



ANÁLISE DE DESFOSFORAÇÃO UTILIZANDO A TERMODINÂMICA COMPUTACIONAL E MODELOS ESTATÍSTICOS DE DADOS INDUSTRIAIS

Autor: Bianca Freitas dos Santos

Orientador Wagner Viana Bielefeldt

Laboratório de Siderurgia (LaSid) - Centro de Tecnologia

Av. Bento Gonçalves, 9500 - Porto Alegre – RS

1. Introdução:

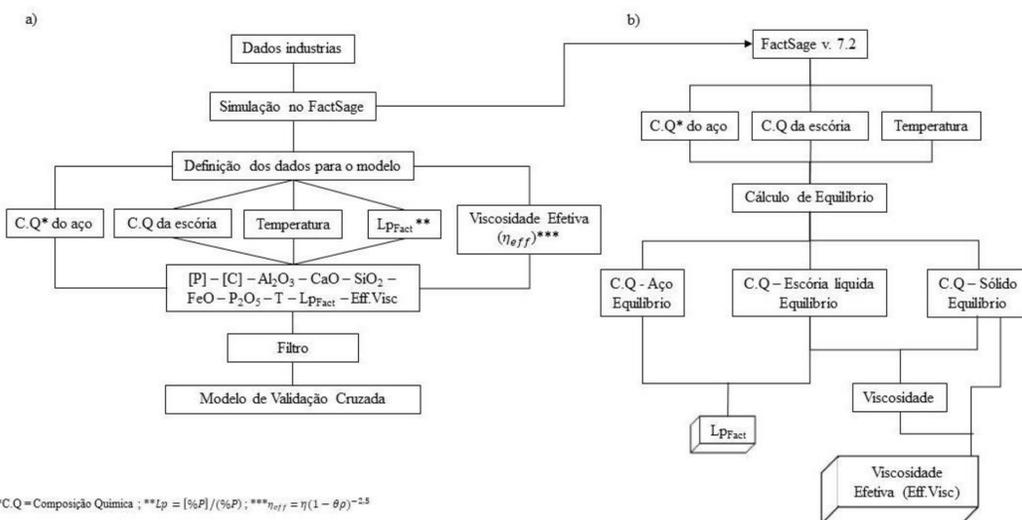
O fósforo é um elemento extremamente nocivo ao aço quando em grandes quantidades, aumentando a fragilidade a frio e piorando a sua ductilidade. Este elemento é removido do aço e transferido para a escória durante a etapa de refino primário, que acontece em um forno elétrico a arco (FEA), chamada de desfosforação. Sabe-se que os diferentes óxidos que compõe a escória, assim como a cinética, afetam a transferência do fósforo do banho para a escória. Por ser um fenômeno complexo, diversos pesquisadores criaram equações matemáticas que preveem como a desfosforação irá ocorrer no equilíbrio. Porém estes modelos não encontraram uma boa correlação com dados provenientes de uma usina siderúrgica[1].

2. Objetivo:

Este trabalho visa avaliar o programa de simulação termodinâmica FactSage v. 7.2 e utilizar os resultados dessas simulações (partição de fósforo no equilíbrio e viscosidade efetiva), para criar um novo modelo, utilizando os parâmetros utilizados por outros autores[2], e os resultados criados pela simulação termodinâmica.

3. Metodologia:

Para a criação desse modelo, os dados industriais de 13000 corridas (composição química da escória e do aço, e a temperatura) foram utilizados. Todas as corridas foram simuladas no equilíbrio termodinâmico utilizando o FactSage v. 7.2, os resultados da simulação e os dados industriais passaram por um tratamento estatístico, e foi utilizado a metodologia de validação cruzada para a criação do modelo. Na figura 1, encontra-se a metodologia usada nesse estudo.



*C.Q.=Composição Química ; **Lp = [%P]/(%P) ; ***η_{eff} = η(1 - θp)^{-2.5}

Figura 1: Fluxograma da metodologia utilizada: a) a respeito do modelo estatístico, e b) sobre a simulação do FactSage

Com esses resultados, os termos consistiram nos principais óxidos de escória (Al_2O_3 , CaO , SiO_2 , FeO , MgO , P_2O_5) e aço ($[P]$ e $[C]$) dos dados industriais. Os resultados da simulação do FactSage (Lp_{fact} e η_{eff}) foram testados individualmente por sua significância em relação ao quociente de equilíbrio Kp que é descrito pela equação 1. $k_p = (\%P_2O_5)/([P]^2 \cdot (FeO)^5)$ (1)

Os modelos de forma geral foram feitos utilizando-se os seguintes parâmetros: um termo que representa a basicidade, um termo que representa o potencial de oxigênio, um termo que leva em consideração a temperatura e uma constante. Agora foram inseridos à fórmula outro termo que considera os dados industriais como se estivesse em equilíbrio (representado por $Log(Lp_{Fact})$) e um termo cinético (η_{eff}), resultando na equação 2.

$$LogKp = \sum A(\text{termo basicidade}) + \sum B(\text{termo de oxigênio}) + \frac{C}{T} + D + \sum E(\text{termo de equilíbrio}) + \sum F(\text{termo cinético}) \quad (2)$$

4. Resultados:

A comparação entre o modelo antes e depois do filtro pode ser visto na figura 2.

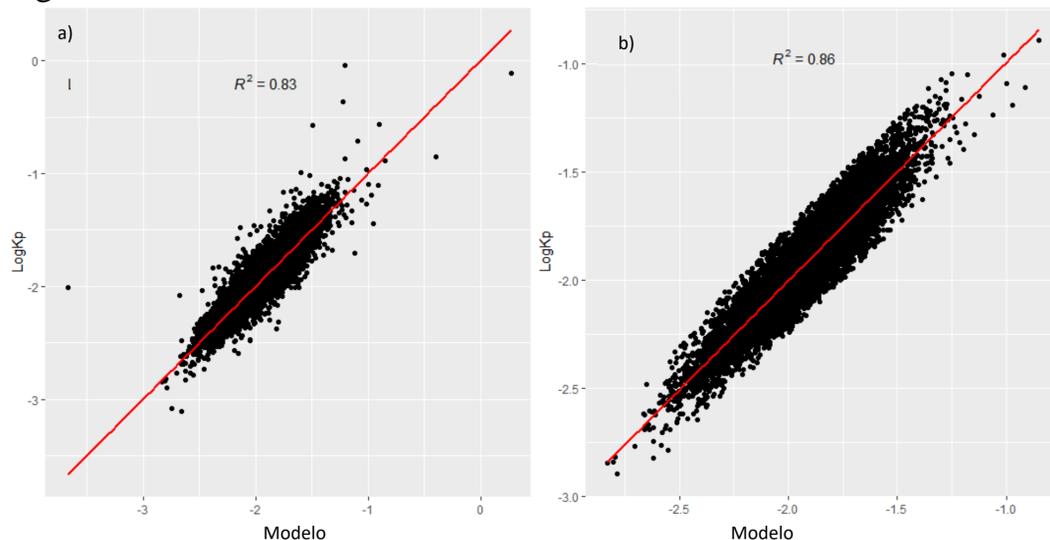


Figura 2: Comparação entre o modelo a) sem filtro e b) com filtro

Nota-se, pela figura 2, que para ambos os casos o coeficiente de determinação foi elevado. Porém, a utilização do filtro resultou em um leve aumento, passando de 0,83 para 0,86. Ao comparar com resultados da literatura, onde a maior correlação encontrada foi de 0,5 [1], nota-se que o modelo proposto obteve um resultado maior, indicando que a utilização de parâmetros que não são apenas da composição química colaboraram para uma melhor correlação.

O modelo final, calculado com os dados industriais é mostrado na equação 3.

$$LogKp = 0.05765 * (\%CaO) + 0.01449 * (\%MgO) - 0.006305 * (\%SiO_2) + 0.01007 * (\%Al_2O_3) - 0.1541 * [\%C] - 0.002219 * Lp_{Fact} + 0.6745 * \eta_{eff} \quad (3)$$

5. Conclusões:

A utilização dos parâmetros cinético (η_{eff}) e termodinâmico (Lp_{Fact}), obtidos pelo programa FactSage v. 7.2, tiveram efeito considerado significativo para o $LogKp$. O modelo proposto mostrou uma ótima correlação com os dados industriais ($R^2= 0,86$).

Referências

- [1] Bergozza, JG; Almeida, RAM; Bielefeldt, WV; Vilela, ACF. AVALIAÇÃO DA PARTIÇÃO DE FÓSFORO APLICADA NA PRODUÇÃO DE AÇO: MODELOS MATEMÁTICOS E TERMODINÂMICA COMPUTACIONAL, p. 331-341. In: 49º Seminário de Aciaria, Fundação e Metalurgia de Não-Ferrosos, São Paulo, 2018..
- [2] Almeida RAM, Santos BF, Bielefeldt WV, Vilela ACF. Development of Phosphorus Partition Model Using EAF Steelmaking Data. In: 50º Seminário de Aciaria, Fundação e Metalurgia de Não-Ferrosos, São Paulo, 2019.

Agradecimentos:

