

# CÁLCULO DA VISCOSIDADE DE ESCÓRIAS DO SISTEMA CaO-SiO<sub>2</sub>-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-MgO UTILIZANDO O SOFTWARE FACTSAGE 6.4\*

Miguel Lahr da Silva<sup>1</sup>  
Wagner Viana Bielefeldt<sup>2</sup>  
Antônio Cezar Faria Vilela<sup>3</sup>

## Resumo

Este estudo foca na análise do comportamento do módulo para cálculo da viscosidade de escórias fundidas do software FactSage 6.4. Foram utilizados dados da literatura e calculada a viscosidade de 972 escórias, no sistema CaO-SiO<sub>2</sub>-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-MgO, variando composição dentro da faixa de 2-58% de CaO, 7,4-70% de SiO<sub>2</sub>, 0-40% de Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> e 0-38% de MgO, e temperatura na faixa de 1050-1750°C. Foi encontrada uma tendência do software de produzir resultados com valores de viscosidades menores que os encontrados na literatura. O desvio médio entre os valores da literatura e calculados foi de 32,06%, segundo estudos da literatura é considerado adequado para viscosidades de escórias siderúrgicas fundidas.

**Palavras-chave:** Escória; Viscosidade; Termodinâmica computacional.

## CaO-SiO<sub>2</sub>-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-MgO SLAG VISCOSITY CALCULATION USING FACTSAGE 6.4 SOFTWARE

### Abstract

This study focused on the behavior analysis of the viscosity module of the FactSage 6.4 software. A total of 972 slags were calculated using literature data from the CaO-SiO<sub>2</sub>-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-MgO system, varying the composition on the range between 2-58% CaO, 0.4-70% SiO<sub>2</sub>, 0-40% of Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> and 0-38% MgO. The temperature range was from 1050°C to 1760°C. The software showed a tendency to produce lower values than the ones on the literature data. The average deviation between the calculated and literature values was 32,06%, which according to literature studies is considered suitable for steelmaking molten slags viscosity.

**Keywords:** Slags; Viscosity; Computational thermodynamics.

<sup>1</sup> Eng. Metalúrgico, mestrando; Laboratório de Siderurgia (LaSid); PPGE3M/UFRGS, Porto Alegre, RS, Brasil.

<sup>2</sup> Prof., Dr.; LaSid; Depto. de Metalurgia, PPGE3M/UFRGS, Porto Alegre, Brasil.

<sup>3</sup> Prof., Dr.-Ing.; LaSid; Depto. de Metalurgia, PPGE3M/UFRGS, Porto Alegre, RS, Brasil.

## 1 INTRODUÇÃO

O estudo das propriedades de escórias fundidas tem se tornado cada vez mais importante dentro da siderurgia, tendo como principal objetivo o aumento da produtividade, a produção de um produto de maior qualidade e a redução de custos de processo. Dentre as características desta escória destaca-se a viscosidade, em virtude de sua fundamental importância no processo. Infelizmente o estudo da viscosidade de escórias é problemático, as medições são difíceis, caras e muitas vezes carregam erros consideráveis, segundo Mills et al [1], incertezas na casa dos 25 a 30% são esperadas.

Neste contexto entram os modelos matemáticos, a possibilidade de calcular a viscosidade com precisão, a partir da composição da escória e da temperatura é extremamente vantajosa dentro do ambiente industrial e de pesquisa. Com o passar dos anos, vários modelos foram desenvolvidos e alguns permanecem em uso. Sridhar [2] faz uma revisão dos modelos mais utilizados atualmente.

Como todos os modelos são ajustados por dados obtidos experimentalmente, pode-se esperar que os valores calculados a partir desses tivessem o mesmo nível de incertezas que os dados usados. Assim sendo, em um número suficientemente grande de cálculos, a diferença entre dados calculados e medidos deve ser por volta de 25 a 30%.

O objetivo deste trabalho é, através da comparação entre os dados calculados pelo software e os obtidos em estudos da literatura, analisar a eficiência do modelo de cálculo de viscosidade do software FactSage (versão 6.4), atualmente disponível no mercado, e que vem sendo utilizado pelo Laboratório de Siderurgia da UFRGS, para uma faixa de composições no sistema  $\text{CaO-SiO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3\text{-MgO}$ .

## 2 METODOLOGIA

A fim de verificar a eficiência do programa FactSage para os cálculos de viscosidade, foi utilizado a versão 6.4. Dados experimentais [3-11] obtidos na literatura foram comparados com valores calculados pelo software. Todos os dados foram medidos utilizando viscosímetro rotativo ou vibratório na amostra fundida de escória e abrangem uma ampla faixa de composições no sistema  $\text{CaO-SiO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3\text{-MgO}$ .

Machin et al [6,7] estudaram a viscosidade de uma ampla quantidade de composições, focando principalmente no papel da alumina. Forsbacka et al [3] focaram em escórias da produção de ferro-cromo. Kim et al<sup>[5]</sup>, Nakamoto et al [8] e Tang et al [10] deram ênfase nas escórias de alto-forno e, por fim, Jönsson et al [4], Yakushev et al [11] e Song et al [9] em escórias de refino secundário de aços.

A tabela 1 mostra a variação da composição das escórias utilizadas no trabalho de Machin et al [6,7]. As tabelas 2, 3 e 4 mostram, respectivamente, as composições máximas e mínimas das escórias de ferro-cromo, alto-forno e refino secundário.

**Tabela 1** – Distribuição das composições das escórias [6,7].

	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> (% em massa)	CaO (% em massa)	SiO <sub>2</sub> (% em massa)	MgO (% em massa)	%CaO/%SiO <sub>2</sub>
Máximo	25	40	50	30	0,8
Mínimo	5	5	50	0	0,1

**Tabela 2** – Distribuição das composições das escórias de ferro-cromo [3].

	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> (% em massa)	CaO (% em massa)	SiO <sub>2</sub> (% em massa)	MgO (% em massa)	%CaO/%SiO <sub>2</sub>
Máximo	30	20	40	38	0,8
Mínimo	25	2	25	20	0,05

**Tabela 3** – Distribuição das composições das escórias de alto-forno [5,8,10].

	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> (% em massa)	CaO (% em massa)	SiO <sub>2</sub> (% em massa)	MgO (% em massa)	%CaO/%SiO <sub>2</sub>
Máximo	35	52,7	59,38	10	7,12
Mínimo	0	25	7,4	4,9	0,5

**Tabela 4** – Distribuição das composições das escórias de refino secundário de aços [4,9,11].

	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> (% em massa)	CaO (% em massa)	SiO <sub>2</sub> (% em massa)	MgO (% em massa)	%CaO/%SiO <sub>2</sub>
Máximo	40	58	45,5	12	5,5
Mínimo	0	39	10	0	1,19

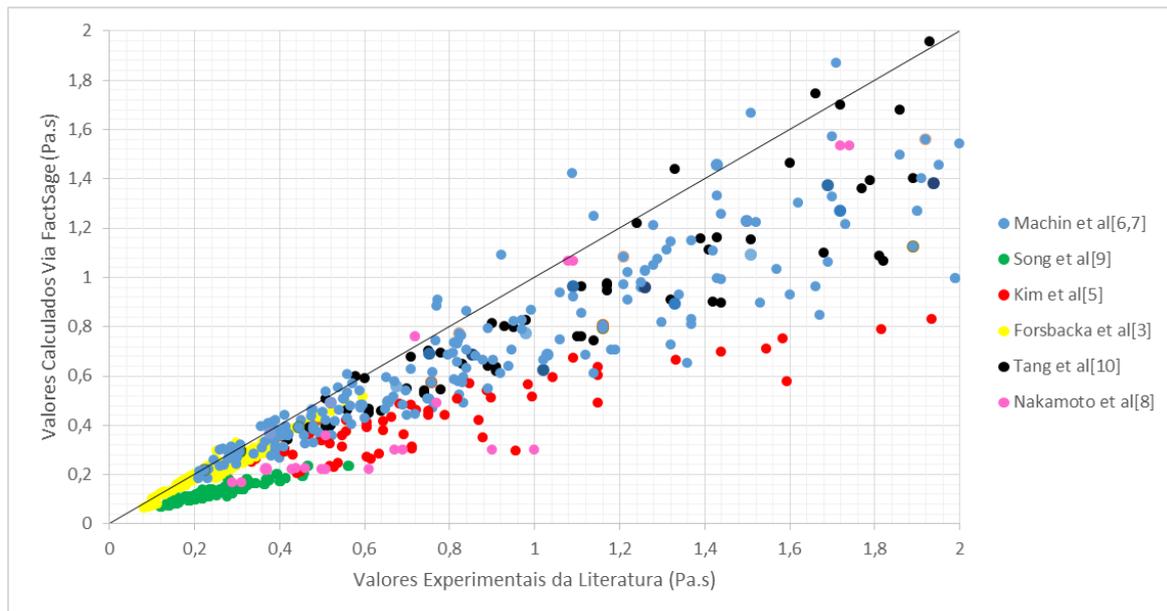
A escolha dos autores foi feita de forma a explorar uma ampla faixa de viscosidades, variando desde 0,1 Pa.s até 16300 Pa.s, possibilitando assim uma verificação completa das capacidades do software.

Não foi considerada a presença de sólidos na escória fundida, os dados resultantes são providos diretamente pelo software, sem tratamento posterior.

Para os cálculos foi usado o modulo Viscosity do FactSage. Este utiliza um modelo Quase-Químico e a base de dados do software para calcular a viscosidade do sistema de óxidos. O banco de dados utilizado foi o Melts, que segundo a documentação do software [12], é indicado para viscosidades de até e 15 Pa.s.

### 3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

A figura 1 mostra a comparação entre os valores encontrados na literatura e os calculados pelo FactSage 6.4. Os valores dos eixos foram limitados até 2 Pa.s, faixa onde se encontram as escórias utilizadas na produção industrial de aço.



**Figura 1** – Valores de viscosidade calculados vs valores experimentais da literatura.

Observa-se na figura 1 que os pontos estão dispersos no gráfico, indicando uma não linearidade na relação entre os valores, principalmente nos dados de Machin et al<sup>[6,7]</sup> para valores acima de 0,5 Pa.s. Os valores calculados nas composições usuais para escórias mostram uma tendência a serem menores que os medidos nos estudos anteriormente citados. Dados de Forsbacka et al [4] e Song et al [9] foram os que demonstraram maior linearidade, enquanto o primeiro, Forsbacka et al [4], mostrou menor variação entre os valores medidos e calculados.

A tabela 5 mostra o valor absoluto da média, composta pela diferença em porcentagem, entre o valor medido e do calculado pelo FactSage para cada ponto estudado. Este número mostra a o distanciamento entre estes valores, conforme expresso pela equação 1, proposta por Mills et al [1] e Forsbacka et al [3]. É importante observar que o uso do módulo no numerador da equação mascara a tendência dos valores calculados serem menores, mas mostra a diferença de forma adequada e é importante para que uma comparação direta com os trabalhos dos autores citados seja possível.

$$\delta_n = \frac{|(\eta_n)_{cal} - (\eta_n)_{med}|}{(\eta_n)_{med}} \times 100 \quad (1)$$

Sendo:

$\delta_n$  – Valor absoluto da média  
 $(\eta_n)_{cal}$  – Média dos valores calculados  
 $(\eta_n)_{med}$  – Média dos valores da literatura

**Tabela 5** – Diferença entre valores calculados e medidos de viscosidade.

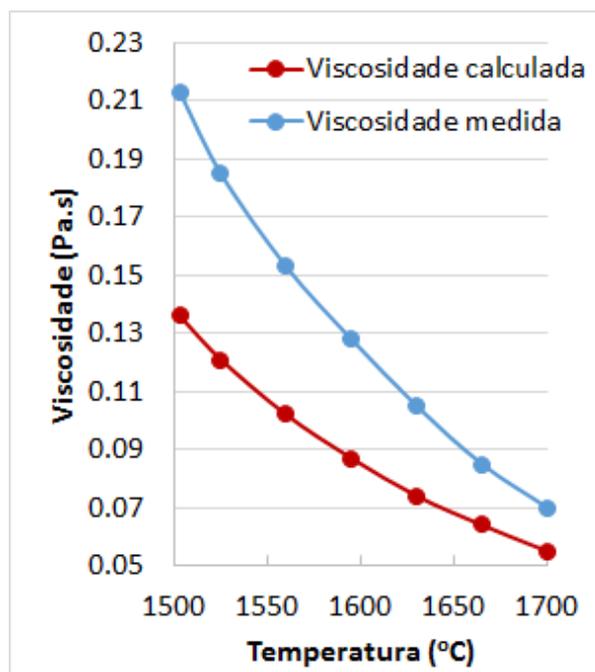
	Song et al <sup>[9]</sup>	Machin et al <sup>[6]</sup>	Machin et al <sup>[7]</sup>	Kim et al <sup>[5]</sup>	Forsbacka et al <sup>[3]</sup>	Nakamoto et al <sup>[8]</sup>	Tang et al <sup>[10]</sup>
$\delta$ Médio (%)	48,29	31,83	24,03	44,81	13,21	36,62	25,63
$\sigma$	6,02	19,50	15,06	13,19	6,94	22,44	17,33
$\delta$ Máx. (%)	60,83	107,67	71,95	72,06	27,68	69,90	83,98
$\delta$ Min. (%)	24,89	0,36	0,35	20,42	1,25	1,20	0,40

De uma forma geral o software proporcionou uma precisão adequada, conforme proposto por Mills et al [1], sendo o distanciamento médio entre todos os valores calculados e medidos foi de 32.06%. Observam-se valores mais baixos nos estudos de Forsbacka et al [3], conforme já visto na figura 1. Os dados de Machin et al [6,7] forneceram as maiores variações. Estas encontram-se principalmente na faixa de valores mais altos, compostas por um ternário, SiO<sub>2</sub>-CaO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, com alta quantidade de sílica, muitas vezes sem a presença de alumina.

Cálculos para escórias de alto-forno mostraram uma variação média alta, aproximadamente 36,7%, apesar do valor obtido com os dados de Tang et al [10] ser adequado. Um maior estudo deste tipo de escórias é necessário para aprimorar o software para esta aplicação.

Viscosidades calculadas para escórias de refino secundário apresentaram uma variação bastante grande entre os estudos, sendo que para os valores de Song et al [9] esta foi de 49% com desvio padrão de 6,02, mostrando que os valores ficaram todos bastante afastados dos valores calculados.

Jönsson et al [4] e Yakushev et al [11] não forneceram em valores exatos das medições realizadas, portanto para possibilitar a comparação com os cálculos realizados pelo FactSage foram plotados gráficos de temperatura vs viscosidade, conforme mostrado nas figuras 2 a 4. As tabelas 6 e 7 apresentam as composições químicas das escórias avaliadas.

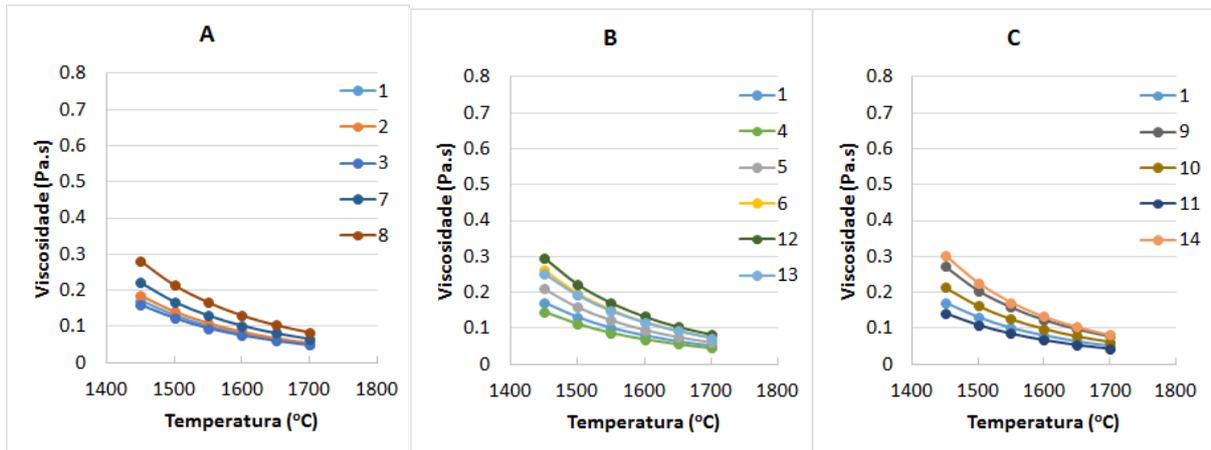


**Figura 2** – Viscosidades calculadas e medidas para escórias estudadas por Jönsson et al [4].

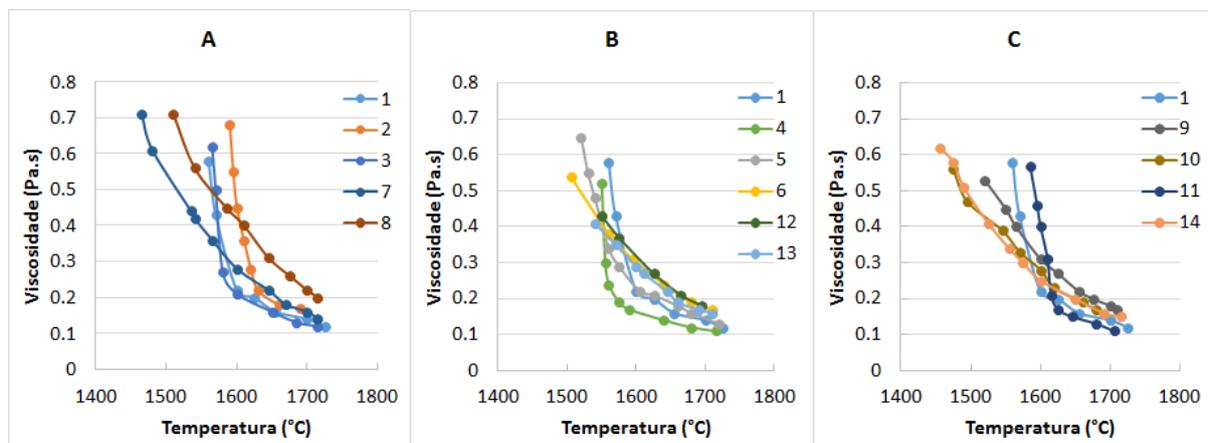
**Tabela 6** – Composição química da escória estudada por Jönsson et al [4].  
(% em massa)

Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	CaO	SiO <sub>2</sub>	MgO	CaO/SiO <sub>2</sub>
30	50	13	7	3,85

Para Jönsson et al [4], figura 2, observa-se uma variação de aproximadamente 32% e uma curva com formato semelhante à obtida pelos autores, apenas com valores menores, indicando um funcionamento adequado do modelo.



**Figura 3** – Viscosidades calculadas a partir dos dados de Yakushev et al<sup>[11]</sup>, variando em a) MgO ou Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>; b) SiO<sub>2</sub>; c) CaO.



**Figura 4** – Viscosidades medidas, variando em a) MgO ou Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>; b) SiO<sub>2</sub>; c) CaO. Fonte: Adaptado de Yakushev et al [11].

**Tabela 7** – Composição química da escória estudada por Yakushev et al [11]. (% em massa)

Variação de MgO ou Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>						Variação de SiO <sub>2</sub>					
	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	CaO	SiO <sub>2</sub>	MgO	CaO/SiO <sub>2</sub>		Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	CaO	SiO <sub>2</sub>	MgO	CaO/SiO <sub>2</sub>
1	20	52	20	8	2,60	1	20	52	20	8	2,60
2	20,9	54,2	20,9	4	2,59	4	21,2	55,3	15	8,5	3,69
3	19,1	49,8	19,1	12	2,61	5	18,75	48,75	25	7,5	1,95
7	30	45,5	17,5	7	2,60	6	17,5	45,5	30	7	1,52
8	40	39	15	6	2,60	12	20	42	30	8	1,40
						13	30	42	20	8	2,10

Variação de CaO					
	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	CaO	SiO <sub>2</sub>	MgO	CaO/SiO <sub>2</sub>
1	20	52	20	8	2,60
9	25	40	25	10	1,60
10	22,5	46	22,5	9	2,04
11	17,5	58	17,5	7	3,31
14	0	54,5	45,5	0	1,20

Ao comparar as curvas obtidas por cálculos, na figura 3, com as das escórias estudadas por Yakushev et al [11], na figura 4, pode-se observar que os resultados diferem de forma bastante pronunciada, tanto em valores como no próprio formato.

Usualmente o aumento de temperatura provoca uma queda nos valores de viscosidade de forma aproximadamente quadrática, com uma curva bastante suave. Tal comportamento é observado nas temperaturas onde a influência da fase sólida presente na escória é pequena, neste caso, temperaturas acima de 1600°C, sendo que as maiores temperaturas Liquidus são 1630°C nas escórias 2 e 11.

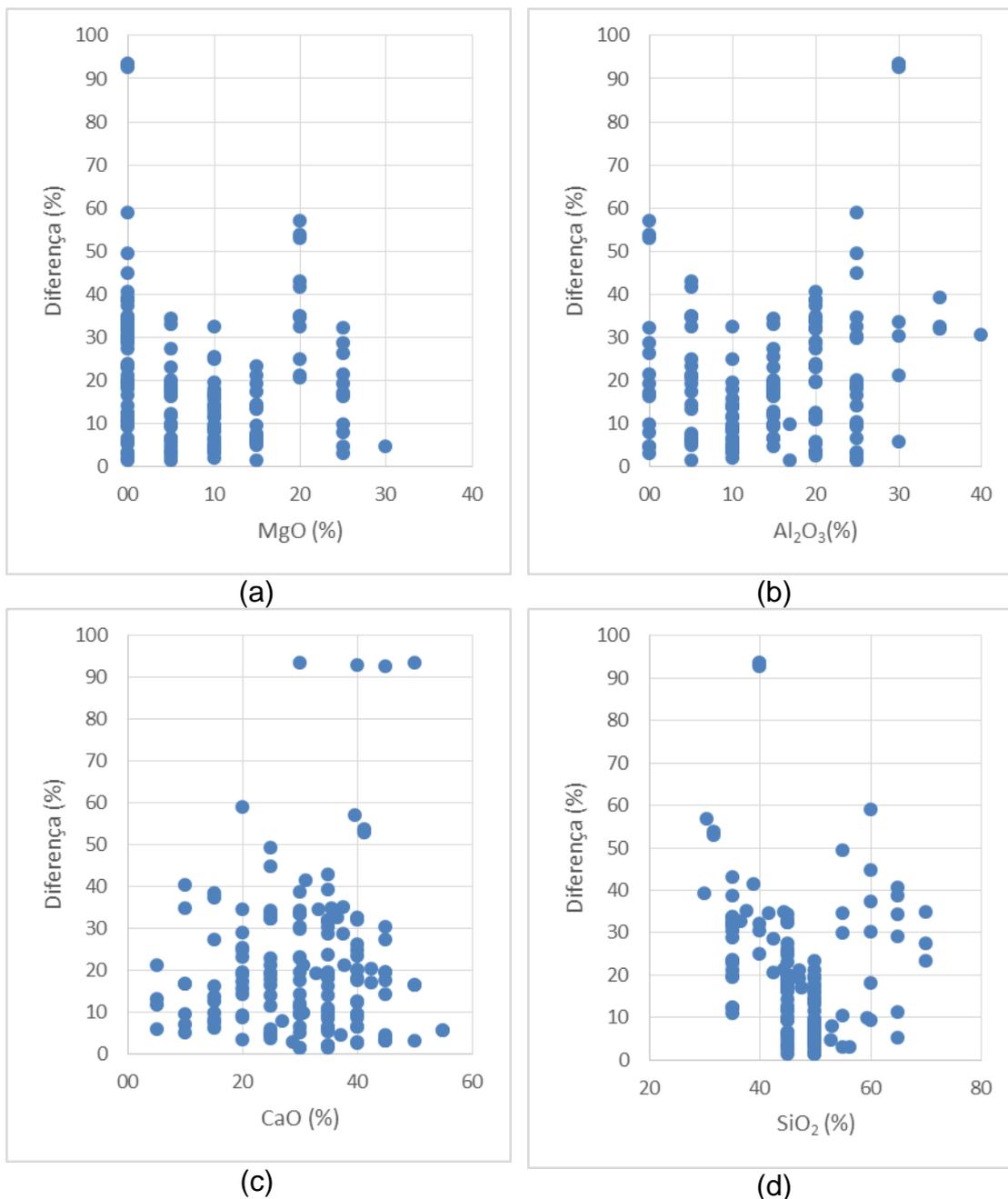
Nos dados analisados não se observa este comportamento, pois as curvas se comportam de forma errática mesmo acima da temperatura Liquidus, tornando menor a credibilidade destes.

Tal afirmação é coerente com a de Duchesne et al [13], que a validade e precisão de tais medições é questionável.

A fim de estabelecer se o software possui alguma limitação com um elemento específico do sistema de escórias, foram plotados gráficos da diferença entre os valores medidos e calculados em porcentagem vs fração de CaO, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, MgO e SiO<sub>2</sub>, conforme mostrado na figura 5.

Observa-se que a distribuição dos pontos é aleatória, não mostrando nenhuma relação entre os valores ( $\delta_n$ ) e a fração de qualquer componente da escória. Desta forma pode-se inferir que o modelo utilizado pelo FactSage 6.4 não é tendencioso em relação à nenhum dos 4 elementos que foram alvo deste estudo.

Também é possível mostrar que a maior parte dos pontos encontra-se na região abaixo de 40% de desvio, conforme já havia sido mostrado através das médias na tabela 5.



**Figura 5** – Diferença entre os valores ( $\delta_n$ ) vs fração do componente em: a) MgO; b) Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>; c) CaO; d) SiO<sub>2</sub>

#### 4 CONCLUSÕES

Foram analisadas 972 escórias no sistema CaO-SiO<sub>2</sub>-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-MgO, variando composição e temperatura, com o uso do software FactSage 6.4.

O software tem uma grande tendência em fornecer resultados de valores de viscosidade com um desvio negativo em relação aos medidos experimentalmente.

O desvio médio entre todos os valores calculados e medidos foi de 32.06% e mostrou-se adequado dentro da ampla faixa de composições analisada e esperado segundo a literatura.

Não foi encontrada uma relação direta entre a eficiência do software e a fração de qualquer elemento presente na escória.

## Agradecimentos

Miguel Lahr da Silva agradece à Fundação Luiz Englert pela bolsa de mestrado no ano de 2014, aos professores Wagner Viana Bielefeldt e Antônio Cezar Faria Vilela e à equipe do LaSid – UFRGS.

## REFERÊNCIAS

- 1 Mills et al. 'Round Robin' Project on the Estimation of Slag Viscosities: Scandinavian Journal of Metallurgy 2001, Vol. 30; 396-403
- 2 Sridhar. Estimation Models for Molten Slag and Alloy Viscosities: The member Journal of The Minerals, Metals & Materials Society, 2002; 46-50
- 3 Forsbacka et al. Experimental study of viscosities of selected CaO-MgO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-SiO<sub>2</sub> slags and application of the lida model: Scandinavian Journal of Metallurgy 2003, vol. 32; 273-280
- 4 Jönsson et al. Viscosities of LF Slags and Their Impact on Ladle Refining: ISIJ International, 1997, Vol. 37, No. 5; 484-491
- 5 Kim et al. Effect of Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> and CaO/SiO<sub>2</sub> on the Viscosity of Calcium-Silicate-Based Slags Containing 10 Mass Pct MgO: Metallurgical and Materials Transactions B, 2013, Vol. 44B; 5-12
- 6 Machin et al. Viscosity Studies of System CaO-MgO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-SiO<sub>2</sub>: Journal of The American Ceramic Society, 1948, vol. 31, No. 7; 200-204
- 7 Machin et al. Viscosity Studies of System CaO-MgO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-SiO<sub>2</sub> III, 35, 45 and 50% SiO<sub>2</sub>: Journal of The American Ceramic Society, 1952, vol. 35, No. 12; 322-325
- 8 Nakamoto et al. Evaluation of Viscosity of Molten SiO<sub>2</sub>-CaO-MgO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Slags in Blast Furnace Operation: ISIJ International, 2004, Vol. 44, No. 12; 2115-2119
- 9 Song et al. Viscosities of the Quaternary Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-CaO-MgO-SiO<sub>2</sub>: Steel Research Int. 2001, vol. 82, No. 3; 260-268
- 10 Tang et al. Viscosities Behavior of CaO-SiO<sub>2</sub>-MgO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Slag With Low Mass Ratio of CaO to SiO<sub>2</sub>, and Wide Range of Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Content: Journal of Iron and Steel Research, International, 2011, Vol. 18, No. 2; 1-6.
- 11 Yakushev et al. Viscosity of CaO-Base Slags With Varying Content of Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, SiO<sub>2</sub> and MgO: Steels In URSS, 1977, Vol. 7, No. 11; 617-618
- 12 Viscosity Module: Documentação software FactSage 6.4
- 13 M.A. Duchesne et al. Slag Viscosity Modeling Toolbox: Fuel, 2013, Vol. 114; 38-43.