

# SIMULAÇÃO DA PRODUÇÃO DE AÇO INOXIDÁVEL NO FORNO ELÉTRICO A ARCO PELA TERMODINÂMICA COMPUTACIONAL <sup>1</sup>

Nestor Cezar Heck<sup>2</sup>  
Antônio Cezar Faria Vilela<sup>3</sup>

## Resumo

Este trabalho, realizado com o auxílio da termodinâmica computacional, dá continuação a um estudo sistemático, que trata dos fundamentos dos processos de fabricação dos aços inoxidáveis em FEA / FP / VOD, com a finalidade de compreender e, assim, melhorar o controle operacional e o rendimento de alguns insumos desses processos – especialmente do Cr. Embora, na prática, os prognósticos da termodinâmica dependam de uma cinética (micro ou macroscópica) favorável para serem verdadeiros, ela é uma ferramenta apropriada para esse estudo pois é a única capaz de antecipar informações fundamentais e importantes sobre fases e concentração de seus constituintes, de um dado sistema, a uma certa temperatura e pressão. Os resultados deste trabalho constituem a fundamentação teórica de um projeto de pesquisa que será realizado no Laboratório de Siderurgia do Centro de Tecnologia da UFRGS.

**Palavras-chave:** Termodinâmica computacional; Aço inoxidável; Aciaria elétrica.

## SIMULATION OF THE PRODUCTION OF STAINLESS STEEL USING EAF BY MEANS OF COMPUTATIONAL THERMODYNAMICS

### Abstract

This work, effected with the help of computational thermodynamics gives sequence to a systematic study on the fundamental aspects of the stainless steel production processes with EAF / LF / VOD. It is aimed at the understanding but also tries to contribute for the improvement of operating controls and the yield of some alloying elements – chromium specially. Computational thermodynamics is a proper tool for this study because it is the only one which has capability to give forth fundamental information regarding phases and concentration of phase constituents in a given system under certain temperature and pressure once kinetic resistance at micro or macro levels are of lesser concern. Results make-up the theoretical fundamentals of a research project to be held at the Iron and Steelmaking Laboratory, Technology Center, UFRGS.

**Key words:** Computational thermodynamics; Stainless steel; Electric steelmaking.

---

<sup>1</sup> Trabalho apresentado no XXXVII Seminário de Aciaria - Internacional, 21 a 24 de maio de 2006, Porto Alegre, RS

<sup>2</sup> Dr.-Ing, Núcleo de Termodinâmica Computacional para a Metalurgia, NTCm, professor do DEMET e PPGEM, Escola de Engenharia, UFRGS, Porto Alegre, RS

<sup>3</sup> Dr.-Ing, Laboratório de Siderurgia, LASID, professor do DEMET e PPGEM, Escola de Engenharia, UFRGS, Porto Alegre, RS

## INTRODUÇÃO

Esse trabalho se insere dentro de um projeto mais amplo, que tem por objetivo fundamental a otimização do processo de produção de aço inoxidável em forno elétrico a arco / forno-panela / VOD. Trata-se, basicamente, da busca do aperfeiçoamentos nas operações levadas a termo durante o processo produtivo, que incluem a redução da perda de insumos valiosos – principalmente do cromo – pelo incremento do seu rendimento em algumas etapas da produção e pelo seu reaproveitamento por reciclagem em outras.

Este estudo se justifica pela importância, em qualquer projeto, da análise das questões básicas, que são aquelas sobre as quais se fundamenta a tecnologia. O modelamento termodinâmico, por meio da ferramenta computacional, tem se revelado uma técnica muito interessante para a análise de questões dessa natureza.

## MODELAMENTO TERMODINÂMICO

O modelamento termodinâmico de fenômenos e processos é uma ferramenta conveniente, capaz de fornecer uma *previsão* minuciosa sobre um dado sistema, num *caso limite* – qual seja, aquele que se estabelece quando inexitem quaisquer resistências de ordem cinética a dificultar ou impedir a marcha de reações e processos físico-químicos durante uma determinada etapa de um processo de produção.

Embora fundamentalmente abstrata, ou virtual, essa situação, pode vir a servir como um guia para o acompanhamento e a compreensão de fenômenos como, por exemplo, daqueles que se desenvolvem durante a produção dos aços inoxidáveis.

É bom salientar que – sob o ponto-de-vista da termodinâmica – um banho de ferro líquido à 1600°C não estará em equilíbrio com uma atmosfera onde a fugacidade do oxigênio é 0,21 atm. Por causa da *cinética* lenta da sua oxidação – explicada pela grande massa e baixa relação área/volume e, também, pela existência de barreiras físicas, como a escória – é que, na prática, tal sistema existe. Para uma simulação termodinâmica, contudo, não existem empecilhos dessa ordem e, tal sistema inicial, resultaria apenas numa grande massa de óxido! Simplificadamente, esse problema mostra as dificuldades que se enfrenta nesse tipo de simulação. Para superá-las e poder modelar com a ferramenta termodinâmica, portanto, é preciso abstrair a realidade realizando a sua substituição por um *modelo* que – ao mesmo tempo – tenha a capacidade de se manter fiel à situação (mantenha um bom grau de *similaridade* com o processo) e que viabilize a simulação tornando-a exeqüível.

Dentro dessa ótica, opta-se por trabalhar com uma atmosfera ‘virtual’, tipicamente redutora, criada e mantida basicamente pela massa de elementos metálicos reduzidos que formam o ‘banho’ metálico. Como várias outras, essa é uma solução de compromisso, justificável frente às dificuldades que inviabilizariam a abordagem a partir de um outro enfoque.

## METODOLOGIA

### a) Sistemas termodinâmicos

Num trabalho anterior<sup>(1)</sup> foram analisados vários sub-sistemas simples envolvendo os elementos Fe, O, Cr, C e Ni.

O primeiro sistema daquela simulação, o sistema Fe-O, representava a interação mais simples possível entre a atmosfera e o banho de ferro. A partir dele, aumentou-se gradativamente a complexidade da simulação até se chegar ao sistema Fe-O-Cr-C-Ni, onde foi possível a reprodução de uma série de fenômenos fundamentais como, por exemplo, a ação do vácuo para a remoção do carbono (e parcialmente do cromo) do banho.

O presente trabalho avança um pouco mais no grau de complexidade do sistema e contempla especialmente a formação da ‘escória’ em ambiente oxidante – por *escória* entende-se, aqui, o somatório de *todas* as fases líquidas e sólidas que não constituem a fase ‘banho líquido’ (aço). O sistema aqui estudado inclui os componentes atômicos: Fe-O-Cr-C-Ni-Si-Ca.

#### b) Aplicativo e dados termodinâmicos

O aplicativo utilizado neste trabalho denomina-se FactSage 5.3.1.<sup>(2)</sup>

Os seguintes bancos de dados permitiram a realização da simulação:

- (i) FactSage 5.00 soluções (2001), contendo dados de fases soluções;
- (ii) FactSage 5.00 compostos (2001) dados de 4429 *compostos puros* sólidos, líquidos, gasosos e iônicos.

#### c) Soluções e constituintes

Embora disponíveis em um número de até quarenta em um único cálculo de equilíbrio, a Tabela 1 mostra as fases do tipo mistura (solução) e seus constituintes que efetivamente tomaram parte de algum equilíbrio termodinâmico do sistema. As fases do tipo composto estavam disponíveis em um número muito maior, de 246.

**Tabela 1.** Fases do tipo mistura (solução) e seus constituintes (cujas massas são calculadas pelo aplicativo), de importância neste estudo

Correspon- dência	EF*	Denominação no FACT	Constituintes (se mistura ou solução)
Banho	L	FeLQ	Fe, <b>Cr</b> , Ni, Si, C, O, Ca, CaO <b>CrO</b> , SiO, <b>Cr<sub>2</sub>O</b>
Fração líquida da escória	L	BSlag	FeO, Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> , CaO, SiO <sub>2</sub> , Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> , <b>CrO</b> , <b>Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub></b>
Fração sólida da escória	S	CORU	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> , <b>Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub></b> , Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>
	S	CaSP	<b>CaCr<sub>2</sub>O<sub>4</sub></b> , CaFe <sub>2</sub> O <sub>4</sub>
	S	aC2S	Ca <sub>2</sub> SiO <sub>4</sub>
Atmosfera	G	gas_real	CO <sub>2</sub> , CO, O <sub>2</sub>

\*Estado físico; S = sólido, L = líquido

Nota-se que a fase ‘ferro líquido’ (FeLQ) contempla o conceito moderno de *associados* M\*O.<sup>(3)</sup> Seus autores sugerem que, dessa forma, é possível representar adequadamente – melhor do que no modelo clássico de Wagner – a forte interação que se verifica entre o oxigênio dissolvido e alguns solutos presentes no aço líquido.

#### d) Condições iniciais

As condições dos cálculos foram limitadas à temperatura de 1600 [°C] e a uma pressão total de 1 [atm].

A composição química inicial do banho, antes da aplicação das condições

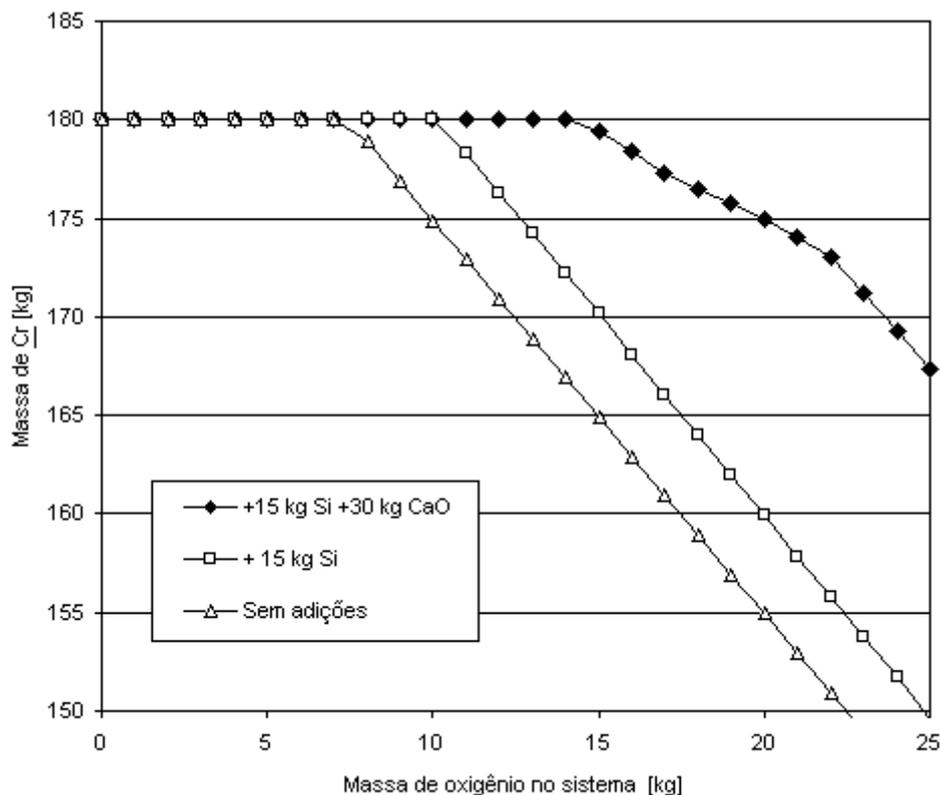
deste estudo, foi definida como sendo composta de apenas quatro elementos, conforme pode ser visto na Tabela 2.

**Tabela 2.** Composição do banho [kg] antes da aplicação das condições do estudo

Cr	Ni	C	Fe
180	80	10	730

## RESULTADOS E DISCUSSÃO

Os resultados da análise desse sistema, na pressão de 1 atmosfera e na temperatura de 1600 [°C], mostram nitidamente fatos já conhecidos da indústria: quanto maior for a disponibilidade de oxigênio no sistema, tanto maior será o consumo do cromo dissolvido (Figura 1).



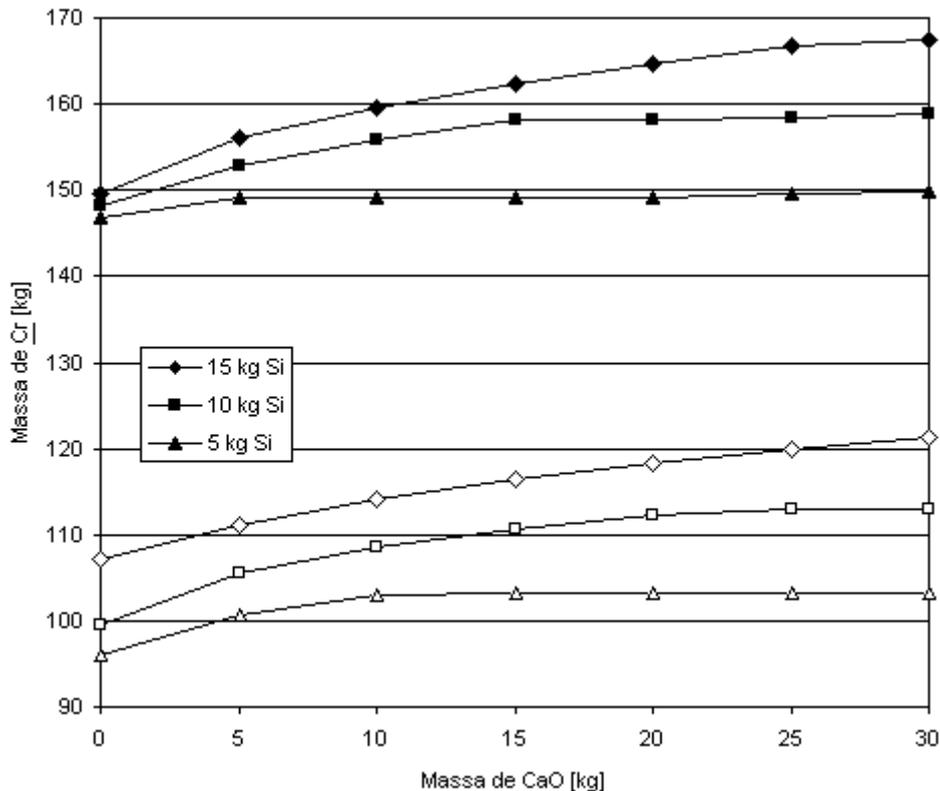
**Figura 1.** Massa de Cr (dissolvida no banho) [kg/t] em função da massa de oxigênio disponível no sistema, para as condições: sem e com silício, e Si + CaO; sistema Fe-Cr-O-C-Ni-Si-Ca à 1600 [°C] e pressão de 1 [atm]

Com a adição de silício (agente redutor do óxido de cromo na 'escória') ao banho – no valor de 15 quilogramas por tonelada de metal – a quantidade de Cr que é recuperado da escória situa-se por volta de 5 [kg/t]; na presença de cal, contudo, ela cresce, podendo chegar – neste sistema simples – a aproximadamente 20 quilogramas por tonelada. Embora a recuperação *total* só se dê em níveis 'moderados' de oxigênio no sistema, encontra-se aqui motivação suficiente para se efetuar uma análise detalhada da adição de cal ao forno.

Este estudo, do efeito da adição da cal, foi realizado por meio de simulações que consideraram como *constante* a massa de oxigênio no sistema. Isso equivale a dizer que ele correspondeu à realização de 'cortes' transversais na Figura 1, em níveis de oxigênio interessantes para a pesquisa. Dois níveis de oxigênio foram escolhidos: 25 e 50 [kg/t] e pode-se dizer que correspondem aproximadamente às

condições 'levemente' e 'fortemente' oxidantes.

Inicialmente foi estudada a evolução da massa de cromo dissolvido no banho em função da massa de cal adicionada ao sistema, para os dois níveis supra citados de oxigênio, Figura 2.

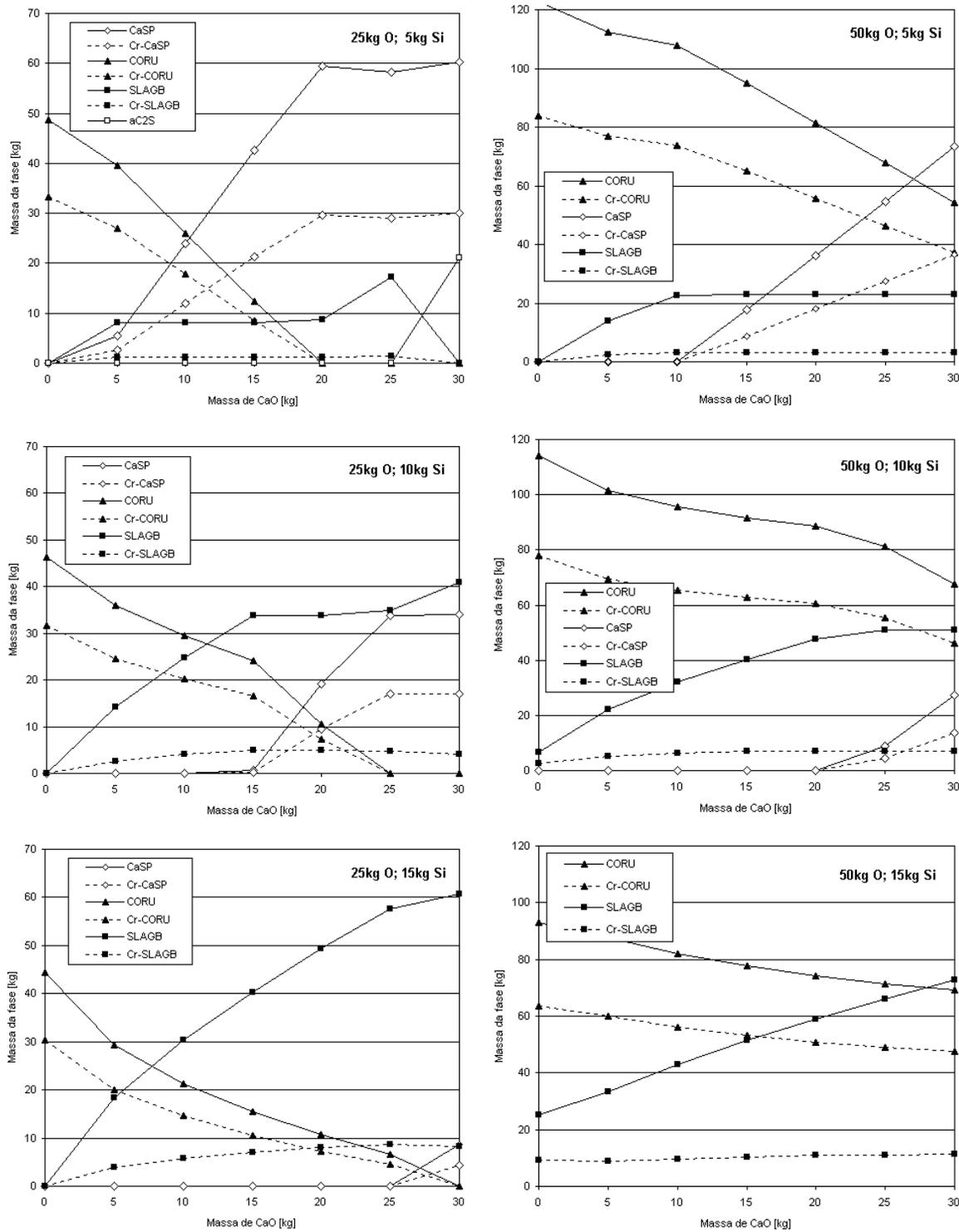


**Figura 2.** Quantidade de cromo contido no banho (símbolos *pretos*: 25 [kg] de oxigênio; símbolos *brancos*: 50 [kg] de oxigênio) em função da massa de silício e da massa de cal.

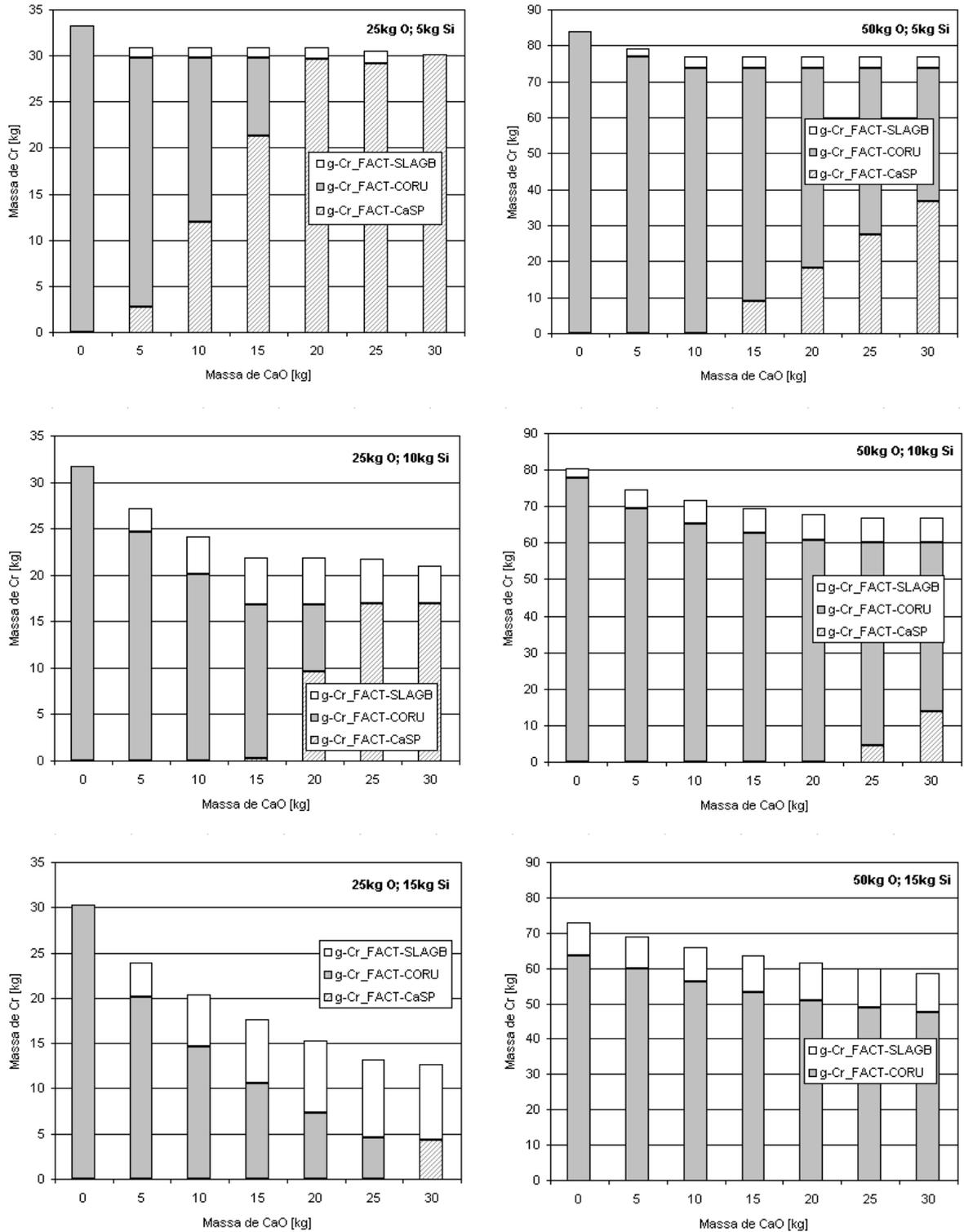
Pode-se observar o efeito benéfico da adição de CaO ao sistema. Nota-se, contudo, que o efeito da quantidade de silício adicionada é um pouco diferente em função do nível de oxigênio no sistema, sendo menos efetiva para a combinação 5 [kg] de Si e 25 [kg] de oxigênio.

Por outro lado, é interessante, também, fazer uma avaliação das fases presentes na 'escória' e do seu estado físico – pois é possível a formação tanto de fases sólidas quanto líquidas. O cromo presente em fases sólidas é mais difícil de ser recuperado – o que é uma desvantagem. A explicação está no fato de que, para sólidos *compactos*, as reações se dão somente na interface entre o sólido e o líquido. Assim, mesmo quando colocada sob condições termodinâmicas que a torna instável, uma fase sólida demorará mais tempo para se transformar em outra.

A evolução da massa das diferentes fases (bem como da massa de cromo na respectiva fase), em função da massa de cal, da massa de silício e do nível de oxigênio escolhido, pode ser vista nas Figuras 3 e 4.



**Figura 3.** Tipos e quantidades de fases presentes na ‘escória’ (vide, também, Tabela 1); linhas *contínuas*: quantidade da fase; linhas *tracejadas*: quantidade de cromo (contido na respectiva fase), em função da quantidade de oxigênio no sistema (coluna da esquerda: 25 [kg/t] e, coluna da direita: 50 [kg/t]) e da quantidade de silício (5 a 15 [kg/t], de cima para baixo); a única fase líquida presente no equilíbrio é a fase ‘SLAGB’

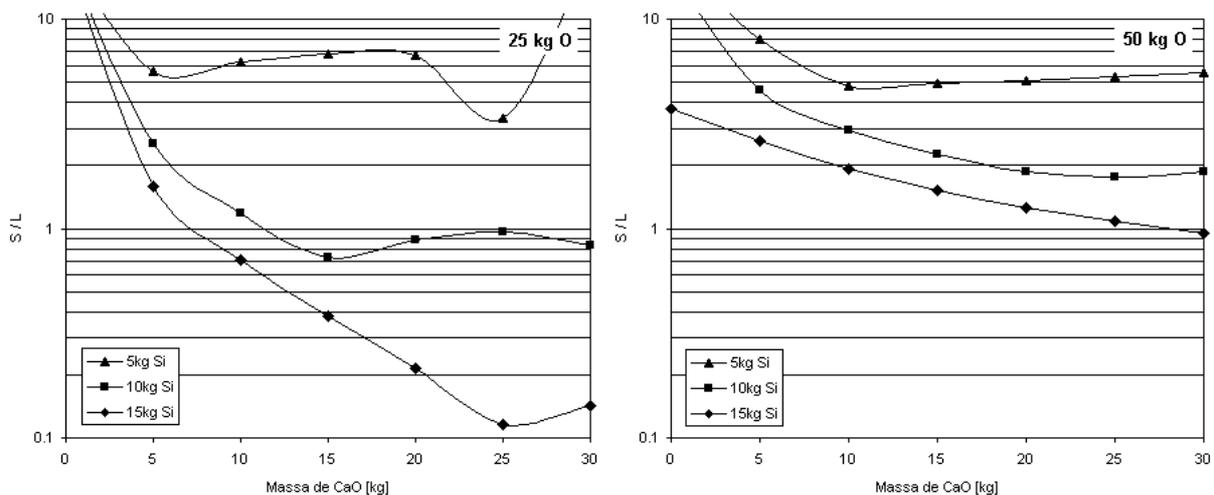


**Figura 4.** Massa de cromo total contido na ‘escória’ (vide, também, Tabela 1); e sua distribuição por tipo de fase em função da quantidade de oxigênio no sistema (coluna da esquerda: 25 [kg/t] e, coluna da direita: 50 [kg/t]) e da quantidade de silício (5 a 15 [kg/t], de cima para baixo); a única fase líquida presente no equilíbrio é a fase ‘SLAGB’

Nota-se que a fase sólida CORU (basicamente  $\text{Cr}_2\text{O}_3$ ) é a mais representativa para valores baixos de silício adicionado e elevados de oxigênio no sistema. A medida que mais silício é adicionado e menos oxigênio está presente no sistema, a situação se inverte e as fase sólidas dão lugar à fase líquida SLAGB – especialmente para 30 [kg] de CaO.

A massa de cromo, à sua vez, concentra-se nas fases sólidas da escória, com exceção do sistema com baixo conteúdo de oxigênio, contendo 15 [kg] de Si. Neste caso, para teores elevados de CaO, mais de 50% do Cr está presente na fase líquida da escória. Além disso, um cálculo revela que, para 30 [kg] de CaO, ele também apresenta o menor teor de Cr na escória, com menos de 20% em massa.

A relação sólido/líquido, S/L, existente na escória foi calculada para todos os casos e pode ser vista na Figura 5 agrupada para os dois níveis de oxigênio do sistema. Ela confirma basicamente os aspectos comentados acima.



**Figura 5.** Relação sólido/líquido, S/L, existente na escória em função da quantidade de CaO, oxigênio no sistema (à esquerda: 25 [kg/t] e, à direita: 50 [kg/t]) e da quantidade de silício (5 a 15 [kg/t])

A massa total de escória (para o caso da adição de 30 [kg] de cal) cai aproximadamente à metade, de 150-140 [kg] para 80-70 [kg], com a redução do oxigênio no sistema, de 50 para 25 [kg] – os valores variam em função da quantidade de Si adicionada (em qualquer dos dois casos ela é maior para a adição da menor quantidade de Si e vice-versa).

## CONCLUSÕES

Com base nesse estudo preliminar, que explorou apenas aspectos fundamentais sobre os quais está embasada a tecnologia, pode-se concluir que:

Foi possível, por meio da simulação, abordar – ainda que de uma forma muito simplificada – alguns aspectos quantitativos fundamentais, importantes na produção do aço inoxidável; esses resultados, portanto, estimulam a condução de estudos mais profundos, para que situações mais complexas também possam ser simuladas e posteriormente validadas. É importante salientar que, embora os fenômenos sejam conhecidos e os sistemas relativamente simples, já é necessário – para a *quantificação* dos equilíbrios citados – modelos sofisticados e uma quantidade muito grande de dados.

Sobre o cromo, pode-se dizer que há uma tendência forte dele se encontrar contido nas fases sólidas da escória – a menos do sistema com baixo oxigênio e

conteúdo de Si adicionado de 15 [kg]. Neste caso, para teores elevados de CaO, além do sistema apresentar os menores teores de Cr na escória, com menos de 20% em massa, mais de 50% do Cr está presente na fase líquida da escória.

## REFERÊNCIAS

- 1 HECK,N.C., VILELA,A.C.F. Aplicação da Termodinâmica Computacional na Simulação da Produção de Aço Inoxidável em Forno Elétrico a Arco. XXXVI Seminário de Fusão, Refino e Solidificação dos Metais - Internacional, 16 a 18 de maio de 2005, Vitória, **Anais**, ABM, 2005
- 2 BALE,C.W., CHARTRAND,P., DECTEROV,S.A., ERIKSSON,G., HACK,K., BEN MAHFOUD,R., MELANÇON,J., PELTON,A.D., PETERSEN,S. FactSage thermochemical software and databases. **Calphad**, Vol. 26, nr.2, Junho, 2002, p.189-228
- 3 JUNG,I-H., DECTEROV,S.A., PELTON,A.D. A Thermodynamic Model for Deoxidation Equilibria in Steel. **Metallurgical and Materials Transactions B**, Vol. 35B, Junho, 2004, p.493