

COMPARAÇÃO ENTRE AS DIVERSAS ABORDAGENS PARA O CÁLCULO DA ENERGIA DE ATIVAÇÃO PARA A DEFORMAÇÃO A QUENTE ΔQ

Antonio Augusto Gorni
Eng. de Materiais, M. Eng.,
Pesquisador da Companhia Siderúrgica Paulista - COSIPA
E-Mail: agorni@iron.com.br

RESUMO

A energia de ativação para deformação, ΔQ , é um parâmetro de fundamental importância para a caracterização do comportamento de metais durante sua conformação a quente. A determinação desse parâmetro pode ser feita através de uma equação deduzida originalmente por **Sellars & Tegart**. Contudo, uma vez que sua resolução matemática é relativamente complicada, duas outras abordagens simplificadas foram desenvolvidas a partir da original. Este artigo apresenta resumidamente a metodologia de resolução dessas equações para se determinar o valor de ΔQ , utilizando-se tanto a equação original como as simplificadas. A aplicação efetiva dessa metodologia para a determinação de ΔQ no caso da deformação a quente da austenita de aços ao carbono e microligados demonstrou que a diferença entre os valores desse parâmetro obtidos pelas diversas abordagens propostas esteve entre 5 e 17%, praticamente da mesma ordem do erro experimental observado. Isto parece indicar que, neste caso, qualquer uma das abordagens matemáticas pode ser utilizada para a determinação desse parâmetro.

ABSTRACT

The activation energy for deformation, ΔQ , is a parameter of fundamental importance for the characterization of the behavior of metals during hot forming processes. The determination of that parameter can be made through an equation deduced originally by Sellars and Tegart. However, once its mathematical resolution is relatively complicated, two simplified approaches were developed. This paper presents the methodology of resolution of those equations to determine the value of ΔQ . The application of that methodology for the determination of ΔQ in the case of austenite hot deformation of carbon and microalloyed steels demonstrated that the difference among the values of that parameter obtained by the several approaches proposed was between 5 and 17%, practically of the same order of the observed experimental errors. This seems to indicate that, in this case, any one of the mathematical approaches can be used for the determination of that parameter.

¹ Publicado na REM – Revista Escola de Minas, 51:1, 1998, 16-21.

- INTRODUÇÃO

A Energia para Ativação da Deformação a Quente ΔQ é um parâmetro de grande importância na caracterização do comportamento a quente de metais, particularmente aços. Na verdade, ela representa a energia de ativação necessária para ativar os mecanismos de amaciamento do metal que está sendo deformado.

Pode-se entender melhor o significado físico de ΔQ observando-se curvas tensão versus grau de deformação a quente para um aço, conforme mostrado na Figura 1. A deformação sob altas temperaturas é um processo termicamente ativado onde estão envolvidas quatro variáveis principais: temperatura, grau/velocidade de deformação e resistência à deformação a quente. Pode-se observar que, particularmente nas curvas obtidas sob maiores temperaturas (1100 e 1000°C), a medida que se aplica deformação, o valor da tensão inicialmente sobe, atingindo-se um valor máximo. Nesta região da curva, os processos de encruamento do material se sobrepõem aos de amaciamento dinâmico, resultando num aumento líquido da resistência à deformação. No entanto, isso também corresponde a um aumento da densidade de defeitos cristalinos dentro do metal que está se deformando. O surgimento de um valor de pico para a tensão (ou seja, resistência à deformação a quente) sinaliza que, ao se continuar a aplicar a deformação, os mecanismos de amaciamento dinâmico do material - particularmente recristalização - acabam por se tornar efetivamente ativos provocando, num primeiro momento, queda no valor da resistência à deformação a quente. Contudo, para graus ainda maiores de deformação, atinge-se um estágio de equilíbrio entre os processos de encruamento e os de amaciamento dinâmico, o que se traduz no estabelecimento de um valor constante de resistência à deformação a quente, obtendo-se um patamar na curva. Essa situação se prolonga até que o corpo de prova se rompa. Este comportamento é típico dos metais com reticulado cristalino C.F.C., que é o caso do ferro no estado austenítico.

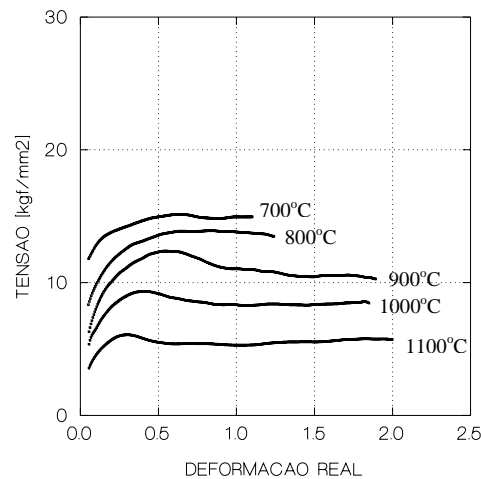


Figura 1: Curvas de resistência à deformação a quente determinadas por ensaios de torção em aço microligado ao Nb-Ti. Velocidade de deformação utilizada: $0,5 \text{ s}^{-1}$.

Neste estado de equilíbrio o grau de deformação deixa de ser uma variável significativa, restando portanto três variáveis envolvidas no processo, sendo que apenas duas são independentes: temperatura e velocidade de deformação. É possível desenvolver uma relação matemática que revele os mecanismos metalúrgicos envolvidos na deformação a quente com essas duas variáveis independentes, desde que se disponham de dados experimentais de resistência à deformação obtidos a partir de ensaios de conformação a quente executados ao longo de uma faixa de valores de temperatura e taxa de deformação.

A primeira expressão com esse objetivo foi proposta por **SELLARS & TEGART**:

$$\dot{\varepsilon} = A \left[\sinh(\alpha \sigma_{\text{pico}}) \right]^{n'} \exp\left(-\frac{\Delta Q}{RT}\right) \quad (1)$$

onde $\dot{\varepsilon}$ é a velocidade de deformação; σ_{pico} é o valor máximo observado de resistência à deformação a quente; T é temperatura do ensaio; α , A e n' são constantes.

Ao se analisar matematicamente esta equação pode-se constatar que, para baixos valores de resistência à deformação, ou seja, quando $\alpha\sigma < 0,23$, ela pode ser aproximada por uma função de potência, ou seja,

$$\dot{\varepsilon} = A \sigma^m \exp\left(-\frac{\Delta Q}{RT}\right) \quad (2)$$

Por outro lado, sob situações inversas, ela pode ser aproximada por uma função exponencial:

$$\dot{\varepsilon} \exp\left(-\frac{\Delta Q}{RT}\right) = A \exp(\beta \sigma) \quad (3)$$

Disso decorre que o valor de α que promove o melhor ajuste dos dados experimentais à equação (1) deve ser igual ao da recíproca da tensão que delimita a mudança de regime da curva tensão versus deformação.

Estas equações simplificadas permitem uma primeira aproximação dos valores das constantes que caracterizam o comportamento do material sob conformação a quente pois, como será visto a seguir, sua resolução matemática é mais simples do que a da equação original de **Sellars-Tegart**.

- DESENVOLVIMENTO MATEMÁTICO

Como já foi afirmado anteriormente, para se determinar o valor da energia de ativação da deformação ΔQ é necessário primeiramente efetuar uma série de ensaios de conformação a quente ao longo de uma faixa de temperaturas e velocidades de deformação. O grau de deformação a ser aplicado em cada ensaio deve ser o suficiente para que a curva tensão versus deformação apresente um valor máximo de tensão, seguido de um patamar. No caso de ensaios de torção a quente com a austenita de aços de baixo carbono, o grau mínimo de deformação a ser aplicado é da ordem

de 1,5. Para se determinar ΔQ sob tais condições pode-se, por exemplo, efetuar ensaios sob temperaturas de 1100, 1000, 900 e 800°C, e velocidades de deformação de 0,5, 1,0 e 5,0 s⁻¹. Estes ensaios permitem a obtenção dos dados necessários para o ajuste das equações (1) a (3): temperatura, velocidade de deformação, resistência máxima à deformação a quente e o respectivo grau de deformação onde ela ocorreu.

Pode-se propor o seguinte método para resolução da equação (1). Em primeiro lugar, determina-se o valor de α e n' . Isto pode ser feito plotando-se gráficos das retas

$$\log(\dot{\varepsilon}) = a + n' \log \sinh(\alpha \sigma_{pico}) \quad (4)$$

para cada temperatura de ensaio utilizada, e

$$\log \sinh(\alpha \sigma_{pico}) = b + \frac{1000 n}{T} \quad (5)$$

para cada velocidade de deformação empregada, conforme mostrado na Figura 2. Estas duas equações deverão ser ajustadas de forma simultânea aos dados experimentais obtidos, para se obter os valores das constantes que definem as equações das retas, onde se incluem os parâmetros α e n' presentes na equação de **Sellars-Tegart**. Matematicamente falando, os valores ideais dessas constantes serão aqueles que minimizarão a função resíduo R :

$$R = \frac{\sum_{i=1}^m \left| \log(\dot{\varepsilon}_i) - n' \log[\sinh(\alpha \sigma_{pico i})] - a_i \right|}{nt} + \frac{\sum_{i=1}^{mv} \left| \log[\sinh(\alpha \sigma_{pico i})] - n \frac{T_i}{1000} - b_i \right|}{nv} \quad (6)$$

onde nt é o número de temperaturas e nv o número de velocidades de deformação utilizadas no procedimento experimental.

A equação (6) pode ser resolvida através de regressão não-linear, utilizando-se um procedimento baseado no método Simplex para

se ajustar as constantes α , n' , n , a_i e b_i de modo a se minimizar R . O único inconveniente deste método é que ele é iterativo e, a rigor, não se pode ter certeza absoluta de que ele tenha atingido o mínimo absoluto da função que resolve o problema no término de sua execução. Há sempre o risco do procedimento ter atingido um mínimo local da função, cuja solução não será a ideal. Contudo, este inconveniente pode ser resolvido assumindo-se intervalo de convergência e um valor de R suficientemente pequenos. Maiores níveis de precisão, contudo, representam maior esforço computacional, ou seja, tempos mais longos para a obtenção da solução do problema.

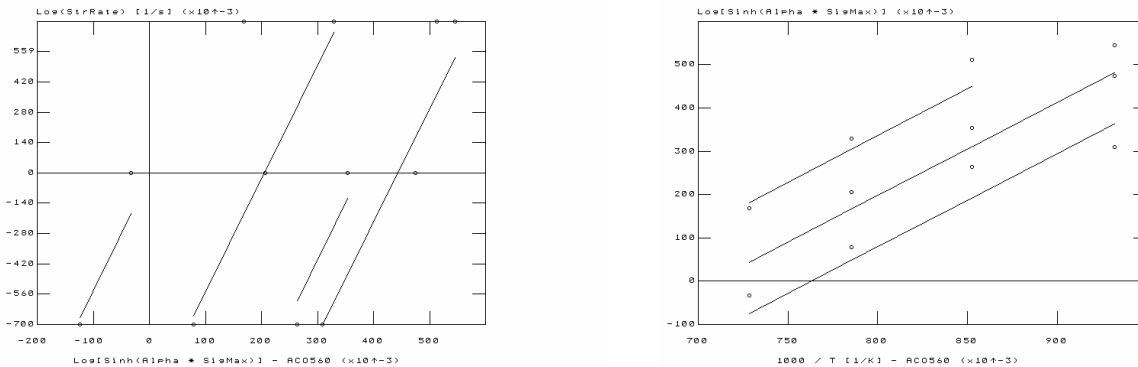


Figura 1: Gráficos utilizados na determinação das constantes α e n' da equação (1).

Uma vez determinadas essas constantes, o cálculo de ΔQ é simples:

$$\Delta Q = 2,3 R n n' \quad (7)$$

onde R é a constante universal dos gases.

Finalmente, falta determinar a constante A . Isto pode ser feito plotando-se o gráfico entre $\log[\sinh(\alpha \sigma_{\text{pico}})]$ e $\log(Z)$, onde Z é o parâmetro de **Zener-Hollomon**, definido pela expressão

$$Z = \varepsilon \exp\left(-\frac{\Delta Q}{RT}\right) \quad (8)$$

Esta relação gera uma reta, que é definida pela expressão

$$\log[\sinh(\alpha\sigma_{pico})] = a' + n'' \log\left[\varepsilon \exp\left(-\frac{\Delta Q}{RT}\right)\right] \quad (9)$$

mostrada na figura 3.

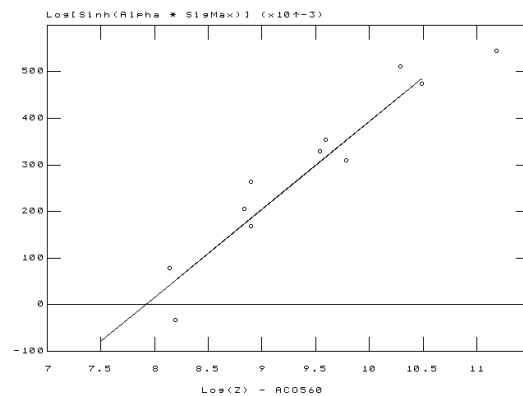


Figura 3: Gráfico utilizado na determinação do valor da constante **A** da equação (1).

O valor de **A** será igual ao de **Z** quando $\sinh(\alpha\sigma_{pico})$ for igual a um, ou seja, $10^{(-a'/n'')}$. Antigamente essa determinação era feita através de extrapolação de um gráfico similar ao da Figura 3. Hoje, com a facilidade de acesso a computadores, ela pode ser feita numericamente, de maneira muito mais simples e precisa, utilizando-se a correspondente equação da reta obtida no gráfico.

Já a determinação das constantes **A**, **m** e ΔQ ao se utilizar a equação (2), simplificada através da função potência, é um pouco menos complicada. De fato, há menos uma constante a determinar que no caso da

equação (1). A constante m pode ser calculada considerando-se a temperatura constante e aplicando-se logaritmo à equação (2):

$$\ln \varepsilon = \ln \left[A \exp \left(\frac{Q}{RT} \right) \right] + m \ln \sigma_{pico} = K + m \ln \sigma_{pico} \quad (10)$$

Neste caso, teremos uma equação (10) para cada temperatura empregada no ensaio de conformação a quente, ou seja, teremos nt valores de m e K , determinados a partir da regressão linear da equação (10) com os dados experimentais.

O parâmetro ΔQ é calculado de forma análoga, assumindo-se ε constante e aplicando-se logaritmo à equação (2):

$$\ln \sigma_{pico} = \frac{\ln \varepsilon - \ln A}{m} + \frac{\Delta Q}{R m} \ln T = a + b \ln T \quad (11)$$

O ajuste, por regressão linear, da equação (11) aos dados experimentais permite calcular as constantes a e b . A partir daí, é possível calcular ΔQ , que é igual ao produto das constantes $b R m$. Por sua vez, a constante A poderá ser calculada pela fórmula

$$A = \frac{\varepsilon}{\exp(a m)} \quad (12)$$

Esta resolução através do uso de regressão linear tem como principal vantagem a rapidez e a certeza de que o resultado obtido é o mais ajustado às condições experimentais, pois esse método estatístico é direto, ou seja, não é iterativo. De fato, sua resolução é praticamente instantânea. Outro aspecto positivo é o fato de se poderem determinar vários valores de ΔQ , ou seja, um para cada ensaio. É possível determinar o valor médio de ΔQ a partir dos dados desse conjunto, bem como determinar

o desvio padrão e a precisão da média associados a ele, permitindo-se avaliar o erro experimental obtido. Há, contudo, o inconveniente da equação (2) ser uma aproximação da equação original (1).

A resolução da equação (3), simplificada através da função exponencial, é muito similar à da equação (2). O parâmetro β é calculado assumindo-se temperatura constante e aplicando-se logaritmo à equação (3), obtendo-se a relação

$$\ln \varepsilon = \ln \left[\frac{A \exp(\beta \sigma_{pico})}{T} \right] + \beta \sigma_{pico} = K + \beta \sigma_{pico} \quad (13)$$

Também aqui teremos uma equação (13) para cada temperatura empregada no ensaio de conformação a quente, ou seja, teremos n valores de β e K , determinados a partir da regressão linear da equação (13) com os dados experimentais.

O cálculo de ΔQ é feito de forma análoga à da equação (2), ou seja, assumindo-se ε constante e aplicando-se logaritmo à equação (3):

$$\sigma = \frac{\ln \varepsilon - \ln A}{\beta} + \frac{Q}{\beta R T} = a + \frac{b}{T} \quad (14)$$

O ajuste, por regressão linear, da equação (14) aos dados experimentais permite calcular as constantes a e b . A partir daí, é possível calcular ΔQ , que é igual ao produto das constantes $b R \beta$. Por sua vez, a constante A poderá ser calculada pela fórmula

$$A = \frac{\varepsilon}{\exp(a \beta)} \quad (15)$$

As vantagens e desvantagens do uso desta equação são similares às já descritas para a equação (2).

- UM EXEMPLO REAL DO CÁLCULO DE ΔQ

Os valores de ΔQ , determinados através das equações (1), (2) e (3) para os aços cuja composição química está listada na Tabela I, podem ser vistos na Tabela II. Eles foram calculados a partir dos resultados de ensaios de torção a quente, utilizando-se as condições de temperatura, grau e velocidade de deformação descritas no primeiro parágrafo da seção anterior.

AÇO	C	Mn	Si	Al	Cr	Cu	Nb	V	Ti	N
C1	0,09	0,53	0,18	0,029	-	-	-	-	-	0,0047
C2	0,15	0,90	0,21	0,039	-	-	-	-	-	0,0053
CMn	0,16	1,48	0,36	0,039	-	-	-	-	-	0,0048
Nb	0,18	1,34	0,30	0,025	-	-	0,033	-	-	0,0074
NbTi1	0,14	1,11	0,30	0,044	-	-	0,020	-	0,015	0,0054
NbTi2	0,14	1,34	0,23	0,035	-	-	0,033	-	0,014	0,0048
NbTiV	0,12	1,50	0,31	0,038	-	-	0,047	0,051	0,020	0,0064
NbCrCu1	0,16	1,03	0,41	0,029	0,54	0,23	0,025	-	-	0,0107
NbCrCu2	0,13	0,99	0,38	0,042	0,50	0,22	0,014	-	-	0,0095

Tabela I: Composição química dos aços estudados, percentagem em peso.

Como se pode observar a partir dos dados da Tabela II, os valores de ΔQ obtidos neste trabalho estão dentro da faixa de dispersão relativa aos aços ao carbono e microligados citados na literatura, apesar do aço ao Nb ter apresentado valor significativamente diferente do restante do conjunto. A análise da magnitude de ΔQ na tabela II ainda

indica que ela é proporcional aos teores de C e Mn dos aços, e pouco influenciada isoladamente pelos demais elementos.

AÇO	Equação (1)	Equação (2)	Equação (3)
C1	228	289	286
C2	284	305	309
CMn	328	360	339
Nb	466	487	475
NbTi1	296	326	331
NbTi2	256	306	310
NbTiV	304	386	338
NbCrCu1	304	446	396
NbCrCu2	262	280	276

Tabela II: Valores de ΔQ , expressos em [kJ/mol], obtidos pelas equações (1), (2) e (3) para os aços constantes na Tabela I.

A tabela III mostra as diferenças observadas entre os valores de ΔQ determinados pelas diferentes abordagens descritas neste trabalho, representadas pelas equações (1), (2) e (3). As diferenças entre o método original e os simplificados foram maiores (17 e 10%, respectivamente para o uso da função potência e exponencial); a diferença entre os métodos simplificados ficou por volta de 5%.

Embora o valor de ΔQ calculado pela equação (1) seja, a princípio, o mais legítimo, as limitações do método matemático iterativo utilizado em sua resolução podem afetar seu grau de precisão, pois é necessário garantir que a solução encontrada por ele não seja um mínimo local da equação (6). Por outro lado, os valores calculados pela resolução das equações (2) e (3), embora resultem de uma simplificação da equação original, são a melhor solução possível do ponto de vista matemático. Contudo, pode-se concluir que a dispersão verificada nas diversas abordagens de cálculo foi similar ao erro experimental na determinação

de ΔQ , que foi da ordem de 10 a 15%. Logo, sob tais condições, o emprego de qualquer uma das abordagens é possível, sem que ocorram diferenças significativas nos valores de ΔQ obtidos.

AÇO	$\Delta Eq (1) - Eq (2) $	$\Delta Eq (1) - Eq (3) $	$\Delta Eq (2) - Eq (3) $
C1	61	58	3
C2	21	25	4
CMn	32	11	21
Nb	21	9	12
NbTi1	30	35	5
NbTi2	50	54	4
NbTiV	82	34	48
NbCrCu1	142	92	50
NbCrCu2	18	14	4
MÉDIA	51 (17%)	37 (10%)	17 (5%)

Tabela III: Erros absolutos entre os valores de ΔQ determinados pelas equações (1), (2) e (3).

- CONCLUSÕES

- A energia de ativação para deformação, ΔQ , é um parâmetro de fundamental importância para a caracterização do comportamento de metais durante sua conformação a quente, pois indica a energia necessária para a ativação dos mecanismos de amaciamento dinâmico que reduzirão sua resistência à deformação a quente;

- A determinação desse parâmetro pode ser feita através de uma equação deduzida originalmente por **Sellars & Tegart**. Contudo, uma vez que sua resolução matemática é relativamente complicada, duas abordagens simplificadas foram desenvolvidas, usando as funções potência e exponencial como aproximação da função original;

- Os resultados obtidos na determinação de ΔQ para a deformação da austenita de aços ao carbono e microligados demonstraram que as diferenças entre os valores desse parâmetro obtidos pelas diversas abordagens matemáticas propostas estiveram entre 5 e 17%. Ou seja, apresentaram a mesma ordem de magnitude verificada para o erro experimental observado. Isto parece indicar que, neste caso, qualquer uma das abordagens para cálculo desse parâmetro pode ser utilizada para a determinação desse parâmetro.

- NOTA

Os valores de ΔQ aqui apresentados foram calculados através de programas escritos em QBASIC. Suas listagens podem ser encontradas na Internet, nos seguintes endereços WWW:

- . Cálculo pela equação original de Sellars-Tegart:

<http://www.geocities.com/SiliconValley/5978/q.html>

- . Cálculo pela equação simplificada, utilizando função potência:

<http://www.geocities.com/SiliconValley/5978/qpote.html>

- . Cálculo pela equação simplificada, utilizando função exponencial:

<http://www.geocities.com/SiliconValley/5978/qexp.html>

- REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

GORNI, A.A. & CAVALCANTI, C.G. Efeito dos Elementos de Liga sobre a Resistência à Deformação a Quente dos Aços ao Carbono e Microligados. II Segundo Congresso Internacional de Tecnologia Metalúrgica e de Materiais, Associação Brasileira de Metalurgia e Materiais, São Paulo SP, 12 a 17 de Outubro de 1997.

GORNI, A.A. Um Ajuste de Curvas para Qualquer Tipo de Função. Revista Micro Sistemas, número 102, Fevereiro de 1991, 35-46.

GORNI, A.A. SubGraf - Subrotinas para o Traçado de Funções, Versão QBasic. Revista Micro Sistemas, n. 158, 1996, 46-50.

LAASRAOUI, A. & JONAS, J.J. Prediction of Steel Flow Stresses at High Temperatures and Strain Rates. Metallurgical Transactions A, July 1991, 1545-1558.

UVIRA, J.L. & JONAS, J.J. Hot Compression of Armco Iron. Transactions of the Metallurgical Society of AIME, August 1968, 1619-1626.