

# Simulazione di transizioni di fase diffusive e deformative

M. Maraldi, L. Molari, P.G. Molari

*Il calcolo degli organi di macchina richiede una descrizione molto accurata delle caratteristiche del materiale; ciò non può prescindere dalla descrizione dei trattamenti termici ai quali il pezzo è stato sottoposto.*

*La simulazione dei trattamenti termici degli acciai viene normalmente affrontata mediante modelli di natura fenomenologica che fanno largo uso di leggi empiriche per descrivere l'evoluzione della microstruttura all'interno del pezzo. Tuttavia, l'impiego di leggi empiriche richiede un'apposita taratura dei parametri del modello; inoltre tali leggi, per loro natura, non chiariscono fino in fondo le ragioni fisiche per le quali i fenomeni in gioco avvengono. Ne consegue che tale metodo è fortemente limitato nella sua generalità.*

*Il problema può essere affrontato nella sua globalità, ossia prendendo in considerazione gli effetti termici, meccanici e di transizione di fase, partendo da una descrizione della struttura interna del materiale a scala microscopica ed inserita in un contesto termodinamicamente consistente.*

*In particolare, in questo lavoro viene proposto un modello a parametri di fase alla scala microscopica capace di descrivere trasformazioni di fase sia diffusive sia deformative e dunque di modellare, rispettivamente, la trasformazione da austenite a perlite e quella da austenite a martensite. Il modello, per la formulazione e la sua natura, risulta consistente con i principi della termodinamica e permette una descrizione delle trasformazioni diffusiva e deformativa e dei fenomeni termici in un contesto unificato.*

*Le equazioni sulle quali si basa sono: l'equazione del moto, il bilancio della massa di carbonio (che porta alla equazione di Cahn-Hilliard) e l'equazione del calore completa, che deriva dal bilancio di energia interna. A causa della natura non-locale del modello e della presenza di equazioni differenziali alle derivate parziali fino al quarto ordine, la soluzione del problema così formulato risulta complessa da un punto di vista computazionale; per questo motivo è stato messo a punto uno strumento numerico sofisticato ma robusto.*

*Sono stati inoltre condotti alcuni test numerici che mostrano le potenzialità dell'approccio. Il modello risulta capace di cogliere le principali caratteristiche esibite alla scala microscopica dalle transizioni di fase perlitica e martensitica, le interazioni fra queste e l'influenza dei fenomeni meccanici e termici.*

## Parole chiave:

acciaio, trasformazione di fase, trattamenti termici, modellazione

## INTRODUZIONE

Il progetto degli organi di macchina realizzati in acciaio viene quasi sempre condotto simulandone il comportamento in opera con metodi numerici agli elementi finiti. Le ipotesi generalmente adottate sono di un comportamento elastico (lineare o non lineare) con materiale omogeneo e isotropo, sotto l'azione di forze esterne e forze di massa, in presenza di vincoli rigidi, elastici, o considerando particolari azioni di contatto. Dalle simulazioni si ricavano mappe dello stato tensionale e deformativo del pezzo meccanico che vengono confrontate con valori ritenuti ammissibili per quel componente in quella applicazione specifica. Sulla base di queste mappe il progettista sceglie se mantenere o variare il tipo di acciaio scelto, se mantenere o variare la geometria del pezzo.

Tuttavia, quasi sempre il materiale con il quale il pezzo è co-

struito è ben lontano da essere omogeneo e isotropo e quindi si impiegano coefficienti correttivi (basati sull'esperienza) che ne valutano in modo empirico i limiti di resistenza o di usura e si cerca di dare indicazioni aggiuntive corredando i disegni di annotazioni sulla fibrosità del materiale, sulla durezza superficiale richiesta, sulla profondità di tempra, sui rivestimenti o sui trattamenti delle superfici.

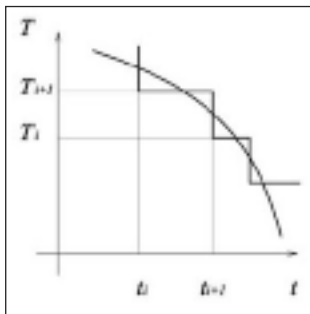
Il costruttore di macchine si chiede a volte quale sia il vantaggio reale di simulazioni dello stato tensionale e deformativo tanto dispendiose e raffinate quando poi la valutazione finale deve passare attraverso indicazioni essenzialmente qualitative.

Viene quindi spontaneo chiedersi perché non inglobare la storia della fabbricazione del pezzo nella descrizione del pezzo stesso, e ricavare da essa le caratteristiche del materiale anziché pretendere di assegnarle a priori, con tutti i limiti di attendibilità ai quali si è accennato, o non assegnarle affatto.

Uno dei modi per alterare in modo essenziale le caratteristiche del materiale consiste nel sottoporre il pezzo meccanico ad un trattamento termico; in particolare, il trattamento termico di tempra degli acciai altera in modo essenziale la struttura del materiale e quindi le caratteristiche meccaniche del componente [1-3].

M. Maraldi, P.G. Molari  
DIEM, Università di Bologna

L. Molari  
DICAM, Università di Bologna



**FIG. 1**  
*Il processo discretizzato in una successione di passi isotermitici.*

*The process discretized in a sum of isothermal steps.*

## I MODELLI ORA IMPIEGATI

Allo stato attuale, molti modelli di trattamento termico applicabili in ambito industriale [4,5] si basano su formulazioni empiriche per descrivere l'evoluzione temporale della microstruttura, sull'impiego delle curve di Bain e su una legge di additività. Per l'evoluzione delle fasi derivanti da un processo diffusivo (ad esempio la perlite) vengono impiegate relazioni quali la legge di Johnson-Mehl-Avrami, mentre per l'evoluzione delle fasi "martensitiche" si impiegano leggi simili a quella proposta da Koistinen-Marburger, adatte a processi atermici. L'intero trattamento viene poi scomposto in una sommatoria di passi isotermitici (Fig. 1).

Per ognuno di questi passi si determinano, mediante le curve di Bain (TTT) o le curve CCT, i parametri da inserire nelle equazioni evolutive e le conseguenti quantità delle varie fasi ottenute [4,5]. Per comporre infine i risultati parziali si impiegano leggi di additività, molto spesso in forma integrale; fra queste, la più accreditata è la legge di Scheil [6].

## CRITICA AI METODI IMPIEGATI

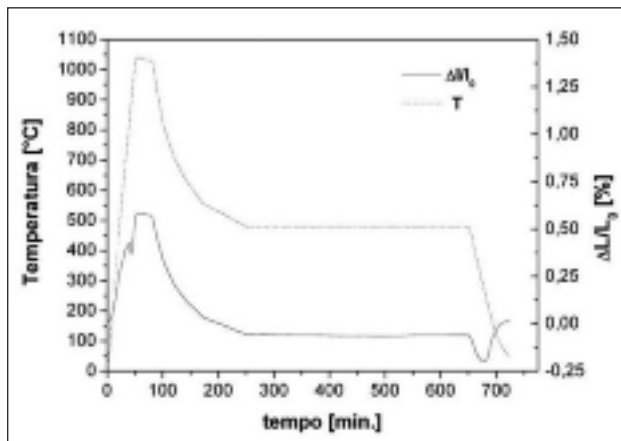
Nell'uso dei metodi sopradetti ci si scontra subito con i parametri che si devono prendere in considerazione per descrivere il fenomeno. La letteratura fa riferimento alle curve di Bain e, visti i limiti di tali curve, alle curve CCT.

Ma nascono spontanee alcune domande:

Le curve di Bain o le CCT sono adatte a descrivere il fenomeno se non si conosce la dinamica interna del fenomeno stesso?

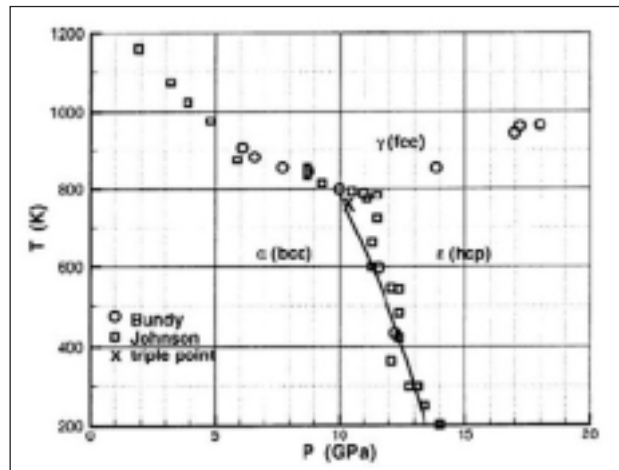
Come valutare la variazione di temperatura fra il materiale in superficie e quello che è all'interno del pezzo?

Può essere determinante per descrivere il problema considerare come primaria la trasmissione del calore per conduzione, fenomeno per sua natura così lento, in presenza di una così repentina trasformazione di fase?



**FIG. 2** *Curva dilatometrica di un acciaio durante un ciclo di tempra [7].*

*Dilatometric curve of a steel during quenching [7].*



**FIG. 3** *Cambiamento di fase per l'acciaio in funzione della pressione e della temperatura [8].*

*Phase transition for steel, as a function of temperature and pressure [8].*

E ancora:

Perché non tenere in alcun conto la curva dilatometrica (vedi Fig. 2) che il materiale presenta sia in fase di riscaldamento, sia in fase di raffreddamento?

Perché la pressione (ossia la componente idrostatica del tensore degli sforzi) non viene mai considerata fra i parametri che descrivono il fenomeno di tempra, quando tutti conoscono l'importanza di questo parametro nel cambiamento di fase (vedi Fig. 3) e conoscono l'importanza del diffuso trattamento di tempra sotto pressa?

## IL MODELLO PROPOSTO

Nel tentativo di ovviare alle problematiche esposte, si sviluppa un modello a parametri di fase inserito in un contesto termodinamicamente consistente [9-18]; tale modello, per semplicità pensato per un acciaio euteticoide, descrive le transizioni di fase diffusive e martensitiche ad una scala microscopica, ma, per sua stessa natura, può essere portato, con opportune modifiche, ad una scala di osservazione più alta.

La presenza di tre fasi, ossia la martensite, l'austenite e la perlite, viene considerata introducendo due parametri identificatori di fase, detti parametri d'ordine. In particolare per il fenomeno diffusivo viene introdotto un parametro d'ordine ( $c$ ) che è legato alla frazione in massa di carbonio. Quindi la perlite e le fasi ottenute da un processo diffusivo sono identificate da un valore di  $c$  diverso da 0. I cambiamenti di fase martensitici vengono descritti attraverso un altro parametro d'ordine ( $e_2$ ). Come noto [19], la formazione di martensite avviene mediante una deformazione di scorrimento del reticolo cristallino (la cosiddetta deformazione di Bain); una scelta piuttosto comune in letteratura per il parametro d'ordine deformativo è la seguente [11]:

$$e_2 = \frac{\epsilon_{11} - \epsilon_{22}}{\sqrt{2}}$$

dove  $\epsilon$  è il tensore delle deformazioni.

Si noti che il parametro d'ordine è dipendente dal sistema di riferimento, coerentemente con la scelta di descrivere il fenomeno a scala microscopica.

In funzione dei due parametri d'ordine, oltre che della temperatura, viene descritta l'energia libera  $\phi$ , la scelta della quale è fondamentale per la descrizione dell'intero processo. In particolare, si assume che l'energia libera sia espressa come somma

di quattro contributi:

$$\varphi = \varphi_{diff} + \varphi_{def} + \varphi_{accopp} + \varphi_{grad}$$

dove

$$\varphi_{diff} = \frac{A}{4} c^4 + \frac{B(T - T_p)}{2} c^2$$

è l'energia libera che tiene conto delle trasformazioni diffusive, con A e B costanti e  $T_p$  la temperatura di transizione perlitica (vedi Fig. 4);

$$\varphi_{def} = \frac{D}{6} e_2^6 - \frac{E}{4} e_2^4 + \frac{F(T - T_M)}{2} e_2^2 + \frac{G}{2} (\epsilon_1 - x_{1c}c - x_{12}e_2^2)^2 + \frac{H}{2} e_3^2$$

è la parte di energia libera che tiene conto delle transizioni deformative (vedi Fig. 5), con D, E, F, G, H,  $x_{12}$ ,  $x_{1c}$  costanti e  $T_M$  la temperatura di transizione martensitica ( $T_M < T_p$ ).

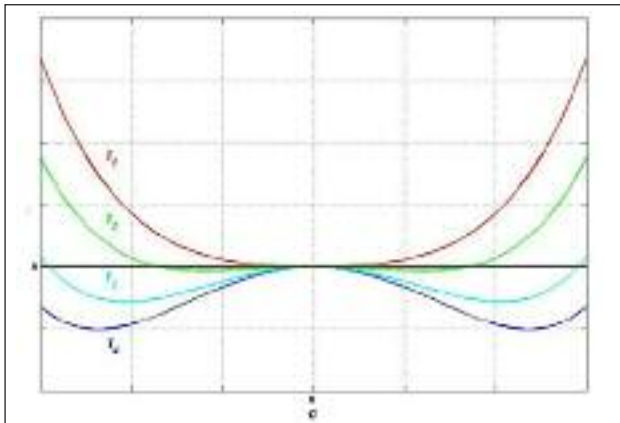
$e_1 = (\epsilon_{11} + \epsilon_{22})/\sqrt{2}$  descrive la variazione di volume mentre  $e_3 = \epsilon_{12}$  descrive la deformazione tagliante.

L'energia libera è composta da due ulteriori contributi: uno di accoppiamento e un termine non locale che tiene conto dell'energia di formazione delle interfacce; tali contributi hanno le seguenti espressioni:

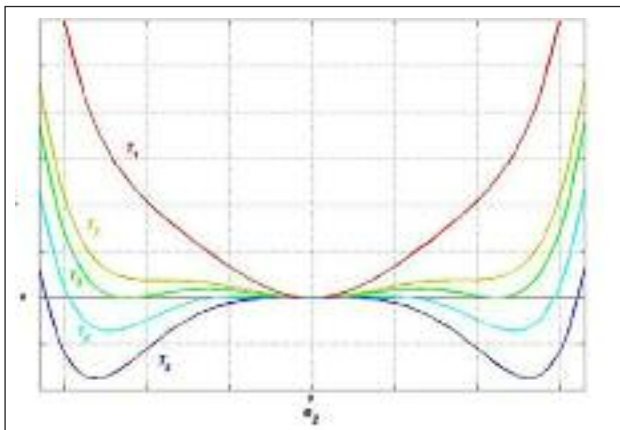
$$\varphi_{accopp} = x_{2c} c^2 e_2^2$$

$$\varphi_{grad} = \frac{1}{2} K_{D1} \|\nabla e_2\|^2 + \frac{1}{2} K_{D2} \|\nabla c\|^2$$

con  $K_{D1}$ ,  $K_{D2}$ ,  $x_{2c}$  costanti.



**FIG. 4** La forma dell'energia libera per la parte diffusiva. Diffusive free energy shape.



**FIG. 5** La forma dell'energia libera per la parte deformativa. Displacive free energy shape.

## EQUAZIONI GOVERNANTI

Le equazioni governanti comprendono le equazioni di bilancio dei parametri d'ordine:

$$\dot{c} = -\nabla \cdot j_c$$

dove  $j_c$  è il flusso di c,

$$\rho \dot{v} = \nabla \cdot \sigma$$

dove  $\rho$  è la densità,  $v$  la velocità, e  $\sigma$  il tensore degli sforzi.

Le equazioni del modello sono completate dall'equazione del calore, ottenuta dal bilancio dell'energia:

$$c_p \dot{T} - T \left( \frac{\partial \sigma}{\partial T} : \dot{\epsilon} + \frac{\partial \mu}{\partial T} \dot{c} \right) + \nabla \mu \cdot j_c - \nabla \cdot k \nabla T = 0.$$

Impiegando l'espressione dell'energia libera sopra riportata ed imponendo la verifica del secondo principio della termodinamica si possono scrivere le equazioni costitutive del modello:

$$\sigma = \frac{\delta \varphi}{\delta \epsilon}, \quad \mu = \frac{\delta \varphi}{\delta c}, \quad j_c = -M \nabla \mu,$$

$$q = -k \nabla T, \quad s = -\frac{\partial \varphi}{\partial T}$$

dove  $\mu$  è il potenziale chimico, ossia la variabile coniugata a c nel lavoro, s l'entropia e q il flusso di calore.

Il modello così ottenuto è così termodinamicamente consistente come dimostrato nei dettagli in [14,15].

## RISULTATI NUMERICI

Per dimostrare le potenzialità del modello sono state condotte alcune simulazioni numeriche. Il dominio preso in esame è un quadrato con lato di lunghezza unitaria; la temperatura iniziale è stata imposta uniforme su tutto il dominio. Sono state imposte le seguenti condizioni al contorno: spostamenti orizzontali nulli sul bordo di sinistra, spostamento verticale nullo nel punto centrale dello stesso lato, condizioni di isolamento per quanto riguarda le interazioni non locali [20,15] e il flusso di massa, condizioni di scambio termico per convezione su tutto il dominio (con temperatura dell'ambiente esterno uguale alla temperatura iniziale del dominio).

Di seguito vengono presentati due casi, elaborati a partire da differenti valori della temperatura iniziale.

### Caso 1

Il valore della temperatura iniziale nel dominio è al di sotto della temperatura di transizione perlitica  $T_p$ , ma al di sopra della temperatura di transizione martensitica  $T_M$ ; come atteso, su tutto il dominio ha luogo una transizione diffusiva. In Fig. 6 si nota che la transizione inizia quasi contemporaneamente su tutto il dominio (ed è identificata dal fatto che il parametro d'ordine diffusivo c assume valori non nulli), mentre il parametro d'ordine deformativo  $e_2$  rimane a valori pressoché nulli.

La temperatura cambia in accordo con la transizione avvenuta: c'è un generale incremento a seguito della transizione di fase, dovuto alla presenza dei termini di accoppiamento termochimico nella equazione del calore.

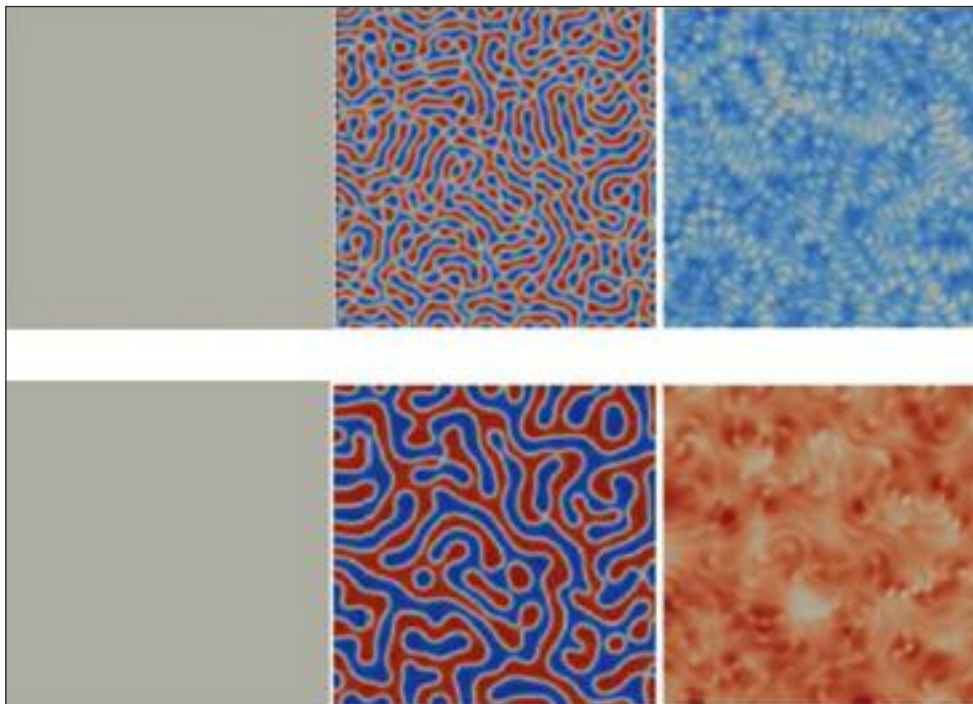
### Caso 2

Il valore della temperatura iniziale nel dominio è posto inferiore alla temperatura di transizione martensitica  $T_M$ . Come riportato in Fig. 7, il parametro d'ordine  $e_2$  assume valori significativamente diversi da zero, mentre il parametro d'ordine c rimane a valori pressoché nulli; ciò significa che nell'intero dominio ha luogo una trasformazione martensitica. Si noti come in questo caso la transizione inizi dai bordi del dominio privi di vincoli sullo spostamento, e presenti una trama inclinata a 45°. La tem-

**FIG. 6**

**Transizione diffusiva: nella colonna di sinistra l'evoluzione del parametro d'ordine deformativo, nella colonna centrale l'evoluzione del parametro d'ordine diffusivo, mentre nella colonna di destra l'evoluzione della temperatura (prima riga  $t=0.03$ , seconda riga  $t=0.08$ ).**

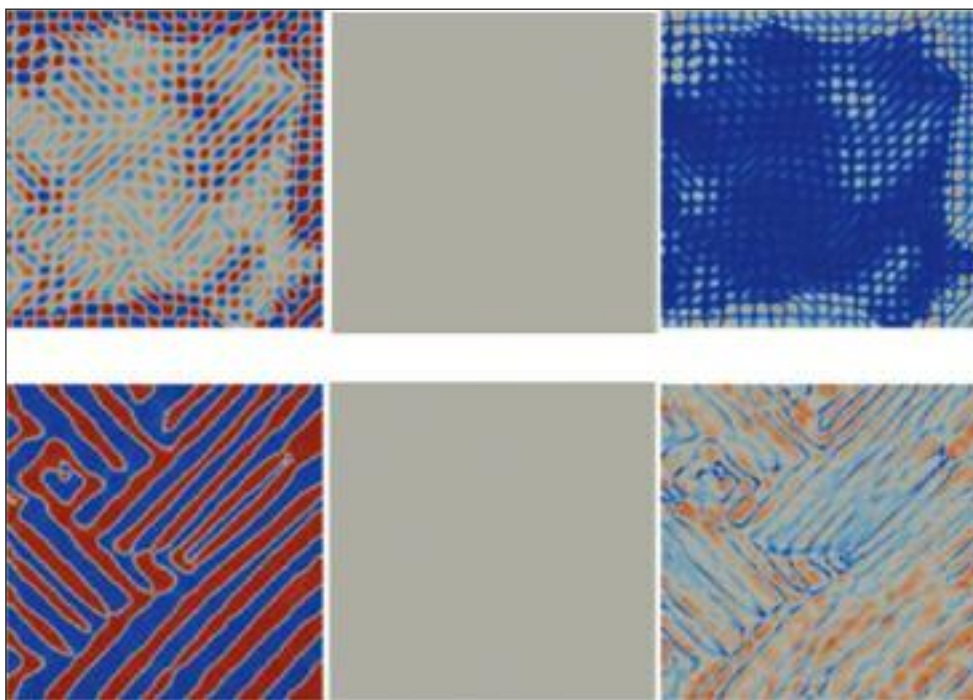
*Diffusive phase transition. Left column: the evolution of the displacive order parameter; central column: the evolution of the diffusive order parameter; right column: the evolution of the temperature. Top row at time  $t=0.03$ ; bottom row at time  $t=0.08$ .*



**FIG. 7**

**Transizione deformativa: nella colonna di sinistra l'evoluzione del parametro d'ordine deformativo, nella colonna centrale l'evoluzione del parametro d'ordine diffusivo, mentre nella colonna di destra l'evoluzione della temperatura (prima riga  $t=0.03$ , seconda riga  $t=0.08$ ).**

*Displacive phase transition. Left column: the evolution of the displacive order parameter; central column: the evolution of the diffusive order parameter; right column: the evolution of the temperature. Top row at time  $t=0.03$ ; bottom row at time  $t=0.08$ .*



peratura cambia in accordo con la transizione: anche in questo caso vi è un generale incremento a seguito della transizione di fase, dovuto alla presenza dei termini di accoppiamento termomeccanico nell'equazione del calore.

Un'ulteriore verifica della capacità descrittiva del modello proposto può venire dalla ricostruzione delle curve di Bain (Fig. 8), ottenute dai risultati di simulazioni condotte per diversi valori della temperatura iniziale del dominio, imposta costante ed uguale alla temperatura dell'ambiente esterno.

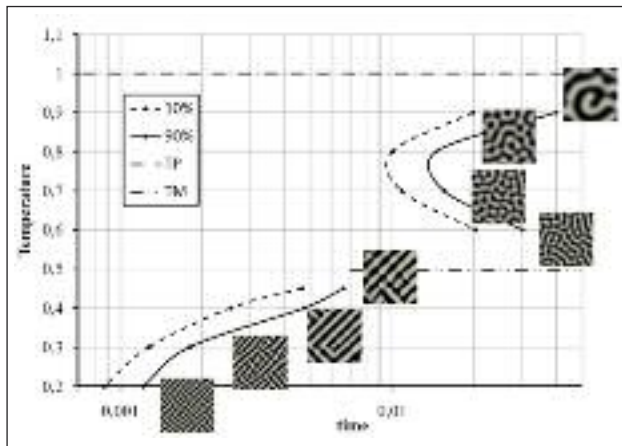
## Conclusioni

È stato presentato un modello a parametri di fase per la descrizione dei principali cambiamenti di fase che avvengono durante il trattamento termico di un acciaio; tale modello è inserito in

un contesto termodinamicamente consistente, nel quale la formulazione di un'opportuna energia libera assume un ruolo di primo piano. Le equazioni sulle quali si basa risultano di natura complessa da un punto di vista computazionale; per questo motivo è stato sviluppato uno strumento numerico sofisticato ma robusto per la loro risoluzione.

Dalla risoluzione di alcuni casi-test si è osservato come il modello proposto sia in grado di fornire risultati incoraggianti alla scala microscopica e permetta di simulare il transitorio legato al cambiamento di fase: è, quest'ultimo, un passaggio particolarmente delicato, che deve essere trattato tenendo conto della trasformazione microstrutturale e della sua dinamica.

Per giungere a risultati ancora più attendibili e con possibilità di impiego in campo industriale, risulta necessario far salire il mo-



**FIG. 8** *La ricostruzione del diagramma TTT [15].  
Recover of the TTT diagram [15].*

dello ad una scala di osservazione macroscopica e raccogliere dati sperimentali sul transitorio legato al cambiamento di fase. Sembra sia lecito affermare che la strada intrapresa possa portare ad una descrizione molto più accurata e quindi molto più attendibile dei fenomeni in gioco, capace di togliere ulteriore spazio all'empirismo ancora presente nel campo del trattamento di tempra degli acciai, processo tecnologico di importanza così vitale per l'ingegneria.

## BIBLIOGRAFIA

- [1] E.C. Bain, "Pioneering in steel research: a personal record", M.R. Ed Hyslop, American Society for Metals, Ohio, 1975.
- [2] C. M. Wayman, "Introduction to the cristallography of martensitic transformations", Macmillan Co, London, 1964.
- [3] G. Krauss, "Steels: heat treatment and processing principles", ASM international, 1990.
- [4] J. Bergheau, P. Duranton, H. Porzner, F. Boitout, "Coupled Carbon diffusion, metallurgical transformation and heat transfer models applied to the case-hardening process", Proc. of Europam 2000, Nantes, 2000.
- [5] M. Brokate, J. Sprekels, Hysteresis and phase transitions, Springer-Verlag, New York, 1996.
- [6] E. Scheil, "Z. anorg. u. allgem.", Chemie, 1932.
- [7] M. Pellizzari, D. Cescato, G. Straffelini, R. Valentini, A. Solina, "Studio del trattamento termico di acciai rapidi per cilindri di laminazione a caldo", La metallurgia italiana, aprile 2008, pagg. 7-13.
- [8] K. Yano, Y. Horie, "Mesomechanics of the alpha-epsilon transition in iron", Int J of Plasticity, 18, 1427-1446, 2002.
- [9] M. Bouville, R. Ahluwalia, "Interplay between diffusive and displacive phase transformations: time-temperature-transformation diagrams and microstructures", Phys. Rev. Lett., 97 (5), 055701.1-055701.4, 2006.
- [10] R. Abeyaratne, K. Bhattacharya, J. K. Knowles, "Strain-energy functions with local minima: modeling phase transformations using finite thermoelasticity", in: Y.B. Fu, R.W. Ogden (Eds.), Nonlinear Elasticity: Theory and Applications, London Mathematical Society Lecture Note Series, vol. 283, Cambridge University Press, Cambridge, 2001, pp. 433-490.
- [11] R. Ahluwalia, T. Lookman, A. Saxena, "Dynamic strain loading of cubic to tetragonal martensites", Acta materialia, 54, 2109-2120, 2006.
- [12] F. Falk, "Model free energy, mechanics and thermodynamics of shape memory alloys", Acta Metall. 28, 1773 (1980).
- [13] A. Onuki, "Pretransitional effects at structural phase transitions", Journal of the physical society of Japan, Vol. 68 (1999), no. 1, page 5.
- [14] M. Maraldi, G. N. Wells, L. Molari, "Phase field model for coupled displacive and diffusive microstructural processes under thermal loading", Journal of mechanics and physics of solids, Vol. 59 (2011), no. 8, page 1596.
- [15] M. Maraldi, L. Molari, D. Grandi, "A unified thermodynamic framework for the modelling of diffusive and displacive phase transitions", International journal of engineering science, Vol. 50 (2012), no. 1, page 31.
- [16] M. Maraldi, G. N. Wells, L. Molari, P. G. Molari, "A model for diffusive and displacive phase transitions: thermochemo-mechanical coupling effects", AES-ATEMA 5<sup>th</sup> Intern. Conf. on Advances and Trends in Engineering Materials and their Applications, Le Quebec, 2010.
- [17] M. Maraldi, L. Molari, "Modeling Steel Heat Treating" Proc. of AI-META 2007, Brescia 2007.
- [18] M. Militzer, "Phase field modeling of microstructure evolution in steels", Current Opinion in Solid State and Materials Science 15 (2011) 106-115.
- [19] H. K. D. H. Bhadeshia, "Worked examples in the geometry of crystals", The Institute of Metals, London.
- [20] C. Polizzotto, "Unified thermodynamic framework for nonlocal/gradient continuum theories", European journal of mechanics A/solids, Vol. 22 (2003), no. 5, page 651.

## Abstract

### Towards modelling diffusive and displacive phase transitions

**Keywords:** steel, phase transformation, heat treatment, modeling

The stress analysis of machine elements requires a realistic description of the mechanical properties of the material; this may be achieved by accounting for all the thermo-mechanical processes to which the material has been subjected.

The simulation of steel heat treatments is usually performed with models based on empirical laws which describe the evolution of the material microstructure. Such empirical laws, however, require an ad-hoc tuning of the model parameters and, for their intrinsic nature, do not clarify the physics behind the phenomena involved; this results in a lack of generality of the method.

Without losing generality, the problem can be studied within the framework of thermodynamics, taking into account thermal, mechanical and phase-transformational effects, starting from the description of the internal structure of the material at the microscopic scale. In this paper, a thermodynamically consistent phase-field model is proposed which is set at the microscopic scale and is able to describe both diffusive (austenite-to-perlite) and displacive (austenite-to-martensite) phase transitions.

The equations considered in the model are: the balance of linear momentum equation, the carbon mass balance equation (expressed as a Cahn-Hilliard-type equation) and the balance of energy equation. Due to the non-local nature of the model and to the presence of fourth-order partial differential equations, the solution of the mathematical problem is computationally complex; for this reason a sophisticated, yet robust numerical tool has been developed to solve the set of equations.

Some numerical examples are presented to illustrate the capabilities of the framework. The model is able to describe the main features of diffusive and displacive phase transitions, their interplay and the coupling with mechanical and thermal phenomena.