

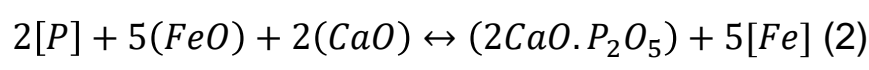
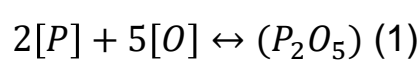
AValiação da Partição de Fósforo Aplicada na Produção de Aço: Modelos Matemáticos e Termodinâmica Computacional

Autora: Júlia Giacomet Bergozza

Orientador: Prof. Dr. Wagner Viana Bielefeldt

INTRODUÇÃO

A alta demanda em qualidade do aço e o alto custo do minério de ferro foram motivadores para este artigo sobre a desfosforação - um processo termodinâmico de retirada de fósforo do aço para a escória (Equação 1) que resulta em um aço com melhor ductilidade, dureza e menor fragilidade a frio e características deletérias. Devido a Energia Livre de Gibbs, há uma preferência de formação do óxido de ferro ao invés do óxido de fósforo, como desejamos, para que ocorra a desfosforação é necessário a adição de um óxido básico - cal - afim de promover a formação de $2CaO.P_2O_5$ e Fe (Equação 2).



Um método utilizado para medir a quantidade de fósforo que foi oxidado é o coeficiente de partição de fósforo (Lp), o qual leva em consideração o percentual em massa do fósforo na escória (%P) e o percentual em massa do fósforo no aço [%P] (Equação 3).

$$Lp = \frac{(\%P)}{[\%P]} \quad (3)$$

OBJETIVO

Este trabalho tem como objetivo realizar a comparação entre diferentes modelos matemáticos para o cálculo do coeficiente de partição de fósforo com os resultados obtidos a partir de dados industriais, observando também a diferença destes resultados com os Lp's obtidos a partir do software de simulação termodinâmica FactSage v.7.2. Somado a isso, será discutido quais os principais motivos para os desvios apresentados entre os diferentes modelos (termodinâmico e matemático) e os valores provindos da indústria siderúrgica.

METODOLOGIA

Para o desenvolvimento deste trabalho, foram utilizados 3351 dados de corridas de variados padrões de carga coletados ao longo de um ano em uma aciaria elétrica, devido a este fator, os dados utilizados neste trabalho possuem grandes variações na sua composição química (Tabela 1 e 2).

Tabela 1. Dados industriais da composição química da escória em wt%

| Dados | (Al ₂ O ₃) | (CaO) | (FeO) | (MgO) | (MnO) | (P ₂ O ₅) | (SiO ₂) |
|-----------|-----------------------------------|-------|-------|-------|-------|----------------------------------|---------------------|
| Máx | 11.48 | 49.08 | 51.35 | 19.07 | 16.35 | 1.71 | 22.53 |
| Mín | 2.49 | 17.60 | 9.92 | 3.46 | 3.42 | 0.08 | 7.23 |
| \bar{x} | 6.05 | 31.83 | 28.30 | 7.98 | 6.20 | 0.47 | 13.94 |
| σ | 1.25 | 4.13 | 5.60 | 1.46 | 1.03 | 0.11 | 2.04 |

Tabela 2. Dados industriais da composição química do aço em Wt%.

| Dados | [P] | [C] | [O] | T (°C) |
|-----------|-------|-------|-------|--------|
| Máx | 0.037 | 0.937 | 0.172 | 1699 |
| Mín | 0.004 | 0.022 | 0.000 | 1555 |
| \bar{x} | 0.011 | 0.074 | 0.060 | 1625 |
| σ | 0.003 | 0.039 | 0.016 | 23.275 |

Além disso, foram selecionados métodos matemáticos de previsão do Lp das escórias que mais se destacaram na literatura, os modelos levam em consideração variadas composições e temperaturas, que estão representados na tabela (Tabela 3).

Tabela 3. Modelos matemáticos e seus autores

| Autor | Temp. (°C) | Composição | Modelo | Eq. |
|---------------|------------|---|--|-----|
| Healy | 1580-1669 | FeO ₁ -SiO ₂ -CaO _(acima de 24%) | $\log Lp = 22350/T + 7\log(\%CaO) + 2.5\log(\%FeO) - 23.7$ | 4 |
| Healy | 1580-1669 | FeO ₁ -SiO ₂ -CaO _(até saturação) | $\log Lp = 22350/T + 0.08(\%CaO) + 2.5\log(\%FeO) - 16$ | 5 |
| Suito | 1550-1650 | MgO _(sat) -CaO-Fe ₂ O-SiO ₂ | $\log Lp = 0.145[(\%CaO) + 0.3(\%MgO) - 0.5(\%P_2O_5) + 0.6(\%MnO)] + 22810/T - 20.506 + 2.5\log(\%FeO)$ | 6 |
| Turkdogan | 1200-1450 | MgO _(sat) -CaO - Fe ₂ O - SiO ₂ - CaF ₂ | $\log Lp = 21740/T - 9.87 + 0.071[(\%CaO) + (\%CaF_2) + 0.3(\%MgO)] + 2.5\log(\%O)$ | 7 |
| Ide + Fruehan | 1600 | CaO-SiO ₂ -MgO-MnO-FeO | $\log Lp = 0.072[(\%CaO) + 0.15(\%MgO) + 0.6(\%P_2O_5) + 0.6(\%MnO)] + 11570/T - 10.50 + 2.5\log(\%FeO)$ | 8 |
| Assis | 1600 | CaO -MgO-SiO ₂ - FeO-P ₂ O ₅ | $\log Lp = 0.072[(\%CaO + 0.3(\%MgO) + 5.2(\%P_2O_5) - 0.58(\%SiO_2)] + 11570/T - 10.52 + 2.5\log(\%FeO)$ | 9 |
| Tayeb | 1550-1650 | CaO-SiO ₂ -MgO _(sat) -FeO-P ₂ O ₅ -Al ₂ O ₃ | $\log Lp = 0.06[(\%CaO) + 0.37(\%MgO) + 4.65(\%P_2O_5) - 0.05(\%Al_2O_3) - 0.2(\%SiO_2)] + 11570/T - 10.52 + 2.5\log(\%FeO)$ | 10 |
| Tayeb | 1550-1650 | CaO-SiO ₂ -MgO _(sat) -FeO-P ₂ O ₅ -Al ₂ O ₃ | $\log Lp = 0.073[(\%CaO) + 0.148(\%MgO) + 0.96(\%P_2O_5) + 0.22(\%Al_2O_3) + 0.144(\%SiO_2)] + 2.5\log(\%FeO) + 11570/T - 10.46 \pm 0.1$ | 11 |

Para o desenvolvimento deste trabalho, foram calculados os seguintes coeficientes de partição de fósforo:

I. Lp Real: calculou-se por meio da Equação 6 os Lp's dos dados industriais;

II. Lp Artigos: calculou-se a partir das Equações 7 a 14, dos elementos representados na Tabela 1, os Lp's dos modelos matemáticos;

III. Lp FactSage: utilizando os bancos de dados FToxid (utilizado quando há presença de óxidos), FTmisc (utilizado para a fase de ferro líquido) e FactPS (utilizado para compostos padrão) foi simulado no software FactSage v.7.2 os Lp's previstos para equilíbrio químico.

Como consequência, realizou-se uma comparação entre estes Lp's obtidos (Lp Real, Lp FactSage e Lp Artigos) e avaliou-se a correlação linear (R²) entre estes resultados. Como pode ser melhor visualizado no fluxograma (Figura 2) a seguir:

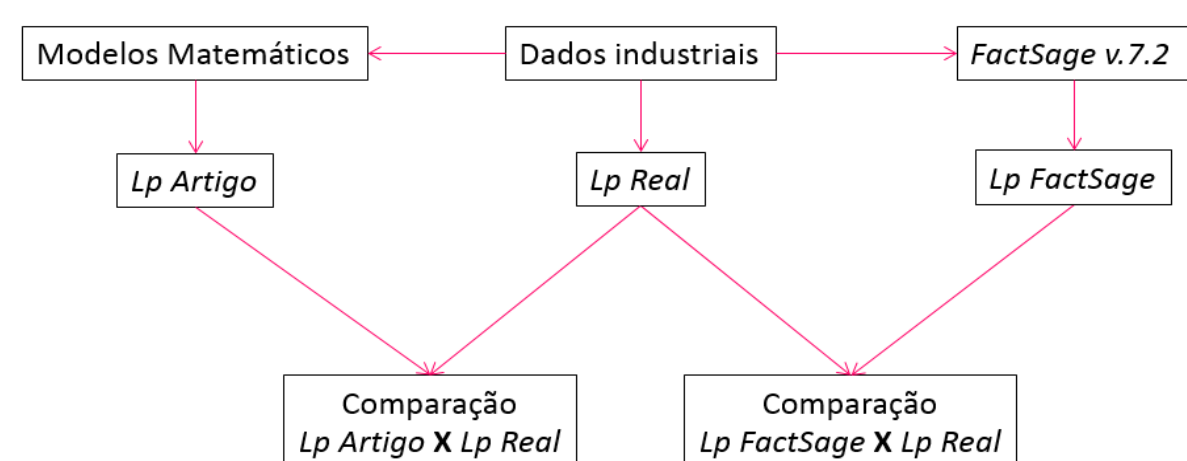


Figura 2. Fluxograma da metodologia utilizada neste trabalho

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Com o desenvolvimento das comparações, diferentes resultados foram obtidos para a previsão do coeficiente de partição de fósforo de um mesmo grupo de escórias industriais (Tabela 3). Serão discutidos os métodos matemáticos que apresentaram o maior e o menor coeficiente de determinação (R²) em relação ao Lp desta siderúrgica. Além disso, será analisada a exatidão da previsão do software FactSage.

Tabela 3. Assertividade dos modelos estudados do melhor para o pior

| Posição | Modelo | Equação | R ² |
|---------|---------------|---------|----------------|
| 1° | Assis | 9 | 55,66% |
| 2° | Tayeb | 10 | 52,97% |
| 3° | Ide e Fruehan | 8 | 48,12% |
| 4° | FactSage | - | 47,86% |
| 5° | Tayeb | 11 | 43,53% |
| 6° | Healy | 4 | 40,87% |
| 7° | Healy | 5 | 39,86% |
| 8° | Suito | 6 | 29,05% |
| 9° | Turkdogan | 7 | 19,74% |

I. Modelo de Assis

Como pode ser observado no gráfico abaixo (Figura 2), o modelo de Assis foi o que melhor apresentou a correlação entre o Lp Real e o Lp Artigo, tendo uma assertividade de 55,66% dos casos.

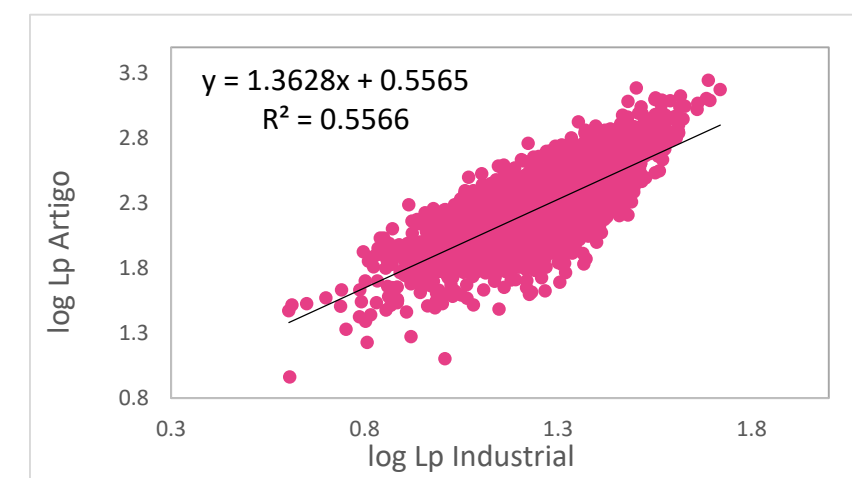


Figura 2. Relação entre Lp Industrial e Lp Artigo calculada através da equação 9

Apesar de ter sido o modelo que apresentou resultados mais positivos entre os demais, ele ainda não pode ser utilizado por esta siderúrgica, pelo fato de existirem fontes de erros como: composição química - visto que a escória utilizada pelo autor não contém alumina (Al₂O₃) como a industrial - e a temperatura - uma vez que as análises foram feitas utilizando a média de 1625°C, enquanto o autor utiliza 1600°C.

II. Modelo de Turkdogan

O modelo que apresentou a pior correlação foi o de Turkdogan, o qual apresentou uma assertividade de apenas 19,74% entre os Lp's Reais e dos Artigos, que pode ser melhor observado com o gráfico (Figura 3).

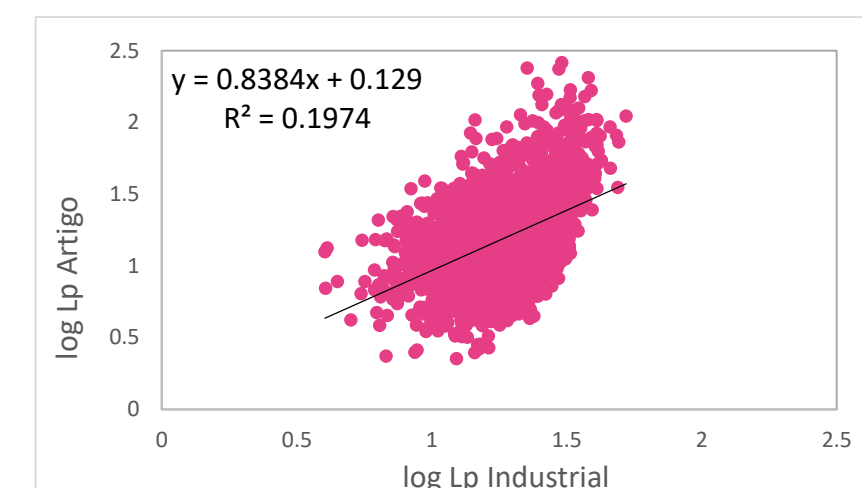


Figura 3. Relação entre Lp Industrial e Lp Artigo calculada através da equação 7

Este método matemático teve como principal fonte de erro a temperatura utilizada, uma vez que o autor definiu como temperatura ideal para seu estudo a faixa de 1200°C a 1450°C, uma temperatura que dista muito da temperatura média utilizada nesta indústria siderúrgica (1625°C).

III. FactSage

Os Lp's gerados pelo software de simulações termoquímicas FactSage, apresentaram a quarta melhor correlação com os Lp's Reais, de 47,86%, entretanto esta assertividade não é tão ideal quanto o esperado, assim observado no gráfico (Figura 11).

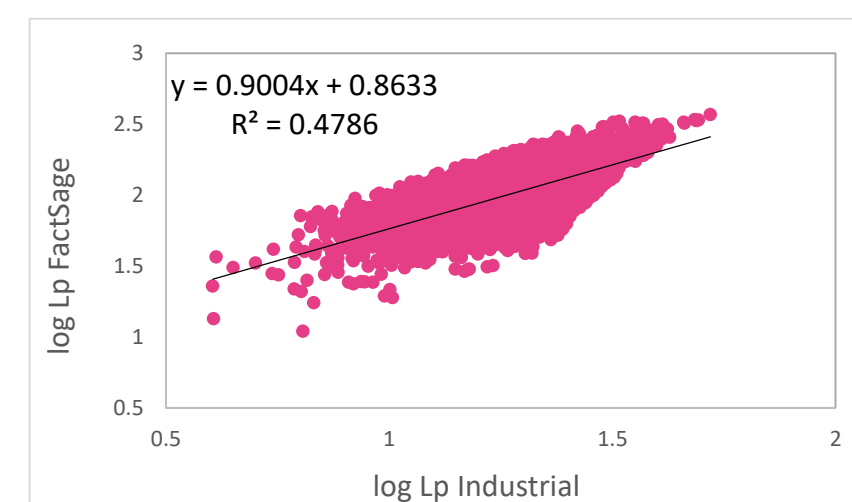


Figura 4. Relação entre o Lp Industrial e o Lp FactSage

É considerado uma fonte de erro, o fato de software prever o resultado da simulação considerando como se todos os dados se encontrassem em equilíbrio químico (termodinâmico), o que não ocorre nas indústrias siderúrgicas.

CONCLUSÕES

Percebe-se que os modelos matemáticos atuais não apresentam boas correlações com os dados de uma siderúrgica, visto que, no máximo, 55,66% dos valores da partição do fósforo foram previstos por estes métodos. Este fato se dá principalmente por tratarmos de uma aciaria elétrica enquanto a maior parte dos artigos foi feita com base no conversor a oxigênio.

Além disso, obtivemos uma divergência entre os resultados previstos pelo FactSage e os industriais, fato deste software prever o resultado em relação ao equilíbrio enquanto na indústria ele não é alcançado. O software sozinho não apresentou uma assertividade ideal, todavia, se for utilizado um fator de correção, a distância entre os coeficientes poderá ser minimizada, fazendo com que esta siderúrgica possa utilizar este software para a previsão da partição de fósforo.

Há necessidade de um estudo mais aprofundado sobre modelos matemáticos de previsão da partição de fósforo, principalmente quando se fala de uma produção realizada em forno elétrico a arco.

AGRADECIMENTOS

Agradeço a Gerdau Aços Longos pela bolsa "Parceria de Futuro" e ao Laboratório de Siderurgia da Universidade Federal do Rio Grande do Sul pela oportunidade e por me ensinar sobre siderurgia.

Agradeço principalmente aos meus pais, por todo apoio, carinho e incentivo ao estudo.