

SIMULAÇÃO E VALIDAÇÃO DE MODELO MATEMÁTICO DA DESCARBURAÇÃO EM DESGASEIFICADOR A VÁCUO COM CIRCULAÇÃO¹

Jacyra Valéria Dornelas da Silva Araújo²

Katsujiro Suzaki³

André Luiz Vasconcellos da Costa e Silva⁴

Resumo

Aços livres de intersticiais (“interstitial free”, IF) vem aumentando sua participação significativamente no mercado de aços planos de maior valor agregado. A obtenção dos reduzidos teores de carbono especificados requer o emprego de tratamento sob vácuo. A demanda por teores de carbono cada vez mais baixos e a necessidade de reduzir os tempos de processamento requerem o emprego de desgaseificadores com circulação e, cada vez mais, a otimização dos parâmetros de processamento.

Para orientar a definição dos parâmetros ótimos de processamento em diferentes condições, o modelamento matemático para a simulação do processo de descarburização em desgaseificador com circulação vem sendo desenvolvido.

No presente trabalho, os resultados obtidos com um modelo “user friendly” apresentado anteriormente são discutidos e comparados com resultados industriais, inclusive para fins de validação do modelo. Este modelo incorpora aspectos termodinâmicos e cinéticos do processo e foi desenvolvido e aprimorado de modo a permitir a análise do efeito da variação dos principais parâmetros de operação, tais como taxa de injeção de argônio, seqüência de evacuação, nível de oxidação do aço, etc., sobre o progresso da descarburização. Assim, são apresentados os resultados de simulações de diferentes condições de tratamento, relevantes para a produção de aços IF e, em casos selecionados, comparados os resultados com aqueles obtidos industrialmente.

Os resultados indicam que o modelo formulado é uma ferramenta útil para a compreensão e desenvolvimento dos processos de elaboração de aços IF.

Palavras-Chave: modelo matemático, refino secundário, aço IF

¹ Contribuição técnica a ser apresentada, no XXX Seminário sobre Fusão, Refino e Solidificação dos Metais, Maio de 1999, Belo Horizonte, MG.

² Aluno de graduação da EEIMVR, UFF, Av. dos Trabalhadores 420, 27260-740, Volta Redonda, RJ, Brasil.

³ Membro da ABM, M.Sc., Engenheiro da Gerência de Metalurgia do Aço, CSN, Volta Redonda, RJ, Brasil.

⁴ Membro da ABM, Ph.D., Professor da EEIMVR, UFF, Av. dos Trabalhadores 420, 27260-740, Volta Redonda, RJ, Brasil. Andre@metal.eeimvr.uff.br

1 Introdução

Aços com baixos teores de solutos intersticiais (IF) vem sendo cada vez mais empregados, principalmente na indústria automotiva. A descarburização até os baixos teores de carbono requeridos, nos curtos ciclos necessários em aciarias de elevada produtividade vem sendo obtida pelo tratamento sob vácuo, principalmente o processo RH.

Duas das mais importantes metas na melhoria do processamento no tratamento RH são a obtenção de teores de carbono cada vez menores e diminuição do tempo de refino. A simulação do processo com base em um modelo que permita relacionar a cinética de descarburização com os parâmetros do processo deve ser útil nesta otimização.

Seguindo uma linha de pesquisa em simulação da descarburização sob vácuo⁽¹⁾, desenvolveu-se um modelo com uma interface gráfica amigável ao usuário e com maior flexibilidade de utilização. Em trabalho anterior⁽²⁾ foi apresentada a formulação do modelo. No presente trabalho, os resultados obtidos com o modelo são discutidos e comparados com resultados industriais, inclusive para fins de validação. São apresentados os resultados de simulações de diferentes condições de tratamento, relevantes para a produção de aços IF e, em casos selecionados, comparados os resultados com aqueles obtidos industrialmente.

2 Esquema do Processo RH-KTB

O equipamento RH é constituído por um vaso com duas pernas, uma delas possuindo ventaneiras por onde é injetado argônio para promover a circulação do aço entre a panela, onde as pernas são imersas, e o vaso. Em sua parte superior está acoplado um sistema de evacuação de gases, capaz de alcançar pressões no vaso em torno de 1 mbar. A cinética de descarburização pode ser afetada pelo sopro de oxigênio sobre o banho, no vaso, através do sistema KTB. Tanto as vazões de oxigênio da lança KTB quanto a vazão de argônio na perna podem ser variadas.⁽³⁾

A diferença de pressão entre o interior e o exterior do vaso faz com que o aço líquido suba pelas pernas até a altura máxima correspondente à diferença de pressão externa e interna. O argônio injetado em uma das pernas promove a circulação do banho entre o vaso e a panela. A injeção de argônio na perna de subida causa uma maior elevação da coluna de aço nesta região do vaso. A circulação entre o vaso e panela depende da pressão no vaso, injeção de argônio e diâmetro das pernas.

O aço que se encontra no vaso está submetido a uma baixa pressão o que favorece termodinamicamente a reação entre o carbono e oxigênio do banho, gerando CO .

3 Modelo Matemático

3.1 Hipóteses

Na formulação do modelo são consideradas as seguintes hipóteses:

- a) A descarburização ocorre na perna de subida e no vaso RH.;
- b) O aço é perfeitamente misturado na panela e no vaso;
- c) A descarburização ocorre apenas em três sítios de reação – interior do banho no vaso, superfície do banho no vaso e na perna de subida, onde a descarburização ocorre na superfície das bolhas de argônio⁽¹⁾⁽⁴⁾⁽⁵⁾⁽⁶⁾;
- d) Apenas o transporte de massa do carbono é considerado como determinante da cinética de descarburização⁽⁷⁾⁽⁸⁾;
- e) Reações paralelas à descarburização não são consideradas no modelo;
- f) Variações da temperatura do banho não são consideradas.

3.2 Modelo Matemático

O modelo matemático baseia-se em três balanços: o balanço de massa do carbono e do oxigênio no vaso RH, na panela, e o balanço de massa dos gases no vaso.

3.2.1 Balanço de massa dos gases no vaso

O principal objetivo do balanço de massa dos gases no vaso é conhecer a pressão reinante no interior do vaso. Conseqüentemente, conhecendo-se a capacidade de evacuação do sistema de vácuo e a quantidade de gás que entra no vaso (Ar , CO e O_2) pode-se calcular a queda de pressão, e a pressão parcial de CO no vaso RH.

Realizando o balanço de massa gás, considerado ideal, no interior do vaso, é possível determinar a variação de pressão no interior do vaso.

$$\frac{dP}{dt} = \frac{R.T}{V_{Sist.} \cdot M_{gás}} * (Q_m - Q_{out}) \quad (1)$$

A vazão de gás exaurido pelo sistema de vácuo é característica do sistema de vácuo.

3.3 Balanço de massa de carbono e de oxigênio na panela, na perna de subida e no vaso

Para fins de modelamento o processo é dividido em três macro-reatores: panela, perna de subida e vaso, em função do comportamento da descarburização em cada uma destes reatores. Como em modelamentos anteriores⁽¹⁾⁽⁴⁾⁽⁵⁾⁽⁶⁾, considera-se que a reação de descarburização ocorra em três regiões distintas do vaso RH: perna de subida, superfície e interior do banho, causando variação local dos teores de carbono e oxigênio.

Como não há descarburização na panela, a variação da massa de carbono na panela em função do tempo deve-se à circulação do aço entre o vaso e panela, logo:

$$\frac{dm_C^L}{dt} = \left(\frac{W_L}{100} \right) \frac{d\%C_L}{dt} = - \left(\frac{Q}{100} \right) [\%C_L - \%C_V] \quad (2)$$

A variação de massa de carbono no vaso deve-se à circulação do aço e a descarburização que ocorre nos dois sítios de reação: superfície do banho e interior do banho. Pode-se expressar o balanço no vaso como:

$$W_V \left(\frac{d\%C_V}{dt} \right)_{vaso} = Q.(\%C_P - \%C_V) - (F). \rho. A. k_{C,L} ([\%C_V] - [\%C]_{eq.}) - \left[\frac{\rho. A. Q}{W_V} \cdot \left[\%C_V. h_{máx.} - \frac{h_{máx.}}{K_{eq.}} \%O_V (P_V + \rho. g. \frac{h_{máx.}^2}{2} + P_{sat.}) \right] \right] \quad (3)$$

O primeiro termo corresponde à variação da massa de carbono devido à circulação. O segundo termo, corresponde à variação de massa devido à descarburização na superfície do banho, e o último refere-se à nucleação de CO no interior do banho.

Devido a agitação do banho promovida pelas bolhas de argônio e de CO na superfície do vaso, a área efetiva de reação da equação (3) assume um valor bastante elevado⁽¹⁰⁾. Este efeito foi incluído na equação 3 através fator F . Como em outros modelos em que ocorre agitação por gás este fator é tomado como proporcional à raiz quarta da energia de agitação do gás, por unidade de tempo⁽⁹⁾

O terceiro termo da equação 3 representa a geração de CO no interior do banho. Considera-se que a única barreira para a geração de CO no interior do banho é a nucleação⁽⁶⁾. Desde que a supersaturação em CO seja suficiente para vencer a sobrepressão de nucleação, tomada como $2670Pa$ ⁽¹¹⁾, ocorre descarburização sem limitações cinéticas. Assim, existe uma profundidade máxima do banho, acima da qual não há nucleação de CO , dada pela condição:

$$\%C_V. \%O_V. K_{eq.} = (P_V + \rho. g. h_{máx.} + P_{sat.}) \quad (4)$$

Se a descarburização, em cada profundidade, ocorra até atingir o carbono de equilíbrio com a pressão aplicável, a perda de massa de carbono, neste sítio, pode ser determinada ao longo de toda altura até o valor $h_{máx.}$, como mostra o último termo da Equação 3

O aço que sobe pela perna do vaso sofre descarburização devido à absorção de CO pelas bolhas de argônio injetado. Assim, a perna de subida é considerada um conjunto de micro-reatores gás-metal em série. O último destes reatores entrega ao vaso uma quantidade de aço com teores de carbono e oxigênio menores do que os da panela. Nestes reatores, além do balanço de massa de carbono e de oxigênio, é necessário considerar o balanço de massa de CO no gás.

O balanço de massa de CO para cada micro-reator na perna de subida é dado por:

$$\frac{dn_{CO}}{dt} = \dot{n}_{Ar} \cdot \left[\left(\frac{n_{CO}}{n_{Ar}} \right)^{in} - \left(\frac{n_{CO}}{n_{Ar}} \right)^{out} \right] + \dot{n}_{CO\text{Absorvido}} \quad (5)$$

O tipo de escoamento assumido neste modelo é “slug flow”, onde o coeficiente volumétrico de transporte de massa é obtido empregando-se a equação empírica de Akita⁽¹²⁾.

$$\frac{Ak_i d_{Perna}^2}{D_i} = 0.6 \left(\frac{\eta_{Liq.}}{\rho_{Liq.} D_i} \right)^{1/2} \left(\frac{gd_{Perna}^2 \rho_{Liq.}}{\sigma} \right)^{0.62} \left(\frac{gd_{Perna}^3 \rho_{Liq.}^2}{\eta_{Liq.}^2} \right)^{0.31} \epsilon_g^{1.1} \quad (6)$$

O número de moles de CO absorvido pelas bolhas de argônio por unidade de tempo para cada reator é dado por:

$$\left(\frac{dn_{CO}}{dt} \right)_{Absorvido}^{Reator} = \frac{(\kappa_C \cdot a)(W^{reator})}{M_C \cdot (10^{-3})(10^2)} * \left\{ \%C_p^{reator} - \frac{(P_V + \rho \cdot g \cdot h_V^{reator})}{K_{eq} \cdot \%O_p^{reator}} \left(\frac{n_{CO}^{reator}}{n_{CO}^{reator} + n_{Ar}^{reator}} \right) \right\} \quad (7)$$

Logo, o balanço de massa de carbono na perna de subida é expresso por:

$$\left(\frac{dm_C}{dt} \right)^{Reator} = \frac{Q}{100} \left(\%C_p^{reator\ anterior} - \%C_p^{reator} \right) - \left(\frac{dn_{CO}}{dt} \right)_{Absorvido}^{Reator} \cdot M_C \quad (8)$$

De maneira análoga ao balanço de massa de carbono, o balanço de massa de oxigênio é calculado através de suas equações diferenciais específicas para a panela, perna e vaso. A variação de oxigênio na panela deve-se apenas à circulação do banho.

As equações para a variação da massa de oxigênio no vaso RH e na perna de subida podem ser expressas em função da variação da massa de carbono para cada uma destas regiões, através da estequiometria.

Para o vaso um termo referente a absorção de oxigênio soprado pelo sistema KTB é adicionado ao balanço de massa de oxigênio⁽¹³⁾.

3.4 Circulação do Banho

Foram utilizadas duas equações empíricas para o cálculo da circulação do banho: equação de Kuwabara⁽⁴⁾ e equação de Furtado e colaboradores⁽¹⁴⁾ determinada em modelo físico do RH industrial modelado neste trabalho.

Equação empírica proposta por Kuwabara:

$$Q(\text{kg} / \text{s}) = 114 \cdot (G_{Ar} \cdot 60)^{1/3} \cdot (d_p^{subida})^{1/3} \cdot (d_p^{descida}) \cdot (\ln(P_{atm.} / P_V))^{1/3} \cdot (1000 / 60) \quad (10)$$

Equação de Furtado:

$$Q(t / \text{min}) = 11364.6 + 104.884 * \text{Log}(Q^{0.342} * H^{1.623}) \quad (11)$$

4 Resultados e Discussão

4.1 Comparação das curvas de descarburização simuladas com as da literatura

Foram feitas simulações para a verificação do comportamento do modelo em relação à literatura.

As figuras 1 e 2 comparam os resultados do modelo atual com aqueles simulados por Cordeiro⁽¹⁾. As condições de simulação foram as mesmas exceto quanto ao modo de alimentação de oxigênio. Presentemente, o suprimento de oxigênio foi simulado através do sopro KTB, enquanto Cordeiro simulou uma injeção contínua de O_2 dentro do vaso; a quantidade total de oxigênio introduzido no banho foi a mesma, entretanto. Em ambos os casos, foi empregada a equação de Kuwabara para o cálculo da taxa de circulação do banho.

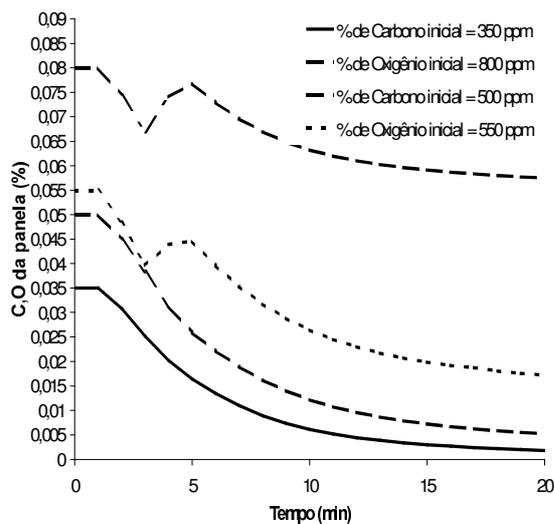


Fig. 1: Simulação para mesmas condições de Cordeiro^(R)

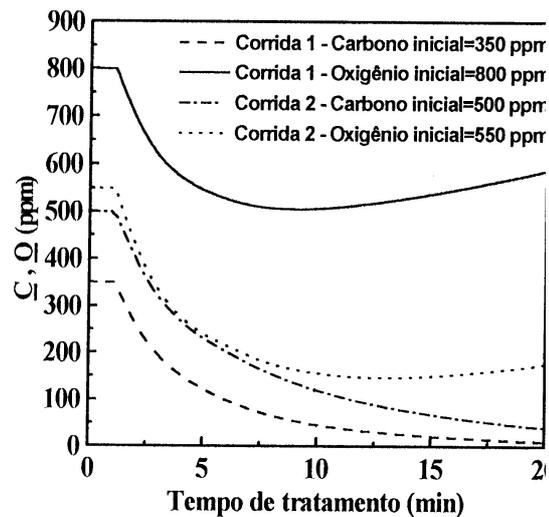


Fig. 2: Simulação de Cordeiro⁽¹⁾

Os resultados dos dois modelos são compatíveis. Pode-se observar pelos gráficos a influência das concentrações iniciais de carbono e oxigênio no teor final de carbono.

Takahashi⁽⁵⁾ apresentou resultados de simulação em que taxa de injeção de argônio variou durante o tratamento, porém sem informar como esta variação ocorreu.

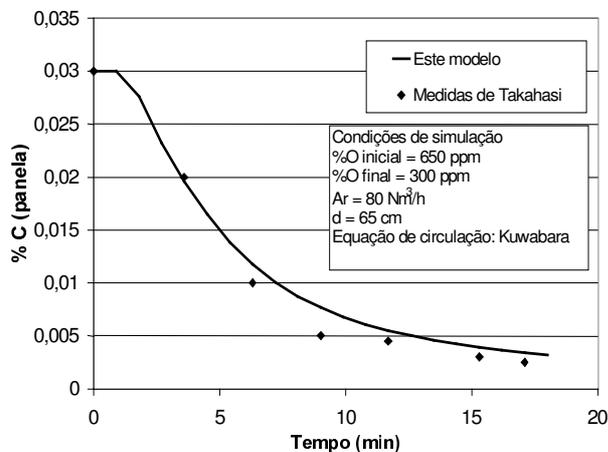


Fig. 3: Simulação comparativa para as condições de Takahashi⁽⁵⁾

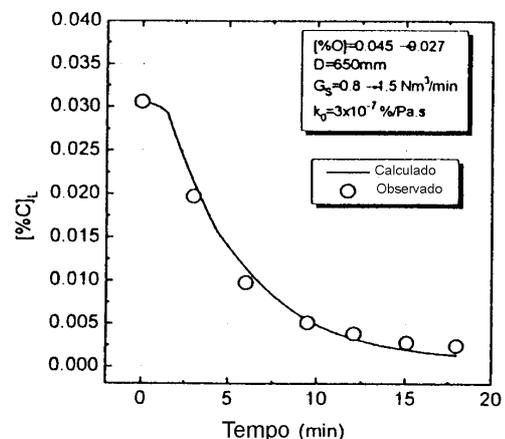


Fig. 4: Resultados de Takahashi

O teor de oxigênio final não correspondeu ao consumo estequiométrico de oxigênio devido a descarburização na simulação de Takahashi, sem que uma justificativa tenha sido apresentada por este autor (ex: absorção de oxigênio da escória). Desta forma, a simulação foi realizada para as condições citadas na figura 4. Também, neste caso, foi empregada a equação de circulação de Kuwabara.

Os resultados da simulação com o modelo atual são semelhantes valores simulados e medidos por Takahashi. Em vista das possíveis diferenças entre características do RH não explicitadas por Takahashi, a concordância pode ser considerada boa.

4.2 Validação e comparação da simulação com resultados industriais

4.2.1 Modelo do sistema de vácuo

Em uma primeira etapa foi validado o modelo do sistema de vácuo. Até o presente esta validação só foi possível até o limite de 60 mbar, através do tratamento ligeiro de uma corrida desoxidada. Testes a quente deverão ser realizados para validar o restante do modelo

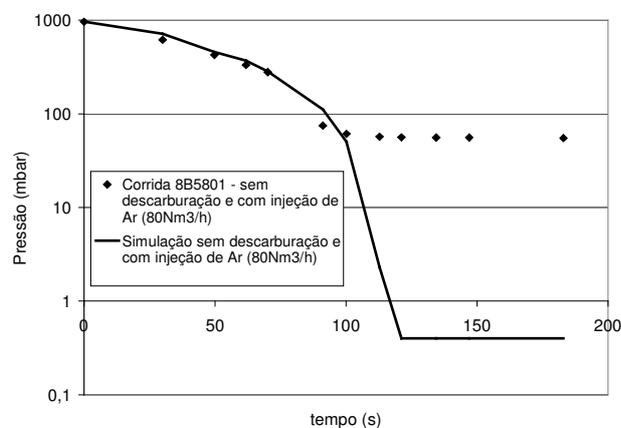


Fig. 5: Comparação entre a queda de pressão simulada e medida, para uma corrida desoxidada, em RH industrial.

4.2.2 Efeito da fator de amplificação da área efetiva do vaso

A figura 6 apresenta a simulação da descarburização de uma corrida tratada em RH industrial. Pode-se observar o efeito da inclusão da amplificação da área, com um fator $F=1$ na simulação. Com um maior número de observações industriais será possível ajustar o valor de F , considerando a etapa do processo em que a área do vaso tem maior importância.

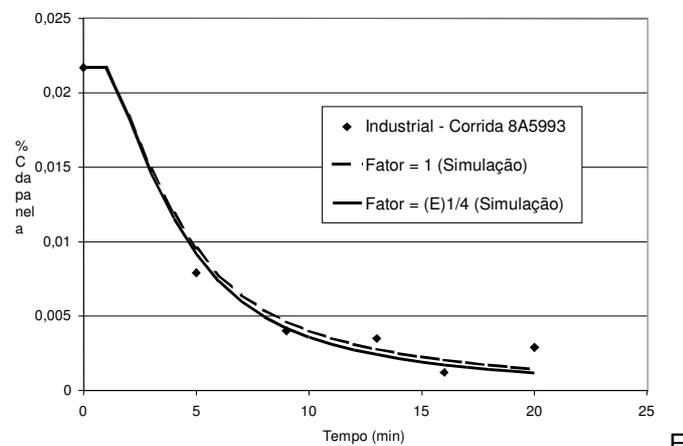


Fig. 6: Simulações variando o fator de intensificação para a área efetiva de reação.

4.2.3 Efeito da equação de Circulação

A Figura 7 compara os resultados de simulação da mesma corrida industrial do item anterior com os valores experimentais em duas condições: a) com o emprego da equação de circulação de Kuwabara e b) com a equação de circulação de Furtado⁽¹⁴⁾. Esta equação resulta em valores mais elevados da taxa de circulação no início do processo, do que os calculados pela equação de Kuwabara. Ambas equações tendem ao mesmo valor para pressões de fim de vácuo. Observa-se que esta mudança resulta na intensificação da descarburização na etapa inicial do processo, como esperado.

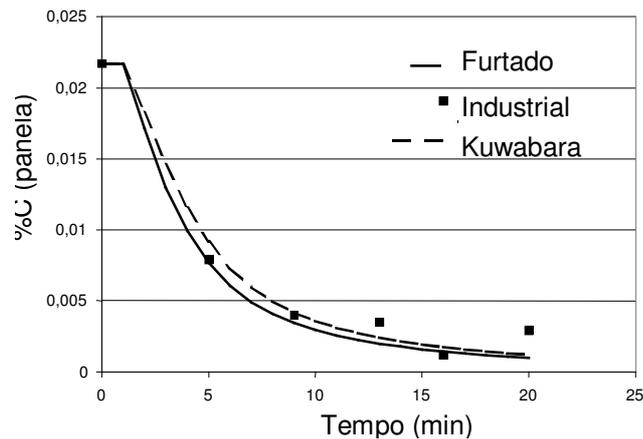


Fig. 7. Simulação de descarburização empregando diferentes equações para a taxa de circulação do metal.

4.2.4 Ajuste a corridas industriais

Medidas do teor de carbono e de oxigênio foram realizadas durante o processo de descarburização, para possibilitar o ajuste do modelo ao equipamento industrial. A seguir estes resultados são comparados com os resultados de simulação considerando o fator de intensificação da área de reação com a constante $F=1$, e empregando a equação de circulação de Furtado. Em todas as corridas ocorreu sopro de KTB.

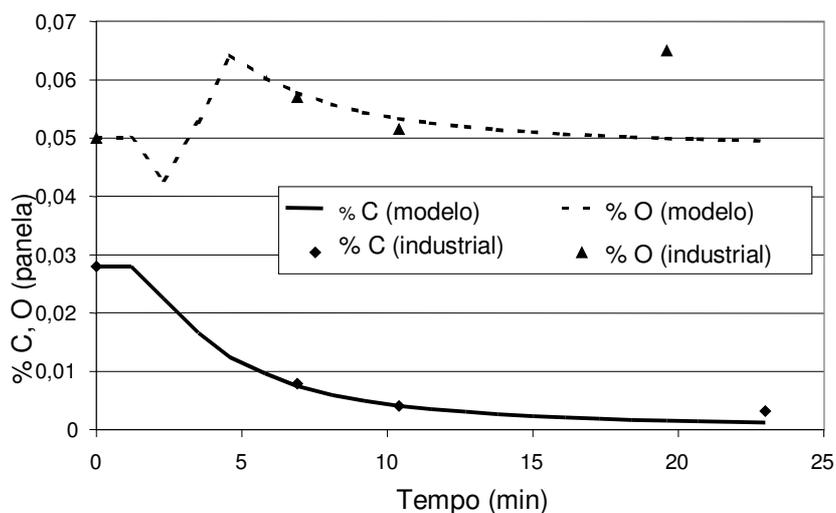


Fig. 8: Comparação de valores simulados em medidos de C e O em corrida industrial. Ver texto para condições de simulação e discussão.

Na Figura 8 observa-se um teor final de oxigênio bem mais alto que o modelado. Isto ocorreu em todos os casos simulados e deve estar associado a dissolução do FeO da escória. Esta fonte de oxigênio será incorporada ao modelo, no futuro.

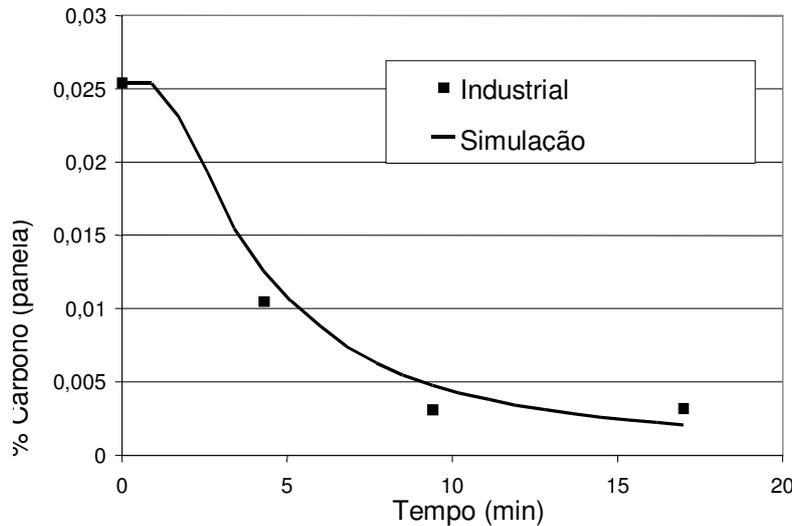


Fig. 9: Simulação de corrida em KTB industrial, empregando a equação de Kuwabara

A Figura 9 mostra os resultados da simulação de outra corrida industrial, empregando a equação de Kuwabara para a circulação. No estágio atual da validação não se dispõe de dados suficientes para decidir pelo emprego sistemático da equação de Furtado ou Kuwabara.

Observa-se que os teores de carbono finais se situam, em geral, abaixo dos valores medidos experimentalmente. Isto indica a necessidade de ajuste nos coeficientes cinéticos dos diferentes sítios de descarburização. Entretanto, a tendência geral do modelo pode ser considerada boa e acredita-se que os ajustes finais poderão ser realizados com um número limitado de experimentos industriais.

5 Conclusão

Um modelo matemático de fácil utilização e ajuste foi desenvolvido para descrever a descarburização em um RH industrial. Os resultados da etapa inicial de validação do modelo indicaram que:

O sistema de vácuo está adequadamente modelado.

A tendência do comportamento da descarburização é bem descrita pelo modelo. Um desvio mais significativo ocorre no comportamento do oxigênio, possivelmente devido a fontes não consideradas no modelo (escória da panela). Presentemente o modelo apresenta um teor de carbono final inferior ao medido o industrialmente, mas o ajuste dos coeficientes cinéticos do modelo deverá permitir melhores previsões e o ajuste da evolução ao longo da corrida.

Foram identificadas as principais variáveis ajustáveis e seus efeitos sobre o comportamento do modelo e ajuste aos dados industriais.

Um conjunto adicional de medidas da evolução do carbono e oxigênio ao longo do processo deverá permitir o ajuste satisfatório do modelo, confirmando sua utilidade para a compreensão e desenvolvimento dos processos de elaboração de aços IF.

Agradecimentos

Os autores agradecem a CSN-Companhia Siderúrgica Nacional pelo apoio na realização deste trabalho. JVDSA agradece o apoio da CAPES. ACS agradece o apoio do CNPq.

Nomenclatura

A – área	m^2
(ak) – coeficiente volumétrico de transporte de massa – s^{-1}	
d – diâmetro.....	m
D_i – coeficiente de difusão da espécie i	m^2/s
G – Vazão de gás.....	Nm^3/s
H – profundidade - distância da superfície	m
h – profundidade - distância da superfície	m
K_{eq} – constante de equilíbrio	
k - coeficiente de transporte de massa.....	m/s
M – massa molecular	kg/mol
m – massa.....	kg
n – número de moles	
P – Pressão	Pa (N/m^2)
Q – taxa de circulação do banho	kg/s
Q_i – taxa mássica do componente i	kg/s
T – temperatura	K
t – tempo.....	s
U – velocidade superficial.....	m/s
V – volume.....	m^3
W – massa da corrida	kg
ϵ - fração de vazios	adimensional
•	
$\dot{\epsilon}$ - taxa de energia de agitação.....	J/s
η - viscosidade	kg/m.s
ρ - densidade do ferro.....	kg/m^3
σ - tensão superficial.....	J/m^2

Subscrito/ Sobrescrito

Ar – argônio	Atm. - atmosfera
eq. – equilíbrio	exit – saída
g – gás	in - entra
inj – pos. injeção argônio na perna subida	L – panela
Liq - líquido	máx – máximo
out - sai	P - perna
res – residência	Sist. – sistema de vácuo
sat – saturação	V – vaso
sup - superfície	x – fração molar

Bibliografia

- (1) Cordeiro, N. B. Modelamento Matemático da Descarburação no Desgaseificador a Vácuo com Circulação. *Dissertação de Mestrado, UFF, Volta Redonda, 1997.*
- (2) Araújo, J.V.D.S., Coutinho Neto, L., Costa e Silva, A., *53º Congresso Anual da ABM, Belo Horizonte, MG, ABM São Paulo SP, 1998.*
- (3) Fruehan, R. J. *Vacuum Degassing of Steel.* The Iron and Steel Society, 1990
- (4) Kuwabara, T.; Umezawa, K.; Mori, K.; Watanabe, H., *Trans. ISIJ.*, Tokyo, v. 28, p. 305-314, 1988.
- (5) Takahashi, M.; Matsumoto, H.; Saito, T., *ISIJ International*, Vol. 35, Nº. 12, p. 1452-1458, 1995;

- (6) Yano, M.; Harashima, K.; Azuma, K.; Kitamura, S.; Inomoto, T.; Nagahama, H., *Nippon Steel Technical Report*, Nº. 61, April, 1994;
- (7) Cordeiro, N. B.; Castro, R. N.; Silva, A. C.; Tokumitsu, N., *Seminário sobre Fusão, Refino e Solidificação dos Aços.*, Campinas - SP, Maio, 1997;
- (8) Suzuki, K.; Mori, K. Rate of Desorption of CO from Liquid Iron. *Trans. ISIJ*, Vol. 17, p. 136-143, 1977;
- (9) Deo, B.; Gupta, S., *Steel Research*, 67, n. 1, p.7-11, 1996.
- (10) Kouroki, S.; Obana, T.; Shiota, Y., *The Sumitomo Search*, Nº. 44, December, 1990;
- (11) Kitamura, S.; Yano, M.; Harashima, K.; Tsutsumi, N., *Tetsu to Hagané*, v. 80, p. 31-36, 1994;
- (12) Akita, K.; Yoshida, F., *Ind. Eng. Chem. Process Des. Develop.*, v. 12, nº 1, 1973;
- (13) Yamaguchi, K.; Kishimoto, Y.; Sakuraya, T.; Fujii, T.; Aratani, M.; Nishikawa, H. *ISIJ International*, Vol. 32, Nº. 1, p. 126-135, 1992;
- (14) Furtado, H.S., Adriano, M., Mello, A.H., Passos, S.R.M. e Suzaki, K., *53º Congresso Anual da ABM*, Belo Horizonte, MG, ABM São Paulo SP, 1998.

ABSTRACT

The market share of interstitial free (IF) steels is significantly increasing in the high value added steel market. The specified levels of carbon can only be reached through vacuum treatment. The requirement for lower carbon contents and shorter processing times mandate the use of circulation degasers such as the RH, and a constant effort in process optimization.

As a tool for guiding process optimization different mathematical models of the decarburization models have been developed for the RH process.

In this work, the results of simulations performed with an user-friendly model previously described are presented and compared with industrial results, as a first step in the model validation stage. This model incorporates both thermodynamic and kinetic aspects of the process and has been developed so as to facilitate the analysis of the effects of changes in process variables. Thus, selected simulation cases are presented and compared with industrial results. It is shown that after proper validation the model will be an useful tool for IF processing development.

Keywords: mathematical modeling, vacuum decarburization, IF steel