REDEMAT

REDE TEMÁTICA EM ENGENHARIA DE MATERIAIS

UFOP - UEMG

Tese de Doutorado

"ANÁLISE DA TURBULÊNCIA E DO COMPORTAMENTO METAL-ESCÓRIA NO INTERIOR DE UM REATOR RH E SUA INFLUÊNCIA SOBRE A REAÇÃO DE DESSULFURAÇÃO DO AÇO''

Autor: Johne Jesus Mol Peixoto

Orientador: Prof. PhD. Carlos Antônio da Silva

Coorientador: Prof. DSc. Itavahn Alves da Silva

Ouro Preto, abril de 2019

Johne Jesus Mol Peixoto

“Análise da Turbulência e do Comportamento Metal-Escória no Interior de um Reator RH e sua Influência sobre a Reação de Dessulfuração do Aço’’

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Materiais da REDEMAT, como parte integrante dos requisitos para a obtenção do Título de Doutor em Engenharia de Materiais.

Área de concentração: Processos de Fabricação

Orientador: Prof. PhD. Carlos Antônio da Silva

Coorientador: Prof. DSc. Itavahn Alves da Silva

Ouro Preto, abril de 2019.

P379a

Peixoto, Johne Jesus Mol.
Análise da Turbulência e do Comportamento Metal-Escória no Interior de um Reator RH e sua Influência sobre a Reação de Dessulfuração do Aço [manuscrito] / Johne Jesus Mol Peixoto. - 2019.
205f.: il.: color; grafs; tabs.

Orientador: Prof. Dr. Carlos Antônio da Silva.
Coorientador: Prof. Dr. Itavahn Alves da Silva.

Tese (Doutorado) - Universidade Federal de Ouro Preto. Pró-Reitoria de Pesquisa e Pós-Graduação. REDEMAT. Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Materiais.
Área de Concentração: Processos de Fabricação.

1. Desgaseificador RH. 2. Dessulfuração. 3. Comportamento metal/escória. 4. Forças de não-arraste. 5. Simulação matemática. I. Silva, Carlos Antônio da . II. Silva, Itavahn Alves da . III. Universidade Federal de Ouro Preto. IV. Titulo.

CDU: 62-5

Catalogação: www.sisbin.ufop.br

"Análise da Turbulência e do Comportamento Metal-Escória no Interior de um Reator RH e sua Influência sobre a reação de Dessulfuração do Aço"

Autor: Johne Jesus Mol Peixoto

Tese defendida e aprovada, em 23 de abril de 2019, pela banca examinadora constituída pelos professores:

Prof. Carlos Antônio da Silva (PhD) – Orientador
Universidade Federal de Ouro Preto

Prof. Guilherme Liziero Ruggio da Silva (Doutor)
Instituto Federal de Minas Gerais
Campus Ouro Branco

Prof. Leandro Rocha Lemos (Doutor)
Universidade Federal de Minas Gerais

Prof. Itavahn Alves da Silva (Doutor)
Universidade Federal de Ouro Preto

Prof. Paulo Santos Assis (Dr. Ing.)
Universidade Federal de Ouro Preto

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus por mais esta vitória em minha vida e por sempre me dar forças para enfrentar os desafios.

Agradeço aos meus pais – John e Marta –, irmãos, familiares e amigos pelo apoio e incentivo oferecidos durante esta jornada.

Em especial à minha esposa Bianca pela paciência, incentivo e amor, e à minha filha Tereza Maria, que mesmo recém-nascida, foi grande estímulo para finalizar este trabalho.

Agradeço ao professor PhD. Carlos Antônio da Silva pela oportunidade e orientação neste trabalho e também ao professor DSc. Itavahn Alves da Silva pela coorientação.

Agradeço também a todos os amigos do laboratório de Pirometalurgia por tornar aquele ambiente um espaço de amizade aliado à produção científica. Em especial ao Weslei e aos alunos de iniciação científica (Natália, Thiago e Salvatore) por todo o auxílio na realização dos experimentos e análise dos resultados.

Agradeço aos demais professores que fizeram parte desta caminhada e deram sua contribuição para minha formação pessoal e profissional.

À UFOP pela estrutura disponibilizada.

À CAPES pela bolsa de doutorado concedida.

Epígrafe

“Educação não transforma o mundo. Educação muda as pessoas. Pessoas transformam o mundo.”

Paulo Freire

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS VII
LISTA DE TABELAS XVI
LISTA DE NOTAÇÕES XVIII
RESUMO XXI
ABSTRACT XXIII
1 INTRODUÇÃO 1
2 OBJETIVOS 5
2.1 Objetivos Gerais 5
2.2 Objetivos Específicos 5
3 REFERENCIAL TEÓRICO 6
3.1 Desgaseificador RH 6
3.1.1 Reações importantes no desgaseificador RH 8
3.1.2 Taxa de circulação 10
3.2 Modelamento Físico de desgaseificador RH 14
3.2.1 Avaliação da taxa de circulação via modelagem física 14
3.2.2 Tempo de misturamento no modelo físico do reator RH 18
3.2.3 Caracterização do padrão de fluxo em modelo físico de RH 19
3.3 Modelamento Matemático do Desgaseificador RH 22
3.3.1 Análise de parâmetros operacionais via simulação matemática 23
3.3.2 Modelos de transferência de momento interfásico 27
3.3.3 Influência das forças de interação entre as fases líquidas e gasosas 31
3.3.4 Diâmetro das bolhas de gás 37
3.4 Dessulfuração do Aço 42
3.4.1 Influência da composição química da escória sobre a dessulfuração 43
3.4.2 Dessulfuração do aço no reator RH 46
3.4.3 Análise do Comportamento Metal-Escória 53
3.4.4 Modelamento físico sobre a transferência de massa 56
4 MATERIAIS E MÉTODOS 60
4.1 Modelo Físico 62
4.1.1 Determinação da taxa de circulação – Método da Condutivimetria 66
4.1.2 Determinação da taxa de circulação – Método de Ponte de *Strain Gage* 68
4.1.3 Velocimetria PIV (*Particle Image Velocimetry*) 70

4.1.4 Injeção de material na câmara de vácuo 72
4.1.5 Filmagens com câmeras de alta velocidade 75
4.1.6 Medição do diâmetro das gotas de óleo 76
4.1.7 Estimativa de transferência de massa 78
4.2 Modelamento Matemático 82
4.2.1 Regime permanente 89
4.2.2 Regime transiente 90
4.2.3 Simulação da dispersão de gotas 91
4.3 Análise cinética da dessulfuração do aço no RH 93
5 RESULTADOS E DISCUSSÃO 97
5.1 Taxa de Circulação 97
5.1.1 Comparação das técnicas de medição 97
5.1.2 Correlação pela Equação de Kuwabara 102
5.1.3 Influência da densidade do fluido de circulação 103
5.2 Simulação Matemática do Desgaseificador RH 104
5.2.1 Penetração do gás na perna de subida 105
5.2.2 Previsão da taxa de circulação de líquido 113
5.3 Análise da Dessulfuração do Aço no Reator RH 118
5.3.1 Padrão de fluxo 118
5.3.2 Comportamento aço/escória 122
5.3.3 Taxa de dessulfuração do aço 126
5.4 Avaliação do Comportamento Metal/Escória 133
5.4.1 Tempo de residência do material injetado no modelo físico 134
5.4.2 Diâmetro das gotas de óleo arrastadas pelo fluxo 140
5.4.3 Análise da transferência de massa via modelamento físico 147
5.4.4 Avaliação qualitativa da dispersão de gotas no interior do reator RH 153
6 CONCLUSÕES 160
7 RELEVÂNCIA DOS RESULTADOS 162
8 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS 164
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS 165
APÊNDICE I – LISTA DE PUBLICAÇÕES 174
APÊNDICE II – TESTES DE TRANSFERÊNCIA DE MASSA 175
APÊNDICE III – RESUMOS DOS ARTIGOS PUBLICADOS 176

LISTA DE FIGURAS

Figura 3.1 – (a) Esquema de um desgaseificador RH; (b) RH-PTB com injeção de dessulfurantes na câmara de vácuo. 6

Figura 3.2 – Evolução das unidades de desgaseificador RH da ThyssenKrupp, 1958-1992. 7

Figura 3.3 – Diagrama esquemático do modelo físico do desgaseificador RH com: (a) medição de velocidade na perna de descida; (b) medidor de vazão por ondas ultrassônicas 15

Figura 3.4 – Influência da profundidade de imersão das pernas sobre a taxa de circulação de água para diferentes vazões de gás. 16

Figura 3.5 – Efeitos do diâmetro do bico de injeção sobre a taxa de circulação. 17

Figura 3.6 – Variação da coloração do líquido em função do tempo em um modelo físico de 85L de um reator RH; vazão de gás $4{,}17 \times 10^{-4}$ m³/s. 18

Figura 3.7 – Campo de velocidade na seção transversal da panela obtido via técnica PIV com vazão de gás de 20L/min. 20

Figura 3.8 – Valores médios de parâmetros de turbulência* por unidade de massa: (a) energia cinética turbulenta; (b) taxa de dissipação turbulenta. *Calculados a partir de valores de velocidade instantânea medidos pela técnica PIV, vazão de gás de 20L/min. 21

Figura 3.9 – Dispersão de traçador em modelo físico de reator RH, com vazão de gás de 2,63m³/h 22

Figura 3.10 – Fração volumétrica (VF) de aço no vaso de RH em vários planos, onde: Seção A – Y = 0; Seção B – Z = 0,8m; Seção C – Z = 1,6m e Seção D – plano da seção transversal vertical que passa pelas duas lanças de injeção de pó 27

Figura 3.11 – Ilustração das forças de interação interfásica na perna de subida do reator RH. 29

Figura 3.12 – Comparação da penetração de gás na perna de subida entre imagens do modelo físico com resultados do modelo matemático sem força de não-arraste (SFNA) e com combinação das forças de dispersão turbulenta (FDT) e força de lubrificação das paredes (FLP) para as configurações com apenas um bico (B1), dois bicos (B2) e quatro bicos de injeção (B4). Vazões de ar iguais a 50, 100, 200L/min, equivalentes a 5, 10 e 20L/min por bico. 34

Figura 3.13 – Comparação da penetração de gás na perna de subida entre imagens do modelo físico e previsões do modelo matemático (CFD) após 30s de simulação, para a configuração apenas um bico (B1) ou dois bicos (B2) vazões de ar por bico de 5L/min a 50L/min por bico. 35

Figura 3.14 – Penetração do gás na perna de subida do reator RH: (a) sem força de dispersão turbulenta (F_{TD}); (b) considerando F_{TD}. Vazão de argônio = 60Nm³/h..... 35

Figura 3.15 – Efeito das forças de interação na distribuição de gás na perna de subida, vazão de argônio de 90 Nm³/h: (a) somente força de arraste (F_A); (b) F_A e F_{TD}; (c) todas as cinco forças; (d) sem F_{TD}.. 36

Figura 3.16 – (a) Variação do diâmetro e da densidade das bolhas de argônio ao longo da perna de subida; (b) Efeito da expansão das bolhas na taxa de recirculação do aço. 41

Figura 3.17 – Capacidade de enxofre (C_S) de algumas escórias a 1600°C. 43

Figura 3.18 – Grau de dessulfuração para diferentes valores de partição de enxofre em função da quantidade específica de escória. 46

Figura 3.19 – Variação do teor de enxofre no aço – média de 20 testes. 50

Figura 3.20 – Evolução da camada de óleo em função do tempo e as respectivas curvas de regressão. 54

Figura 3.21 – Eficiência de dessulfuração do aço no reator RH em diferentes vazões de gás. 55

Figura 4.1 – (a) Representação esquemática dos parâmetros geométricos do modelo físico utilizando vaso inferior retangular. (b) Modelo de acrílico do desgaseificador RH. 61

Figura 4.2 – Fluxograma esquemático das variáveis, objetivos dos testes realizados e principais finalidades dos resultados obtidos no modelo de acrílico do desgaseificador RH..... 62

Figura 4.3 – a) Curva experimental típica de concentração de traçador (KCl) versus tempo; b) Diagrama esquemático do sistema de medição de taxa de circulação pelo método da Condutivimetria..... 67

Figura 4.4 – Diagrama esquemático do sistema de medição de taxa de circulação pelo método da Ponte de *Strain Gage*. 69

Figura 4.5 – Representação esquemática da montagem experimental para realização de captura de imagens pela técnica PIV. 71

Figura 4.6 – a) Representação esquemática da posição para injeção de partículas na câmara de vácuo do modelo do reator RH; b) partículas de polipropileno ($\rho = 889 kg/m^3$, diâmetro médio de 3,5mm)..... 73

Figura 4.7 – Representação esquemática da montagem experimental para realização dos testes com injeção de óleo. 74

Figura 4.8 – a) Exemplo de escala para calibração do programa ImageJ; b) imagem original de gotas logo abaixo da saída da perna de descida; c) imagem das gotas após tratamento de remoção de plano de fundo (*subtract background*) e transformação via limiarização (*Threshold*); d) contornos das gotas que foram mensuradas pelo programa..... 78

Figura 4.9 – Montagem experimental para realização dos testes em bancada de transferência de massa de timol: (a) representação esquemática e (b) aparato experimental. 80

Figura 4.10 – (a) Representação esquemática da montagem experimental para realização dos testes de transferência de massa de timol no modelo físico do reator RH; (b) recipientes para coletas de amostra de solução de timol, com filtro de papel para reter gotas de óleo (frasco 2), e vedação com papel alumínio para evitar perda por volatilização (frasco 1). 81

Figura 4.11 – Fluxograma esquemático do desenvolvimento da simulação matemática do desgaseificador RH. 82

Figura 4.12 – Geometria utilizada na simulação: (a) sem camada de ar; (b) com camada de ar na câmara de vácuo. 83

Figura 4.13 – Malha construída para o modelo físico com camada de ar na câmara de vácuo: a) visão geral; b) detalhe do refinamento na perna de subida e na interface água/ar na câmara de vácuo. 84

Figura 4.14 – Malha hexaédrica construída para simulações bifásicas em tamanho real do reator RH com camada de ar na câmara de vácuo: a) visão geral; b) detalhe do refinamento na perna de subida e na interface aço/argônio. 85

Figura 4.15 – Vista em perspectiva da geometria do reator RH: (a) simulação em regime transiente destacando os pontos de injeção de traçador e de monitoramento da concentração em função do tempo; (b) principais partes do setup para simulação da trajetória de gotas (regime permanente). 91

Figura 5.1 – Perfil de velocidades na perna de descida obtido via técnica PIV utilizando água para imersão da perna igual a 6cm e vazão de gás: (a) 70L/min; (b) 110L/min; (c) 90L/min; e (d) 110L/min. 98

Figura 5.2 – Distribuição de velocidade ao longo de uma linha horizontal coincidente com o diâmetro da perna de descida para vazão de gás: (a) 70L/min; (b) 110L/min; (c) 90L/min; e (d) 110L/min. 99

Figura 5.3 – Taxa de circulação para o vaso inferior de formato retangular, utilizando água como fluido de circulação: (a) influência da profundidade de imersão das pernas via MPSG; (b) comparação entre as técnicas de medição: Cond. – condutivimetria; MPSG - método da ponte de *strain gages* e pela técnica PIV, profundidade de imersão de 60mm. 100

Figura 5.4 – Presença de bolhas na perna de descida em imagens obtidas via técnica PIV. Vazão de gás: (a) 70L/min; (b) 110L/min; (c) 90L/min; e (d) 110L/min. 100

Figura 5.5 – Taxa de circulação para o vaso inferior de formato cilíndrico (panela): (a) comparação entre as técnicas de medição utilizando água como fluido de circulação; (b) influência da profundidade de imersão das pernas; (c) influência da densidade do fluido de circulação, imersão de 60mm. 101

Figura 5.6 – Taxa de circulação em função da profundidade de imersão das pernas para o vaso inferior de formato retangular (caixa), utilizando fluido de circulação a solução aquosa de: (a) NaCl ($\rho = 1{,}17 g/cm^3$); (b) $ZnCl_2$ ($\rho = 1{,}22 g/cm^3$). 102

Figura 5.7 – Relação entre valores de taxa de circulação obtidos pelo método da ponte de *strain gages* e $G^{1/33}$ para o vaso inferior: (a) panela; (b) caixa. 103

Figura 5.8 – Comparação dos valores da taxa de circulação utilizando água e solução aquosa (NaCl ou $ZnCl_2$) com o vaso inferior: (a) panela; (b) caixa. 104

Figura 5.9 – Penetração do gás na zona de injeção do modelo físico, vazão de gás 70L/min (superior) e 110L/min (inferior), com o foco da câmera na região: (a) dos bicos de injeção; (b) inferior da perna e (c) superior da perna. TC – Taxa de circulação. 106

Figura 5.10 – Penetração do gás na zona de injeção do modelo físico com injeção de gás em apenas em dois bicos, vazão de gás (superior) e 110L/min (inferior), com o foco da câmera na região: (a) 10L/min; (b) 20L/min e (c) 50L/min. 107

Figura 5.11 – Penetração do gás na zona de injeção do modelo matemático, vazão de gás 110L/min. Influência das forças de interação gás/líquido, força de: (a) arraste (apenas); (b) sustentação; (c) massa virtual; (d) dispersão turbulenta. FV - fração volumétrica de ar. 108

Figura 5.12 – Profundidade de penetração do gás na zona de injeção, vazão de gás 70L/min (superior) e 110L/min (inferior), modelo físico versus matemático utilizando C_D = 0,44 e : (a) C_{VM} = 0,2; (b) C_{VM} = 0,3; (c) C_{VM} = 0,5. 108

Figura 5.13 –Profundidade de penetração do gás na perna de subida utilizando apenas dois bicos, vazão de gás 20L/min (superior) e 50L/min (inferior), modelo matemático utilizando modelo de Ishii-Zuber para força de arraste e força de massa virtual: (a) C_{VM} = 0,25; (b) C_{VM} = 0,3; (c) C_{VM} = 0,5. 109

Figura 5.14 – Influência das forças de não-arraste sobre a penetração do gás no fluxo ascendente de líquido, utilizando todos os bicos de injeção; combinação de forças C_D = Ishii-Zuber, C_{VM} = 0,25 e: (a) sem F_{WL}; (b) F_{WL} = modelo de Frank; (c) F_{WL} + C_L=0,5; (d) F_{WL} + F_{TD}. Vazão de gás 110L/min. 110

Figura 5.15 – Profundidade de penetração do gás na perna de subida utilizando apenas dois bicos, vazão de gás 20L/min (superior) e 50L/min (inferior), modelo matemático utilizando C_D = Ishii-Zuber, C_{VM} = 0,25, F_{WL} = modelo de Frank: (a) C_L = 0,3 e (b) F_{TD} = média Favre da força de arraste. 111

Figura 5.16 – Comparação da penetração do gás em diferentes alturas da perna de subida entre modelo físico e simulação matemática utilizando C_D = Ishii-Zuber, C_{VM} = 0,25, F_{WL} = Frank: (a) C_L = 0,3; (b) F_{TD} = Favre; (c) F_{TD} = Favre + C_L = 0,3. Injeção de gás em todos os bicos, vazão de gás 80L/min. 112

Figura 5.17 – Comparação da penetração do gás em diferentes alturas da perna de subida entre modelo físico e simulação matemática utilizando C_D = Ishii-Zuber, C_{VM} = 0,25, F_{WL} = Frank: (a) C_L = 0,3; (b) F_{TD} = Favre; (c) F_{TD} = Favre + C_L = 0,3. Injeção de gás em todos os bicos, vazão de gás 160L/min. 113

Figura 5.18 – Análise da penetração do gás na zona de injeção com injeção de gás em apenas em dois bicos. Simulação matemática utilizando C_D = Ishii-Zuber, C_{VM} = 0,25, F_{WL} = Frank e F_{TD} = Favre, vazão de gás: (a) 25L/min; (b) 30L/min e (c) 40L/min. 114

Figura 5.19 – Comparação entre taxa de circulação utilizando-se apenas dois bicos para injeção de gás obtida no modelo físico e prevista pelo modelo CFD com C_D= Modelo de Ishii-Zuber, C_{VM} = 0,25; F_{WL} = Frank e F_{TD} = Favre. 115

Figura 5.20 – (a) Taxa de circulação obtida no modelo físico e no modelo CFD com C_D= 0,44, C_{VM} = 0,25; F_{WL} = Frank e F_{TD} = Favre; (b) Relação entre taxa de circulação e vazão de gás ($G^{1/3}$). 116

Figura 5.21 – Comparação entre resultados de simulação matemática e experimentos no modelo físico das curvas normalizadas de espalhamento de traçador obtidos em experimentos utilizando apenas dois bicos de injeção de gás: (a) 20L/min; (b) 50L/min. Exp. = Experimento. 117

Figura 5.22 – Comparação entre resultados de simulação e experimentos no modelo físico das curvas normalizadas de espalhamento de traçador para as vazões de gás: (a) 70L/min; (b) 130L/min. 117

Figura 5.23 – Distribuição da fração volumétrica de gás na perna de subida: (a) CFD versus o modelo físico para diferentes alturas e (b) fração volumétrica de ar, vazão de 120 L/min; (c) e (d) fração volumétrica de argônio para vazão de 150 Nm³/h, considerando expansão de gás. 120

Figura 5.24 — Taxa de circulação em função da vazão de gás para: (a) modelo físico; (b) simulação matemática em escala real. 121

Figura 5.25 – Perfil de velocidades no plano de simetria do reator RH para vazão de gás igual a: (a) 120L/min de ar; (b) 150Nm³/h de argônio, simulação em escala real, considerando expansão das bolhas de argônio. 122

Figura 5.26 – Dispersão de gotas de N-pentano no interior da panela do modelo físico do reator RH em função do tempo para vazão de gás igual a (L/min): (a) 70, (b) 90 e (c) 110..... 123

Figura 5.27 – Morfologia das gotas de n-pentano logo abaixo da perna de descida, 5 segundos após a passagem da primeira gota de óleo e os contornos das gotas mensuradas pelo programa ImageJ. Vazão de gás (L/min): (a) 70, (b) 90 e (c) 110; (d) Box plot da distribuição de tamanhos das gotas. 125

Figura 5.28 – Perfis de taxa de dissipação de energia cinética turbulenta nas regiões da perna de descida e panela para vazão de argônio (Nm^3/h): (a) 90; (b) 110; (c) 140..... 127

Figura 5.29 – (a) Gráficos de taxa de dissipação de energia cinética turbulenta (ε) versus vazão de gás nas regiões: (b) 1/4 RH; (c) panela; (d) Volume 1 (exceto perna de subida)..... 128

Figura 5.30 – Grau de dessulfuração do aço em função do tempo para diferentes vazões de argônio (em Nm^3/h)..... 133

Figura 5.31 - Dispersão das partículas de polipropileno no interior da câmara de vácuo do modelo do reator RH em função do tempo para: (a) água; (b) solução aquosa de NaCl..... 135

Figura 5.32 - Dispersão das partículas de polipropileno no interior da panela do modelo físico do reator RH em função do tempo para: (a) água; (b) solução salina NaCl..... 136

Figura 5.33 - Dispersão das partículas de polipropileno no interior da panela do modelo físico do reator RH em diferentes vazões utilizando solução aquosa de NaCl como fluido similar a aço. 137

Figura 5.34 - Tempo total para arraste de 250g de partículas de polipropileno da câmara de vácuo para a panela – CV: câmara de vácuo..... 138

Figura 5.35 – Dispersão de gotas de 2L de N-pentano adicionados na câmara de vácuo do modelo físico do reator RH em função do tempo para vazão de gás igual a (L/min): (a) 70, (b) 90 e (c) 110..... 139

Figura 5.36 - Comportamento dos diferentes tipos de óleo (500mL) na câmara de vácuo durante as filmagens para medição de diâmetro de gotas: (a) óleo 500cst; (b) óleo 50cst; (c) óleo 10w30; (d) n-pentano. Vazão de gás 90L/min. 141

Figura 5.37 - Morfologia das gotas de óleo logo abaixo da perna de descida em função do tempo: (a) água - 500cSt; (b) água - 10W30; (c) NaCl - 500cSt; (c) NaCl – 10W30. Vazão de gás 90L/min. 142

Figura 5.38 - Morfologia (e contornos das gotas avaliadas pelo programa ImageJ) das gotas de óleo (500cSt) logo abaixo da perna de descida, 2 segundos após a passagem da primeira gota de óleo, utilizando como fluido de circulação: (a) água; (b) NaCl. 143

Figura 5.39 - Morfologia das gotas de óleo logo abaixo da perna de descida, 5 segundos após a passagem da primeira gota de óleo (n-pentano) e os contornos das gotas mensuradas pelo programa ImageJ, utilizando água como fluido de circulação, Vazão de gás (L/min): (a) 70, (b) 90 e (c) 110. 144

Figura 5.40 - Diagrama de caixa e valor médio do diâmetro das gotas de óleo arrastadas da câmara de vácuo para: (a) água/óleo 500cSt; (b) água/óleo 50cSt; (c) solução aquosa NaCl/ óleo 500cSt; (d) solução aquosa NaCl/ óleo 50cSt. *T1 – teste 1 e T2 – teste 2. 145

Figura 5.41 - Diagrama de caixa e valor médio do diâmetro das gotas de óleo arrastadas: (a) água/óleo 10W30 ; (b) solução aquosa NaCl/óleo 10W30; (c) água/n-pentano. *T1 – teste 1 e T2 – teste 2. 145

Figura 5.42 – Diâmetro médio de Sauter das gotas de óleo arrastadas da câmara de vácuo, fluido de circulação: (a) água; (b) solução NaCl. 147

Figura 5.43 – Variação da concentração de timol em função do tempo: (a) teste em bancada (1L de solução; 24mL de óleo 10W30), sob forte agitação; (b) testes no reator RH em diferentes vazões (89L de solução; 2L de óleo 10W30, com tempo de injeção de 85s). 149

Figura 5.44 – Extração de timol para diferentes tempos de injeção, e vazão de gás: (a) e (c) 70L/min; (b) e (d) 110L/min. T1 e T2 são testes 1 e 2, respectivamente. 150

Figura 5.45 – Extração de timol para diferentes vazões de gás, e tempo de injeção de óleo igual a 85s. 151

Figura 5.46 - Dispersão das gotas de óleo de soja no interior da panela do modelo físico do reator RH, utilizando 2L de óleo e tempo de injeção de 15s, vazão de gás: (a) 70L/min; (b) 110L/min. 152

Figura 5.47 – Presença de gotículas de óleo de soja dispersas na água 5min após o término da injeção do óleo na câmara de vácuo do modelo físico, vazões de gás: (a) 70L/min e (b) 110L/min. Tempo de injeção de óleo igual a 15s. 153

Figura 5.48 – Resultados de simulação matemática das trajetórias de gotas dos diferentes óleos, considerando diâmetros iguais aos valores médios de d_{32} (diâmetro de Sauter): (a) 500cSt 16mm; (b) 50cSt 9,8mm; (c) 10W30 6,1mm e (d) n-pentano 4,7mm. Vazão 110L/min. 154

Figura 5.49 – Comparação entre modelo físico (a) e simulação matemática da trajetória das gotas de n-pentano, considerando (b) todas as trajetórias e (c) 50% das trajetórias. Vazão de gás 110L/min. 155

Figura 5.50 – Resultados de simulação matemática da trajetória das gotas de óleo de soja, considerando diâmetros iguais: (a) 9,8mm; (b) 4,7mm. 156

Figura 5.51 – Comparação entre modelo físico (a1 e a2) e simulação matemática da trajetória das gotas de óleo de soja, considerando diâmetro igual a: (b1) 4,7mm; (b2) 3mm. Vazão 110L/min. 157

Figura 5.52 – Resultados de simulação matemática da trajetória de gotas de escória, considerando diâmetro igual a: (a) 10mm; (b) 8mm; (c) 7mm. Vazão de argônio 140Nm³/h. 158

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1 – Relações de equilíbrio das reações de desgaseificação 9

Tabela 3.2 – Resumo de algumas simulações matemáticas de reatores RH. 24

Tabela 3.3 – Principais equações para determinação do diâmetro de bolha de gás. 37

Tabela 3.4 – Alguns dados de experimentos industriais de dessulfuração do aço por sopro de pó em reator RH 48

Tabela 3.5 – Resultados industriais de dessulfuração do aço por sopro de pó em reator RH.. 52

Tabela 3.6 – Resultados industriais de dessulfuração do aço pela adição de material dessulfurante via sistema de adição de ligas em reator RH. 53

Tabela 4.1 – Métodos de análise e combinação de variáveis utilizadas nos testes. 61

Tabela 4.2 – Descrição das Características do Protótipo e do Modelo 63

Tabela 4.3 – Variáveis relevantes à recirculação no processo RH..... 63

Tabela 4.4 – Grupos adimensionais, critérios de similaridade..... 64

Tabela 4.5 – Parâmetros para os testes de velocimetria PIV. 71

Tabela 4.6 – Principais parâmetros dos testes de injeção de partículas. 74

Tabela 4.7 – Valores da viscosidade e densidade de materiais utilizados no modelamento da interação metal/escória. 75

Tabela 4.8 – Combinação de variáveis para realização dos testes de medição de gotas de óleo. 76

Tabela 4.9 – Propriedades físicas utilizadas na simulação matemática do reator RH. 86

Tabela 5.1 – Resumo do comportamento de gotas de n-pentano (500mL) no modelo físico. 124

Tabela 5.2 – Resultados de dessulfuração do aço em testes industriais em reator RH – pressão de vácuo 50mbar e vazão de gás 110Nm^3/h. 129

Tabela 5.3 – Resumo de parâmetros relacionados a dispersão das gotas de escória em um reator RH de 315t baseado em estimativas do modelamento físico. 131

Tabela 5.4 – Resumo do comportamento de gotas de n-pentano (2L) no modelo físico de reator RH. 140

Tabela 5.5 – Quantidade média de gotas mensuradas em cada teste com as diferentes combinações fluido de circulação/óleo. 141

Tabela 5.6 – Parâmetros e resultados dos testes em bancada para determinação do coeficiente de partição de timol entre óleo e água. 148

LISTA DE NOTAÇÕES

A; A_{PR} – área interfacial total (aço/escória); área da interface metal/escória do reator permanente (m^2);

$a_{Al_2O_3}$ - Atividade da alumina na escória;

BOF – Basic Oxygen Furnace

CCD – *Charge Coupled Device*

CFD; CFX – *Computational Fluid Dynamics;* software Ansys of CFD;

C_{cd} - Coeficiente de transferência de momento para a força de arraste;

C_D; C_L- Coeficiente da força de arraste (D – *drag*) e da força de sustentação (L - *lift*);

C_{TD}; C_{VM} - coeficiente da força de dispersão turbulenta (TD) e da força de massa virtual (VM);

C_{WL} - Coeficiente da força de lubrificação;

C_S ; C'_S - Capacidade de enxofre de uma escória; capacidade de enxofre modificada;

C_{sal} ; ΔC_{sal} – concentração em g de KCl/kg de água; incremento de concentração de traçador;

DDM - modelo de diâmetros dispersos

d_b, d_g, $d_{g,0}$; $d_{g,s}$ – diâmetro da bolha de gás (m; $d_{g,s}$ em cm);

d_P ; $d_{pó}$ – diâmetro da partícula (m); diâmetro da partícula de pó dessulfurante (m);

d_p e d_m – são os diâmetros da gota de escória e de óleo (m);

D; D_c: Diâmetro da perna (m; D_c em cm);

D_S - Difusividade do enxofre no aço líquido (m^2/s);

Fr; Fr_{mod} – número adimensional de Froude, e número de Froude modificado;

$\vec{F}_i$ – Força de interação entre as duas fases;

F_D; F_L – Força de arraste (D – *drag*) e força de sustentação (L - *lift*);

F_{TD}; F_{VM} – Força de dispersão turbulenta (TD) e força de massa virtual (VM);

F_{WL} – Força de lubrificação da parede;

f - Fator de fricção;

f_{BC} – fração de partículas que ficam aprisionadas nas bolhas (na interface bolha/metal);

g – Aceleração da gravidade (m/s^2);

G – Vazão de gás (Nm^3/s);

h_i – atividade henriana do soluto i;

h_O; h_{Al} e h_S – atividade de oxigênio, alumínio e enxofre, respectivamente, no aço;

k - a energia cinética turbulenta;

k_{ac} - constante aparente de descarburação;

k_A; k_i – respectivo coeficiente de transferência de massa (m/s);

Ki – constante de equilíbrio da reação.

L_m e L_p – comprimento de referência no modelo e no protótipo, respectivamente (m);

L_S - Relação de partição de enxofre no equilíbrio entre escória e metal;

$M_{aço}$; M_{sal} – massa de aço (kg); massa de traçador – sal (g);

m_{BC} – fator adimensional chamado fator de área efetiva (para as partículas dentro das bolhas);

m_e – massa da esfera (kg);

MPSG - Método da Ponte de *Strain Gages;*

MUSIG - modelo de múltiplos grupos de tamanho;

P_2: Pressão na câmara de vácuo (atm);

P_1: Pressão na perna de descida na linha dos bicos de injeção de gás (atm);

p_i - a pressão parcial (atm);

PIV – *Particle Image Velocimetry;*

ppm - partes por milhão;

Q_t; Q_c: Taxa de circulação (Q_t - t/min; Q_c - kg/s);

Q_{BC} – vazão de gás de transporte do pó (Nm^3/s);

RH-KTB – Ruhrstahl-Heraeus-Kawasaki top blowing (lança de sopro de gás)

RH-MFL – reator RH equipado com queimador (lança) multi-função (Multi Function Burner)

RH – PB (IJ) - *Powder Blowing (Injection);*

RH- PB (OB) - *Powder Blowing (Top Blowing Oxygen);*

RH-PTB - *Powder Top Blowing;*

RMS – *Root Mean Square*

R_d; R_e – raio da perna de descida (m); raio da esfera (m);

Re – Número de Reynolds;

Sc – Número de Schmid;

$\%S_0$; $\%S_{final}$ – concentração inicial e final de enxofre no aço;

T – Temperatura em Kelvin (K);

Δt (s) – o tempo de contato;

$t_{injeção}$ (s) – tempo de injeção do material (tempo de tratamento);

t_p e t_m – tempo (s) no protótipo e modelo físico;

t_{PC} e t_{BC} - tempo de residência das partículas e das bolhas, respectivamente (s);

t_{Rp}; t_H – tempo de residência das gotas de escória (s); tempo de arraste da escória;

u_g; $u_{g,0}$; $u_{g,s}$ – velocidade do gás na saída do bico de injeção (m/s; $u_{g,s}$ em cm/s);

u_m e u_p – velocidade de referência no modelo e no protótipo, respectivamente (m/s);

u_P – velocidade que a partícula atinge a superfície do líquido (m/s);

v; v_l – velocidade do líquido (m/s);

$V_{aço}$ – volume de aço na panela (m^3);

(W_{0S}) e [W_{0S}] - porcentagem em peso de enxofre de equilíbrio na escória e no aço, respectivamente;

[W_{Al}] - porcentagem em peso de alumínio no aço;

$W_{escória}$ – quantidade de gotas de escória arrastadas para a panela (kg/s);

W_m – quantidade de líquido no reator (em kg);

W_p – Massa do líquido na panela (t);

$W_{pó}$ – taxa de sopro de pó (kg/s);

Letras Gregas

α_i, α_l, α_g - fração volumétrica (l = líquido; g = gás);

ε - taxa de dissipação de energia cinética turbulenta;

$\eta_{aço}$ – viscosidade dinâmica do aço (Pa.s);

λ – Fator de escala;

λ_0 é a basicidade ótica da escória;

μ_l; $\mu_{l,t}$ – viscosidade do fluido (Pa.s); viscosidade turbulenta (calculada pelo modelo de turbulência);

ξ - poder de agitação;

ρ_i; ρ_L; ρ_l; ρ_P; ρ_w – densidade do material i (i=L -> líquido; i=P -> partícula; i=w -> água; kg/m^3);

Δρ – diferença de densidade entre escória e aço (kg/m^3);

σ_l - Tensão interfacial líquido/gás (N/m);

σ_{w-O}; σ_{a-e} – tensão interfacial água/óleo (w-o) e aço/escória (a-e; N/m););

τ: Tempo total de mistura (s);

υ_l – é o volume específico de líquido;

φ - Diâmetro do Bico de injeção de gás (m);

RESUMO

A dessulfuração do aço pode ser realizada pela adição de material dessulfurante na câmara de vácuo do desgaseificador RH. Foram realizados modelamentos físico e matemático de um reator RH visando melhor entender quais parâmetros mais interferem na cinética da dessulfuração do aço. As várias combinações analisadas incluem a imersão das pernas, a vazão de gás, fluido similar ao aço (água ou solução salina) e diferentes óleos para simular a escória. Os ensaios, referentes ao modelamento físico, incluíram: determinação da taxa de circulação via método de ponte de *strain gages* (MPSG), condutivimetria e aplicação da técnica de velocimetria PIV (*Particle Image Velocimetry*); simulação no modelo físico (escala 1:7,5) do processo de adição de material dessulfurante na câmara de vácuo, avaliando o tempo de residência, o tamanho das gotas de material arrastadas pelo fluxo e a taxa de transferência de massa de timol. Por meio de simulação numérica do fluxo bifásico pôde-se prever a influência das variáveis operacionais sobre a taxa de circulação. Foi possível determinar a taxa de circulação quando se utiliza solução salina para simular o aço utilizando-se o MPSG, sendo o método validado com resultados de taxa de circulação de água obtidos pelo método da condutivimetria, comumente empregado. Notou-se que o emprego da solução salina elevou a taxa de circulação de modo proporcional ao aumento na densidade (cerca de 20%), indicando pouca influência sobre os valores de velocidade do líquido no interior do modelo. A imersão das pernas não afetou significativamente a taxa de circulação, enquanto a vazão de gás influenciou por uma função de potência ($Q_c \propto G^{1/3}$). A influência do formato do vaso inferior (cilíndrico ou retangular) sobre a taxa de circulação foi desprezível, corroborando a utilização do vaso inferior em formato retangular para medição do diâmetro das gotas de óleo arrastadas. A redução da viscosidade do óleo e o aumento na diferença de densidade entre os fluidos resultaram em considerável diminuição do diâmetro médio das gotas de óleo arrastadas da câmara de vácuo para a panela. Foi observado ainda um prolongamento no tempo de residência do material na câmara de vácuo para maiores diferenças de densidade e menores vazões de gás. Testes de transferência de massa entre água e óleo no modelo físico resultaram numa extração em torno de 15%, 2min após a adição do material na câmara de vácuo. Porém, a baixa diferença de densidade entre o óleo e a água não permitiu inferir a influência da vazão de gás sobre a taxa de transferência de massa. A distribuição do gás na perna de subida e os valores de taxa de circulação previstos via simulação numérica foram validados pelos resultados do modelo físico.

A melhor predição da taxa de circulação, da penetração e distribuição do gás foi obtida na simulação com incorporação da força de massa virtual (coeficiente igual 0,25) e força de dispersão turbulenta, adotando o modelo da média de Favre (ponderada pela massa) da força de arraste. A força de lubrificação das paredes deve ser utilizada para evitar o acúmulo de gás próximo às paredes da perna, mas seu efeito sobre a taxa de circulação foi desprezível. Em simulações do sistema aço/argônio, a expansão das bolhas de gás devido à queda de pressão foi considerada, resultando em aumento nos valores de taxa de circulação previsto pelo modelo numérico. A partir da análise de dispersão de escória no interior do aço líquido e resultados numéricos, foi possível adaptar um modelo cinético para estimar taxa dessulfuração pela adição de material dessulfurante na câmara de vácuo do reator RH. O modelo sugere ser possível alcançar um grau de dessulfuração entre 19% e 33%.

Palavras-chave: Desgaseificador RH, Dessulfuração, Comportamento metal/escória, Forças de não-arraste, Modelamento físico, Simulação matemática.

ABSTRACT

Steel desulfurization can be accomplished by the addition of desulfurizing agent in the RH vacuum chamber. Computational Fluid Dynamics (CFD) technique and 1:7.5 physical model of a RH degasser has been employed in order to better understand the effects of operational parameters on steel desulfurization kinetics. The effects of parameters such as gas flow rate, snorkels immersion depth, fluid emulating liquid steel (water or aqueous salt solution) and different oils for simulating the slag have been taken care of. The experiments in the physical model were: measurement of liquid circulation rate via the strain gage bridge method (SGBM) and by the well-known conductimetry method and velocity measurements from PIV technique (Particle Image Velocimetry); simulation of the desulfurizing agent addition into the vacuum chamber of the model, to evaluate the residence time, the size of the oil droplets dragged by the flow and mass transfer rate of thymol. The numerical simulation of the multiphase flow was set to predict the effect of operational parameters on the liquid circulation rate. The SGBM technique can be used to evaluate the circulation rate of denser salt solution used as circulating fluid. Increasing the density of the circulating fluid proportionally increases the rate of circulation (about 20%), suggesting a slight influence on the liquid velocity inside the model. The snorkel immersion depth did not affect significantly the circulation rate, while the gas flow rate influence can be reported as a power law relationship ($Q_c \propto G^{1/3}$). The shape of the lower vessel had negligible influence on the circulation rate, supporting the use of the rectangular vessel to evaluate the size of the entrained oil droplets. Reducing the oil viscosity and increasing the density difference (between circulating fluid and oil) resulted in a smaller average diameter of the entrained droplets. The residence time of material inside the vacuum chamber was longer the larger the difference between the oil and circulating fluid densities or by properly reducing gas flow. Tests of mass transfer between water and oil in the physical model resulted in an extraction about 15%, 2min after the material addition in the vacuum chamber. However, the lower water/oil density difference did not allow to infer the gas flow rate influence on the mass transfer rate. The CFD predicted radial gas distribution and liquid circulation rate have been validated against experimental data from physical model. Better predictions of gas distribution in the up-snorkel as well as circulation rate via mathematical modeling were achieved with incorporation of the virtual mass force coefficient of 0.25 and the turbulent dispersion force, with the model based on the Favre (mass weighted) average of the drag force. The wall

lubrication force should be accounted for in order to avoid gas accumulation near the snorkel walls, but its effect on the circulation rate was insignificant. On full-scale simulations, the bubble expansion due to pressure drop has been taken in consideration, increasing the predicted steel circulation rate. Based on the results from physical model about slag dispersion inside liquid steel and on numerical simulation, a kinetic model was applied to evaluate the desulfurization due desulfurizer addition on the vacuum chamber of RH reactor.

Keywords: RH degasser, Desulphurization, Physical Modelling, Slag–Metal Behavior**,** Numerical Simulation, Non-drag forces.

1 INTRODUÇÃO

A presença de enxofre no aço, normalmente na forma de inclusões de sulfeto, afeta negativamente propriedades como ductibilidade, tenacidade e resistência à fadiga, tornando-o indesejável na maioria dos tipos de aço, salvo exceções, como por exemplo, produção de aços de corte fácil para fabricação de peças (boa usinabilidade). É fato que o enxofre está contido em muitas matérias-primas utilizadas na fabricação do aço e, desta forma, a produção de aços de alta qualidade exige sua remoção em alguma(s) etapa(s) de processamento. É comum conduzir a dessulfuração durante o pré-tratamento de gusa e/ou no refino secundário do aço.

Desde seu desenvolvimento na Alemanha há mais de 50 anos, os reatores RH (Ruhrstahl–Heraeus) têm sido aplicados na indústria siderúrgica moderna para melhorar a qualidade do aço e aumentar o range de produtos (TEMBERGEN *et al.*, 2008). O processo de desgaseificação no reator RH tem sido largamente aplicado objetivando-se descarburação, remoção de nitrogênio, hidrogênio e inclusões, adição de elementos de liga, entre outros (ZHANG *et al.*, 2014). No processo RH, o refino se baseia na interação entre aço líquido e fase gasosa. Kuwabara *et al.* (1988), Tsujino *et al.* (1989), Silva e Tavares (2012), Wang *et al.* (2014), entre outros destacam que, sob o ponto de vista metalúrgico, as reações de desgaseificação do aço ocorrem na interface bolhas de argônio/aço, na superfície livre aço líquido/vácuo e na interface das gotas de aço projetadas na câmara de vácuo. O grau de vácuo, a taxa de circulação bem como a energia de agitação do banho metálico tem efeitos importantes nas taxas de reações (ZHANG *et al.*, 2014).

A despeito da variedade de tipos de aços que são produzidos, em uma mesma estação de refino secundário, verifica-se que o número de equipamentos de refino disponíveis é, em geral, limitadíssimo. Visando atender a esta demanda, os diversos equipamentos de refino secundário tornaram-se mais versáteis. Neste sentido, mutações metalúrgicas do reator RH, identificadas como RH-KTB, RH-PB, RH-MFB, etc., possibilitam operações que variam desde aquecimento aluminotérmico do banho até dessulfuração do aço pela injeção de material dessulfurante na câmara de vácuo (SUSAKI *et al.*, 2014).

Além da desgaseificação e descarburação do aço, muitos dos atuais reatores RH podem ser utilizados para outras funções, como a dessulfuração (GHOSH, 2001b). É preciso lembrar que

nem todas essas funções são igualmente importantes. A aplicação destas técnicas depende de demanda e de adequações da rota de produção, que determinam a escolha do processo, das instalações necessárias e das práticas operacionais.

Existem alguns trabalhos publicados na literatura reportando excelentes resultados de eficiência de dessulfuração do aço no reator RH (vide seção 3.4.1). Devido ao desgaste severo da estrutura refratária da perna de descida e da panela de aço, a dessulfuração durante o tratamento de refino secundário no RH não é uma prática muito comum em aciarias, porém se faz uso desta técnica para produção de aços com teores ultrabaixos de enxofre: como por exemplo, aço silício de grão não orientado - GNO (ZULHAN *et al.*, 2013); aços de aplicação na indústria naval, aeronáutica, tubulações (pipeline) e entre outros que necessitam de um teor de enxofre menor que 0,001% em peso (WEI *et al.*, 2000). Yang *et al*. (2014) lembram que o tratamento do aço no RH é o último processo entre os mais importantes para a dessulfuração do aço, e assim o reator RH é largamente aplicado para produção de aços ultrabaixo teor de enxofre.

Okano *et al.* (1997), Wei *et al.* (2000), Yang *et al.* (2014) destacam as vantagens em se realizar a dessulfuração do aço no reator RH: o potencial de oxigênio pode ser reduzido a um nível baixo, o que favorece a reação de dessulfuração; desgaseificação (remoção de hidrogênio) pode ser conduzida simultaneamente e de maneira efetiva; os efeitos da escória de topo na panela sobre a remoção de enxofre pode ser minimizada sob as condições de refino no RH; previne a contaminação pelo ar (principalmente absorção de N), pois a dessulfuração é conduzida sob vácuo.

Wei *et al.* (2000) relatam que a escória no topo da panela é essencialmente inativa e sua contribuição para a dessulfuração é relativamente pequena e pode ser negligenciada, assim a superfície das partículas de pó (fluxo), que são as gotas de escória e partículas dispersas no aço líquido, são os sítios mais importantes para a dessulfuração. Porém, He *et al.* (2012) afirmam que a composição da escória de topo tem efeito sobre o coeficiente de partição de enxofre entre o aço e a escória, sendo que o conteúdo de FeO+MnO na escória de topo deve ser inferior a 15% em peso antes e 10% após do tratamento no RH. Wei *et al.* (2000) destacam ainda que é necessário se conhecer: o tamanho e tempo de residência médios das partículas dessulfurantes

no interior do aço líquido para então se descrever quantitativamente a reação de dessulfuração do aço pelas partículas de pó dispersas no aço líquido.

Outro aspecto importante é que devido às diferentes condições necessárias para as reações de descarburação e de dessulfuração, a etapa de dessulfuração é geralmente realizada após o término dos demais tratamentos conduzidos no RH. Lembrando-se da necessidade de manter a sequência de corridas estável de modo a não interferir no ritmo da máquina de lingotamento, é imprescindível que o tempo de refino secundário não ultrapasse certo limite. Por exemplo, por causa da condição de menor potencial de oxigênio no banho metálico, He *et al.* (2012) relatam que a dessulfuração no RH é realizada após as etapas de descarburação, desoxidação e adição de ligas, sendo restrita a uma duração de 6-10min devido ao ritmo de produção. Além disso, os fluxantes (principalmente CaF_2), quando injetados na câmara de vácuo provocam desgaste severo dos refratários da perna de descida e do vaso inferior (da panela) do RH, além do impacto ambiental negativo (da fluorita).

De modo geral, o aumento da taxa de circulação incorre em aumento da taxa de descarburação do aço, além do encurtamento do tempo de tratamento de refino secundário. Porém, num estudo do processo de dessulfuração no reator RH, Yang *et al.* (2014) observaram que a taxa de dessulfuração primeiramente aumenta com o aumento da vazão de gás, devido ao aumento da circulação do aço, mas a partir de certo valor de vazão esta passa a decrescer, pois a circulação excessiva reduz o tempo de residência das partículas dessulfurantes no interior do aço. Assim, existe um valor ótimo de vazão de gás que maximiza a taxa de dessulfuração.

Apesar do processo de dessulfuração no reator RH ter sido proposto há mais de duas décadas, são poucos os estudos sobre o comportamento da escória adicionada na câmara de vácuo, sendo que alguns modelos de dessulfuração propostos anteriormente são carentes neste sentido. Por isso, a análise do comportamento da escória adicionada na câmara de vácuo, contribui na elucidação dos mecanismos de arraste desta escória, possibilitando o desenvolvimento de um modelo de dessulfuração no RH, identificando-se os parâmetros operacionais que maximizem as taxas de dessulfuração. E desta feita obter-se a redução do tempo de tratamento, do volume de escória adicionado no processo, do desgaste dos revestimentos refratários, e consequentemente na redução de custos de produção.

No tocante às simulações matemáticas, existem diferentes modelos de interação entre duas fases e tipos de forças de não-arraste que podem ser empregados para prever a interação gás/líquido no reator RH. A profundidade de penetração do gás é o fator chave para determinação da distribuição do gás injetado e descrever adequadamente o fluxo de líquido no interior do reator (GENG *et al.*, 2010). E diversas simulações numéricas apresentadas na literatura falharam em prever adequadamente a penetração de gás na perna de subida do reator RH (BRAGA *et al.*, 2016). Ainda há dúvidas sobre os modelos para força de arraste, contribuição dominante para as forças de interação, desempenhando um papel essencial na determinação do fluxo multifásico (CHEN *et al.*, 2016) e para as forças de não-arraste (força de sustentação, de massa virtual, de dispersão turbulenta e de lubrificação das paredes) que devem ser incorporadas para descrever com maior fidelidade as características do escoamento multifásico no reator RH (ZHU *et al.*, 2017).

Este trabalho procura avaliar como parâmetros operacionais influenciam a dessulfuração do aço líquido em um reator RH através da adição de material dessulfurante via sistema de adição de ligas (desta forma, dispensa-se a instalação de equipamentos específicos para injeção de pó dessulfurante). Para tanto foi realizada uma abordagem numérica por meio do software comercial ANSYS-CFX, para resolver o escoamento bifásico turbulento. Foi ajustada e validada uma combinação de forças de interação bolha/líquido na simulação matemática capaz de prever a distribuição de gás na perna de subida e a taxa de circulação de líquido em diferentes vazões de gás, com considerável margem de confiabilidade. Foi também realizada uma análise intensiva, utilizando técnicas de modelamento físico e computacional, para avaliar a adição de material dessulfurante na câmara de vácuo pela calha de adição de ligas, buscando evidenciar a influência da vazão de gás e da diferença de densidade entre as fases sobre o tempo de residência do material e o tamanho das gotas de óleo que são arrastadas pelo fluxo de líquido no interior do modelo. Por fim foi desenvolvido um modelo cinético para estimar a taxa de dessulfuração do aço e auxiliar na escolha de condições operacionais que maximize a remoção de enxofre e que permita minimizar tempo de tratamento.

2 OBJETIVOS

2.1 Objetivos Gerais

Utilizar modelamento físico e simulação matemática de um desgaseificador RH de forma a avaliar parâmetros do processo de dessulfuração do aço pela adição de dessulfurante através da calha de adição de ligas.

2.2 Objetivos Específicos

- Desenvolver um método de determinação da taxa de circulação no modelo físico utilizando um sistema com *strain gages*;
- Determinar a taxa de circulação no interior do modelo físico pelo método da condutivimetria e pela técnica PIV (*Particle Image Velocimetry*) – a partir do perfil de velocidades na perna de descida;
- Estudar o efeito da profundidade de imersão das pernas e da vazão de gás sobre a taxa de circulação;
- Caracterizar a zona de injeção de gás na perna de subida para diferentes vazões de gás, utilizando todos os 16 ou apenas 2 bicos (permitindo vizualização da seção longitudinal);
- Desenvolver um modelo matemático para determinar os perfis de velocidades dos fluidos e a taxa de circulação no reator RH, utilizando o software Ansys-CFX e validar o modelo com resultados obtidos nos experimentos com o modelo físico;
- Elucidar a influência da viscosidade e da diferença de densidade (fluido de circulação/óleo) nas condições de arraste de escória através dos sistemas água-óleo e solução NaCl-óleo;
- Avaliar a transferência de massa de um traçador entre água e óleo no modelo físico;
- Propor um modelo cinético para a dessulfuração do aço pela injeção de material na câmara de vácuo do reator RH através do canal de adição de ligas.

3 REFERENCIAL TEÓRICO

3.1 Desgaseificador RH

O desgaseificador RH (ver Figura 3.1) é o processo dominante para o tratamento a vácuo de refino secundário do aço líquido. Foi denominado em função das empresas Ruhrstahl e Heraeus, onde o processo foi desenvolvido no final da década de 1950 (TEMBERGEN *et al.*, 2008). O equipamento básico e as condições de operação necessária para o RH estavam amplamente desenvolvidos até meados de 1960, mas outras melhorias foram introduzidas até a década de 1990 (EMI, 2015): sistemas de vácuo de grande capacidade, permitindo a realização mais rápida de alto vácuo no vaso e elevando a taxa de desgaseificação desde o início do tratamento; aumento dos diâmetros das pernas e do vaso, e elevação da vazão de argônio através de tubos de aço inoxidável na perna de subida; tijolos refratários mudaram para tijolos de ligação direta magnesita-cromita, elevando a durabilidade; e instalação de aquecedor de resistência elétrica no vaso para compensar a queda de temperatura do aço líquido e fundir o acúmulo de projeções ("cascão") na parede interna do vaso.

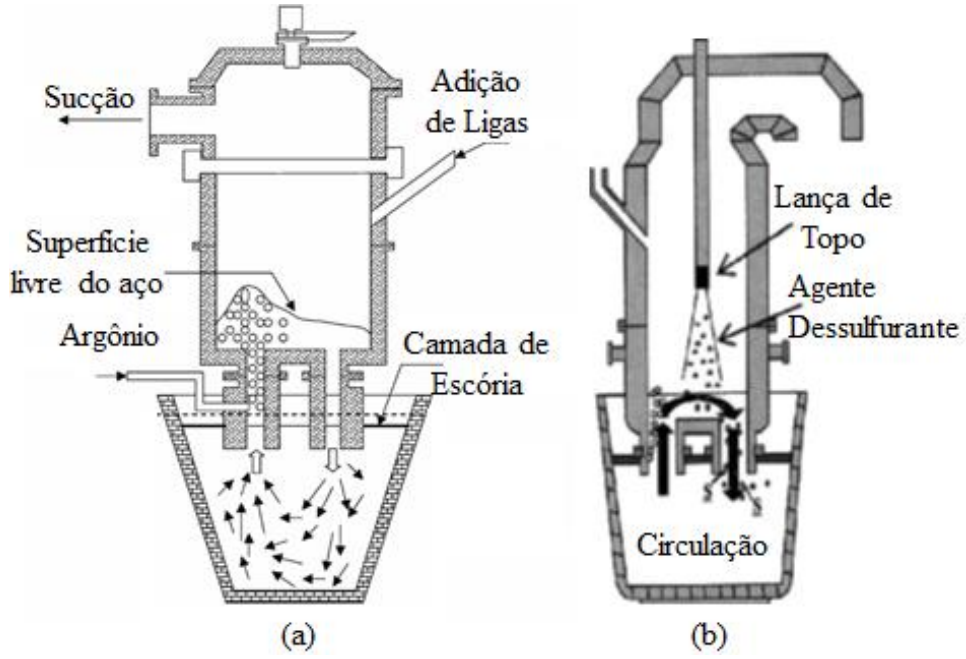

Figura 3.1 – (a) Esquema de um desgaseificador RH (adaptado ZHANG e LI, 2014); (b) RH-PTB com injeção de dessulfurantes na câmara de vácuo (adaptado EMI, 2015).

EMI (2015) descreve sucintamente o princípio de funcionamento do reator RH: a perna de subida (contendo os bicos de injeção de gás) e de descida instaladas na porção inferior de uma câmara de vácuo, as quais são imersas no aço líquido contido na panela. Ao aplicar-se o vácuo, parte do aço líquido é sugada para a parte inferior do vaso de vácuo, argônio (Ar) é injetado pelos bicos na perna de subida encorajando o movimento de subida e descida do aço, o qual retorna à panela pela perna de descida da câmara de vácuo, formando uma recirculação do aço líquido. Esta circulação de aço líquido entre a panela e a câmara de vácuo afeta tanto a cinética das reações de refino secundário quanto a velocidade de homogeneização do banho e a remoção de inclusões, desempenhando uma tarefa importante sobre a produtividade do equipamento (NEVES *et al.*, 2009).

O desenvolvimento da geometria do vaso (tamanho e forma), seção transversal das pernas e capacidade de produção de unidades de RH é exemplificado na Figura 3.2, que elucida a evolução no design do vaso RH desde o início da tecnologia RH (TEMBERGEN *et al.*, 2008).

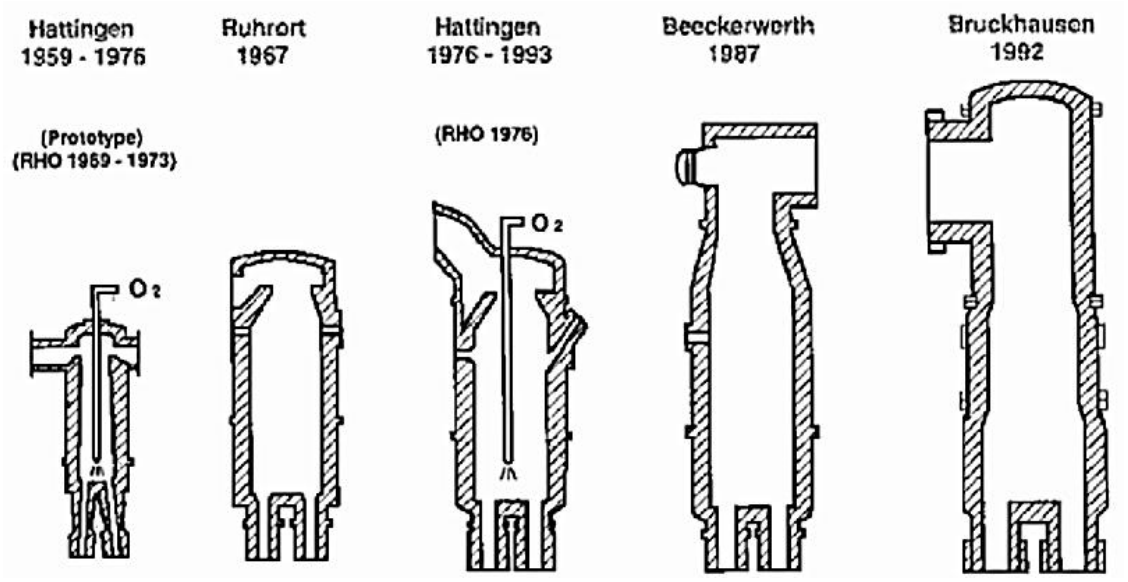

Figura 3.2 – Evolução das unidades de desgaseificador RH da ThyssenKrupp, 1958-1992 (TEMBERGEN *et al.*, 2008).

Além da desidrogenação e desnitrogenação do aço líquido, as principais funções dos reatores RH modernos são descarburação, tratamento de limpidez (redução da população e de tamanhos, além da mudança morfológica das inclusões) e ajuste de composição química do aço (SILVA,

2010; GHOSH, 2001a). Wei *et al.* (2001) destacam ainda que a partir da década de 90, foram desenvolvidas várias tecnologias de sopro e injeção de pó dessulfurante durante o tratamento do aço no RH para produção de aços ultrabaixo enxofre: processo RH-PB (IJ), no qual o material dessulfurante é injetado na panela através de uma lança posicionada abaixo da perna de subida; processo RH-PB (OB), no qual o dessulfurante é soprado através de ventaneiras de sopro de oxigênio localizadas na parte inferior da câmara de vácuo; e processo RH-PTB (vide Figura 3.1-b), no qual o material dessulfurante é soprado sobre a superfície livre do aço utilizando uma lança posicionada no topo da câmara de vácuo (geralmente argônio é utilizado como gás de transporte do pó).

Tembergen *et al.* (2008) lembram ainda que a quantidade de aço que necessita de tratamento a vácuo continuará a crescer, o que exigirá que as siderúrgicas invistam em desgaseificação a vácuo se quiserem permanecer competitivas nos mercados domésticos e internacionais. Atualmente, é possível obter teor final de carbono extremamente baixos (menos de 20ppm), conforme exigido para a produção de chapas automotivas, enquanto a adição de elementos de liga durante a desgaseificação tem a vantagem de obter altos rendimentos das ligas, devido à ausência de ar (alto vácuo) e evitando-se as reações ocorrentes na interface metal-escória.

3.1.1 Reações importantes no desgaseificador RH

O processo de refino no reator RH é classificado como desgaseificação e descarburação do aço líquido que circula entre a panela e a câmara de vácuo pelo sopro de gás (Argônio). As principais reações de desgaseificação e suas respectivas relações de equilíbrio são apresentadas na Tabela 3.1. Nota-se pelas relações de equilíbrio termodinâmico que as reações de desgaseificação do aço líquido possuem forte dependência da pressão na câmara de vácuo. Assim, a redução da pressão no interior da câmara de vácuo favorece a eliminação dos gases (H_2 e N_2) e a descarburação (CO). No entanto, o oxigênio dissolvido não pode ser removido do aço líquido como O_2 gasoso, como exemplifica Ghosh (2001a) que para p_{O_2} = 10^{-3}atm e 1600 °C, o teor de oxigênio em equilíbrio no aço líquido seria 26% em peso, valor absurdo. Além disso, Ghosh (2001a) também demonstra que do ponto de vista termodinâmico, é possível obter níveis muito baixos e completamente satisfatórios de H, N e C, mas ressalta que valores tão baixos não são alcançados na prática devido às limitações cinéticas.

As reações de desgaseificação e descarburação do banho ocorrem na interface das bolhas de argônio, na superfície livre do aço no interior da câmara de vácuo, na superfície das projeções criadas pela separação das bolhas (TAVARES *et al.*, 2008). Kuwabara *et al.* (1988), Silva *et al.* (2004), Zhang *et al.* (2014) dentre outros pesquisadores reportam que a cinética destas reações é afetada, principalmente, pela taxa de circulação de aço entre a câmara de vácuo e a panela.

Tabela 3.1 – Relações de equilíbrio das reações de desgaseificação (GHOSH, 2001a)

Equação	**Relação de equilíbrio**	**K_i vs T (K)**
$[H] = \frac{1}{2}H_2(g)$ (3.1)	$[h_H] = K_H \cdot p_{H_2}^{1/2}$	$\log K_H = -\frac{1905}{T} + 2{,}409$
$[N] = \frac{1}{2}N_2(g)$ (3.2)	$[h_N] = K_N \cdot p_{N_2}^{1/2}$	$\log K_N = -\frac{518}{T} + 2{,}937$
$[C] + [O] = CO_{(g)}$ (3.3)	$[h_C] \cdot [h_O] = K_{CO} \cdot p_{CO}$	$\log K_C = -\frac{1160}{T} - 6$

Onde [H], [N], [C] e [O] encontram-se dissolvidos no metal líquido; T - temperatura em Kelvin (K); h_i – atividade henriana do soluto i; p_i - a pressão parcial (atm); Ki – constante de equilíbrio da reação.

Normalmente, no tratamento para descarburação do aço no reator RH, são produzidos aços com teores de carbono ≤ 0,003% (SILVA, 2010). Kuwabara *et al.* (1988) obtiveram melhoria na taxa de descarburação: para teores elevados de carbono (>10ppm) utilizando pernas de formato oval, o que aumenta a taxa de circulação e a taxa de reação; e para teores mais baixos de carbono (<10ppm) através da injeção de argônio pelo fundo do vaso de vácuo, o que aumenta a área superficial disponível para reação.

Kishimoto *et al*. (1993), Silva e Tavares (2012) recomendaram que, para aumentar a taxa de descarburação no processo RH, duas medidas podem ser tomadas: no início quando o teor de carbono é alto deve-se propiciar a maximização da taxa de circulação e o aumento da taxa de remoção de gases com a criação de um vácuo suficiente para favorecer a reação; quando a concentração dos reagentes (carbono e oxigênio) fica muito baixa, deve-se aumentar a vazão de argônio, para incrementar a turbulência na superfície, propiciando um aumento na área

superficial do banho metálico em contato com as baixas pressões no interior do vaso.

Neste sentido, Silva e Tavares (2012) investigaram a variação da constante aparente de descarburação (k_{ac}), em função da vazão de argônio utilizada no desgaseifiador RH. Foram consideradas 97 corridas de aço ultrabaixo carbono, utilizando três vazões de argônio (80 Nm^3/h, 110 Nm^3/h e 140 Nm^3/h), retirando-se amostras de aço aos 0, 6 e 12 minutos de cada corrida. A vazão de argônio foi então otimizada em cada etapa de descarburação: na primeira etapa reduziu-se esta vazão de 110 Nm^3/h para 80 Nm^3/h, visto que foram obtidos valores semelhantes de k_{ac} nas três vazões testadas; na segunda etapa da descarburação manteve-se a vazão de 140 Nm^3/h, por apresentar o maior valor de k_{ac}. Assim, de forma global obteve-se uma considerável redução no consumo total de argônio durante as duas etapas de descarburação, e também, uma menor queda de temperatura do aço durante o tratamento.

3.1.2 Taxa de circulação

Sabe-se que a eficiência de desgaseificação no RH depende da taxa de circulação do aço. A taxa de circulação pode ser entendida como a quantidade de aço que passa pela seção transversal da perna de descida por unidade de tempo, e exerce uma influência significativa sobre a descarburação, remoção de oxigênio e desidrogenação do aço, bem como sobre a eficiência da mistura na câmara de vácuo. Como tal, uma melhoria da eficiência do processo pode ser alcançada pela compreensão das variáveis que influenciam esse parâmetro (SESHADRI e COSTA, 1986). Desta forma, alguns pesquisadores propuseram equações empíricas para determinar a taxa de circulação. Destacam-se:

- ✓ Equação de Watanabe *et al.* (1966, apud SESHADRI e COSTA, 1986):

$$Q = 0{,}2.D_c^{1,5}.G^{0,33} \tag{3.4}$$

- ✓ Aplicando um balanço energético a uma unidade industrial de RH de 80t de capacidade, Seshadri e Costa (1986) obtiveram a Equação (3.5), que correlaciona taxa de circulação e vazão de gás:

$$Q_t = 58{,}9.G^{0,33} \tag{3.5}$$

- ✓ Equação empírica proposta por Kurokawa (1987 apud Park *et al.*, 2000), para calcular a taxa de circulação a partir do tempo de mistura:

$$Q_t = 3{,}33.\, D_c^{\frac{4}{3}}.\, W_p^{\frac{1}{3}}.\, \tau^{-0{,}741} \tag{3.6}$$

- ✓ Também a partir de um balanço energético, Kuwabara *et al.* (1988) encontraram a Equação (3.7), cuja validade foi verificada por dados de modelo físico, e o valor da constante de proporcionalidade igual a 114 foi determinada utilizando-se dados de taxa de circulação obtidos em vários processos industriais:

$$Q_t = 114.\, D^{\frac{4}{3}}.\, G^{\frac{1}{3}}.\, \left[\ln\left(\frac{P_1}{P_2}\right)\right]^{\frac{1}{3}} \tag{3.7}$$

Onde: Q_t: Taxa de circulação do aço (t/min); Q_c: Taxa de circulação (kg/s); D: Diâmetro das pernas (m); D_c: Diâmetro da perna (cm); G: Vazão de gás inerte na perna de subida (Nm^3/min); W_p: Massa do líquido na panela (t); τ: Tempo total de mistura (s); P_2: Pressão na câmara de vácuo (atm); P_1: Pressão na perna de descida na linha dos bicos de injeção de gás (atm);

É geralmente aceito que a taxa de circulação está relacionada à vazão de gás injetado e ao diâmetro das pernas. Como a taxa de circulação depende de muitos outros parâmetros, além dos descritos acima, as Equações empíricas (3.4) a (3.7) possuem limitações em suas aplicações. Dentre as diversas variáveis que influenciam a taxa de circulação, Park *et al.* (2000), Silva *et al.* (2004), Martins (2004), Lacosqui (2006) e Neves (2008) destacam: a forma do equipamento; formato, diâmetro e número de pernas; diâmetro interno, quantidade, disposição e qualidade de obstrução dos bicos de injeção de gás inerte; além das condições de operação - altura de líquido e pressão da câmara de vácuo, profundidade de imersão das pernas, vazão de gás injetado na perna de subida, injeção de gás auxiliar na panela.

Neste sentido, diversos estudos foram realizados para avaliar a influência destas variáveis sobre a taxa de circulação. Os trabalhos que utilizaram técnicas de modelamento físico e simulação numérica serão abordados em tópicos específicos adiante desta revisão da literatura. A seguir, apresentam-se resultados de dois trabalhos que aferiram a taxa de circulação de aço em reatores RH.

Em reatores industriais, isótopos radioativos eram geralmente utilizados como traçadores para avaliar a taxa de circulação, porém apesar da precisão, tal método é um tanto problemático quanto comparado com outros. Desta forma, Kuwabara *et al.* (1988) utilizaram um método de medição da taxa de circulação pela adição de ferroligas, a partir de uma estimativa pelo balanço de massa do componente de liga adicionado. Os valores de taxa de circulação obtidos por este método também foram empregados para determinar a constante da Equação (3.7).

Park *et al.* (2000) injetaram 125kg de cobre na câmara de vácuo de um desgaseificador RH (capacidade total 330t de aço) após estabilização do fluxo de aço líquido entre câmara de vácuo e panela, recolhendo amostras do aço ao longo do experimento para determinar o tempo de misturamento, que utilizaram para calcular a taxa de circulação utilizando a Equação (3.6) proposta por Kurokawa. Os resultados de taxa de circulação obtidos por estes experimentos foram próximos aos valores calculados pelo modelo computacional desenvolvido por eles.

Ajmani *et al.* (2004) também injetaram cobre, para validar resultados obtidos em modelamento matemático. Eles adicionaram 65kg de cobre puro (99,9%), cortado em pequenos pedaços, dentro da câmara de vácuo do desgaseificador RH, com uma panela de 130t de capacidade, e a partir da determinação do teor de cobre no aço em função do tempo, determinaram o tempo de misturamento. Estes resultados foram utilizados para validar o modelamento numérico, visto que os resultados de tempo de mistura previsto pelo modelo matemático foram muito próximos aos resultados dos testes na planta.

Shirabe e Szekely (1983), Kato *et al.* (1993), Miki *et al.* (1997), Lascosqui (2006), Geng *et al.* (2012a), Silva *et al.* (2015) destacam que o fluxo recirculatório de aço entre a câmara de vácuo e a panela, aliado ao aumento do estado de turbulência, na perna de subida do reator RH facilitam as colisões, aglomeração e flotação de inclusões não metálicas. Geng *et al.* (2012a e 2012b) lembram ainda que o aumento da taxa de circulação, além de reduzir o tempo de misturamento, resulta em considerável acréscimo nas taxas de descarburação, desgaseificação, dissolução das adições de elementos de liga e remoção de inclusão.

É consenso entre os muitos trabalhos sobre taxa de circulação no reator RH, que o aumento na vazão de gás na perna de subida resulta em elevação da taxa de circulação de aço. Contudo,

Park *et al.* (2000) ressaltam que a taxa de circulação tende a decrescer quando a vazão de argônio na perna de subida excede o valor de saturação. Eles observaram este fenômeno em resultados de simulação matemática. Justificaram este efeito da seguinte forma: à medida que a vazão do gás aumenta acima da vazão saturação, o volume sobreposto de plumas aumenta, e o volume total da pluma gasosa diminui, resultando em redução da força motriz da circulação de líquido. Resultados similares foram observados posteriormente em outros trabalhos, como por exemplo, Geng *et al.* (2010), Mukherjee *et al.* (2017).

Com o objetivo de aumentar taxa de circulação no desgaseificador RH, muitas pesquisas têm sido realizadas nos últimos anos, destacando-se algumas medidas principais: a primeira alternativa é modificar os parâmetros de imersão das pernas (AJMANI *et al.*, 2004), aumentar o diâmetro das pernas de subida e descida (VARGAS, 2000), utilizar pernas de formato oval para substituir o formato circular (KUWABARA *et al.*, 1988; LING *et al.*, 2016a; LUO *et al.*, 2018), utilizar três pernas de subida e uma de descida (KISHAN e DASH, 2009); outro método é aplicar um campo eletromagnético em torno da perna de subida ou de descida (GENG *et al.*, 2012a); uma terceira alternativa é injeção adicional de argônio, como por exemplo, soprando argônio através de plugues no fundo da câmara de vácuo (KUWABARA *et al.*, 1988); NEVES *et al.*, 2009) ou no fundo da panela (SESHADRI *et al.*, 2006; GENG *et al.*, 2012b).

Em resumo, o reator RH é um equipamento para refino secundário do aço líquido assistido por recirculação e desgaseificação a vácuo, visando a descarburação, remoção de nitrogênio, hidrogênio, oxigênio, enxofre e inclusões não metálicas; adição de elementos de liga, entre outros. Dadas as diversas aplicações, são diversos os estudos sobre o desgaseificador RH disponíveis na literatura. Nos tópicos seguintes, agrupou-se por assunto, diferentes trabalhos sobre modelamento físico, modelamento matemático de RH, dessulfuração do aço e comportamento metal/escória. Estes tópicos são a base para o desenvolvimento da presente pesquisa.

3.2 Modelamento Físico de desgaseificador RH

A utilização de técnicas de modelamento físico e matemático é fundamental para análise da influência de parâmetros operacionais sobre o processo de desgaseificação no reator (RH). Devido ao grande número de parâmetros relacionados, torna-se muito difícil prever a taxa de circulação pela simples aplicação de equações empíricas. Além disso, como a medição direta da taxa de circulação é difícil, muitos estudos sobre o reator RH foram realizados para prever a taxa de circulação usando experimentos com modelo físico, medições de tempo de mistura e/ou utilizando métodos numéricos. Recorre-se ao uso destes métodos para se determinar as condições ótimas de funcionamento do reator (PARK *et al.*, 2000).

Construído o modelo em escala se utilizam critérios de similaridade para determinar as condições de operação do mesmo. Para se determinar valores de parâmetros tais como a taxa de injeção de gás e o diâmetro dos orifícios, é realizada uma análise dimensional com base em variáveis que afetam o processo, e aplicando-se o teorema π de Buckingham, encontram-se os números adimensionais relevantes ao processo, enquanto para a determinação do diâmetro dos bicos de injeção de gás, o número de Froude modificado é comumente usado (Seshadri e Costa, 1986). Os números adimensionais relevantes ao processo são apresentados no tópico 4 (Materiais e Métodos).

3.2.1 Avaliação da taxa de circulação via modelagem física

Como dito previamente, a taxa de circulação, definida como a quantidade de líquido (água, neste caso) que passa pela seção transversal da perna de descida por unidade de tempo, geralmente é medida em L/min, kg/s ou t/h. Devido a sua importância para a caracterização do fluxo em um reator RH, diferentes métodos têm sido utilizados para medir a taxa de circulação: Zheng e Zhu (2016), Mukherjee *et al.* (2017) utilizaram instrumentos para avaliar a velocidade na perna de descida; Seshadri e Costa (1986), Seshadri *et al.* (2006), Silva *et al.* (2004), Tavares *et al.* (2008), entre outros, aplicaram o método da condutivimetria; Lin *et al.* (2012), Zhu *et al.* (2016b), Li *et al.* (2016) utilizaram um medidor de vazão por onda ultrassônica instalado na perna de descida.

Conforme Figura 3.3(a), um tubo com um barômetro digital conectado na parte inferior da perna é usado para medir a queda de pressão. De acordo com o princípio de Bernoulli, a velocidade da água na perna de descida é obtida a partir da queda de pressão alcançada na parte inferior da perna e, por sua vez, a vazão de água é determinada conhecendo-se a área da seção transversal da perna de descida (MUKHERJEE *et al.*, 2017). Para se evitar interferência no perfil de velocidades como resultado do contato direto de sondas com o líquido (água), a taxa de circulação pode ser obtida por um medidor de vazão de onda ultrassônica, que é instalado na perna de descida como mostrado na Figura 3.3(b) (ZHU *et al.*, 2016b).

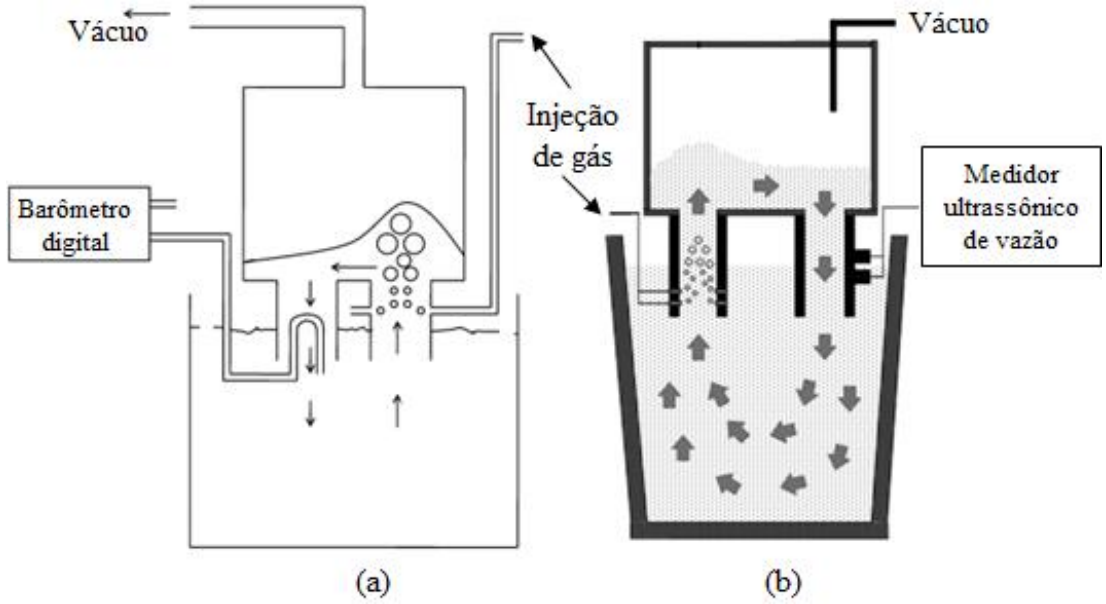

Figura 3.3 – Diagrama esquemático do modelo físico do desgaseificador RH com: (a) medição de velocidade na perna de descida (MUKHERJEE *et al.*, 2017); (b) medidor de vazão por ondas ultrassônicas (ZHU *et al.*, 2016b).

Desta forma, a influência dos diversos parâmetros sobre a taxa de circulação de líquido no reator RH tem sido largamente investigada. Utilizando um modelo físico em escala de 1:3 para um reator RH de 160t a 170t, Mukherjee *et al.* (2017) avaliaram o efeito da vazão de gás e da profundidade de imersão das pernas sobre a taxa de circulação. Conforme Figura 3.4, estes autores observaram que o aumento da profundidade de imersão resultou em aumento considerável da taxa de circulação, mas não explicaram o motivo da redução quando a vazão de gás alterou de 12L/min para 24L/min. Em um modelo físico em escala 1:5, Vargas (2000) também observou que a taxa de circulação aumentou quando a profundidades de imersão das

pernas passou de 60mm para 90mm, porém quando passou de 90mm para 120mm o efeito sobre a taxa de circulação foi menos pronunciado.

Em um modelo físico em escala 1:4, Lin *et al.* (2012) observaram elevação dos valores de taxa de circulação com o aumento da vazão de gás, com o aumento do diâmetro da perna de subida e com a diminuição do diâmetro interno dos bicos de injeção de gás (Figura 3.5b). Em relação ao diâmetro dos bicos de injeção, Tavares *et al.* (2008) haviam observado efeito inverso sobre a taxa de circulação, conforme Figura 3.5(a). Isto pode ser justificado em função dos níveis de vazão adotados por cada autor e o diâmetro da perna de subida. Tavares *et al.* (2008) utilizaram um modelo com 12 bicos e diâmetro interno da perna de 120mm, enquanto o modelo de Lin *et al.* (2012) possuía 16 bicos e diâmetro interno da perna igual a 187,5mm. Desta forma, nos níveis de vazão adotados para cada trabalho, a velocidade do gás na saída dos bicos é consideravelmente maior no trabalho de Tavares *et al.* (2008), e os próprios autores relatam que com os bicos de 1mm, a pluma gasosa tende a se concentrar nas regiões centrais da perna, deixando uma área próxima à parede praticamente sem passagem de gás. Conforme o diâmetro do bico aumenta, a pluma é distribuída de maneira mais uniforme ao longo da seção transversal da perna, particularmente em elevadas vazões, resultando em aumento da taxa de circulação.

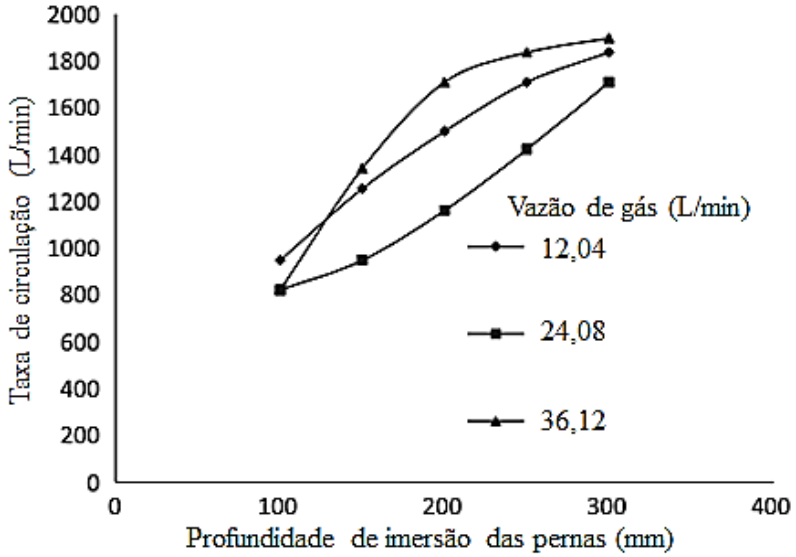

Figura 3.4 – Influência da profundidade de imersão das pernas sobre a taxa de circulação de água para diferentes vazões de gás (MUKHERJEE *et al.*, 2017).

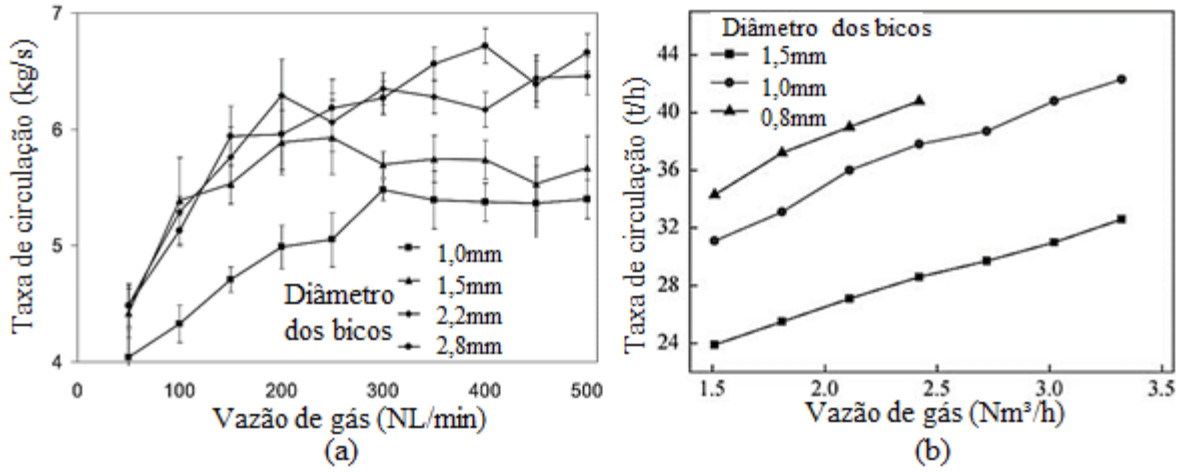

Figura 3.5 – Efeitos do diâmetro do bico de injeção sobre a taxa de circulação: (a) Tavares *et al.* (2008); (b) Lin *et al.* (2012).

Por outro lado, devido às menores vazões de gás e maior diâmetro da perna de subida no modelo físico do trabalho de Lin *et al.* (2012), a redução do diâmetro dos bicos de injeção de gás inerte na perna de subida implica em aumento da profundidade de penetração do gás e distribuição de bolhas mais uniformes no interior da perna, resultando em elevação da taxa de circulação. Ressalta-se ainda que devido aos maiores valores de vazão de gás, para um determinado diâmetro dos bicos, Tavares *et al.* (2008) observaram que a taxa de circulação permanece aproximadamente constante ou mostra uma leve tendência de redução acima de uma determinada vazão de gás, isto é, a vazão de gás atingiu o valor de saturação (figura 3.5a) conforme sugerido anteriormente por Park *et al.* (2000).

O efeito da obstrução dos bicos de injeção de gás inerte pela perna de subida sobre a taxa de circulação também foi avaliado através de modelamento físico. Silva *et al.* (2004) afirmaram que o bloqueio de bicos em si não é um problema crítico se for possível manter a taxa de circulação do aço aumentando a injeção de gás, medida compensatória que pode ser praticada até uma vazão limite de gás. Porém, estes autores observaram que condições de obstrução do tipo assimétrica podem resultar em redução de 50% na taxa de circulação. Lin *et al.* (2012) relacionaram este efeito negativo de obstruções assimétricas à distribuição não uniforme de gás na perna de subida. No caso de bloqueios simétricos, a penetração do fluxo gasoso é maior do que em casos de não obstrução, o que evita a queda significativa da taxa de circulação do aço.

Outros trabalhos avaliaram a influência do formato das pernas RH, que pode ser com formato circular ou oval, como inicialmente proposto por Kuwabara *et al.* (1988), e apresentado recentemente nos trabalhos de Ling *et al.* (2016a) e Luo *et al.* (2018). Estes trabalhos relatam um aumento da taxa de circulação ao se utilizar as pernas ovais, devido ao aumento da área da seção transversal da perna.

3.2.2 Tempo de misturamento no modelo físico do reator RH

Park *et al.* (2000) ressaltam que as medidas de tempo de mistura num reator real são demoradas e dispendiosas, além do problema da contaminação do banho pelo material do traçador. No modelo físico, de modo geral, o método consiste em injetar um pulso de solução salina (NaCl ou KCl) próximo à perna de subida ou na câmara de vácuo e monitorar a condutividade da água em um ou mais pontos na panela (MUKHERJEE *et al.*, 2017; ZHU *et al.*, 2018; LUO *et al.*, 2018). Outros experimentos já foram realizados utilizando-se o método da reação de descoloração, Figura 3.6 (YOSHITOMI *et al.*, 2016), e comparados com resultados do método da condutivimetria.

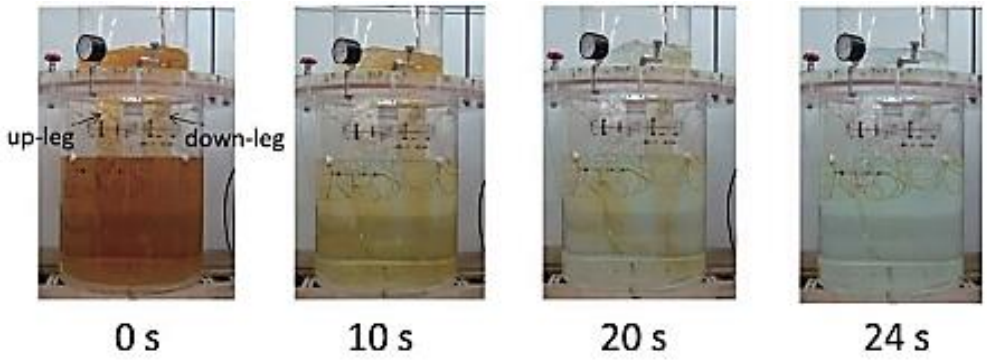

Figura 3.6 – Variação da coloração do líquido em função do tempo em um modelo físico de 85L de um reator RH; vazão de gás $4{,}17 \times 10^{-4}$ m³/s (YOSHITOMI *et al.*, 2016).

Silva *et al.* (2004) notaram considerável diferença em relação aos resultados de taxa de circulação obtidos por medições de condutividade realizadas na perna de descida e medições de condutividade tomadas em três diferentes níveis dentro da panela. Eles afirmam que para avaliar os fenômenos de homogeneização, esse aspecto (posição do sensor) deve ser levado em

consideração quando se compara o tempo de misturamento em forno panela com o misturamento no reator RH ou outras classes de reatores.

Zhang e Li (2014) destacam que o tempo de mistura é sempre relatado como valor único para o processo de desgaseificação de RH sob certas condições operacionais. No entanto, a condição de mistura na panela e mesmo na câmara de vácuo deve depender da localização, de modo que o tempo de mistura seja um valor local, mas não um único valor fixo em toda a panela ou câmara de vácuo. Estes autores encontraram tempos de mistura geralmente de três a quatro vezes o tempo de recirculação, e quando o tempo de mistura é informado, o local onde o tempo de mistura foi medido deve ser claramente mencionado. O tempo de mistura (τ) foi ajustado por uma função de potência do poder de agitação (ξ), resultando em $\tau \sim \xi^{-0,42}$.

Luo *et al.* (2018) também observaram que o tempo de mistura foi fortemente dependente da posição de medida, para os sete pontos avaliados na seção central da panela no modelo físico. Utilizando a perna de descida em formato oval o tempo de mistura foi mais longo do que aquele com a perna circular, devido à menor taxa de dissipação turbulenta no RH utilizando perna oval. Estes autores concluíram que o tempo de mistura está intimamente relacionado com a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta local (ε), e por regressão matemática dos dados do modelo físico, chegaram a função de potência $\tau = 30,63\varepsilon^{-0,368}$.

3.2.3 Caracterização do padrão de fluxo em modelo físico de RH

A técnica PIV tem sido aplicada para medir valores de velocidade do líquido em modelos físico do reator RH (ZHANG e LI, 2014; LING *et al.*, 2016a e 2016b; LUO *et al.*, 2018). Ling *et al.* (2016a e 2016b) mediram o perfil de velocidades na panela de um modelo físico em escala 1/5 de um reator RH de 210t utilizando esta técnica e utilizaram os valores de velocidade para validar o modelo matemático CFD em 3D (Figura 3.7).

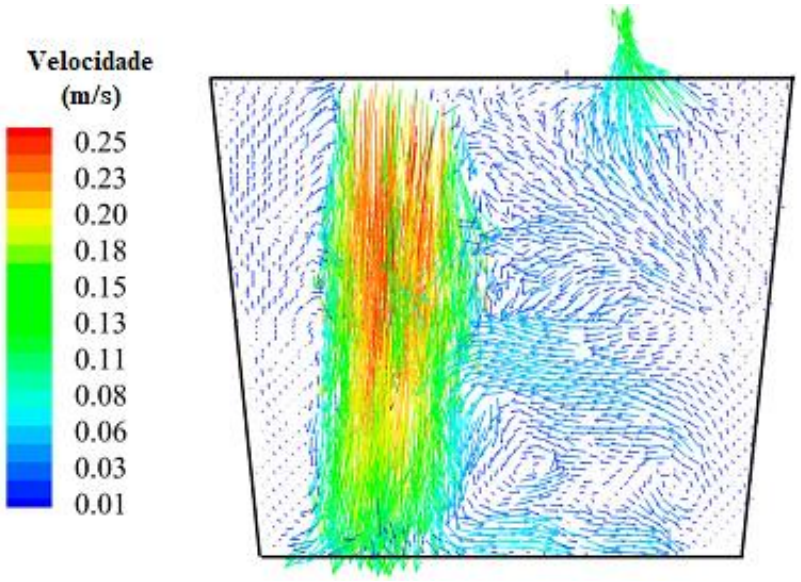

Figura 3.7 – Campo de velocidade na seção transversal da panela obtido via técnica PIV com vazão de gás de 20L/min (LING *et al.*, 2016a).

Zhang e Li (2014) utilizaram esta técnica para avaliar as características turbulentas do fluxo a partir das medidas de velocidade instantânea no interior da câmara de vácuo e na região da panela logo abaixo das pernas do reator RH. Para a vazão de gás de 24L/min, a energia cinética turbulenta média foi de $6{,}0x10^{-3}m^2/s^2$ na câmara de vácuo e de $1{,}54x10^{-3}m^2/s^2$ na panela, indicando que a etapa de controle da mistura e da dispersão durante o tratamento do aço no reator RH é na panela. Luo *et al.* (2018) também avaliaram a energia cinética turbulenta (k) e dissipação de energia cinética turbulenta (ε) a partir das medidas de velocidade instantânea obtidos pela técnica PIV. De acordo com a distribuição da velocidade medida no modelo físico, os valores k e ε foram calculadas em cada instante de tempo, e o valor médio para 50 imagens (tempo total de 26s) é apresentado na Figura 3.8 como um mapa de cores. Nota-se que a turbulência é consideravelmente maior na câmara de vácuo comparativamente à panela, e que os valores k e ε são na câmara de vácuo são maiores próximo a perna de subida e baixos próximo a perna de descida, ocorrendo a situação inversa na panela.

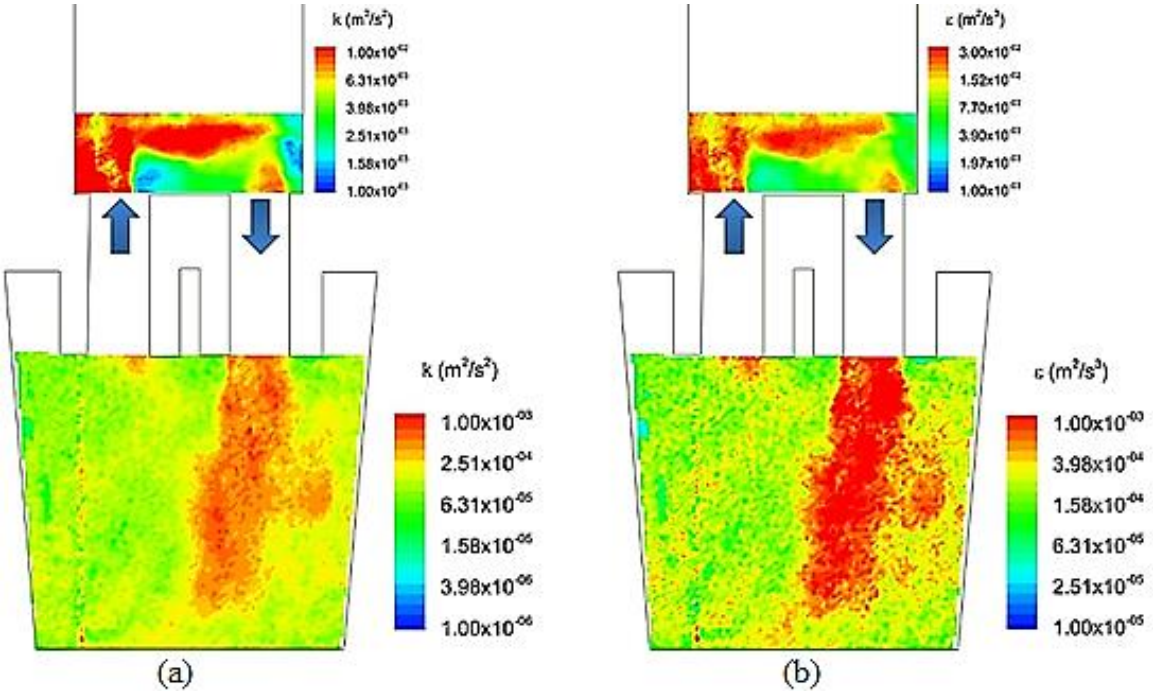

Figura 3.8 – Valores médios de parâmetros de turbulência* por unidade de massa: (a) energia cinética turbulenta; (b) taxa de dissipação turbulenta. *Calculados a partir de valores de velocidade instantânea medidos pela técnica PIV, vazão de gás de 20L/min (LUO *et al.*, 2018).

Zhang e Li (2014) ilustraram o padrão de fluxo na panela pela dispersão de solução de $KMnO_4$ e observaram que aumento da vazão de gás encurtou o tempo de espalhamento da tinta. Li *et al.* (2016) utilizaram a injeção de tinta para explicar o processo de mistura no interior da panela, dividindo o fenômeno de mistura em três regiões e corroborado com a análise de concentração de traçador em função do tempo. O padrão de fluxo de fluido também foi observado por Zhu *et al.* (2018) utilizando dispersão de tinta azul no modelo. Os padrões de fluxo de tinta na câmara de vácuo e panela, como apresentado na Figura 3.9, validaram o comportamento observado nos resultados de simulação numérica, mais significativamente, a existência das zonas de vórtice na panela.

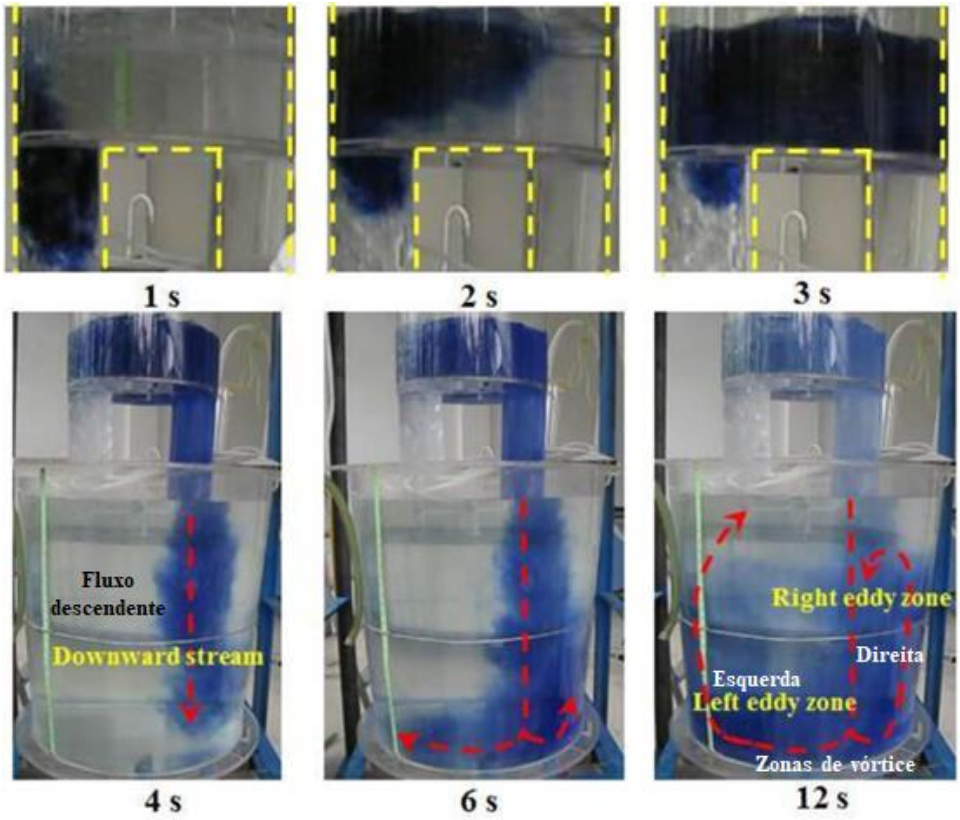

Figura 3.9 – Dispersão de traçador em modelo físico de reator RH, com vazão de gás de 2,63m³/h (ZHU *et al.*, 2018).

3.3 Modelamento Matemático do Desgaseificador RH

A fluidodinâmica computacional (CFD – *Computational Fluid Dynamics*) tem sido aplicada para simulação de escoamento bifásico no reator RH, dada sua capacidade de fornecer uma grande quantidade de informações sobre o sistema, com considerável rapidez e custos relativamente baixos. Neste sentido, é necessário o entendimento das simplificações formuladas para utilização adequada do modelamento matemático, uma vez que os resultados são influenciados diretamente por simplificações inerentes dos métodos numéricos.

Segundo Morales (2008), os modelos monofásicos (modelos da panela do reator RH considerando apenas o fluxo de líquido) foram utilizados por muito tempo para avaliar o escoamento do aço e o fenômeno de mistura no interior da panela do reator RH, sendo que apenas nos anos 2000 surgiram os primeiros modelos bifásicos. A abordagem pseudo-bifásica, como nos trabalhos de Miki *et al.* (1997) e Park *et al.* (2000), foi o passo intermediário entre

estes modelos. De acordo com Morales (2008), o primeiro trabalho a considerar um modelo bifásico para o reator RH foi Wei e Hu (2005).

De modo geral, a validação do modelo matemático é feita pela comparação com modelo físico (taxa de circulação, perfis de velocidade, tempo de mistura, entre outras variáveis) ou com resultados industriais de tempo de mistura e/ou taxa de circulação. Devido às diversas dificuldades enfrentadas para se obter resultados industriais de padrão de fluxo e de valores locais de velocidade, estas variáveis são avaliadas em modelos a frio.

A Tabela 3.2 apresenta resumidamente alguns trabalhos mais recentes sobre simulação matemática do reator RH. O modelo k-ε tem sido o modelo mais empregado nesses trabalhos. As características mais particulares e os resultados mais relevantes de alguns trabalhos são discutidos nos tópicos seguintes.

3.3.1 Análise de parâmetros operacionais via simulação matemática

Tsujino *et al.* (1989) investigaram os efeitos da taxa de circulação, do diâmetro das pernas e da distância entre as pernas sobre o escoamento do aço e na distribuição de um traçador a partir de um modelo matemático monofásico e tridimensional. Os autores observaram melhores condições de homogeneização para maiores taxas de circulação e maiores diâmetros das pernas, enquanto a influência das diferentes posições das pernas não foi significativa.

Kato *et al.* (1993) desenvolveram um modelo de descarburação do aço em conjunto com o fluxo de fluido através de cálculos hidrodinâmicos na panela do reator RH. O perfil de velocidades calculado para a panela foi similar ao padrão de fluxo observado em modelo físico em escala 1:5.

Tabela 3.2 – Resumo de algumas simulações matemáticas de reatores RH.

Ref.	Progra-ma	Caracte-rísticas	Regime	Forças de interação	Foco do trabalho
Morales 2008	CFX 11.0	Comparou modelos k-ε e k-ω	Estacionário (falso transiente)	Várias combinações	Previsão de taxa de circulação e forças de interação interfásicas
Kishan e Dash (2009)	Fluent 6.3	Modelo k-ε	Passo de tempo = 0,0001s	C_D = função de Reynolds; C_{VM}=0,5	Número e profundidade de imersão das pernas
Silveira (2011)	CFX 11	Modelo k-ε	Estacionário (dispersão de traçador - transiente)	C_D= Grace e F_{TD} = Lopez de Bertodano	Diâmetros dos bicos e injeção de gás na base da câmara de vácuo
Geng *et al.* (2010)	CFX 5.7	Modelo k-ε	Estacionário	C_D= Schiller-Naumann; C_{VM} = 0,5	Penetração e distribuição de gás na perna de subida
Geng *et al.* (2012a-b)	CFX 12.1	Modelo k-ε	Estacionário – (transiente - remoção de inclusão e descarburação)	C_D = função do número de Reynolds	(2012a): efeito de campo magnético (2016b): injeção de gás no fundo da panela
Zhang *et al.* (2014)	CFX 11.0	Modelo k-ε	Estacionário – (transiente - descarburação)	Somente C_D	Descarburação do aço
Barral (2016)	CFX	Modelo k-ε	Estacionário	C_D= Grace	Modelos de quebra e coalescência de bolhas
Ling et al. (2016a-b)	Fluent 14.0	Modelos VOF e DPM acoplados	Passo de tempo = 0,001s	C_D; C_L=0,1; C_{VM}=0,5	(2016a): formato das Pernas (2016b): número de bicos de injeção (4, 6 ou 8)
Zhu *et al.* (2016b)	Fluent 14.0	Modelo de Euler	ND*	C_D = 0,05	Efeito da obstrução dos bicos
Chen *et al.* (2016)	Fluent	Abordagem Euler-Euler	ND*	C_D= Schiller-Naumann; C_L= C_{VM}= 0,5	Expansão das bolhas de argônio; forças de interação interfásicas
Chen *et al.* (2017)	Fluent	Modelos VOF e DPM acoplados	Passo de tempo = 0.0025s	Somente C_D	Superfície livre na câmara de vácuo
Zhu *et al.* (2018)	CFX16.2	Modelo k-ε	Estacionário (dispersão de traçador - transiente 0,001s)	C_D= Grace e F_{TD} = média favre de F_D	Otimizar ponto de amostragem na panela
Luo *et al.* (2018)	Fluent 17.0	Modelos VOF e DPM acoplados	Passo de tempo 0,001s	C_D; C_L=0,1; C_{VM}=0,5	Formato das Pernas e tensão de cisalhamento nas paredes

Onde: *ND – Não disponível; Coeficientes de: C_D – força de arraste; C_L – força de sustentação; C_{VM} – força de massa virtual.

O comportamento das inclusões no desgaseificador a vácuo RH foi avaliado em simulações matemáticas desenvolvidas por Shirabe *et al.* (1983) e Miki *et al.* (1997). Shirabe *et al.* (1983) consideram os mecanismos de flotação e coalescimento das inclusões não metálicas; enquanto Miki *et al.* (1997) também levaram em consideração o mecanismo de remoção via aderência ao trem de bolhas de argônio. Estes autores constataram que o desgaseificador RH é eficiente na remoção de inclusões maiores que 5μm, principalmente através dos mecanismos de colisão e posterior flotação e de aderência as bolhas. Porém, nestes trabalhos não foi apresentada nenhuma validação.

Geng *et al.* (2012a) utilizaram simulação matemática para investigar a influência da aplicação de campo magnético sobre o fluxo de aço no reator RH. Estes pesquisadores concluíram que para aumentar taxa de circulação e encurtar o tempo de mistura, a medida mais eficaz é aplicar o campo magnético em torno da perna de subida, e como segunda opção, pode-se aplicar o campo magnético ao redor da perna de descida se a vazão de gás for menor do que o valor de saturação (a partir do qual a taxa de circulação não cresce mais com o aumento da vazão). A aplicação do campo magnético pode acelerar a taxa de descarburação durante o processo, mas não reduz a concentração final de carbono que pode ser alcançada pelo processo. Para melhorar a remoção de inclusões, deve-se aplicar o campo magnético ao redor das duas pernas (descida e subida). Geng *et al.* (2012b) encontraram que a injeção de gás através de plugue no fundo da panela pode aumentar a taxa circulação e melhorar a eficiência de mistura no desgaseificador RH.

Zhang *et al.* (2014) avaliaram a descarburação do aço no desgaseificador de RH com base em uma comparação entre resultados de simulação matemática e dados industriais, e verificaram que o teor final de carbono do aço é influenciado pelos seguintes fatores, em ordem decrescente: diâmetro interno da perna, teor inicial de oxigênio, vazão de gás na perna de subida e teor inicial de carbono. Neste sentido, estes autores afirmaram que o aumento do diâmetro das pernas favorece a descarburação de forma eficaz, pelo aumento da taxa de circulação e da velocidade de reação, e, portanto, é essencial otimizar este parâmetro para obter a máxima eficiência de refino e melhorar a produtividade do processo.

Por meio de simulação matemática utilizando o Fluent®, os trabalhos de Ling *et al.* (2016a) e Luo *et al.* (2018) relatam além do aumento da taxa de circulação uma redução na tensão de cisalhamento nas paredes da panela e das pernas ao se utilizar pernas de formato oval. Esta redução na tensão de cisalhamento das paredes pode ser relacionada à diminuição da erosão do material refratário, e consequente aumento da vida útil do reator.

Segundo Zhu *et al.* (2016b), a obstrução de bicos é um problema recorrente em reatores RH, causado principalmente pelo desgaste de refratários na zona de injeção. Essa complicação afeta principalmente a distribuição do fluxo de gás e de velocidades do aço líquido, o que pode reduzir a taxa de circulação do aço. A partir de simulação matemática de um reator com 12 bicos de injeção de gás, estes autores testaram uma série de combinações de obstruções de bicos com intuito de observar a variação da taxa de circulação do líquido, bem como comportamento do fluxo e distribuição do gás. Então, propuseram que o número de bicos obstruídos tem grande influência sobre a taxa de circulação: a partir de 3 bicos obstruídos (25% do total) a taxa de circulação apresenta maior queda, sendo recomendada a manutenção do equipamento (troca da perna de subida).

Utilizando a abordagem Euler-Euler, Feng *et al.* (2017) investigaram o sistema de lanças duplas de injeção de pó (dessulfurante ou desfosforante) na câmara de vácuo que é utilizado para melhorar a eficiência das reações de refino do aço líquido no reator RH, Figura 3.10. Foram simuladas diferentes posições das lanças e vazões de gás de transporte do pó. Estes pesquisadores observaram que, com o aumento da vazão de gás de transporte de pó, a taxa de circulação e o tempo médio de residência do traçador aumentaram. Também se verificou que existe uma localização ótima das lanças de injeção, que maximiza o tempo de residência do material e pode aprimorar o efeito sobre o refino do aço.

Dada a grande importância da localização do ponto de amostragem para que a amostra seja representativa do processo de refino, Zhu *et al.* (2018) utilizaram modelamento físico e matemático para avaliar a dispersão de traçador no interior da panela do reator RH. A partir da análise da curva de concentração do traçador, o processo de mistura do aço líquido em diferentes posições da panela foi caracterizado. Então, comparando e analisando três parâmetros desta curva, Zhu *et al.* (2018) recomendaram que o ponto localizado no plano de simetria vertical do

reator RH, entre a perna de descida e a parede da panela a cerca de 350mm de profundidade, é o melhor local para amostragem do aço, pois irá garantir a homogeneidade representativa da amostra e que o aço atende às especificações de composição química antes de finalizar o processo de refino no reator RH. Apesar deste ponto ser caracterizado como região de "zona morta", estes autores argumentaram que este ponto possui a menor velocidade de alteração da composição química, tornando-o representativo de toda a panela de aço para alcançar uma composição final dentro das especificações. Resultados industriais da concentração de carbono em aço IF *(Interticial Free*) validaram os resultados observados na simulação matemática.

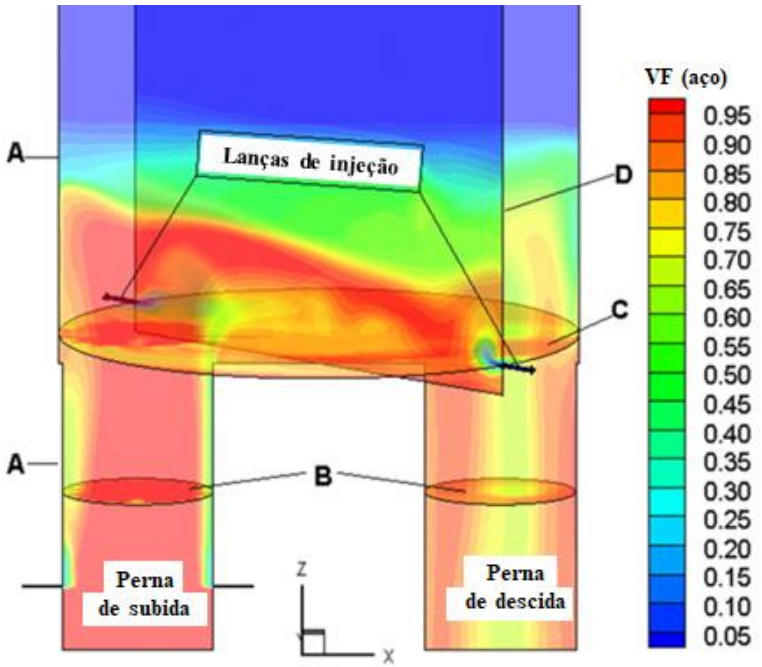

Figura 3.10 – Fração volumétrica (VF) de aço no vaso de RH em vários planos, onde: Seção A – Y = 0; Seção B – Z = 0,8m; Seção C – Z = 1,6m e Seção D – plano da seção transversal vertical que passa pelas duas lanças de injeção de pó (FENG *et al.*, 2017).

3.3.2 Modelos de transferência de momento interfásico

Existem diferentes modelos de interação entre duas fases e tipos de forças de não-arraste que podem ser empregados para prever a interação gás/líquido em simulações matemáticas (CHEN *et al.*, 2016). Para prever o fluxo de líquido no interior do reator RH, os programas de simulação CFD resolvem numericamente as equações de conservação de quantidade de movimento de

cada fase, água e ar (forma turbulenta das equações de Navier-Stokes), nas três direções cartesianas (x, y e z), conforme Equação (3.8):

$$\frac{\partial(\alpha_i \rho_i \vec{u}_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_i \rho_i \, \vec{u}_i \vec{u}_i) = -\alpha_i \nabla \mathrm{p} + \nabla \cdot \left[\alpha_i (\mu_l + \mu_{l,t})(\nabla \vec{u}_i + (\nabla \vec{u}_i)^T)\right] + \alpha_i \rho_i \vec{g} + \vec{F}_i \quad (3.8)$$

Onde: μ_l – viscosidade do líquido; α_i, ρ_i e u_i são, respectivamente, fração volumétrica, densidade e velocidade da fase líquida (i=l) e gasosa (i=g); $\mu_{l,t}$ - viscosidade turbulenta do líquido, determinada pelo modelo de turbulência, p – pressão, e $\vec{F}_i$ – força de interação entre as duas fases (Equação 3.9):

$$\vec{F}_l = -\vec{F}_g = \vec{F}_D + \vec{F}_L + \vec{F}_{VM} + \vec{F}_{TD} + \vec{F}_{WL} \quad (3.9)$$

Onde: $\vec{F}_D$ – força de arraste; $\vec{F}_L$ – força de sustentação; $\vec{F}_{VM}$ – força de massa virtual e $\vec{F}_{TD}$ – força de dispersão turbulenta; $\vec{F}_{WL}$– força de lubrificação da parede.

O funcionamento do reator RH, assim como o de diversos outros equipamentos siderúrgicos de refino secundário, se baseia nas iterações entre o gás e o líquido. Desta forma, torna-se necessário modelar adequadamente a transferência da quantidade de movimento provocado pelo gás no líquido, alcançando similaridade ao processo real (SILVEIRA, 2011). Neste sentido, as forças de interação devem ser avaliadas para melhorar a previsão do comportamento bolhas/líquido. A Figura 3.11 representa esquematicamente a ação destas forças sobre as bolhas de gás no interior da perna de subida do reator RH, e uma breve descrição destas forças é realizada a seguir.

- Força de arraste (F_D): para o fluxo multifásico em agitação gasosa no reator RH, a força de arraste tenderá a diminuir a velocidade da bolha e acelerará o líquido envolvente devido à dissipação viscosa. Geralmente, a força de arraste (Equação 3.10) é a contribuição dominante para as forças de interação (CHEN *et al.*, 2016):

$$\vec{F}_D = C_D \frac{3\alpha_g \alpha_l \rho_l}{4 d_g} \left|\vec{u}_g - \vec{u}_l\right| \left(\vec{u}_g - \vec{u}_l\right) \quad (3.10)$$

Onde: d_g – diâmetro da bolha de gás; C_D é o coeficiente de arraste. Não há um valor universal para tal coeficiente, existindo diversas correlações para seu cálculo, cada qual possuindo uma aplicabilidade distinta – dependendo da deformação das bolhas, fração volumétrica de gás, entre outras coisas (SILVEIRA, 2011).

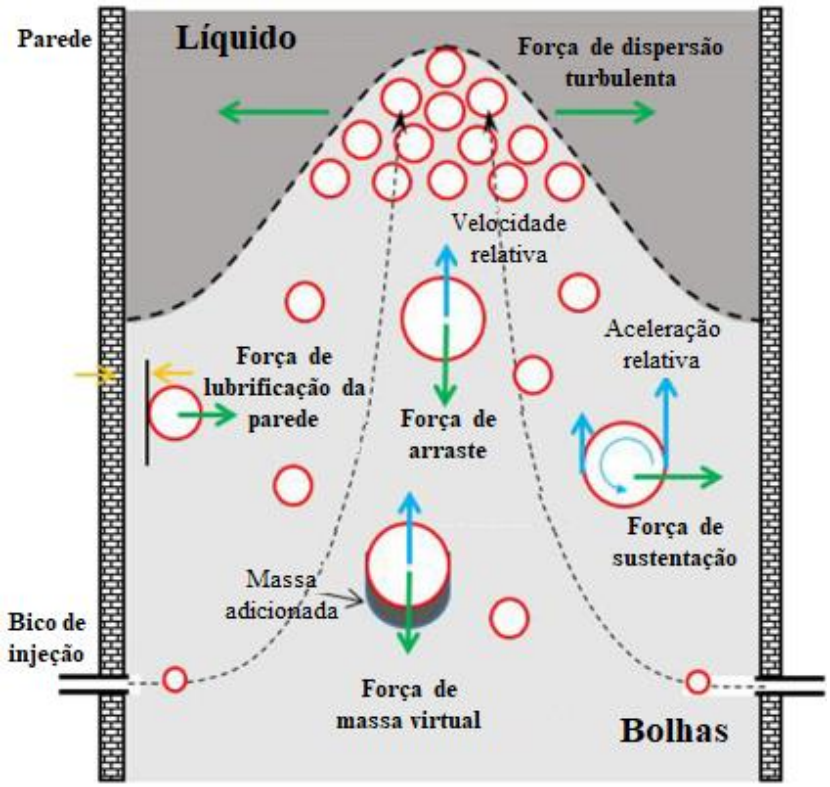

Figura 3.11 – Ilustração das forças de interação interfásicas na perna de subida do reator RH (ZHU *et al.*, 2017).

- Força de sustentação (F_L): é causada principalmente pela existência de um gradiente de velocidade ocasionado pela diferença de pressão em ambos os lados da bolha, o qual é perpendicular à direção do fluxo principal (CHEN *et al.*, 2016). A força de sustentação é proporcional a velocidade relativa entre as fases e a vorticidade local do líquido (SICORSKI, 2006):

$$\vec{F}_L = -C_L \rho_l \alpha_g (\vec{u}_g - \vec{u}_l) \times (\nabla \times \vec{u}_l) \tag{3.11}$$

Onde C_L é o coeficiente de sustentação, que para o fluxo viscoso, varia de 0,01 a 0,5 de uma forma que é apenas parcialmente compreendida (CFX *theory guide*).

- Força de massa virtual (F_{VM}): também chamada de força de massa adicionada, o efeito de massa virtual pode ocorrer quando uma bolha acelera em relação ao líquido, que pode ser definida da seguinte forma (CHEN *et al.*, 2016):

$$\vec{F}_{VM} = C_{VM}\rho_l\alpha_g\left(\frac{d_l\vec{u}_l}{\partial t} - \frac{d_g\vec{u}_g}{\partial t}\right) \tag{3.12}$$

Onde: C_{VM} é o coeficiente de massa virtual, e possui um valor de 0,5 para o fluxo invíscido em torno de uma esfera isolada. Em geral, depende da forma e da concentração das bolhas, e deve ser especificado (CFX *theory guide*).

- Força de dispersão turbulenta (F_{TD}): pode agir na bolha devido à flutuação de turbulência do líquido (CHEN *et al.*, 2016). O modelo baseado na média de Favre (ou média ponderada pela massa) da força de arraste é o mais indicado nas situações onde não se conhece um valor apropriado para o coeficiente de dispersão turbulenta, C_{TD} (CFX *theory guide*), conforme Equação (3.13):

$$\vec{F}_{TD} = -C_{TD}C_{cd}\frac{\upsilon_l}{\sigma_{lg}}\left(\frac{\nabla\alpha_g}{\alpha_g} - \frac{\nabla\alpha_l}{\alpha_l}\right) \tag{3.13}$$

Onde C_{TD}, valor padrão igual a 1; C_{cd} é o coeficiente de transferência de momento para a força de arraste; υ_l é o volume específico de líquido; σ_{tc} é o número de Schmidt turbulento, usualmente igual a 0,9; (CFX *theory guide*).

- Força de lubrificação da parede (F_{WL}): em um tubo vertical, o fluxo de subida de bolhas tende a se concentrar numa região próxima à parede, mas não imediatamente adjacente à parede do tubo (CFX *theory guide*). O modelo de Frank para a força de lubrificação tem sido utilizado para modelar este efeito, que tende a afastar a fase dispersa (ar) para longe das paredes (ZHU *et al.*, 2017), conforme Equação (3.14):

$$F_{WL} = C_{WL}\rho_l\alpha_g\left|U_l - U_g\right|^2 n_w \quad (3.14)$$

Onde: C_{WL} é o coeficiente da força de lubrificação, dado pelo modelo de Frank; n_w = distância normal da parede; U_l-U_g = diferença de velocidade entre as fases, em um plano normal a n_w próximo a parede. Ressalta-se que esta força atua apenas em uma camada adjacente à parede, até uma certa distância dada pelo modelo adotado e que é função do diâmetro das bolhas (CFX *theory guide*).

A força de arraste sempre existe quando uma bolha de gás se move em relação ao líquido, desempenhando um papel essencial na determinação do fluxo multifásico (CHEN *et al.*, 2016). No entanto, a influência de forças de não-arraste (força de sustentação, de massa virtual, de dispersão turbulenta e de lubrificação das paredes) podem também ser importantes para descrever com maior fidelidade as características do escoamento multifásico. A seguir são apresentados e discutidos os resultados de alguns trabalhos referentes ao uso destas forças.

3.3.3 Influência das forças de interação entre as fases líquidas e gasosas

Sicorski (2006) avaliou diferentes valores dos coeficientes das forças de interação líquido-bolha para desenvolver seu modelo numérico de uma panela de aciaria, utilizando o CFX 5.7. A simulação foi validada com resultados de modelo físico. O coeficiente da força de massa virtual foi 0,05, enquanto o coeficiente da força de sustentação ficou entre 0,05 e 0,3, e o coeficiente da força de dispersão turbulenta ficou entre 0,1 e 0,9, dependendo da vazão de gás injetado no fundo da panela.

Kishan e Dash (2006) introduziram, nas equações de conservação de massa e momento, as forças de arraste, de sustentação (C_L = 0,5) e de massa virtual (C_{VM} = 0,5) utilizando termos-fonte adequados no programa Fluent 6.1. O modelo numérico bifásico foi capaz de prever a taxa de circulação para várias vazões de gás dentro de 15% de precisão em comparação com resultados experimentais.

Morales (2008) avaliou a influência do modelo de turbulência (modelos k-ε e k-ω), coeficientes da força de arraste (modelo de Grace e de Ishii-Zuber) e forças de não-arraste (massa virtual,

sustentação e dispersão turbulenta), comparando seus resultados numéricos com dados da literatura. O modelo k-ε proporcionou maior concordância com os resultados experimentais, principalmente da distribuição de gás na perna de subida. Porém, não observou diferenças significativas nos resultados em função das diferentes combinações de força de interação (arraste e não-arraste) e em todos os casos, a taxa de circulação obtida na simulação diferiu dos valores experimentais.

Geng *et al.* (2010) realizaram simulações matemáticas de um reator RH (sistema aço/argônio) e adotaram C_{VM} = 0,5 para a força de massa virtual, observando que para vazões mais baixas de gás (200NL/min) as bolhas de gás concentram-se perto da parede; com o aumento do fluxo de gás, as bolhas de gás podem atingir o centro da perna de subida (a 200NL/min). Notaram ainda existir uma vazão crítica, a partir da qual a taxa de circulação decrescerá com o aumento da vazão de gás. Afirmaram ainda que, devido à grande aceleração relativa existente entre o líquido e as bolhas de gás na zona de injeção da perna de subida, a força de massa virtual não pode ser desprezada em simulações matemáticas do reator RH. Os valores de C_{VM} = 0,5 para a força de massa virtual e C_L = 0,1 para força de sustentação foram adotados em simulações matemáticas de um reator RH considerando o sistema água/ar (modelo físico, LING *et al.*, 2016b) e o sistema aço/argônio (LING *et al.*, 2016a). Em ambos os trabalhos se nota considerável penetração do gás na perna de subida, que aumenta em função da vazão de gás injetado.

No trabalho de Silveira (2011), os modelos de transferência de quantidade de movimento entre as fases líquida e gasosa foram o modelo de arraste de Grace, com um expoente de correção da fração de volume igual a 2 e o modelo proposto por Lopez de Bertodano para a força de dispersão turbulenta com C_{TD} = 0,3. As taxas de circulação previstas pelo modelo matemático de escoamento bifásico para as diferentes vazões de gás foram próximas dos valores determinados no modelo físico, porém a penetração das plumas de gás no interior da perna de subida prevista pelo modelo matemático foi inferior à que foi observada no modelo físico, principalmente na região da zona de injeção.

Por outro lado, Neves (2012) e Neves e Tavares (2017) avaliaram diferentes valores dos coeficientes das forças de não-arraste (F_L, F_{WL} e F_{TD}) e sua influência sobre a previsão da taxa

de circulação, sobre a dispersão e penetração das bolhas (fração volumétrica de gás) em modelo físico do reator RH. Suas análises mostraram que para validar o modelo matemático foi necessário utilizar diferentes combinações de força de não-arraste, sendo o coeficiente da força de sustentação igual 0,1 e os coeficientes da força de lubrificação C1= -0,010 e C2 = 0,050, enquanto o coeficiente da força de dispersão turbulenta variou em função da vazão de gás - C_{TD} = 0,1 para 100L/min e 200L/min, C_{TD} = 0,5 para 300L/min e C_{TD} = 1 para 400L/min e 500L/min.

Neves (2012) analisou o comportamento do gás na perna de subida utilizando apenas um, dois ou quatro bicos de injeção de gás, conforme Figura 3.12. Com a utilização das forças de não-arraste, o autor notou uma leve melhoria na penetração e uma maior dispersão da fase gasosa no interior da perna de subida na região de encontro da pluma, sendo que o emprego da força de lubrificação das paredes contribuiu para afastar o gás das paredes, porém de forma pouco pronunciada. No entanto, os resultados do modelo físico não foram completamente representados pela simulação, e o gás concentrou-se nas regiões próximas à parede. Assim, o autor destaca ao final que apesar da boa aproximação e da validação do modelo matemático utilizando forças de não-arraste, novas simulações devem ser propostas para um melhor ajuste dos resultados observados. Ressalta-se que a força de massa virtual não foi considerada, como sugerido em trabalhos anteriores.

Braga *et al.* (2016) também utilizaram resultados de modelo físico com apenas um e dois bicos injetores de gás para avaliar um modelo matemático capaz de prever a penetração de gás na perna de subida de desgaseificadores RH. Estes autores sugerem que o problema de penetração de gás identificado na literatura se deve a erros numéricos relacionados à discretização insatisfatórias das equações que governam o escoamento no desgaseificador RH. Para contornar tal problema, propuseram um modelo matemático em regime transiente, com uma malha substancialmente mais refinada na perna de subida e esquema de advecção de 2ª ordem para discretização do tempo, utilizando apenas a força de arraste (modelo de Grace). Estes autores encontraram algumas melhorias na comparação com os resultados do modelo físico. Porém para a vazão de 5L/min (por bico) a dispersão de gás na perna foi subestimada e para as condições com dois bicos injetores com vazões maiores que 30L/min, notou-se uma tendência do gás se

concentrar no centro da perna no modelo matemático enquanto que o experimento físico indica a dispersão do gás por toda a perna (Figura 3.13).

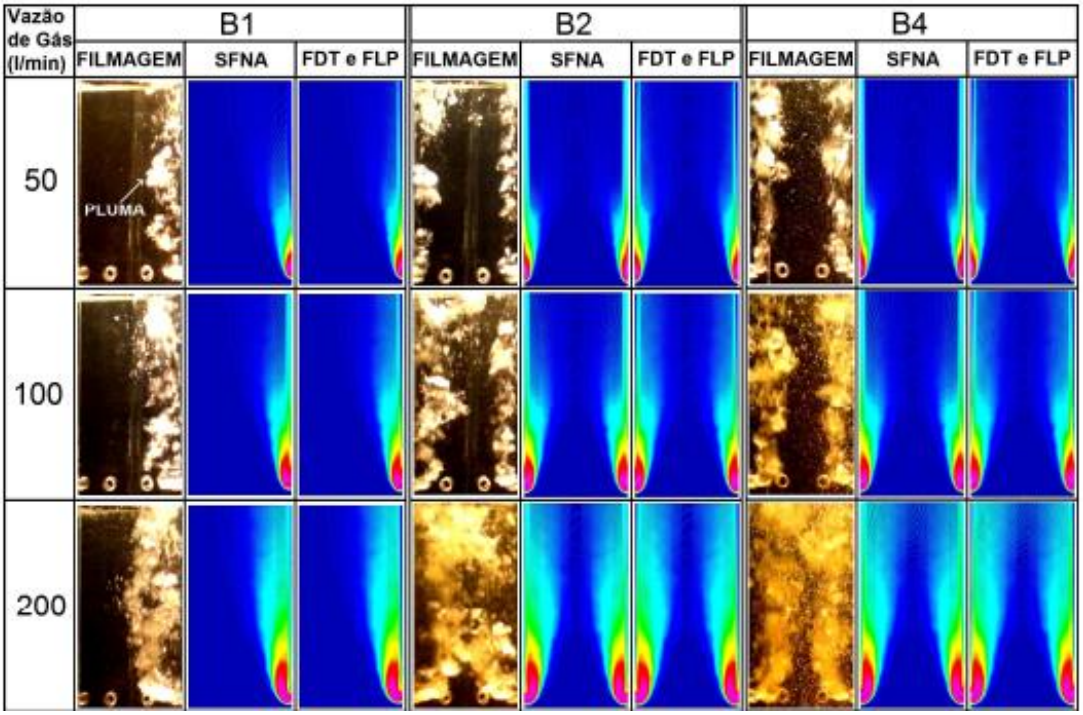

Figura 3.12 – Comparação da penetração de gás na perna de subida entre imagens do modelo físico com resultados do modelo matemático sem força de não-arraste (SFNA) e com combinação das forças de dispersão turbulenta (FDT) e força de lubrificação das paredes (FLP) para as configurações com um bico (B1), dois bicos (B2) e quatro bicos de injeção (B4), e vazões de ar iguais a 50, 100, 200L/min, equivalentes a 5, 10 e 20L/min por bico (NEVES, 2012).

Utilizando aproximação Euleriana-Euleriana, Chen *et al.* (2016) avaliaram a influência de quatro forças de interação entre as fases gasosa e líquida sobre a taxa de circulação no reator RH, em ambos, o modelo a frio (água/ar) e o reator real (aço/argônio). Encontraram que as forças de arraste e de dispersão turbulenta apresentam enorme influência no fluxo multifásico, enquanto as forças de sustentação e de massa virtual possuem influências negligenciáveis. Estes autores afirmaram que a força de dispersão turbulenta era responsável pelo aumento da penetração do gás na zona de injeção perna de subida (Figura 3.14).

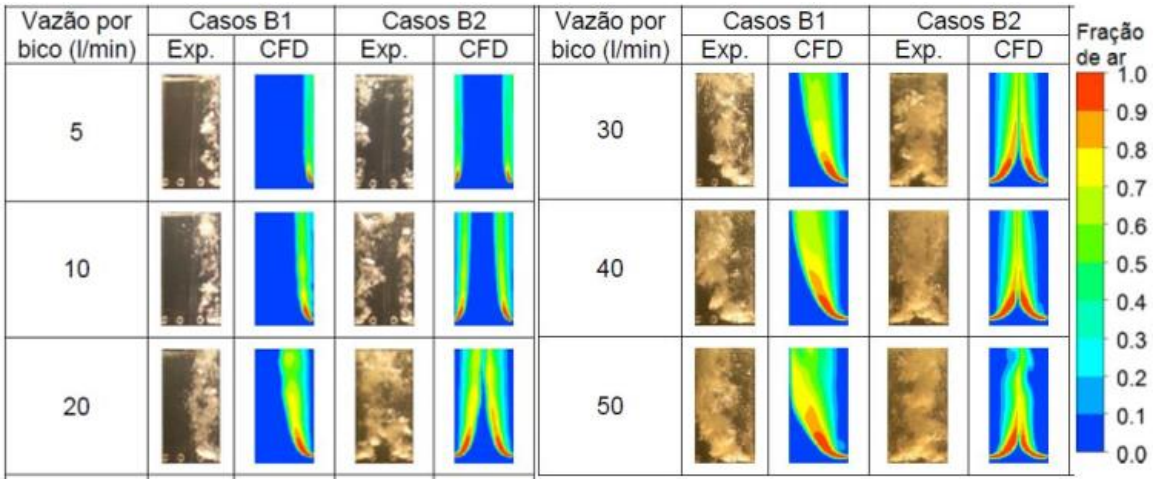

Figura 3.13 – Comparação da penetração de gás na perna de subida entre imagens do modelo físico e previsões do modelo matemático (CFD) após 30s de simulação, para a configuração apenas um bico (B1) ou dois bicos (B2) vazões de ar por bico de 5L/min a 50L/min por bico (BRAGA *et al.*, 2016).

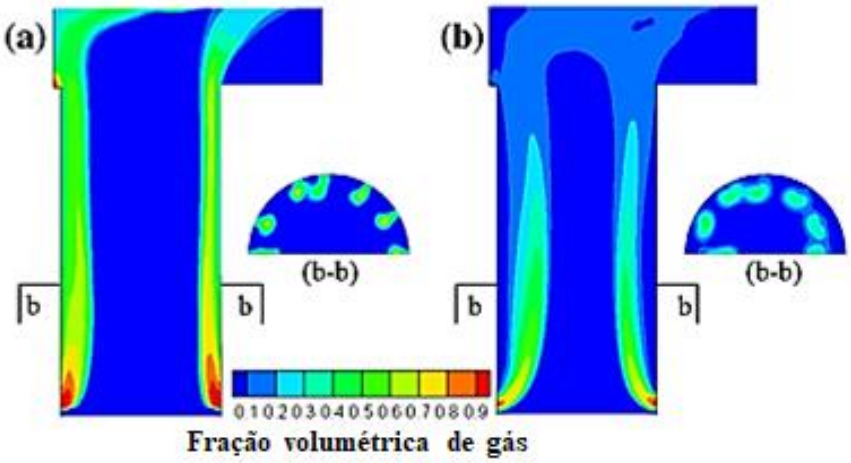

Figura 3.14 – Penetração do gás na perna de subida do reator RH: (a) sem força de dispersão turbulenta (F_{TD}); (b) considerando F_{TD}. Vazão de argônio = 60Nm³/h (CHEN *et al.*, 2016).

Zhu *et al.* (2017) avaliaram a influência destas forças de interação em simulações matemáticas de um reator RH real e concluíram que a força de massa virtual tem um tremendo impacto na penetração do gás na perna de subida e na previsão da taxa de circulação e a força de dispersão turbulenta possui considerável impacto na distribuição do gás e efeito desprezível sobre a taxa de circulação, conforme observado na Figura 3.15. As forças de sustentação (C_L = 0,1) e de lubrificação da parede (modelo de Frank) tiveram influência desprezível comparada às demais

forças. Valores de tempo de mistura reportados na literatura foram utilizados para validar simulação matemática. Destaca-se que estes autores adotaram C_{VM} = 0,5, obtendo uma considerável penetração de argônio na perna de subida.

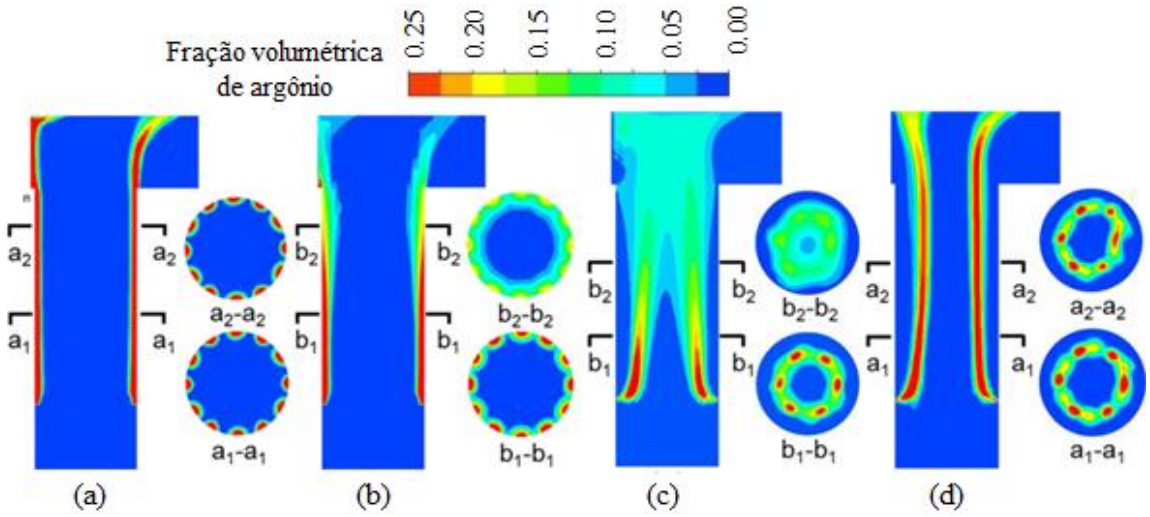

Figura 3.15 – Efeito das forças de interação na distribuição de gás na perna de subida, vazão de argônio de 90 Nm³/h: (a) somente força de arraste (F_A); (b) F_A e F_{TD}; (c) todas as cinco forças; (d) sem F_{TD}; (ZHU *et al.*, 2017).

Como mencionado por Braga *et al.* (2016), e descrito nos parágrafos anteriores, diversos modelos matemáticos não conseguiram boa representação da penetração de gás na perna de subida do reator RH. Em alguns o gás permanece aderido às paredes da perna, enquanto em outros, a penetração do gás é aparentemente excessiva. De acordo com Geng *et al.* (2010), a profundidade de penetração é o fator chave para determinar a distribuição do gás injetado, garantindo a previsão da taxa de circulação. Assim, ainda há dúvidas quanto a melhor combinação das forças de interação e os valores dos coeficientes destas forças para construir uma simulação matemática que descreva o comportamento do gás observado em modelo físico, numa maior faixa de vazão de gás e alcance boa previsão de taxa de circulação e de características do fluxo no interior do reator RH.

3.3.4 Diâmetro das bolhas de gás

No modelamento do desgaseificador RH, o gás pode ser encontrado sob duas formas: a fase contínua que se encontra na câmara de vácuo e a fase dispersa (bolhas) no líquido. Devido à relevância da interação bolha-líquido ser muito maior do que a dos fenômenos interfaciais na superfície livre, muitas vezes desconsidera-se a fase contínua (SILVEIRA, 2011).

Outro fator importante para a realização de simulações computacionais está relacionado ao comportamento e características das bolhas de gás. Existem na literatura muitas fórmulas propostas para calcular o diâmetro inicial de bolhas de gás formadas na saída de bocais. Em geral, para simplificação do modelo, despreza-se a deformação das bolhas de gás, assim como a interação entre bolhas (quebra e coalescência). Conforme Tabela 3.3, para o reator RH, resultados razoáveis têm sido encontrados utilizando-se as correlações dadas pelas equações (3.15) e (3.16).

Tabela 3.3 – Principais equações para determinação do diâmetro de bolha de gás.

Equação	$d_{g,0} = 0{,}091\left(\frac{\sigma_l}{\rho_l}\right)^{0,5} u_{g,0}^{0,44}$ (3.15)	$d_b = 0{,}35\left(\frac{G^2}{g}\right)^{0.2}$ (3.16)
Trabalho original	Sano e Mori (1980)	Johansen e Boysan (1988)
Citações em simulações sobre RH	Geng *et al.* (2010, 2012a, 2012b, 2015), Chen *et al.* (2016), Zhu *et al.* (2017, 2018)	Kishan e Dash (2009), Ling *et al.* (2016a e b), Barral (2016), Luo *et al.* (2018)

Onde: $d_{g,0}$ – diâmetro da bolha de gás (m); $u_{g,0}$ – velocidade do gás na saída do bico de injeção (m/s); σ_l tensão interfacial líquido/gás (N/m); ρ_l – densidade do líquido (kg/m³); d_b – diâmetro da bolha de gás (m); G – vazão de gás (Nm³/s).

A Equação (3.15) adotada pelos trabalhos citados na Tabela 3.3, foi reportada originalmente por Sano e Mori (1980). A Equação (3.17), original de Sano e Mori (1980), foi obtida pela correlação com resultados experimentais do diâmetro de bolhas de nitrogênio dispersas em Mercúrio, para vazões de gás vazões entre 3L/min e 80L/min. As medidas do diâmetro das bolhas foram realizadas quando da formação destas nos plugues e durante a sua ascensão no banho, encontrando um diâmetro médio entre 1,0cm a 2,4cm. Esta equação empírica tem aplicabilidade em outros líquidos, como Sano e Mori (1980) exemplificaram para o sistema ar-

água e argônio-ferro líquido, utilizando resultados de tamanho de bolhas encontrados na literatura.

Porém, conforme relatado anteriormente no trabalho de Marins (2011), o trabalho original de Sano e Mori (1980) utilizava dimensões em CGS (centímetro–grama–segundo), conforme Equação (3.17). Além disso, considerava-se a velocidade superficial de gás, calculada utilizando-se a área da seção transversal do reator. Esse fato não influenciava de forma significativa, já que o tubo considerado como reator era de pequeno diâmetro. Contudo, para o reator RH, esta adaptação gera considerável diferença no valor de diâmetro de bolha, visto que a área da seção transversal da perna de subida é muito superior à área dos bicos. Nos trabalhos relacionados na Tabela 3.3, utiliza-se todas as dimensões no SI (Sistema Internacional) e considera-se a velocidade do gás na saída dos bicos de injeção, obtida pela divisão da vazão de gás pela área dos bicos.

$$d_{g,s} = 0{,}091 \left(\frac{\sigma_l}{\rho_l}\right)^{0,5} u_{g,s}^{0,44} \tag{3.17}$$

Onde: $d_{g,s}$ – diâmetro da bolha de gás (cm); $u_{g,s}$ – velocidade de ascensão do gás (cm/s); σ_l tensão interfacial líquido/gás (dina/cm); ρ_l – densidade do líquido (g/cm³);

Na discussão sobre a formação de bolhas, assumindo que as forças viscosas são insignificantes em comparação com as forças de inércia, Davdson e Schuler (1960) encontraram uma equação para o volume final de bolha de gás muito similar à expressão empírica obtida por van Krevelen e Hoftijzer (1950, apud DAVDSON e SCHULER, 1960). Desde que a densidade do gás fosse insignificante em comparação com a densidade do líquido, o volume de uma bolha é dado pela expressão:

$$V_b = 1{,}378 \left(\frac{G^2}{g}\right)^{0.6} \tag{3.18}$$

Onde: V_b – volume da bolha de gás (cm³); G – vazão de gás (cm³/s); g aceleração da gravidade (cm/s²);

Em modelamento numérico de panelas de aciaria agitadas com gás inerte, Johansen e Boysan (1988) assumiram que diâmetro médio da bolha de gás era 25% do diâmetro dado pela Equação (3.18), encontrando resultados numéricos em concordância razoável com as observações experimentais. Estes autores creditaram a Equação (3.18) a Davidson e Schuler (1960). A partir disso, muitos trabalhos (como por exemplo: os citados na Tabela 3.3) utilizaram a Equação (3.16) para cálculo do diâmetro inicial de bolhas de gás, adotando como referência o trabalho de Johansen e Boysan (1988).

De modo geral, em modelamentos numéricos do reator RH assumem-se bolhas esféricas discretas de tamanho único para cada vazão de gás, desprezando-se a deformação das bolhas de gás, bem como a interação entre bolhas (quebra e coalescência). Desta forma, o diâmetro das bolhas calculado pela Equação (3.15) ou (3.16) é considerado como permanecendo invariante durante seu percurso através do líquido. Para avaliar o efeito da quebra e coalescência das bolhas, Barral (2016) utilizou e comparou o modelo de múltiplos grupos de tamanho (MUSIG) e o modelo de diâmetros dispersos (DDM), através de modelagem física e numérica de dois reatores metalúrgicos:

- **Panela de aciaria:** Barral (2016) relata que, em comparação com os resultados do modelo físico, o uso inadequado de um valor fixo para o diâmetro das bolhas nas simulações matemáticas pode acarretar desvios significativos nos resultados de tempos de mistura, enquanto os valores obtidos pelos dois modelos de quebra e coalescência foram muito semelhantes. Quando se comparou os diâmetros das bolhas medidos no modelo físico, as médias dos tamanhos de bolhas obtidos pelo MUSIG e pelo DDM foram semelhantes, no entanto, a variância apresentada pelo MUSIG é menor e diverge consideravelmente do comportamento observado no modelo físico;

- **Desgaseificador RH:** Barral (2016) destaca que apesar de os resultados de taxa de circulação serem qualitativamente razoáveis nas três situações (as bolhas com tamanho fixo de 10mm, modelos de quebra e coalescência de bolhas MUSIG e DDM), todas estas apresentaram um certo desvio dos resultados experimentais (modelo físico). Como discutido no tópico anterior (3.3.2), é muito provável que esta divergência esteja relacionada ao efeito das forças de não-arraste, que não foram consideradas pelo autor. Utilizando

metodologia estatística, Barral (2016) sugere que o modelo de quebra e coalescência DDM apresentou a melhor aproximação com os resultados experimentais, pois o intervalo de confiança para os valores reais foi mais estreito que para os demais modelos.

Desta forma, Barral (2016) afirma que o modelo de quebra e coalescência DDM representou melhor comportamento das bolhas de gás, tanto para a panela de aciaria quanto para o desgaseificador a vácuo RH. Por fim, o autor ressalta que mesmo com o avanço nas técnicas de medição, são escassos na literatura dados experimentais sobre o comportamento das bolhas, operando em regime heterogêneo de escoamento, em reatores metalúrgicos.

Para o modelo de água, a expansão do ar é ignorada devido à baixa temperatura e à pequena diferença de pressão. Porém, para o desgaseificador RH real, um modelo isotérmico pode falhar para prever a taxa de circulação, uma vez que os efeitos da expansão térmica do gás geralmente não são considerados (KISHAN e DASH, 2009). Além disso, as bolhas ascendentes se expandem devido à diferença extremamente grande entre a pressão nos bicos e na superfície livre da câmara de vácuo (CHEN *et al.*, 2017). Kishan e Dash (2009) destacam o enorme custo computacional necessário para se considerar a expansão do gás no aço líquido em simulações matemáticas, pois: é preciso resolver a equação de energia, juntamente com a equação de estado do gás; e o gás em um tempo muito curto atinge a temperatura do aço líquido (cerca de 1823K), expandindo-se cerca de 6 vezes (o volume inicial da bolha), e para levar em conta esse efeito, é preciso utilizar uma malha muito fina na região dos bicos e um passo de tempo extremamente pequeno.

Para contornar este problema, Chen *et al.* (2016) e Chen *et al.* (2017) utilizaram expressões matemáticas para descrever o diâmetro (e consequentemente a densidade) das bolhas de argônio em função da distância ascendente entre a posição da bolha e a posição dos bicos de injeção, considerando o efeito térmico e a queda de pressão. Estes autores implementaram estas equações como funções definidas pelo usuário, utilizando o software comercial Fluent® para resolver o fluxo multifásico no reator RH. A Figura 3.16(a) apresenta a variação do diâmetro e da densidade da bolha e a Figura 3.16(b) comprova o efeito da expansão do gás sobre a taxa de circulação do aço. Nota-se que, o diâmetro das bolhas aumenta rapidamente (e sua densidade diminui) nos estágios iniciais de subida como resultado do aumento súbito de temperatura

dentro das bolhas e, em seguida, as bolhas continuam expandindo-se devido à queda de pressão. O diâmetro das bolhas perto da superfície livre na câmara de vácuo é quase o dobro do seu valor inicial.

O aumento no diâmetro implica em aumentar significativamente a força de empuxo que atua sobre a bolha, portanto, uma maior aceleração, que por sua vez aumenta a força de arraste que atua sobre o aço líquido, transferindo mais energia cinética para o aço (CHEN *et al.*, 2017). Desta forma, o valor previsto da taxa de circulação considerando a expansão do gás é muito próximo do valor medido experimentalmente (veja Figura 3.16b). Assim, Chen *et al.* (2016) e Chen *et al.* (2017) afirmam que a expansão das bolhas deve ser levada em consideração para simular razoavelmente o fluxo multifásico em um reator RH industrial.

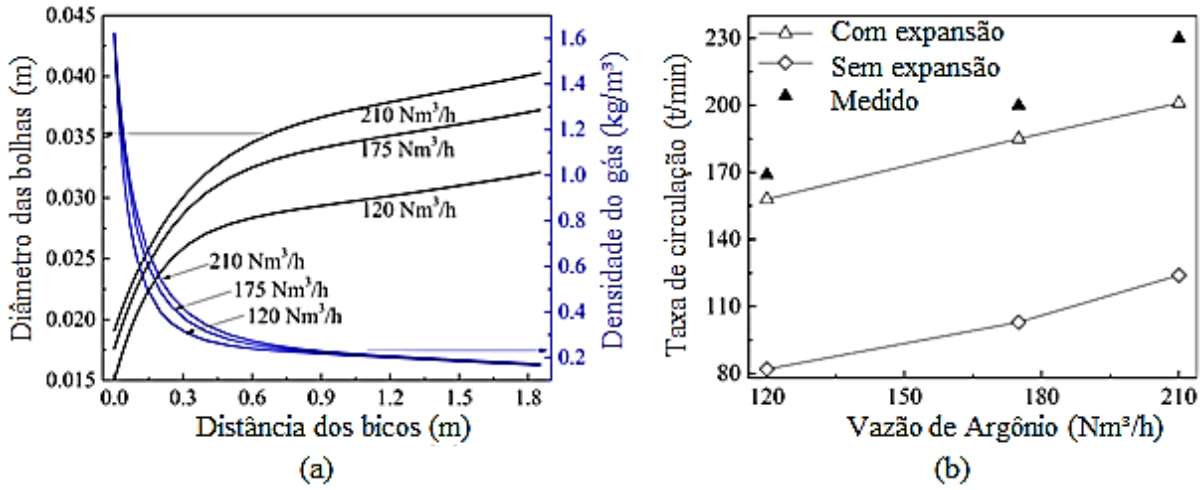

Figura 3.16 – (a) Variação do diâmetro e da densidade das bolhas de argônio ao longo da perna de subida; (b) Efeito da expansão das bolhas na taxa de recirculação do aço (CHEN *et al.*, 2017).

Estas incertezas quanto ao tamanho das bolhas e o efeito da expansão do argônio em simulações do reator RH industrial, aliado às incertezas em combinação de forças de interação bolha/líquido são desafios que ainda precisam ser avaliados para garantir a construção de um modelo numérico capaz de representar de forma satisfatória o fluxo bifásico em reatores RH.

3.4 Dessulfuração do Aço

Exceto nos aços de usinagem fácil, o enxofre é considerado uma impureza prejudicial às propriedades do aço. Na rota de lingotamento contínuo, o teor máximo permitido de enxofre deve ser de 0,02%. Em chapas de aço especiais, a especificação normal para o enxofre é de 0,005% nos dias de hoje, mas existe uma demanda por aço com teor ultrabaixo de enxofre (ULS), por exemplo: tão baixo quanto 10ppm (0,001%), em aços para tubos (GHOSH, 2001b); ou 5ppm em aço silício de grão não orientado - GNO (ZULHAN et al., 2013).

No aço, o enxofre normalmente apresenta-se na forma de inclusões de sulfeto que afetam propriedades como ductilidade, tenacidade e resistência à fadiga. Como este elemento está contido nas matérias-primas usadas na fabricação do aço (principalmente no gusa, proveniente do carvão mineral), sua presença no fluxo de produção siderúrgica é inevitável. Deste modo, a necessidade da obtenção de aços com teores de enxofre cada vez menores, leva ao desenvolvimento de novas técnicas de dessulfuração do aço. De forma geral, para remover o enxofre dissolvido no aço, utiliza-se escórias sintéticas (mistura de óxidos previamente preparada) com elevada capacidade de enxofre, baixa atividade de alumina, ausência de óxidos instáveis como FeO e MnO e baixa temperatura *liquidus* (COSTA, 2012).

As Equações (3.19) e (3.20) representam as reações químicas envolvidas na dessulfuração do aço, quando o aço é desoxidado pelo alumínio. Essas reações ocorrem na interface escória-metal, sendo que o enxofre e o alumínio dissolvidos no banho são transportados por convecção à camada limite e por difusão entram em contato com a escória dessulfurante (COSTA, 2012).

$$CaO_{(s)} + \underline{S} = CaS_{(s)} + \underline{O} \quad (3.19)$$

$$2\underline{Al} + 3\underline{O} = Al_2O_{3(s)} \quad (3.20)$$

A diferença de concentração de enxofre em cada lado da interface de escória-aço é a força motriz da dessulfuração. A reação de dessulfuração é um processo metalúrgico que ocorre em alta temperatura, normalmente a cerca de 1873K, sendo que a velocidade da reação química é relativamente muito alta. Assim, a reação química não pode ser etapa limitante do processo. Desta forma, sugere-se que a etapa limitante seja a transferência de enxofre do aço líquido para

a interface escória-aço ou transferência de (S^{2-}) da interface para o seio da escória ou pó injetado (GHOSH, 2001b; COSTA, 2012; ZHU *et al.*, 2016a).

3.4.1 Influência da composição química da escória sobre a dessulfuração

Como apresentado por Ghosh (2001b), para avaliar a capacidade de dessulfuração de uma escória, a capacidade de enxofre (C_S) de uma escória, isto é, a capacidade de uma escória para absorver enxofre, foi originalmente definida como (Equação 21):

$$C_S = (W_S).(p_{O_2}/p_{S_2})^{1/2} \tag{3.21}$$

Onde (W_S) é porcentagem em peso de enxofre na escória em equilíbrio com um gás tendo pressões parciais de oxigênio e enxofre como p_{O_2} e p_{S_2}, respectivamente. Sua utilidade deriva do fato de que C_S é uma propriedade da escória, e a uma temperatura fixa é determinada somente pela composição da escória. Quanto maior o valor de C_S, melhor a capacidade dessulfurante da escória. A Figura 3.17 mostra os valores de C_S para alguns sistemas típicos de escória de interesse no refino secundário do aço. A superioridade da escória de CaO-CaF_2 é óbvia. Valores de C_S para várias escórias estão disponíveis no Slag Atlas (1995).

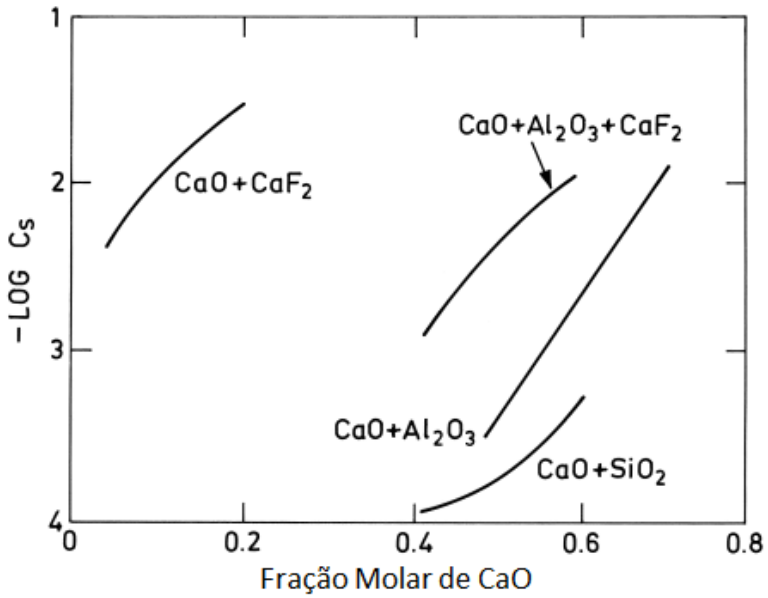

Figura 3.17 – Capacidade de enxofre (C_S) de algumas escórias a 1600°C (GHOSH, 2001b).

O C_S é determinado pelo equilíbrio de uma escória com uma mistura gasosa com potenciais químicos de oxigênio e enxofre conhecidos. No entanto, para o processo de dessulfuração do aço, o interesse é sobre o equilíbrio escória-metal. Isto requer o uso de uma capacidade de enxofre modificada (C'_S), como definido na Equação (3.22) (GHOSH, 2001b):

$$C'_S = \frac{(W_S).[h_O]}{[h_S]} \tag{3.22}$$

Onde h_O e h_S é atividade henriana de oxigênio e enxofre, respectivamente, no aço com estado de referência 1% em peso. A relação entre C_S e C'_S é dada pela Equação (3.23) e a 1600°C tem-se que $C'_S = 7{,}5.C_S$ (GHOSH, 2001b).

$$\log C_S = \log C'_S + \frac{936}{T} - 1{,}375 \tag{3.23}$$

Outro parâmetro de interesse é a relação de partição de enxofre no equilíbrio entre escória e metal (L_S), Equação (3.24), definida pela relação entre os teores desse elemento na escória e no aço. Se $[h_S]$ é tomado como $[W_{0S}]$, então, da Equação (3.22) no equilíbrio de enxofre escória-metal, resulta em:

$$L_S = \frac{(W_{0S})}{[W_{0S}]} = \frac{C'_S}{[h_O]} \tag{3.24}$$

Onde (W_{0S}) e $[W_{0S}]$ é porcentagem em peso de enxofre de equilíbrio na escória e no aço, respectivamente; h_O é atividade henriana de oxigênio no aço, normalmente determinada pela presença de um agente desoxidante, especialmente alumínio dissolvido no aço. Pode-se também relacionar h_O ao teor de FeO na escória, mas foi considerado mais apropriado relacioná-lo ao teor do agente oxidante (GHOSH, 2001b). A partição de enxofre é uma relação de equilíbrio que representa a efetividade de remoção do soluto de uma fase para ser incorporado em outra, e pela Equação (3.24) percebe-se o impacto negativo da presença de oxigênio no aço sobre a remoção de enxofre (COSTA, 2016).

Para uma boa dessulfuração, é necessário um elevado valor de L_S. Isto pode ser conseguido não apenas por um elevado valor de C_S (ou C'_S), mas por um valor baixo de h_O. Aqui, o alumínio é

superior ao silício, uma vez que permite uma desoxidação mais profunda (GHOSH, 2001b). A relação termodinâmica entre o L_S e outros parâmetros para a desoxidação pelo alumínio pode ser derivada como descrito abaixo. Das Equações (3.22) a (3.24):

$$\log L_S = \log C'_S - \log h_O = \log C_S - \frac{936}{T} + 1{,}375 - \log h_O \tag{3.25}$$

Dados termodinâmicos para o equilíbrio da reação de desoxidação do aço pelo alumínio fornecem a Equação (3.26), considerando que a atividade henriana do alumínio (h_{Al}) é igual a porcentagem em peso de alumínio no aço [W_{Al}] (GHOSH, 2001b):

$$\log h_O = \frac{1}{3}\left[-\frac{64000}{T} + 20{,}57 - 2\log W_{Al} + \log(a_{Al_2O_3})\right] \tag{3.26}$$

Onde $\left(a_{Al_2O_3}\right)$ é a atividade da alumina na escória. Combinando as duas equações anteriores:

$$\log L_S = \log C_S - \frac{1}{3}\log\left(a_{Al_2O_3}\right) + \frac{2}{3}\log W_{Al} + \frac{20397}{T} - 5{,}482 \tag{3.27}$$

Ressalta-se que na equação anterior, para avaliar a variação de L_S com a temperatura em uma composição de escória fixa, deve-se analisar também como o C_S varia com a temperatura. A Figura 3.18 apresenta algumas curvas calculadas de grau de dessulfuração, mostrando a necessidade de alto valor de L_S para uma boa dessulfuração.

Zulhan *et al.* (2013) e Schrade *et al.* (2015), a partir de um modelo cinético para dessulfuração de aço por sopro de pó em reator RH, relatam que o coeficiente de partição de enxofre (L_S) desempenha um papel importante na determinação do teor final de enxofre. Um valor elevado de L_S fornece uma boa condição para que um baixo teor final de enxofre possa ser alcançado.

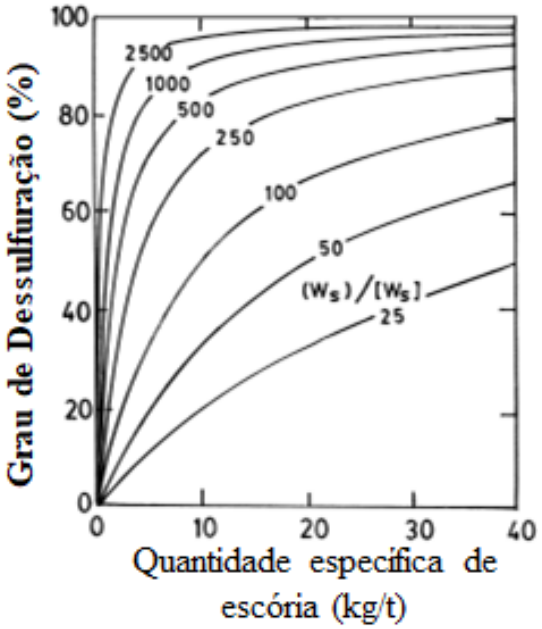

Figura 3.18 – Grau de dessulfuração para diferentes valores de partição de enxofre em função da quantidade específica de escória (GHOSH, 2001b).

Analisando vários trabalhos sobre a influência da composição da escória sobre o coeficiente de partição de enxofre, Ghosh (2001b) concluiu que os domínios de composições de escória líquida que conduzem a elevados valores do coeficiente de partição de enxofre são bastante limitados, e a eficiência de um tratamento de remoção de enxofre dependerá da capacidade para atingir estes domínios. As composições visadas devem estar próximas da saturação de CaO na escória. Ressalta-se ainda que, do ponto de vista prático, existe um esforço mundial para acelerar o processo de refino do aço, e assim, a cinética da dessulfuração é de considerável relevância.

3.4.2 Dessulfuração do aço no reator RH

Okano *et al.* (1997) relatam que o processo de dessulfuração do aço pelo sopro de dessulfurante pulverizado no interior da câmara de vácuo de um reator RH foi adotado industrialmente na Wakayama Steel Works a partir de 1996. O menor consumo de dessulfurante e a redução no tempo total de refino do aço são as principais vantagens deste processo frente à dessulfuração no processo convencional em forno panela. No entanto, Schrade *et al.* (2015) lembraram que esta técnica não se tornou uma prática comum na indústria siderúrgica devido à redução da vida útil do refratário da câmara de vácuo, particularmente na perna de descida e na parte inferior do

vaso do RH. Por outro lado, estes autores afirmaram que esta é uma das poucas alternativas para produção de certos graus de aço ao silício de grão não orientado (NGO), contendo níveis ultrabaixos de carbono e de enxofre. Além disso, Yang *et al.* (2014) sugerem que a etapa de refino do aço no RH representa uma das últimas oportunidades para realizar a dessulfuração.

Wei *et al.* (2000) destacam que, devido às características do fluxo e de misturamento do aço na câmara de vácuo, o processo de refino no reator RH promove condições favoráveis à dessulfuração do aço, entre as quais sobressaem-se: (i) o potencial de oxigênio pode ser reduzido a níveis muito baixos; (ii) a desgaseificação – remoção de hidrogênio – pode ser efetivamente conduzida durante a dessulfuração, além de se evitar o *pick up* de nitrogênio pelo aço; (iii) o efeito da escória de topo da panela sobre a remoção de enxofre pode ser minimizado; (iv) melhores condições cinéticas para a reação de dessulfuração.

Ghosh (2001b) afirma que o oxigênio e o enxofre dissolvidos no aço líquido retardam a taxa de dessorção de nitrogênio do aço durante desgaseificação a vácuo. Um baixo nível de nitrogênio foi alcançado em aços com baixo teor de enxofre e baixo teor de oxigênio. Este é um benefício adicional se a dessulfuração profunda é realizada antes ou durante o tratamento a vácuo.

Não é uma prática comum acalmar o aço pela adição de alumínio logo após o tratamento no LD/forno elétrico de modo a proporcionar uma condição redutora para dessulfuração, e em seguida injetar oxigênio no RH para alterar a condição de redutora para oxidante, ideal para a descarburação (ZULHAN *et al.*, 2013). Assim, sugere-se que, durante o tratamento do aço no RH, a dessulfuração seja feita após a descarburação e adição de ligas, de modo a reduzir o consumo de agente desoxidante.

Wei *et al.* (2000) apresentaram um resumo de resultados industriais de dessulfuração do aço em reator RH (vide Tabela 3.4) através do sopro de pó na câmara de vácuo. Estes dados foram utilizados para validar o modelo cinético proposto por estes autores para prever a taxa dessulfuração do aço sob diferentes condições operacionais (em função do consumo específico de dessulfurante, da taxa de sopro de pó e do tempo de tratamento). A partir do modelo cinético desenvolvido, os autores concluíram que o aumento da taxa de injeção de pó e da taxa de circulação de aço resulta em elevação considerável da velocidade de dessulfuração do aço.

Tabela 3.4 – Alguns dados de experimentos industriais de dessulfuração do aço por sopro de pó em reator RH (WEI *et al.*, 2000)

Massa de aço (t)	Tipo de aço	Comp. Pó (% em peso)	Sopro de pó (kg/min)	Tipo de RH	CP (kg/t aço)	Δt_T (min)	$[S]_0$ (ppm)	$[S]_f$ (ppm)
340	Aço resistente à corrosão	50% CaO + 50% CaF_2	100	RH (IJ)	3-4	25	20-57	~5
250	Aço acalmado ao Si e Al	50% CaO + 50% CaF_2	150	RH-PB	4	20	20-30	5
160	Aço acalmado ao Al	CaO + CaF_2 *	100-130	RH-PTB	5-8	8-12	30-35	≤ 5

*A relação de massa de CaO (cal) e CaF_2 (fluorita) não estava disponível. Comp. – Composição do pó dessulfurante (% em peso); CP - Consumo de pó; Δt_T - Tempo de tratamento.

Por outro lado, Knoop e Tiekink (1996 *apud* ZULHAN *et al.*, 2013) relataram os resultados de testes de dessulfuração do aço em um reator RH de 320 toneladas pela adição de cal e aluminato de cálcio ($CaO\text{-}Al_2O_3$) pré-fundido com o tamanho de grão de 1-3 mm via sistema de adição de ligas (desta forma, não é necessário instalar equipamentos de sopro de pó). Pela adição de 4kg de cal e 4kg de aluminato de cálcio por tonelada de aço, o conteúdo de enxofre foi reduzido de 50ppm para aproximadamente 30ppm em aço do tipo HSLA (*High Strength Low Alloy* - alta resistência baixa liga). Além disso, foi relatado que o tempo de tratamento se estendeu em 10 minutos em relação ao tempo de operação padrão.

Utilizando esta técnica proposta por Knoop e Tiekink (1996 *apud* Zulhan *et al.*, 2013), a Baosteel conduziu experimentos industriais pela adição de 3-5kg de mistura de dessulfurantes ($CaO\text{-}CaF_2\text{-}MgO$) por tonelada de aço adicionados através do sistema de silos do RH para produzir um teor ultrabaixo de enxofre em aço para tubos. Foi relatado que a taxa média de

dessulfuração igual a 50%, e ainda que o menor teor de enxofre de 7ppm pôde ser alcançado por este método (ZULHAN *et al.*, 2013).

Através de experimentos industriais de sopro de pó dessulfurante ($CaO + CaF_2$) em um reator RH, Tusset *et al.* (2003) observaram que para alcançar um baixo teor de enxofre no aço um misturamento suficiente entre aço e escória é mais importante do que a quantidade de pó injetado. Porém, baixas taxas de injeção de pó prolongam o tempo de tratamento e levam a maior queda de temperatura do aço. Além disso, o uso de fluorita (CaF_2) leva a relativamente alta erosão do revestimento refratário. Em dois experimentos utilizando um dessulfurante comercial ($CaO + Al_2O_3$), Tusset *et al.* (2003) notaram que a erosão do refratário foi desprezível, se comparado aos testes anteriores. Porém, a taxa de dessulfuração foi consideravelmente menor utilizando a mistura $CaO + Al_2O_3$ comparativamente ao $CaO + CaF_2$ (vide Figura 3.17).

Zhan *et al.* (2006) obtiveram bons resultados de dessulfuração do aço no reator RH através do uso de escória pré-fundida adicionada na câmara de vácuo pelo sistema de adição de ligas. Com um consumo de 5kg de dessulfurante por tonelada de aço, o teor de enxofre reduziu em média de 41,9ppm para 30ppm, com uma taxa de dessulfuração média de 28,1%. Porém, estes autores ressaltaram um teor final elevado de FeO na escória de topo da panela. Ao modificar a escória de topo controlando seu conteúdo de FeO+MnO, He *et al.* (2012) alcançaram uma taxa de dessulfuração de até 34,1% e o teor final de enxofre inferior a 50ppm em aços elétricos semiacalmados. Utilizaram escória pré-fundida na forma de partículas de 3 a 5 mm, também adicionada à câmara de vácuo pelo sistema de adição de ligas. A composição da escória era $\%CaO/\%Al_2O_3 = 2,5\text{-}4,0$, $CaF_2 < 15\%$ e $SiO_2 < 5\%$, com ponto de fusão abaixo de 1350°C.

Zhang *et al.* (2012) também estudaram o uso do dessulfurante em reator RH para o tratamento de aços elétricos, com o objetivo de alcançar o teor final de enxofre abaixo de 80ppm. Igualmente, realizaram modificação da escória de topo da panela: um ajuste preliminar da escória da panela é realizado durante o vazamento do aço do convertedor, e um ajuste secundário da escória é realizado no processo de refino no forno panela para aumentar a basicidade e reduzir a oxigenação da escória. Desta forma, o teor total de FeO + MnO na escória da panela foi reduzido abaixo de 15% (valor determinado experimentalmente de modo a

favorecer a dessulfuração do aço). No reator RH, após a descarburação do aço, o agente dessulfurante foi adicionado em duas bateladas, com cerca de 2,5kg de dessulfurante por tonelada de aço e 3min de duração cada. A Figura 3.19 apresenta a variação do teor de enxofre ao longo dos testes. Assim, Zhang *et al.* (2012) obtiveram uma taxa média de dessulfuração de 28,7% e o teor final de enxofre inferior a 50ppm em mais de 70% dos testes industriais realizados.

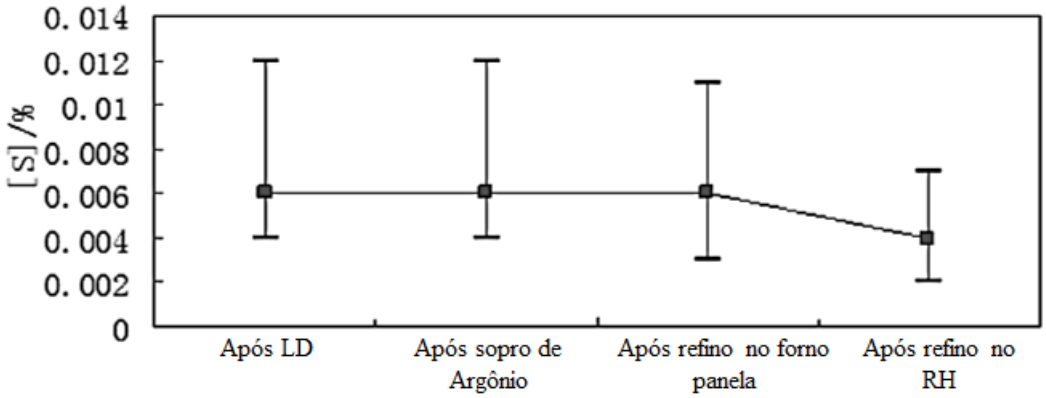

Figura 3.19 – Variação do teor de enxofre no aço – média de 20 testes (ZHANG *et al.*, 2012).

Zulhan *et al.* (2013) revisaram e aperfeiçoaram um modelo cinético que foi introduzido por Wei *et al.* (2000) para prever o teor de enxofre durante o tratamento de RH por injeção de pó. Combinaram as etapas de descarburação e adição de ligas, a fim de fornecer previsão de temperatura para todo o processo de RH, para estimar o tempo total de tratamento, bem como para integrar a linha de produção de aços ao silício de grão não orientado (NGO). A partir deste modelo, Zulhan *et al.* (2013) notaram que o teor de enxofre após a injeção de pó depende do teor inicial de enxofre, por exemplo, para um teor final de enxofre inferior a 10ppm, sugere-se que o teor inicial de enxofre seja inferior a 30ppm. O tempo total de tratamento a vácuo foi cerca de 56 minutos, onde o tempo previsto para a dessulfuração (pelo sopro de pó de 50kg/min a 150kg/min) é de 23 minutos.

Schrade *et al.* (2015) confrontaram o modelo adaptado por Zulhan *et al.* (2013) com resultados industriais de dessulfuração de cinco corridas realizadas durante o período de comissionamento do reator RH de 300t da planta de Maanshan ISCO – China. Foram utilizados de 3kg a 5kg de dessulfurante por tonelada de aço, constituído de CaO/Al_2O_3 = 60%/40%, alcançando uma eficiência de remoção de enxofre superior a 55% para um consumo de 5kg/t aço. O modelo foi

então implementado ao sistema de automação nível 2 desta planta, considerando um valor de L_S igual a 250 para esta proporção de materiais utilizados. Desta forma, todas as etapas do processo são pré-calculadas e atualizadas pelo modelo, que determina: a quantidade de pó a ser injetado, dependendo do teor de enxofre inicial e do valor almejado no final; a taxa de sopro (kg pó/min) e consequentemente, o tempo de sopro necessário (limitado a 23min).

Costa e Tavares (2015) analisaram, via modelamento numérico em CFX®, a dessulfuração do aço líquido no reator RH por meio da adição de escória sintética, formando uma camada sobrenadante de escória no interior da câmara de vácuo. Obtiveram bons resultado de dessulfuração, variando de 40% a 67%, em função do volume e da composição química da escória utilizada na simulação. Os autores destacaram que o ambiente de maior agitação no interior da câmara de vácuo favorece a reação de dessulfuração, pois aumenta a transferência de massa entre metal e escória. Porém, vale ressaltar que o modelo proposto por estes autores previa a permanência da escória líquida como uma camada sobrenadante ao aço na câmara de vácuo, desprezando o arraste desta escória para a panela.

Um modelo matemático baseado nas condições termodinâmica, cinética e práticas operacionais da dessulfuração do aço foi proposto por Zhu *et al.* (2016a) para a previsão da evolução do teor de enxofre no aço durante o tratamento no reator RH. De acordo com a ideia da metalurgia de injeção de pó, estes autores consideraram o efeito de dois mecanismos de reação de dessulfuração durante o processo de injeção de pó no reator RH: uma reação transitória e uma reação de contato permanente. A reação transitória é a reação entre as partículas de pó injetadas e o enxofre dissolvido no metal. A reação de contato permanente é a reação entre a escória de topo da panela e o metal.

Zhu *et al.* (2016a) validaram o modelo com dados industriais de dessulfuração disponíveis na literatura. Então utilizaram o modelo para análise do efeito de parâmetros operacionais sobre a taxa de dessulfuração, encontrando que: (i) a reação de dessulfuração transitória (enquanto as partículas estão imersas no aço líquido) desempenha um papel absoluto na taxa de dessulfuração total, com uma contribuição maior que 98,52%; (ii) se observa uma queda de temperatura do aço de 7,73K quando a taxa de injeção de pó varia de 150kg/min a 300kg/min; (iii) a taxa de dessulfuração aumenta com o aumento da taxa de injeção de pó e com a diminuição do diâmetro

do pó, que deve estar na faixa de 0,35mm a 1mm para evitar arraste das partículas pelo sistema de vácuo e garantir elevada área interfacial; (iv) quando o teor inicial de enxofre no aço líquido é de cerca de 30ppm, o menor teor de enxofre (cerca de 10ppm) pode ser obtido para uma vazão de gás de transporte de 130 Nm³/h e taxa de injeção de pó na faixa de (150–250) kg/min após 10min de tratamento.

A Tabela 3.5 apresenta um resumo dos principais parâmetros de trabalhos que relatam resultados de experimentos industriais de dessulfuração do aço por sopro de pó em reator RH, enquanto a Tabela 3.6 trata de parâmetros de alguns trabalhos sobre dessulfuração do aço pela adição de material dessulfurante via sistema de adição de ligas.

Tabela 3.5 – Resultados industriais de dessulfuração do aço por sopro de pó em reator RH.

Referência	Comp. (% em peso)	CP (kg/t aço)	Δt_T (min)	$[S]_0$ (ppm)	$[S]_f$ (ppm)	DeS (%)
Wei *et al.* (2000)	50% CaO + 50% CaF_2	3-8	12-25	20-57	≤ 5	75-90
Tusset *et al.* (2003)	70% CaO + 30% CaF_2	ND	ND	~45	~23	~50
Zulhan *et al.* (2013)	Mistura CaO/CaF_2; CaO/Al_2O_3 pré-fundida	3-5	23	30	≤ 10	~50-70
Yang *et al.* (2014)	90% CaO e 10%CaF_2	3	~5	ND	ND	16-53
Schrade *et al.* (2015)	60%CaO e 40%Al_2O_3	3-5	≤ 20	~40	~20	~55
Zhu *et al.* (2016a)	75% CaO e 25%CaF_2	5-10	10	30	~10	~40-60

*Comp. – Composição do dessulfurante (% em peso); CP - Consumo específico de dessulfurante; Δt_T - Tempo de tratamento; DeS – taxa de dessulfuração (%); ND – não disponível.

Tabela 3.6 – Resultados industriais de dessulfuração do aço pela adição de material dessulfurante via sistema de adição de ligas em reator RH.

Referência	Comp. (% em peso)	CP (kg/t aço)	Δt_T (min)	$[S]_0$ (ppm)	$[S]_f$ (ppm)	DeS (%)
Knoop e Tiekink (1996)	$CaO\text{-}CaF_2\text{-}MgO$	3-5	ND	30	15	50
Zhan *et al.* (2006)	escória pré-fundida	5	ND	42	30	28
He *et al.* (2012)	$CaO\text{-}CaF_2\text{-}Al_2O_3$	ND	ND	~75	<50	34,1
Zhang *et al.* (2012)	$CaO\text{-}CaF_2\text{-}Al_2O_3$	4-6	4-8	~60	~40	~28,7
Silva *et al.* (2015)	Escória sintética + Cal (1:1)	~10	ND	~120	ND	~35

3.4.3 Análise do Comportamento Metal-Escória

De modo a descrever quantitativamente a reação de dessulfuração do aço no interior do reator RH, o tamanho de partículas (ou gotas de escória) e o tempo de residência deste material no seio do aço líquido precisam ser conhecidos (WEI *et al.*, 2000). Neste sentido, Yang *et al.* (2013) simularam a injeção de pó dessulfurante em uma câmara de vácuo RH, utilizando um modelo físico em escala 1:2,8. Estes pesquisadores injetaram óleo (uma mistura de dois tipos de óleo para obter uma densidade de 661kg/m³, de modo a obedecer ao critério de similaridade por eles adotado) na câmara de vácuo do modelo físico e analisaram a evolução da camada de óleo no topo da panela, para avaliar o tempo de residência e a quantidade de óleo disperso no interior do líquido em função da vazão de gás.

Posteriormente, Yang *et al.* (2014) desenvolveram um modelo matemático para descrever o tempo de residência do óleo no interior do líquido e para caracterizar o processo de dessulfuração no reator RH. Neste modelo, foram considerados os efeitos da reação transitória e da reação de contato permanente sobre a dessulfuração do aço. Regressão exponencial foi utilizada para descrever a espessura da camada de óleo em função do tempo, conforme Figura 3.20. Considerando que a reação transitória é responsável por mais de 90% da dessulfuração total, estes autores determinaram a vazão de gás que maximizava o tempo de residência do óleo no interior do líquido: a vazão de 1,8Nm³/h para o modelo físico, o que corresponde a 50Nm³/h no reator industrial.

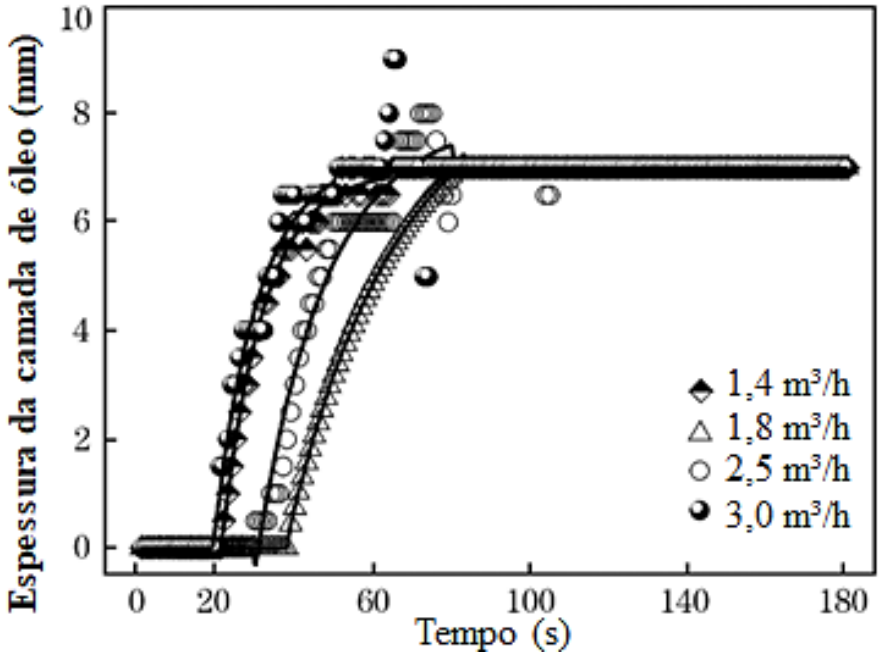

Figura 3.20 – Evolução da camada de óleo em função do tempo e as respectivas curvas de regressão (YANG *et al.*, 2014).

Yang *et al.* (2014) validaram os resultados observados no modelo físico através de testes industriais em um reator RH-PTB de 100t, utilizando 300kg de pó dessulfurante (90% CaO e 10%CaF_2). De modo a evitar efeitos negativos ao processo como prolongamento do tempo de tratamento, redução da eficiência de desgaseificação e aumento na queda de temperatura do aço, durante os testes de dessulfuração, a vazão de gás retornava a vazão normal de trabalho (60Nm³/h para este reator) 5min após o início do sopro de material dessulfurante. Foram realizados 10 testes para cada vazão de gás, e os resultados são apresentados na Figura 3.21. Como previsto pelos testes em modelo físico, a vazão de 50Nm³/h resultou em maior eficiência de dessulfuração. Os autores justificaram o considerável aumento de 16% para 53% resultante da redução da vazão de gás de 60Nm³/h para 50Nm³/h pela diminuição na taxa de circulação e consequentemente o aumento no tempo de residência do dessulfurante no interior do aço. Reduzindo-se ainda mais a vazão de gás, a diminuição da taxa de circulação teria efeitos negativos na transferência de enxofre entre aço e escória.

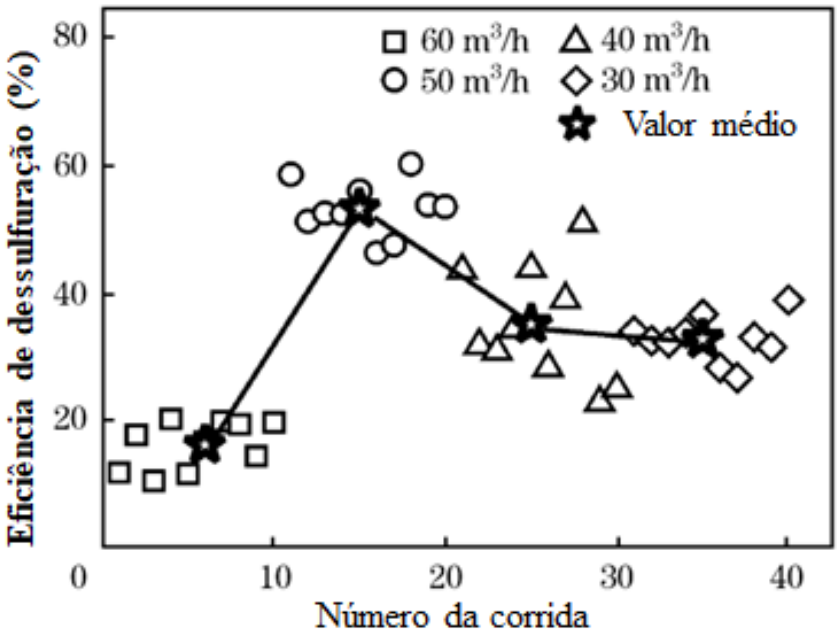

Figura 3.21 – Eficiência de dessulfuração do aço no reator RH em diferentes vazões de gás (YANG *et al.*, 2014).

Vale ressaltar que nos trabalhos de Yang *et al.* (2013 e 2014) não fica claro quais foram os tipos de óleo que estes pesquisadores utilizaram para obter uma densidade de 661kg/m³. Além disso, o critério de similaridade adotado (Equação 3.28) baseado nos adimensionais modificados de Weber (Equação 3.30) e de Froude (Equação 3.29) foram deduzidos de forma incorreta, visto que a Equação (3.29) utiliza variáveis relativas a injeção de gás e a Equação (3.30) não é adimensional.

$$\rho_{óleo} = \rho_{água} - \lambda^2(\rho_{aço} - \rho_{escória})\left(\frac{\sigma_{a-e}}{\sigma_{w-o}}\right)^2\left(\frac{\rho_{água}}{\rho_{aço}}\right)^4\left(\frac{\rho_{Ar}}{\rho_{N_2}}\right)^2 \tag{3.28}$$

$$Fr_m = Fr_p \;\therefore\; \frac{\rho_{água} g L_m}{u_m^2 \rho_{N_2}} = \frac{\rho_{aço} g L_p}{u_p^2 \rho_{Ar}} \tag{3.29}$$

$$We_m = We_p \;\therefore\; \frac{u_m^2 \rho_{água}}{g\sigma_{w-O}(\rho_{água} - \rho_{óleo})^{1/2}} = \frac{u_p^2 \rho_{aço}}{g\sigma_{a-e}(\rho_{aço} - \rho_{escória})^{1/2}} \tag{3.30}$$

Onde: u_m e u_p – velocidade de referência no modelo e no protótipo, respectivamente (m/s); L_m e L_p – comprimento de referência no modelo e no protótipo, respectivamente (m); σ_{w-O} – tensão

interfacial água/óleo (N/m); σ_{a-e} – tensão interfacial aço/escória (N/m); g – aceleração da gravidade (m/s²); λ – fator de escala;); ρ – densidade (kg/m³); Ar – argônio e N_2 – gás nitrogênio;

De forma geral, os óleos utilizados em modelamento físico para simular a escória, apresentam densidade entre 800kg/m³ (querosene) e 950kg/m³ (óleos de silicone). Como a água possui densidade próxima de 1000kg/m³, o sistema água/óleo apresenta uma deficiência quanto à diferença de densidade para analisar as interações entre aço (ρ ~ 7000kg/m³) e escória (ρ ~ 3000kg/m³). Para aumentar a diferença de densidade entre os materiais similares a aço e escória, relata-se o uso de soluções aquosa de: cloreto de zinco 1340-1670kg/m³ (LIN & GUTHRIE, 1994; ARRUDA, 2015) ou cloreto de sódio (1071-1169kg/m³ SAVOLAINEN *et al.*, 2009).

3.4.4 Modelamento físico sobre a transferência de massa

A dessulfuração do aço envolve um conjunto de processos de tratamento com vistas ao ajuste de composição química para atender a variados pré-requisitos de qualidade. O estudo do fenômeno de transferência de massa do enxofre entre aço e escória é de grande importância para alcançar maior entendimento do processo e permitir a otimização das tecnologias existentes. A partir de resultados laboratoriais obtidos em modelo físico em escala, cujos parâmetros são bem monitorados, é possível determinar com relativa precisão as variáveis que mais afetam o processo, e então propor alterações para otimizar os resultados de taxa de remoção de enxofre.

Kim e Fruehan (1987) utilizaram timol ($C_{10}H_{14}O$) como material traçador em água para investigar o efeito de parâmetros operacionais, tais como vazão de gás, viscosidade do óleo, diâmetro e posição das ventaneiras, sobre a taxa de transferência de massa de enxofre numa panela de aciaria. A relação de partição de enxofre entre escória e metal é da ordem de 200 a 500, resultando em um processo controlado por difusão no metal líquido. Estes autores afirmaram que em muitos trabalhos anteriores sobre transferência de massa, o traçador utilizado possuía coeficiente de partição menor que 0,6. Kim e Fruehan (1987) escolheram timol como espécie transferida, pois obtiveram para um modelo a frio usando água e uma mistura 50/50 (em volume) de óleo de parafina e óleo de algodão como fase similar à escória, o valor de

coeficiente de partição de timol maior que 350.

Inicialmente o modelo de panela foi preenchido com 75L de água contendo entre 120ppm e 130ppm de timol. Adiciona-se 2,5L de óleo, valor proporcional a razão aço/escória no tratamento em forno panela. Após o início da injeção de gás, amostras de água são retiradas do sistema ao longo do teste. As amostras foram analisadas em um espectrofotômetro ultravioleta (UV) para determinar a concentração de timol em água. Kim e Fruehan (1987) notaram que existia uma vazão de gás crítica: abaixo desta vazão, a interface água/óleo é muito calma e o coeficiente de transferência de massa aparente variava fracamente com o aumento da vazão; em elevadas vazões de gás o coeficiente de transferência de massa aparente era proporcional a vazão de gás elevado a 1,43, devido à forte agitação que provocava o entranhamento e recirculação de gotas de óleo na água, aumentando a área interfacial água/óleo. Também observaram que a viscosidade do óleo afeta a transferência de massa para vazões altas de gás, pois esta influencia na formação e entranhamento de gotas de óleo. Baseado nestes resultados, Kim e Fruehan (1987) sugerem que para dessulfuração do aço em panela é necessária uma etapa de forte agitação (elevada vazão de gás) para maximizar a área interfacial entre aço e escória, seguido de uma etapa de agitação suave para promover a flotação das gotas de escória entranhadas.

Wei *et al.* (2001) avaliaram a taxa de transferência de massa entre partículas dessulfurantes e aço líquido no processo de sopro de pó na câmara de vácuo de um reator RH-PTB de 90t utilizando sopro de pó de NaCl P.A. (5g) num modelo físico em escala 1/5, utilizando argônio como gás de transporte do pó. A concentração de NaCl na água foi determinada utilizando o método de condutividade elétrica, sendo as alterações na condutividade da solução aquosa detectadas e monitoradas por meio de um medidor de condutividade elétrica posicionado na saída da perna de descida. Considerando uma solução saturada como padrão, o pico de condutividade foi correlacionado com a concentração de NaCl na água, e os coeficientes de transferência de massa de NaCl no líquido foram determinados. Wei *et al.* (2001) encontraram que o coeficiente de transferência de massa no líquido aumentava com o aumento da vazão de gás, do diâmetro da perna de subida e com o aumento do tamanho da partícula de pó. Além disso, o coeficiente de transferência de massa para a dissolução das partículas foi encontrado

no intervalo (1,36-7,30) × 10^{-4}m/s, que é muito maior do que no caso geral da transferência de um elemento entre a escória e o aço, e maior do que o valor para a injeção do pó em uma panela.

Em um estudo semelhante, Wei *et al.* (2007) avaliaram a taxa de transferência de massa entre partículas dessulfurantes e aço líquido no processo de sopro de pó no interior do líquido na panela de um reator RH de 150t utilizando sopro de pó de NaCl P.A. em um modelo físico em escala 1/4, utilizando ar comprimido como gás de transporte do pó. 10 g de pó de NaCl (separado por faixa de tamanho) foram injetados no líquido logo abaixo da perna de subida através de uma lança inclinada 45° em relação a vertical. Assim como no trabalho anterior (WEI *et al.*, 2001), a concentração de NaCl na água foi determinada utilizando o método de condutividade elétrica, e os resultados indicaram que o coeficiente de transferência de massa no líquido aumentava com o aumento da vazão de gás, do diâmetro da perna de subida e com o tamanho da partícula de pó. Wei *et al.* (2007) encontraram o coeficiente de transferência de massa para a dissolução das partículas dentro da faixa (3,392x10^{-5} e 2,661x10^{-4})m/s, que é menor que o resultado determinado por Wei *et al.* (2001) sob as condições do processo RH-PTB (entre 1/4 e 1/3 do valor), porém ainda é muito maior do que no caso geral da transferência de um elemento entre a escória e o aço.

Ressalta-se que sendo as partículas de pó utilizadas no modelo a frio (NaCl) mais densas que a água, o que pode influenciar no comportamento dinâmico destas partículas, diferenciando-o do comportamento das partículas de pó dessulfurantes sopradas no aço (partículas são menos densas que o aço). Além disso, é razoável pensar que há diferenças consideráveis entre o coeficiente de transferência de massa de um elemento entre um fluido e uma partícula (líquida ou sólida) e entre o coeficiente de transferência de massa para dissolução de partículas num líquido.

O processo de transferência de massa de enxofre entre aço líquido e escória dessulfurante foi avaliado por Costa (2016) utilizando modelo físico e matemático de diferentes reatores metalúrgicos, comumente utilizados para este fim. Inicialmente, Costa (2016) avaliou o coeficiente de transferência de massa de cobre II entre água e fase orgânica de recobrimento (querosene e ACORGA 3%), em modelo físico de panela de aciaria em escala 1:5. A partição de cobre entre fase orgânica e meio aquoso foi determinada experimentalmente, sendo igual a 332,7. A partir da evolução da concentração de Cu^{+2}, da velocidade relativa entre as fases na

interface e da área interfacial fornecidas pelo modelo matemático, o coeficiente de transferência de cobre II foi ajustado e aplicado à correlação de Sherwood (Equação 3.31). Seguiu-se com a validação da correlação adimensional de Sherwood em um modelo físico do reator Kambara (KR), também de escala 1:5, dada a grande proximidade entre os valores da taxa de transferência de massa prevista pela correlação adimensional com a taxa de transferência de massa aparente obtida nos testes com o modelo do KR.

$$k_A = 0{,}062 \cdot Re_L^{4/5} \cdot Sc^{1/3} \cdot {}^{D_S}/_{L} \tag{3.31}$$

Onde: k_A - coeficiente de transferência de massa (m/s); Re - Número de Reynolds; Sc - Número de Schmidt; D_S - difusividade do enxofre no aço líquido (m^2/s); L - comprimento característico, dado pelo diâmetro do reator na linha de interface aço escória.

Costa (2016) procurou validar a abordagem matemática em escala industrial utilizando resultados industriais, de três tratamentos de dessulfuração de aço em panela com agitação por injeção de gás. Obteve-se 95% de precisão entre os valores previstos e a taxa de dessulfuração alcançadas industrialmente. Por fim, Costa (2016) aplicou a mesma metodologia no processo KR e no processo RH, obtendo resultados consistentes com a literatura. Porém, ressalta-se que para o reator RH, Costa (2016) considerou uma camada de escória sobrenadante no interior da câmara de vácuo, sendo o mecanismo proposto para a remoção de enxofre através da interface metal escória. Não foi considerada a possibilidade de arraste desta escória pelo fluxo de aço para a panela (e posterior absorção pela escória de topo na panela). A elevada turbulência no interior da câmara de vácuo e valores relativamente altos de velocidade do aço líquido nesta região sugerem que esta camada sobrenadante não seria estável, sendo aos poucos arrastada pelo fluxo de aço.

Considerando o material dessulfurante adicionado na câmara de vácuo pela calha de adição de ligas no Reator RH, experimentos de transferência de massa em modelo físico podem elucidar questões relativas às condições ótimas de taxa de circulação, à minimização do tempo de tratamento, e previsibilidade do grau de dessulfuração que pode ser alcançado pela técnica.

4 MATERIAIS E MÉTODOS

Em função das variáveis propostas para análise, este trabalho foi dividido nas seguintes etapas:

1) experimentos de modelagem física do escoamento no reator RH, para determinar as taxas de circulação em diferentes condições operacionais e filmagens da zona de injeção para caracterizar a penetração e a dispersão do gás na zona de injeção;

2) desenvolvimento da simulação matemática do escoamento bifásico (líquido/gás) no reator RH, para prever as taxas de circulação em diferentes condições operacionais: determinação da combinação de forças de arraste e não-arraste pela comparação com resultados do modelo físico;

3) experimentos de modelagem física utilizando água e solução salina como fluido similar ao aço e 4 tipos de óleos (diferentes densidades e viscosidades) para simular a escória, avaliando tempo de residência e diâmetro das gotas arrastadas; testes de transferência de massa de timol entre a água e o óleo adicionado na câmara de vácuo para simular o processo de dessulfuração no reator RH.

4) desenvolvimento do modelo cinético para estimativa da taxa de dessulfuração a partir de resultados do modelo físico (comportamento óleo/água) e da simulação matemática (taxa de dissipação de energia cinética turbulenta;

As combinações de variáveis assim como os métodos empregados para análise são resumidas na Tabela 4.1. Alguns destes testes utilizaram os três tipos de fluido (água, solução aquosa de NaCl e solução aquosa de $ZnCl_2$) como fluido de circulação similar ao aço. De modo a contornar problemas de distorção das imagens pela curvatura do vaso inferior durante filmagens com câmera de alta velocidade e durante a realização de análises quantitativas do fluxo do fluido através da técnica PIV, um segundo modelo do vaso inferior foi construído no formato retangular. Um desenho esquemático do modelo é apresentado na Figura 4.1(a) e uma imagem do modelo em acrílico na Figura 4.1(b). A Tabela 4.1 destaca a divisão dos testes em relação à utilização do vaso inferior cilíndrico e retangular.

Tabela 4.1 – Métodos de análise e combinação de variáveis utilizadas nos testes.

Parâmetros			**Método de análise**						
			Taxa de circulação					**Injeção de óleo**	
Vaso Inferior	**Imersão Pernas (mm)**	**Vazão de gás (L/min)**	**Strain Gages**	**PIV**	**Cond.**	**CFX Est.**	**CFX Tr.**	**Modelo físico**	**CFX**
Caixa retangular	60	30, 40, 50, 60, 70, 80, 90, 100, 110, 120	X	X	X	X			
		70, 80, 90, 100, 110						Diâmetro de gotas	
Panela cilíndrica	60, 100 e 140	30, 40, 50, 60, 70, 80, 90, 100, 110, 120, 130, 140, 160	X		X	X			
	60	70, 90, 110					traçador	Tempo de residência	Trajetória das gotas

*Cond. – Condutivimetria; Est. – Estacionário; Tr. – Transiente;

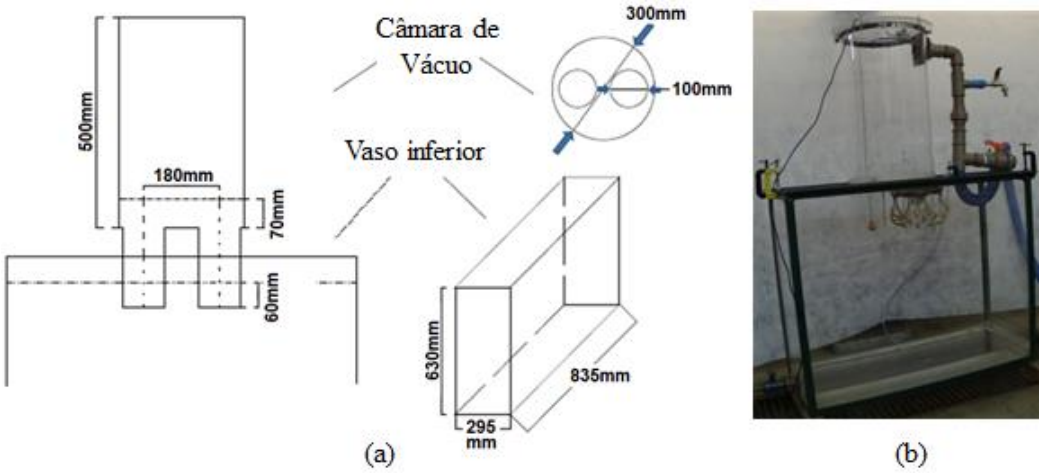

Figura 4.1 – (a) Representação esquemática dos parâmetros geométricos do modelo físico utilizando vaso inferior retangular. (b) Modelo de acrílico do desgaseificador RH.

4.1 Modelo Físico

Um fluxograma resumindo a divisão dos testes realizados no modelo físico do reator RH é apresentado na Figura 4.2. O modelo físico do sistema RH foi construído em acrílico, obedecendo a um fator de escala λ = 1:7,5. Dados geométricos e operacionais do reator industrial em que este modelo se baseia são mostrados na Tabela 4.2, que descreve também as características do modelo, operado de acordo com critérios de similaridade específicos, que são explicitados a seguir.

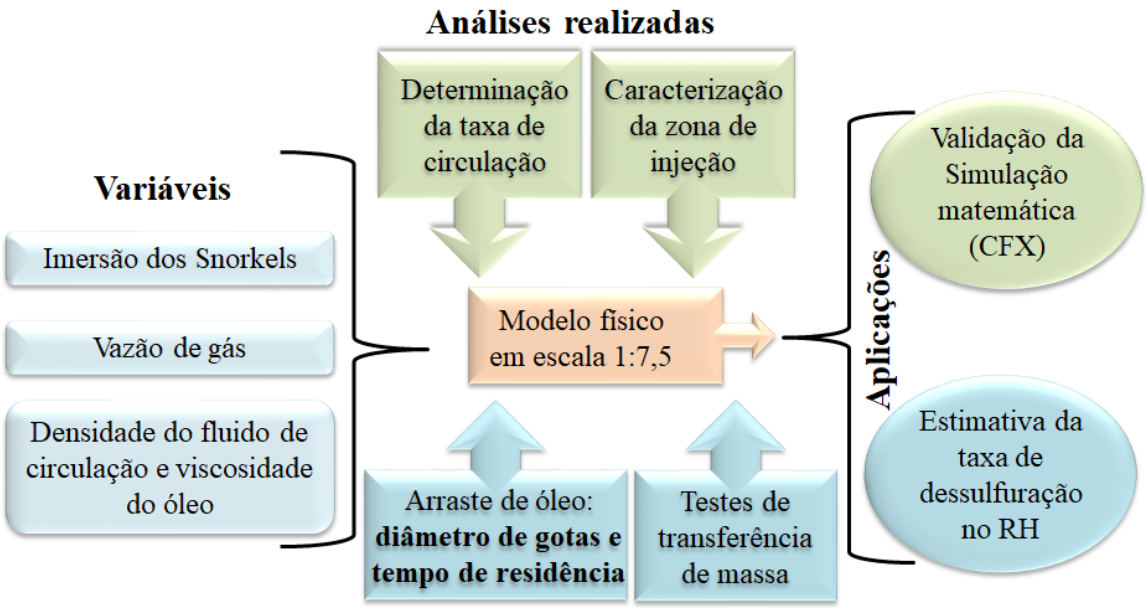

Figura 4.2 – Fluxograma esquemático das variáveis, objetivos dos testes realizados e principais finalidades dos resultados obtidos no modelo de acrílico do desgaseificador RH.

Segundo Seshadri e Costa (1986), as variáveis relevantes ao processo RH são aquelas apresentadas na Tabela 4.3. Desta forma o Teorema π de Buckingham permite definir seis grupos adimensionais e independentes entre si, que podem ser escritos em função destas variáveis. A partir desta análise, os critérios de similaridade podem ser tomados como sendo os grupos da Tabela 4.4. Similaridade requer que todos sejam obedecidos simultaneamente, o que pode não ser possível para uma dada escolha de fluidos (ar/argônio; aço/água).

Tabela 4.2 – Descrição das Características do Protótipo e do Modelo

CARATERÍSTICAS DO REATOR		PROTÓTIPO	MODELO
	Peso Médio da Corrida (t)	315	-
	Pontos de Injeção de gás (Perna de Subida)	16 bicos, distribuídos em 2 níveis de injeção	16 bicos, 2 níveis
Dados Operacionais	Capacidade de Vácuo (mBar)	0,67	984
	Temperatura de Trabalho (°C)	1560	25
	Fluido	Aço	Água
	Densidade de Fluido (kg/m³)	7000	1000
Vaso	Diâmetro Interno (mm)	2245	299,33
	Altura (mm)	7600	65*
Vaso inferior (Panela)	Di superior (mm)	3400	490
	Di inferior (mm)	3000	460
	Altura (mm)	4250	566
	Altura líquido (mm)	3650	486
Pernas	Comprimento (mm)	1540	205,33
	Diâmetro Interno (mm)	750	100
	Distância entre Linhas de Centro (mm)	1500	180
	Profundidade de Imersão (mm)	450	60
Sistema de Injeção de Gás de Arraste	Gás	Argônio	Ar comprimido
	Vazão (NL/min)	2500	120
	Densidade de Gás (k/m³)	0,13	1,123
	Distância entre Níveis de Injeção (mm)	175	23,33
	Diâmetro do Bico de Injeção (mm)	8	2,4

OBS: *Altura necessária somente para elevação da água, devido o vácuo induzido.

Tabela 4.3 – Variáveis relevantes à recirculação no processo RH

PARÂMETRO	***VARIÁVEIS***	***DIMENSÃO***
Velocidade do Líquido	V	Lt^{-1}
Diâmetro Interno da Perna	D	L
Massa Específica do Líquido	ρ_L	ML^{-3}
Massa Específica do Gás	ρ_g	ML^{-3}
Viscosidade do Líquido	μ	MLt^{-1}
Aceleração da Gravidade	G	Lt^{-2}
Vazão de Gás	G	L^3t^{-1}
Velocidade do Gás no Bico	u_g	Lt^{-1}
Diâmetro do Bico	φ	L

Tabela 4.4 – Grupos adimensionais, critérios de similaridade

Grupo	Expressão	Comentários
Froude	$Fr = \frac{V^2}{gD}$	Razão entre força de inércia do líquido e a força peso do mesmo.
Reynolds	$Re = \frac{D\rho V}{\mu}$	Razão entre força de inércia e a força de natureza viscosa, do líquido
Vazão relativa	$N_{Va} = \frac{Q}{D^2 V}$	Fração de volume da perna de subida que é ocupada pelo gás injetado
Froude modificado	$Fr_m = \frac{u_g^2 \rho_g}{Dg\rho_L}$	Razão entre força de inércia do gás no ponto de injeção e o peso do líquido a ser deslocado
Razão geométrica, cinemática, de densidade	$\frac{\varphi}{D}$; $\frac{u_g}{v}$; $\frac{\rho_g}{\rho_L}$	

O adimensional de Reynolds não foi tomado em consideração nestes cálculos, pois na perna de subida o fluxo é bifásico e turbulento. Então a viscosidade molecular (que reflete a influência da força viscosa) não é o parâmetro adequado para refletir o fluxo. Os cálculos que resultaram nos dados da Tabela 4.2 assumem que os parâmetros relevantes ao movimento de líquido na perna de subida são: a força de inércia do líquido; a força peso do líquido presente na perna; a fração da perna de subida ocupada pelo gás; e a força de inércia do gás no ponto de injeção. Os adimensionais de Froude (Equação 4.1), a Vazão Relativa (Equação 4.2) relacionam as três primeiras forças. Utilizando estes critérios e a razão de escala $\lambda = 7{,}5$, determinam-se os parâmetros do modelo físico. Note-se que na Tabela 4.2 estão as dimensões do vaso inferior no formato cilindro cônico, de acordo com o fator de escala.

$$Fr = \frac{V^2}{gD} \tag{4.1}$$

$$N_{Va} = \frac{Q}{D^2 V} \tag{4.2}$$

Além do mais, por questão de conveniência, os bicos de injeção podem não obedecer à escala adotada para o restante do sistema. Esta última particularidade requer adaptar estes critérios, de modo a refletir o sentido do número de Froude modificado:

$$Fr_{mod} = \frac{\rho_g \, Q \, (Q/\varphi^2)}{\rho_l \, D^3 \, g} \tag{4.3}$$

Como exemplo de utilização destes critérios considere-se que os índices *m* e *p* representam, respectivamente, *modelo* e *protótipo* (máquina industrial). Do adimensional de Froude se tira que:

$$\frac{V_m^2}{gD_m} = \frac{V_p^2}{gD_p} \quad => \quad \frac{V_m^2}{V_p^2} = \frac{D_m}{D_p} = \lambda \; => \; \frac{V_m}{V_p} = \lambda^{1}/_{2} \tag{4.4}$$

Esta razão, lançada ao critério de vazão relativa de fluidos (Equação 4.2), resulta em:

$$\frac{Q_m}{D_m^2 V_m} = \frac{Q_p}{D_p^2 V_p} \quad => \quad \frac{Q_m}{Q_p} = \left(\frac{D_m}{D_p}\right)^2 \frac{V_m}{V_p} = \lambda^2 \lambda^{1/2} = \lambda^{5}/_{2} \tag{4.5}$$

Para determinar a relação entre os diâmetros do bico de injeção de gás, do modelo e protótipo, usa-se o número de Froude modificado (Equação 4.2). Considerando ainda a relação entre vazão de gás, velocidade média do gás no orifício e área do orifício, $Q = U \,.\frac{\pi\varphi^2}{4}$, tem-se:

$$\frac{U_m^2 \rho_{gm}}{D_m g \rho_{lm}} = \frac{\mathrm{U}_p^2 \rho_{gp}}{D_p g \rho_{lp}} \quad => \quad \frac{(Q_m^2/\varphi_m^4)\rho_{gm}}{D_m \rho_{lm}} = \frac{(Q_p^2/\varphi_p^4)\rho_{gp}}{D_p \rho_{lp}} \tag{4.6}$$

$$\frac{\varphi_m^4}{\varphi_p^4} = \frac{\rho_{gm}}{\rho_{gp}} \frac{\rho_{lp}}{\rho_{lm}} \frac{D_p}{D_m} \left[\frac{Q_m}{Q_p}\right]^2 = \frac{\rho_{gm}}{\rho_{gp}} \frac{\rho_{lp}}{\rho_{lm}} \lambda^4 \tag{4.7}$$

A aplicação destas fórmulas requer a densidade real do gás e a vazão real do gás injetado nas condições industriais, das quais pode-se apenas inferir valores aproximados de pressão e temperatura. Um fator de expansão/compressão (F_{exp}), medido em relação às CNTPs do gás pode ser estimado como:

$$F_{exp} = \alpha \frac{T_{aço}}{273} \frac{1{,}013 \; x10^5}{P_{vácuo} + \rho_{aço} g H} \tag{4.8}$$

onde $T_{aço}(K)$ é a temperatura do aço; $P_{vácuo}$ representa a pressão na câmara de vácuo, $\rho_{aço}$ é a densidade do aço e H a distância o ponto de injeção e a superfície do aço na câmara de vácuo; α é um fator de correção, a determinar. Portanto, F_{exp} não pode ser obtido com precisão. Considerando a perna com 1540mm de comprimento, imerso a 450mm no aço:

$$F_{exp} = \alpha \frac{T_{aço}}{273} \frac{1{,}013\ x10^5}{P_{vácuo} + \rho_{aço} g H} = \alpha \frac{1873}{273} \frac{1{,}013\ x10^5}{\sim 0 + 7000\ x\ 9{,}81\ x\ 1{,}37} = 7{,}4\ \alpha \qquad (4.9)$$

Considerando α =1, finalmente a vazão no modelo é dada por:

$$\frac{Q_m}{Q_p} = \lambda^{5/2}\ ; \frac{Q_m}{7{,}4 \text{ x } 2500} = \left(\frac{1}{7{,}5}\right)^{5/2} \quad ; Q_m = 7{,}4 \text{x} \lambda^{5/2} \text{x} Q_p \qquad (4.10)$$

Enquanto que o diâmetro do orifício deve ser:

$$\frac{\varphi_m^4}{\varphi_p^4} = \frac{\rho_{gm}}{\rho_{gp}} \frac{\rho_{lp}}{\rho_{lm}} \lambda^4 = 7{,}4\ \frac{7000}{1000} \left(\frac{1}{7{,}5}\right)^4 \qquad (4.11)$$

$$\frac{\varphi_m}{\varphi_p} = 0{,}3577\ ;\ \varphi_m = 2{,}86mm \qquad (4.12)$$

4.1.1 Determinação da taxa de circulação – Método da Condutivimetria

No modelamento físico do reator RH, uma técnica usualmente empregada para determinar a taxa de circulação é o Método da Condutivimetria, como nos trabalhos de Seshadri e Costa (1986), Vargas (2000), Kishan e Dash (2009), Neves (2012), entre outros. A técnica consiste na injeção de uma solução salina (traçador) em forma de pulso na câmara de vácuo ou na perna de subida, e avaliação da concentração do sal na perna de descida, pela medição da variação de condutividade da água. A alteração na condutividade é continuamente monitorada através de um sensor de condutividade (condutivímetro), que é conectado a uma placa de aquisição de dados, que por sua vez faz interface com um programa de computador, onde os dados de cada ensaio são armazenados e processados. Ao se obter a estabilização do sinal (isto é, com uma variação menor que 5%) considera-se que a homogeneização foi alcançada.

As medidas obtidas são transformadas em concentrações, após prévia calibração, permitindo a obtenção de uma curva de concentração versus tempo (Figura 4.3a) e, por conseguinte, a determinação da taxa de circulação através das equações 4.13 a 4.16, obtidas por meio de balanço de massa de traçador, como descrito no trabalho de Vargas (2000). Entre os tempos t_1 e t_2, a massa total de traçador que passa pela perna de descida é dada por:

$$M_{Sal} = \int_{t_2}^{t_1} Q_c \,.\, C_{Sal} \,.\, dt \tag{4.13}$$

Considerando-se Q_c constante:

$$M_{Sal} = Q_c \,.\, A_{pico} \tag{4.14}$$

Onde: M_{sal} = massa de traçador em gramas; Q_c = taxa de circulação em k/s; C_{sal} = concentração em g de KCl/kg de água;

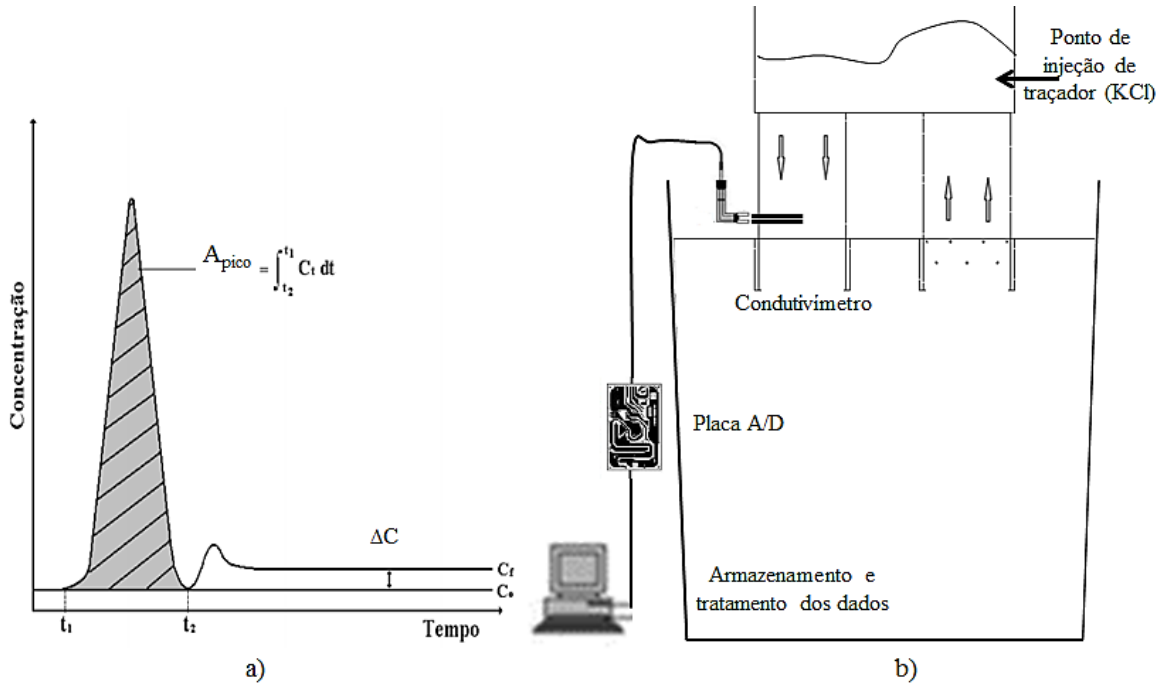

Figura 4.3 – a) Curva experimental típica de concentração de traçador (KCl) versus tempo (Vargas, 2000); b) Diagrama esquemático do sistema de medição de taxa de circulação pelo método da Condutivimetria.

Após estabilização, a massa de traçador é obtida pelo produto da quantidade de líquido no reator (W_m, em kg) e o incremento de concentração de traçador (ΔC_{sal}):

$$M_{sal} = \Delta C_{sal} * W_m \tag{4.15}$$

e então:

$$Q_c = \Delta C_{sal} * W_m / A_{pico} \tag{4.16}$$

A injeção do pulso salino (5mL de solução aquosa saturada de KCl) foi realizada no interior da câmara de vácuo, próximo a perna de subida, enquanto o condutivímetro foi posicionado no centro da perna de descida (ver Figura 4.3b). Foram realizados cerca de 8 testes para cada condição experimental (combinação de vazão de gás e imersão das pernas, conforme tabela 4.1). Após o término dos testes de cada condição experimental, troca-se o líquido contido no modelo para evitar a saturação da água.

4.1.2 Determinação da taxa de circulação – Método de Ponte de *Strain Gage*

Ao se utilizar as soluções aquosas de NaCl ou $ZnCl_2$ como fluido similar ao aço, não é possível a utilização do método da condutivimetria para determinar a taxa de circulação no modelo de RH. Desta forma, foi utilizado um sistema de medição indireta a partir de uma ponte de *strain gages*. Parte do esquema experimental para medição da taxa de circulação é mostrado na Figura 4.4. Uma esfera de massa m_e e raio R_e conhecidos é dependurada na extremidade de uma lâmina flexível. A esfera é posicionada na perna de descida, estando, portanto, sujeita à interação com o fluido que retorna à panela. Os esforços aplicados sobre a lâmina são tais que a mesma se encontra no regime elástico de flexão. Dois *Strain Gage* são colados na face superior da lâmina e outros dois na face inferior, interconectados de forma a compor uma ponte completa de *Wheatstone*. *Strain Gage* é um dispositivo cuja resistência elétrica varia proporcionalmente com a deformação sofrida pelo mesmo. E assim, o sinal elétrico da ponte de *Wheatstone* muda com a deformação. A determinação da deformação exige a medição exata de variações de resistências muito pequenas o que requer o uso de um condicionador de sinal, como mostrado na Figura 4.4.

A esfera posicionada no interior da perna de descida está sujeita a esforços correspondentes a peso, empuxo e força de arraste proporcionada pelo fluido. Maior a vazão de fluido, maior a força de arraste, maior a deformação da lâmina e maior o sinal gerado pela ponte. Portanto o sinal da ponte pode ser utilizado para se estimar a vazão (taxa de circulação), como se descreve a seguir.

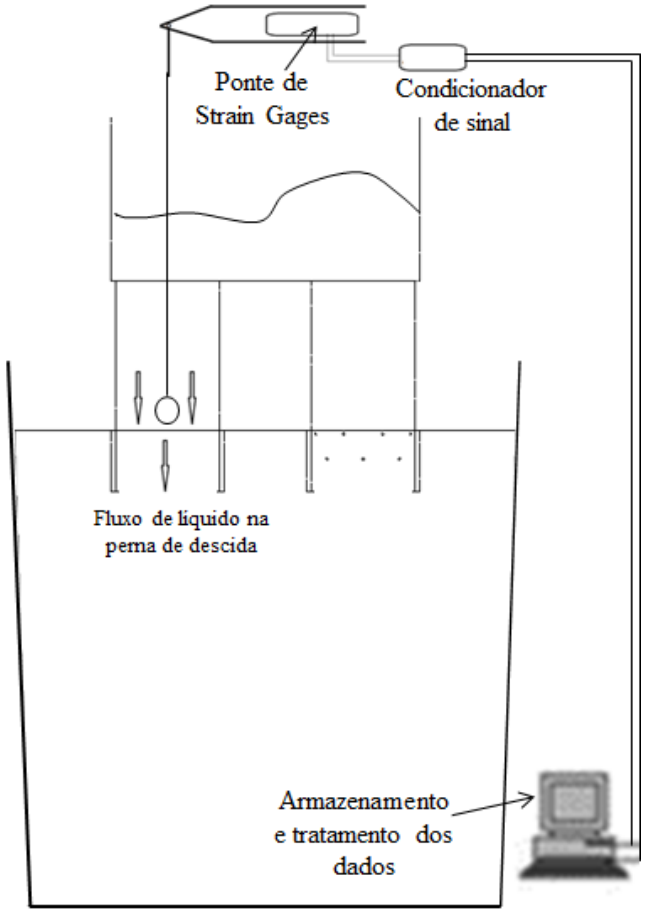

Figura 4.4 – Diagrama esquemático do sistema de medição de taxa de circulação pelo método da Ponte de *Strain Gage*.

As deformações sofridas pelas *Strain Gage* são recebidas numa placa de aquisição de dados A/D e são fornecidas indiretamente na forma de uma diferença de potencial (Volts) gerada pelo condicionador de sinal. São realizadas três séries de leituras por experimento. Primeira leitura, da ponte sem deformação (ponto Zero); sujeita ao peso próprio da lâmina, sem o acoplamento da esfera. Segunda leitura, o sinal da ponte após o acoplamento da esfera, mas no ar, sem a passagem de líquido. Este segundo sinal subtraído do primeiro corresponde ao peso da esfera, o qual foi previamente determinado em balança de precisão. Portanto estes dois primeiros sinais fornecem a calibração do modelo. A terceira leitura é feita com a circulação do fluido e permite determinar, portanto, a força de arraste. Desta forma:

$$Resultante\ [N] = (3^a Leitura - 1^a Leitura)[V] x \frac{Peso\ da\ Esfera\ [N]}{(2^a Leitura - 1^a Leitura)\ [V]} \quad (4.17)$$

$$Resultante\ [N] = (Peso\ da\ Esfera - Empuxo) + f\ \frac{1}{2}\rho_L v^2 \pi R_e^2 \quad (4.18)$$

A resultante é medida pela ponte de *strain gages*; peso e empuxo são conhecidos; a força de arraste (F_A) pode ser calculada:

$$F_A = \ Resultante\ [N] - (Peso\ da\ Esfera - Empuxo)\ \ [N] \quad (4.19)$$

$$F_A = \ f\ \frac{1}{2}\rho_L \mathrm{v}_l^2 \pi R_e^2 \quad (4.20)$$

Sabe-se que o fator de fricção f é dado em função do número de Reynolds (Re):

$$Re = \ \frac{\rho_L \mathrm{v}_l R_d^2}{\mu} \quad (4.21)$$

f = 24/Re; se $Reynolds\ \leq 1$ (4.22)

$f = \frac{18{,}5}{Re^{0{,}6}}$; se $1 < Reynolds < 1000$ (4.23)

$f = 0{,}44$; se Reynolds > 1000 (4.24)

Onde: ρ_L – densidade do líquido (kg/m³), v_l – velocidade do líquido (m/s); $\mathrm{R_d}$ – raio da perna de descida (m); μ_l – viscosidade do fluido (Pa.s); f - fator de fricção.

Resolve-se então, para determinar o valor de velocidade v_l, o sistema de Equações (4.20) a (4.23). Foram realizados 10 testes para cada condição experimental, tomando-se a média dos valores de velocidade obtidos. Daí a vazão do líquido, ou Taxa de Circulação, pode ser calculada como:

$$Taxa\ de\ Circulação\ [kg/s] = \rho_l(\mathrm{v}_l \pi R_d^2) \quad (4.25)$$

4.1.3 Velocimetria PIV (*Particle Image Velocimetry*)

Para análise quantitativa do fluxo por meio de simulação física foi utilizada a técnica PIV (*Particle Image Velocimetry*) através do aparelho fabricado pela DANTEC® existente no laboratório de Pirometalurgia do DEMET/UFOP. Os testes foram realizados de acordo com o esquema da Figura 4.5, através da montagem de um sistema da DANTEC – 2D, o qual compõe-se basicamente de um laser *Dual power*- 65/15 400mJ, duração de pulsos de 4ns, faixa de comprimento de onda entre 1064nm e 532nm, uma câmera CCD *Flow-Sense* 2ME, e com

análise de imagens via software *Dynamics Studio*. Para todas as condições experimentais, foram adquiridas 100 imagens com intervalos entre pulsos do laser de 3000µs e frequência de captura de 10Hz.

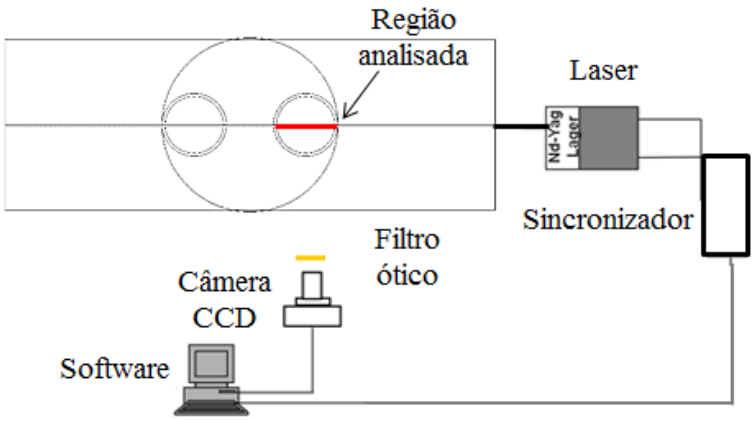

Figura 4.5 – Representação esquemática da montagem experimental para realização de captura de imagens pela técnica PIV.

A distância entre a câmera que compõe o sistema PIV e o modelo foi definida de modo que a área de abrangência da câmera cobrisse toda a seção da perna de descida (100mm horizontalmente) resultando num retângulo de aproximadamente 120mmX100mm (largura x altura). Sendo assim, foi mapeada toda a região lateral da perna de descida, entre a saída da perna e o limite de imersão da perna (60mm). Esta análise permitiu determinar o perfil de velocidades ao longo da perna para diferentes vazões de gás. A Tabela 4.5 resume algumas das variáveis importantes para realização dos testes.

Tabela 4.5 – Parâmetros para os testes de velocimetria PIV.

Parâmetros	**Valores**
Área visualizada	12x10cm²
Distância laser-modelo	0,5m
Distância câmera-modelo	0,8m
Diâmetro das partículas utilizadas	5µm

Foram realizadas análises de velocidade na perna de descida, em segmentos de reta coincidentes com o diâmetro da mesma e em diferentes alturas da perna. Destes valores, pode-se calcular a taxa de circulação, dada pela relação (Equação 4.26).

$$Taxa\ de\ Circulação[kg/s] = \rho_L\ 2\int_0^{R_d} 2\pi v x\ dx \tag{4.26}$$

Onde: R_d é o raio da perna de descida; v é a velocidade no ponto x determinada pela técnica PIV; e x é a distância do ponto até o centro da perna de descida.

4.1.4 Injeção de material na câmara de vácuo

Para simular a injeção de dessulfurante estado sólido (partículas) na câmara de vácuo do reator RH foram utilizadas partículas de polipropileno como fluido similar à escória dessulfurante, avaliando-se o tempo de arraste e a trajetória das partículas da câmara de vácuo para a panela. Como indicado na Figura 4.6(a), o material foi injetado na câmara de vácuo, a uma altura H da superfície livre do líquido.

Considerando como critério de similaridade na injeção de partículas de dessulfurante o adimensional de Froude modificado, razão entre a força de inércia das partículas no ponto de impacto na superfície do líquido e o peso do líquido a ser deslocado, tem-se:

$$Fr_{mp} = \frac{u_P^2 \rho_P}{d_p g \rho_L} \tag{4.27}$$

$$u_P = \sqrt{2gH_{inj}} \tag{4.28}$$

Onde: u_P – velocidade que a partícula atinge a superfície do líquido (m/s); ρ_P e ρ_L – densidade da partícula e do líquido, respectivamente (kg/m³); d_P – diâmetro da partícula (m). O valor de u_p pode ser determinado em função da altura H_{inj} (altura do ponto de injeção do dessulfurante), conforme esquema da Figura 4.6(a):

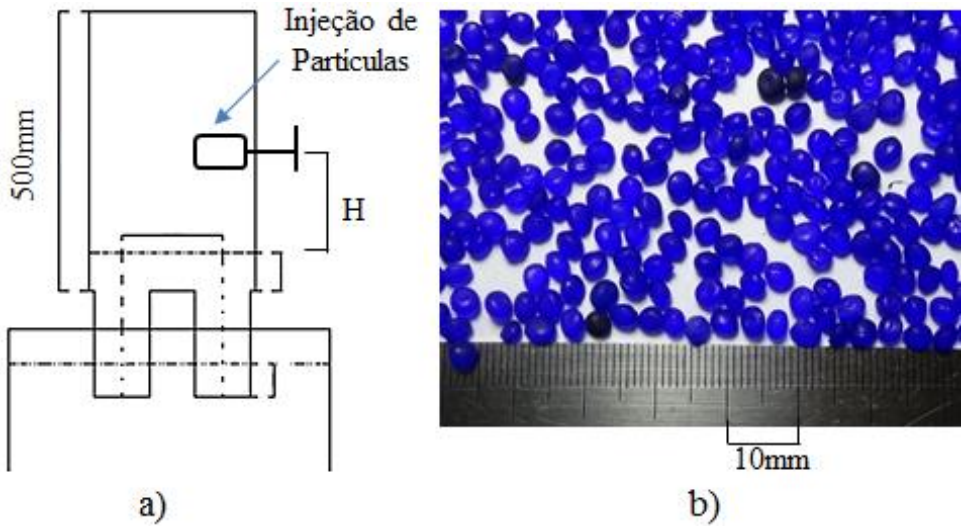

Figura 4.6 – a) Representação esquemática da posição para injeção de partículas na câmara de vácuo do modelo do reator RH; b) partículas de polipropileno (ρ = 889kg/m³, diâmetro médio de 3,5mm).

A Tabela 4.6 apresenta informações sobre a injeção de dessulfurante no modelo e no protótipo. No modelo físico o valor utilizado para H foi 20cm, que de acordo com o critério de similaridade proposto, representa a uma queda de 3,4m no reator real, valor coerente com a posição do sistema de calhas de adição de ligas. Foram injetados 250g de partículas de polipropileno (ρ_p = 889kg/m³), com diâmetro médio de 3,5mm (Figura 4.6b). Uma câmera é posicionada frontalmente a câmara de vácuo e outra frontalmente a panela para capturar o movimento das partículas arrastadas pelo fluxo. Foram realizados 2 testes para cada vazão de gás (60L/min, 70L/min, 80L/min, 90L/min e 100L/min), com a imersão das pernas igual a 60mm. A partir das filmagens, determina-se o tempo total para que as partículas sejam arrastadas da câmara de vácuo.

Para simular o arraste do material dessulfurante no estado líquido, óleos de diferentes densidades e viscosidades foram injetados na câmara de vácuo do modelo físico do reator RH, Figura 4.7. Utilizou-se um tubo de 20mm de diâmetro, com saída de 10mm para adição do material próximo ao centro da câmara de vácuo. Foram realizadas filmagens na seção longitudinal da câmara de vácuo e na panela, para determinar o trajeto das gotas de óleo entre a câmara de vácuo e a superfície da panela e estimar o tempo no qual o óleo permanece disperso no interior do fluido de circulação. Nestas filmagens, N-pentano foi utilizado para simular a

escória devido a sua baixa densidade. Yamashita e Iguchi (2003) também utilizaram este sistema (água/N-pentano) em modelo físico de forno panela com injeção de gás pelo fundo para avaliar o entranhamento gotas de escória e o tempo de residência destas gotas no aço líquido.

Tabela 4.6 – Principais parâmetros dos testes de injeção de partículas.

	Modelo		Industrial*
Fluido	Solução aquosa de NaCl	água	Aço
Partícula	Polipropileno	Polipropileno	Dessulfurante
ρ_L (kg/m³)	1170	1000	7000
ρ_P (kg/m³)	889	889	3000
d_P (m)	0,0035	0,0035	0,025
u_P (m/s)	1,98	1,98	8,11
H_{inj} (m)	0,20	0,20	3,4

* Valores aproximados.

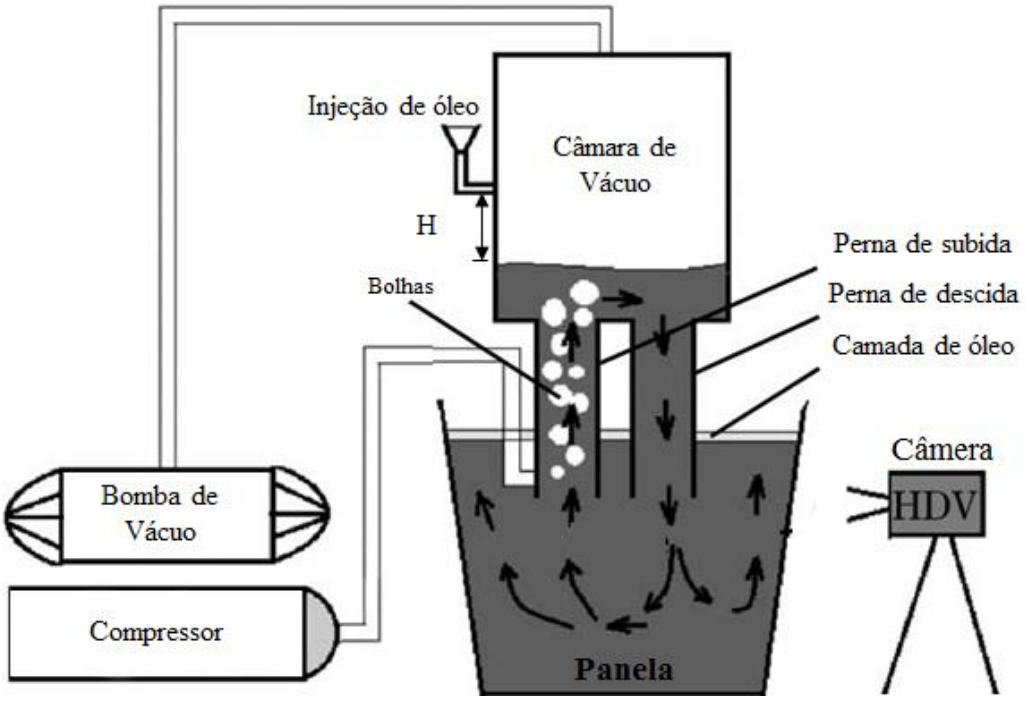

Figura 4.7 – Representação esquemática da montagem experimental para realização dos testes com injeção de óleo.

Quatro tipos de óleos foram utilizados em testes para avaliar o tamanho das gotas arrastadas da câmara de vácuo para a panela, conforme descrito no tópico seguinte. A Tabela 4.7 apresenta os valores das propriedades físicas dos materiais que foram utilizados nos testes deste trabalho e os valores de tensão interfacial entre os sistemas utilizados para simular o comportamento aço/escória. Para determinar as tensões superficiais e interfaciais foram realizadas medições utilizando um tensiômetro - *Surface Tension Analyse*, (DST-60 *Surface Electro Optics Corp*. - disponível no laboratório de Pirometalurgia do DEMET/UFOP. No trabalho de Arruda (2015), encontra-se uma breve descrição do funcionamento deste equipamento. A viscosidade dos óleos foi determinada utilizando o Viscosímetro Rotacional Digital Marte, modelo MVD8, também presente no mesmo laboratório presente no laboratório de Pirometalurgia DEMET-UFOP. Os valores apresentados na Tabela 4.7 são as médias de 3 medições de tais propriedades.

Tabela 4.7 – Valores da viscosidade e densidade de materiais utilizados no modelamento da interação metal/escória.

Material X	**Densidade (kg/m³)**	**Viscosidade**		**tensão interfacial σ (mN/m) [e]**		
		cSt [a]	**mPa.s**	**X/ar**	**X/água**	**X/NaCl**
Água	1000	1	1	72.0	-	-
Solução aquosa ($ZnCl_2$)	1220	12,6 [b]	15,37	-	-	-
Solução (NaCl)	1170	1,33 [c]	1,56	59,2	-	-
Óleo de Silicone 500cSt	950	500	475	39,4	40,9	40,1
Óleo de Silicone 50cSt	950	50	47,5	35,4	35,6	33,6
10 W30	855 [e]	158,2 [e]	135,3	20,8	12,9	8,4
N-pentano	626	0,4	0,23[d]	18,4	5,7	-

[a] 1cSt = 1centistokes = 0,01cm²/s = 0,000001m²/s; [b] Weingartner *et al.* (1984); [c] Savolainen *et al.* (2009); [d] Yamashita e Iguchi (2003); [e] valores medidos;

4.1.5 Filmagens com câmeras de alta velocidade

Para caracterizar da zona de injeção de gás (bolsão de gás proveniente dos bicos injetores) foram realizadas filmagens da parte inferior da seção transversal da perna de subida, utilizando uma câmera de alta velocidade e alta resolução, existentes no laboratório de Pirometalurgia do DEMET/UFOP, nas diferentes condições de vazão de gás. Utilizou-se a câmera de alta

velocidade modelo PiXELINK PL- B776U, com software próprio para a aquisição de imagens. A análise das imagens selecionadas foi realizada com o software AOS Imagem Studio. Imagens da profundidade do bolsão de gás em diferentes alturas da perna de subida foram utilizados para validar a simulação matemática.

Utilizando-se o vaso inferior no formato retangular, posiciona-se uma câmera de alta definição e de alta velocidade AOS S-PRI logo abaixo da saída da perna de descida de modo a capturar imagens das gotas de óleo arrastadas da câmara de vácuo. Estas imagens foram utilizadas para avaliação de quantidade, da morfologia e do tamanho (diâmetro) das gotas de óleo formadas em função das condições dos testes (tipo de fluido, tipo de óleo e vazão de gás), conforme Tabela 4.8. É de grande importância se estimar o tamanho destas gotas, pois a área de contato água/óleo ou solução de NaCl/óleo - ou seja, aço/escória - representa um parâmetro de grande importância sobre taxa de dessulfuração. O método utilizado para medição do diâmetro das gotas é descrito no tópico seguinte.

Tabela 4.8 – Combinação de variáveis para realização dos testes de medição de gotas de óleo.

Fluido de circulação	**Vazão de gás (L/min)**	**Óleos**
água	70, 80, 90, 100 e 110	50 (cSt)
		500 (cSt)
	70, 90 e 110	10W30
		n-Pentano
Solução aquosa NaCl	60, 70, 80, 90, 100	50 (cSt)
		500(cSt)
	70, 90 e 110	10W30
Parâmetros fixos: nível de líquido na câmara de vácuo 70mm; imersão das pernas 60mm.		

4.1.6 Medição do diâmetro das gotas de óleo

Para avaliar o tamanho das gotas de óleo que são arrastadas para a panela, as imagens capturadas abaixo da perna de descida foram tratadas utilizando-se o programa livre ImageJ. Através de uma prévia calibração utilizando uma imagem com escala, o programa permite estimar

simultaneamente a área de várias partículas numa mesma imagem. As imagens passam por tratamento prévio para melhorar o contraste, permitindo a identificação dos contornos das gotas.

Para cada combinação de vazão de gás, tipo de óleo e fluido de circulação (água ou solução de NaCl) apresentadas na Tabela 4.8, foram analisadas entre 10 e 20 imagens, num intervalo total de até 10s de filmagem, totalizando entre 200 e 600 gotas por teste. A Figura 4.8 exemplifica algumas imagens obtidas entre as etapas de medição. A calibração consiste em fornecer ao programa uma distância conhecida de modo a determinar a relação mm/pixels na imagem. Para cada imagem, o processo de medição pode ser resumido em:

a) Transformar a imagem em escala de cinza (imagem tipo 16-bit no ImageJ);
b) Subtrair plano de fundo (ferramenta *Subtract Background*);
c) Limiarização - segmentação da imagem que se baseia na diferença dos níveis de cinza que compõe os diferentes objetos (ferramenta *Threshold* no ImageJ), transformando as gotas na cor preta em um fundo branco (Figura 4.8c);
d) Seleção das gotas que serão avaliadas (ferramenta *Wand tracing tool*: no Image J). Esta etapa é de extrema importância para assegurar que as áreas de gotas defeituosas (sobrepostas, cortadas nos limites da imagem e/ou muito desfocadas na imagem original) e contornos de bolhas não sejam medidas;
e) Cálculo simultâneo da área das gotas selecionadas na etapa anterior (ferramenta *Analyze Particles* do ImageJ). O resultado é apresentado numa tabela e uma imagem com os contornos das regiões que foram analisadas (Figura 4.8d).

Utilizando o MS Excel e assumindo que as gotas são esféricas, calculou-se o diâmetro de cada gota. Destes dados, determina-se a distribuição de tamanhos (valores mínimo, médio e máximo), o diâmetro médio e o desvio padrão. O diâmetro médio de Sauter (d_{32}, m), dado pela Equação (4.29) conforme Zaidi e Sohn (1995), também foi utilizado para evidenciar a influência da vazão de gás e da diferença de densidade entre os fluidos sobre o tamanho das gotas arrastadas. O diâmetro de Sauter é usualmente utilizado pois é facilmente correlacionado com a área interfacial (A_i, m^2) de acordo com a Equação (4.30) (Zaidi e Sohn, 1995):

$$d_{32} = \frac{\sum n_i d_i^3}{\sum n_i d_i^2} \tag{4.29}$$

$$A_i = \frac{6\emptyset}{d_{32}} \tag{4.30}$$

Onde n_i é o número de gotas de diâmetro d_i; $\emptyset$ é o volume total de gotas dispersas no fluido principal (m^3).

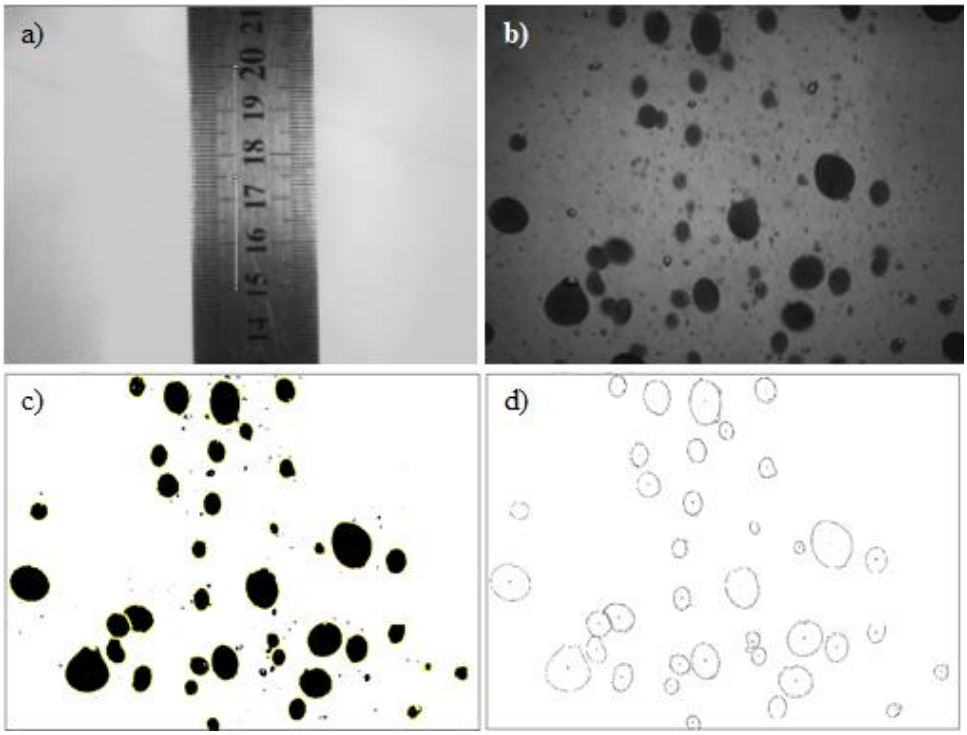

Figura 4.8 – a) Exemplo de escala para calibração do programa ImageJ; b) imagem original de gotas logo abaixo da saída da perna de descida; c) imagem das gotas após tratamento de remoção de plano de fundo (*subtract background*) e transformação via limiarização (*Threshold*); d) contornos das gotas que foram mensuradas pelo programa.

4.1.7 Estimativa de transferência de massa

Apesar de alguns trabalhos realizados sobre transferência de massa líquido/líquido em vasos agitados a gás, para o Reator RH ainda existem questões relativas às condições de arraste de gotas de escória da câmara de vácuo e à transferência de massa entre o aço e o material dessulfurante adicionado na câmara de vácuo.

Os testes de transferência de massa utilizaram água e dois tipos de óleo (óleo de soja e óleo de motor 10W30) como fluidos similares ao aço e escória, respectivamente. Timol ($C_{10}H_{14}O$) foi utilizado como traçador para simular a transferência de enxofre, pois Kim e Fruehan (1987) relataram o valor de coeficiente de partição de timol maior que 350 entre água e uma mistura 50/50 (em volume) de óleo de parafina e óleo de algodão como fase similar à escória. Testes iniciais para determinação do coeficiente de partição entre cada tipo de óleo foram conduzidos em um aparato formado por um béquer e um agitador magnético (Figura 4.9a), contendo cerca de 1L de solução aquosa (100ppm de timol) e 24mL de óleo (óleo de silicone 500cSt e 50cSt, óleo de motor 10W30 e óleo de soja). Estas proporções de materiais representam (em volume) um consumo de dessulfurante equivalente a 10kg/t de aço.

Conforme Figura 4.9, inicialmente, o sistema foi preenchido com solução aquosa (~100ppm de timol) e o óleo foi adicionado na superfície, iniciando forte agitação, mantida por mais de 24h. Algumas amostras são retiradas ao longo do experimento para determinação da concentração de timol, e a partir do ponto onde não há mais variação na concentração, considera-se que o sistema atingiu o equilíbrio. Para coletar as amostras, o material é deixado em repouso por cerca de 5min para separação das gotas de óleo, e as amostras (~10mL) foram retiradas através de um tubo localizado no fundo do recipiente. Com base nos resultados de concentração inicial e final de timol na água, realiza-se um balanço de massa simples de forma que a quantidade de timol de equilíbrio (concentração final) no óleo possa ser inferida. Por fim calcula-se a partição de timol (L_{timol}), ou seja, a razão entre as concentrações de timol de equilíbrio no óleo e na água, respectivamente ($L_{timol} = [timol]_{óleo}/[timol]_{água}$). Este procedimento foi realizado no mínimo três vezes com cada tipo de óleo.

A análise da concentração de timol foi realizada utilizando um espectrofotômetro UV (Modelo S100) com software de análise MetaSpec Pro. As leituras foram realizadas utilizando-se o comprimento de onda igual a 275nm (um dos pontos que o timol apresenta pico de absorção), e a curva de calibração foi construída utilizando soluções preparadas com concentração de timol iguais a 0ppm (água destilada pura), 25ppm, 50ppm, 75ppm, 100ppm e 125ppm, devido à correlação linear existente entre a concentração do traçador e a intensidade da radiação UV absorvida pela amostra.

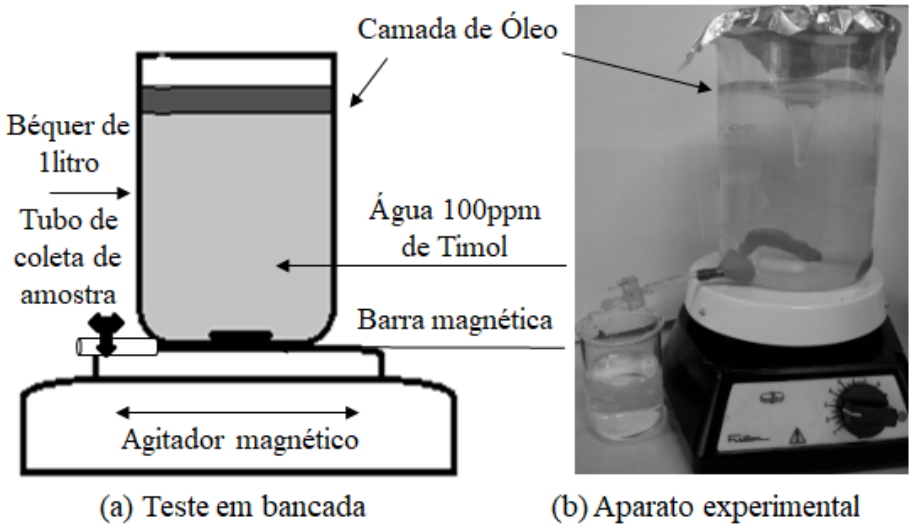

Figura 4.9 – Montagem experimental para realização dos testes em bancada de transferência de massa de timol: (a) representação esquemática e (b) aparato experimental.

Para avaliar a transferência de enxofre entre escória dessulfurante e aço líquido no reator RH foram realizados alguns experimentos no modelo a frio, utilizando água e óleo (óleo de soja da marca Vila Velha, ou óleo de motor 10W30 semissintético, marca Falke) como fluidos similares ao aço e escória, respectivamente. A Figura 4.10(a) apresenta de forma esquemática a montagem experimental. Inicialmente, o modelo físico do reator RH foi preenchido com aproximadamente 89L de solução aquosa contendo aproximadamente 100ppm de timol. Dois minutos após o acionamento do sistema de vácuo e do início da injeção de ar comprimido, cerca de 2L de óleo foram adicionados na câmara de vácuo através de um tubo, posicionado a cerca de 10cm acima da superfície livre. Este volume de óleo foi determinado em função do consumo médio de material dessulfurante (10kg/t de aço), da densidade dos materiais envolvidos e do volume de água no modelo.

Em intervalos de tempo pré-determinados foram coletadas amostras de água (~15mL) para análise da concentração de timol em função do tempo, utilizando um pequeno tubo posicionado abaixo da perna de subida a 20cm do fundo da panela. A partir destes valores de concentração de timol, calcula-se a extração de timol ao longo do tempo, isto é a taxa de transferência de massa (timol). Foram realizados experimentos nas vazões de gás de 70L/min, 90Lmin e 110Lmin.

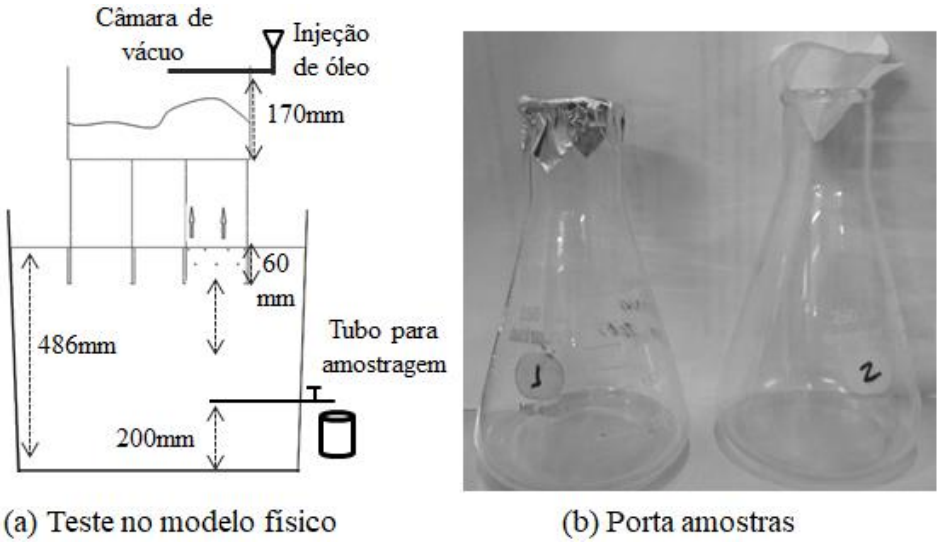

Figura 4.10 – (a) Representação esquemática da montagem experimental para realização dos testes de transferência de massa de timol no modelo físico do reator RH; (b) recipientes para coletas de amostra de solução de timol, com filtro de papel para reter gotas de óleo (frasco 2), e vedação com papel alumínio para evitar perda por volatilização (frasco 1).

Destaca-se que as amostras eram coletadas em recipientes de vidro (frasco de Erlenmeyer), e as amostras eram filtradas em papel filtro de café para reter possíveis gotículas de óleo que alcançassem o tubo de amostragem, e após a amostragem, os frascos eram cobertos com papel alumínio para evitar perdas de timol por volatilização (vide Figura 4.10b). Foi necessário utilizar recipiente de vidro pois o timol era absorvido por recipientes de certos tipos de plástico, resultando em alterações na concentração de timol da amostra.

Além disso, para reduzir efeitos de variações de composição dos óleos de motor 10W30 e de soja, o volume necessário para a realização dos testes (20L de óleo 10W30 e 40L de óleo de soja) foi adquirido (em frascos comerciais de 1L e 900mL, respectivamente), e após homogeneização do volume total, foram armazenados em recipientes de 20L, de onde o volume necessário para cada teste era retirado.

Mediu-se as propriedades da solução de timol e do óleo de soja. A tensão superficial da solução aquosa contendo aproximadamente 100ppm de timol foi igual a 41,35mN/m, enquanto a tensão interfacial solução aquosa/óleo de soja foi igual a 15,57mN/m. Para o óleo de soja, foram encontradas densidade, viscosidade e tensão superficial iguais a 914,3kg/m³, 52,2mPa.s e

28,64mN/m, respectivamente. Destaca-se que as propriedades do óleo de soja são similares aos valores encontrados para o óleo de silicone 50cSt, vide Tabela 4.7 (950 kg/m³; 47,5mPa.s e 35,4mN/m).

4.2 Modelamento Matemático

O modelo matemático elaborado para o desgaseificador a vácuo RH para descrição do fluxo bifásico e previsão da taxa de circulação permite o uso de um plano de simetria, diminuindo assim o custo computacional. A Figura 4.11 apresenta de forma esquemática a relação entre o desenvolvimento da simulação matemática e o objetivo geral deste trabalho (análise da dessulfuração do aço). As etapas do modelamento matemático são: construção da geometria, gerar a malha mais adequada, estabelecer o modelo e as condições de cálculo (construção do *setup*), e por último avaliar os resultados. O modelo matemático desenvolvido foi validado utilizando os resultados da modelagem física. Após obter os primeiros resultados coerentes, foi realizado o teste de independência da malha, para garantir que as dimensões do volume de controle possuam a menor influência possível e não seja um parâmetro que afete os resultados do modelamento.

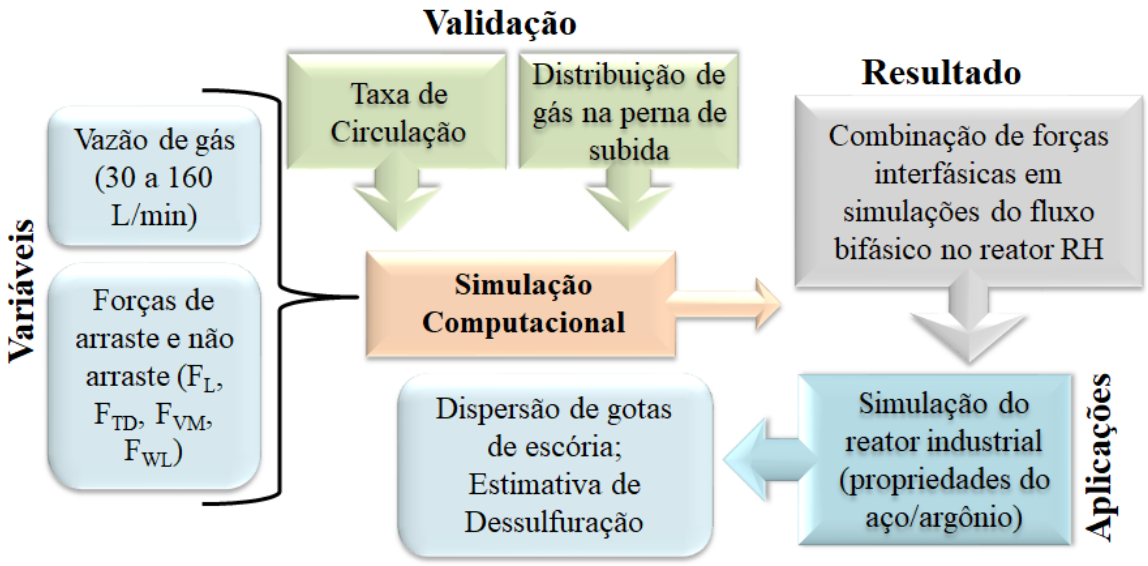

Figura 4.11 – Fluxograma esquemático do desenvolvimento da simulação matemática do desgaseificador RH.

A geometria utilizada nas simulações foi construída através do software *Design Modeler* do Ansys® e suas dimensões seguem as dimensões do modelo em acrílico ou do reator industrial, conforme Tabela 4.2. Inicialmente realizou-se algumas simulações considerando a superfície livre da câmara de vácuo plana, com a opção *degassing*, a qual permite a saída apenas do gás (Figura 4.12). Posteriormente, considerou-se a superfície livre da câmera de vácuo, permitindo flutuação da interface água/ar (variação do nível) e para isso, uma camada de gás de 10cm (modelo físico) ou 70cm (reator industrial) foi adicionada acima da camada de líquido na câmara de vácuo.

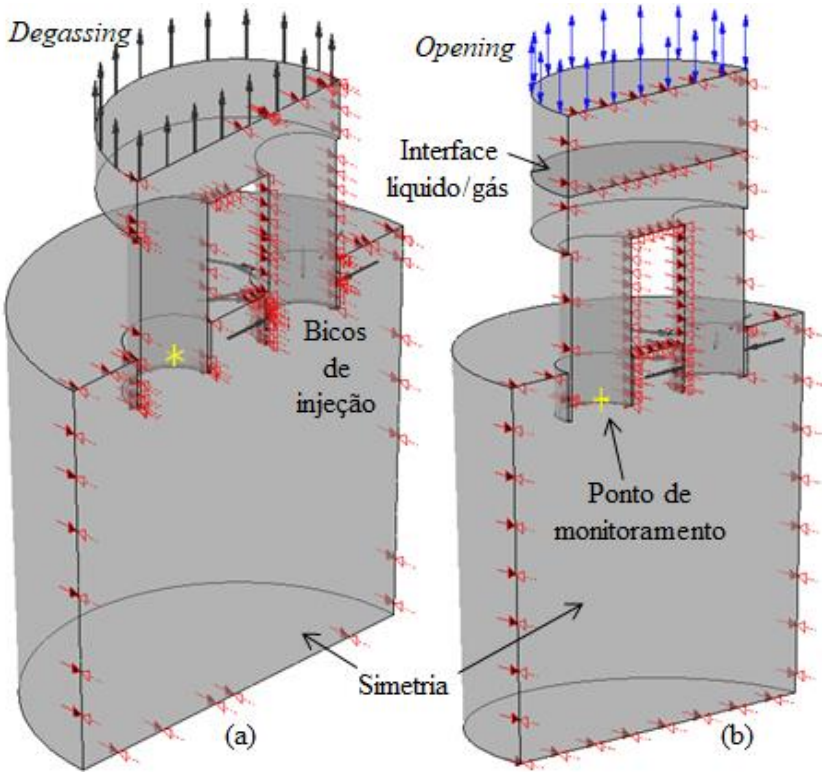

Figura 4.12 – Geometria utilizada na simulação: (a) sem camada de ar; (b) com camada de ar na câmara de vácuo.

A malha é construída utilizando o software *Meshing Modeler*. Inicialmente com elementos predominantemente tetraédricos, aplicando-se a ferramenta *inflation* em todas as superfícies externas (paredes) do reator, com cinco camadas e o parâmetro *transition ratio* igual a 0,2. Posteriormente, optou-se por uma malha mista, contendo elementos tetraédricos e hexaédricos, vide Figura 4.13. O estudo de independência de malha foi realizado através da comparação dos resultados de taxa de circulação obtidos com malhas de tamanhos variados. Inicialmente, foram

comparadas malhas construídas utilizando a ferramenta *element sizing* com tamanho de elementos de 20mm, 15mm, 13mm, 11mm e 9mm na região da panela. Para garantir maior representatividade da interação entre as bolhas de gás e a água, aplica-se um refinamento localizado na perna de subida, com tamanho de elementos (*element size*) de 2mm próximo a região dos bicos (injeção de gás), 3mm na perna de subida até a região de saída do gás na câmara de vácuo, e de 4mm no restante da câmara de vácuo e na perna de descida (Figura 4.13). Na geometria com a camada superior de ar na câmara de vácuo, um refinamento é aplicado à região de interface água/ar. O parâmetro *skewness* é utilizado para avaliar a qualidade da malha. A malha final possuía cerca de 390mil nós e 925mil elementos, com elementos de 15mm na região da panela.

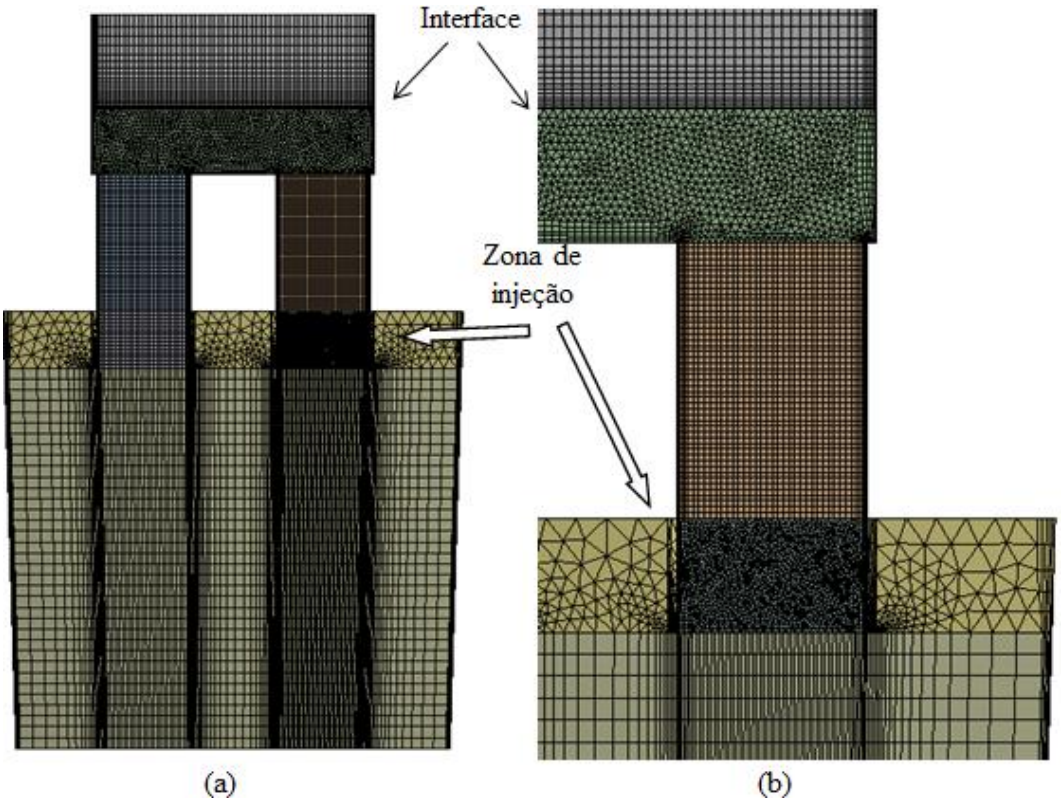

Figura 4.13 – Malha construída para o modelo físico com camada de ar na câmara de vácuo: a) visão geral; b) detalhe do refinamento na perna de subida e na interface água/ar na câmara de vácuo.

Para simular o reator em condições industriais, utilizou-se uma malha hexaédrica, vide Figura 4.14. Após o estudo de independência de malha, utilizando a ferramenta *element sizing*, os elementos da região da panela possuíam tamanho máximo de 90mm, e um refinamento

localizado na perna de subida, com tamanho de elementos de 13mm próximo a região dos bicos (injeção de gás), 15mm na perna de subida até a região de saída do gás na câmara de vácuo, e de 30mm no restante da câmara de vácuo e na perna de descida (Figura 4.14), de modo a garantir maior representatividade da interação entre as bolhas de argônio e o aço líquido. Desta forma, obteve-se uma malha com aproximadamente 700mil nós.

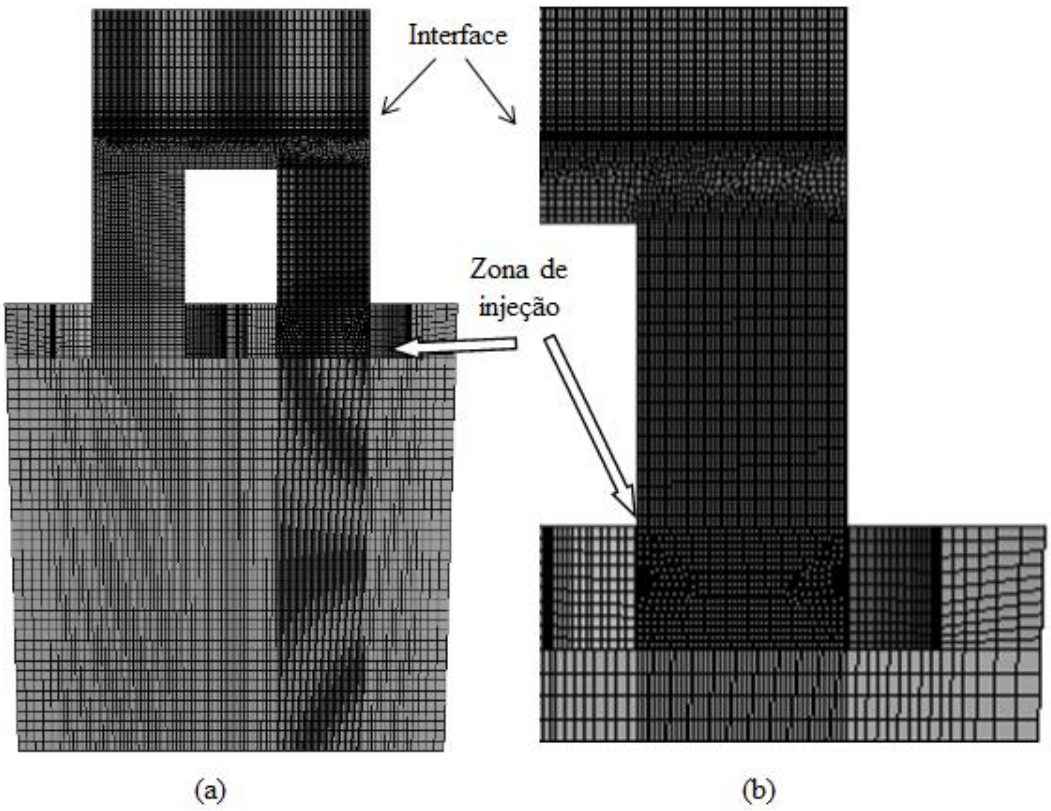

Figura 4.14 – Malha hexaédrica construída para simulações bifásicas em tamanho real do reator RH com camada de ar na câmara de vácuo: a) visão geral; b) detalhe do refinamento na perna de subida e na interface aço/argônio.

As simulações matemáticas foram realizadas utilizando-se o software CFX (Ansys® acadêmico), versões 17.2 a 19.1 (devidos às atualizações realizadas anualmente). O modelo matemático considera o escoamento tridimensional e turbulento; os fluidos newtonianos e incompressíveis* (não é considerada a expansão do gás, exceto para o argônio, como detalhado a seguir) e sistema isotérmico (a 25ºC para o modelo físico e 1600ºC para a simulação em condições reais) e a pressão ambiente igual a 1atm. Utilizam-se os valores padrões do software para as propriedades físicas da água e do ar (a 25°C) e as propriedades do aço e argônio da

Tabela 4.9. O modelo de turbulência adotado é o modelo k – ε para a fase contínua (líquido), enquanto para a fase discreta (gás), adota-se o modelo de equação zero de fase dispersa (*Dispersed Phase Zero Equation*), que assume que a fase discreta possui a mesma viscosidade cinemática turbulenta da fase contínua (CFX *Theory Guide*). Utiliza-se o modelo de diferença de densidades como modelo de empuxo, e a transferência de turbulência entre as fases é estimada pelo modelo de Sato (*Sato Enhanced Eddy Viscosity* - CFX *Theory Guide*).

Tabela 4.9 – Propriedades físicas utilizadas na simulação matemática do reator RH.

	Aço	**Argônio**	**Escória**
Densidade (kg m^{-3})	7000	1,623	3500[(a)]
Temperatura (ºC)	1600	25	1600
Viscosidade dinâmica (mPa.s)	5,7	0,04848	100[(a)]
Tensão interfacial (N m^{-1})	Aço/argônio => 1,54		Aço/escória => 1,5[(b)]

[(a)] Kang *et al.* (2003); [(b)] Nakashima e Mori (1992);

Como discutido no tópico 3.3, além da força de arraste, diversas forças de não-arraste de interação entre fases gás/líquido podem ser consideradas. Os modelos existentes no CFX para tais forças – de arraste, de sustentação (*Lift Force*), de massa virtual (*Virtual Mass Force*), de lubrificação (*Wall Lubrication Force*) e de dispersão turbulenta (*Turbulent Dispersion Force*) – foram testados de modo a obter uma combinação entre tais forças para que os resultados da simulação apresentem maior representatividade dos testes do modelo físico. A melhor combinação destas forças é então adotada na simulação bifásica aço/argônio.

- Força de arraste (Equação 3.10): para o coeficiente de arraste (C_D), além de utilizar o valor constante de C_D = 0,44, foram testados os modelos de Grace e de Ishii-Zuber, disponíveis no CFX (CFX *theory guide*);
- Força de sustentação (Equação 3.11): para o coeficiente da força de sustentação (C_L) foram avaliados os valores 0,1; 0,3 e 0,5.

- Força de massa virtual (Equação 3.12): foram avaliados os valores 0,2; 0,25, 0,3 e 0,5 para o coeficiente da força de massa virtual (C_{VM});
- Força de dispersão turbulenta (Equação 3.13): O modelo adotado neste trabalho foi o modelo baseado na média de Favre (ou média ponderada pela massa) da força de arraste, C_{TD} = valor padrão igual a 1;
- Força de lubrificação da parede (Equação 3.14): foi utilizado o modelo da força de lubrificação de Frank, com valor padrão para os coeficientes deste modelo (CFX *theory guide*);

No CFX, as equações diferenciais de escoamento são resolvidas através do método de volumes finitos, e adota-se a abordagem multifásica euleriana-euleriana, na qual são resolvidas as seguintes equações (Braga *et al.*, 2016):

- Equação de conservação de massa de cada fase (água e ar) e equações de conservação de quantidade de movimento de cada fase, água e ar (forma turbulenta das equações de Navier-Stokes), nas três direções cartesianas (x, y e z);
- Equação de conservação de volume, isto é, soma das frações volumétricas de ar e água igual a 1.
- Equação de conservação de energia cinética turbulenta (modelo k-ε);
- Equação de conservação da taxa de dissipação da energia cinética de turbulência (modelo k-ε).

Para simplificação do modelo, despreza-se a deformação das bolhas de gás, assim como a interação entre bolhas (quebra e coalescência). Deste modo, assume-se que o diâmetro da bolha de gás é constante, sendo calculado para cada vazão a partir da correlação (equação 4.31) reportada por Johansen e Boysan (1988) para determinar diâmetro de bolha em panelas, e posteriormente adotadas em vários trabalhos, como exemplificado na Tabela 3.3 (tópico 3.3.4). De acordo com a vazão de gás, o diâmetro das bolhas ficou entre 4,9-6,5mm para o sistema água/ar e entre 16,7-22mm para aço/argônio:

$$d_b = 0.35\left(\frac{G^2}{g}\right)^{0.2} \quad (4.31)$$

Onde G – vazão de gás (Nm^3/s); g aceleração da gravidade (m/s^2);

Como discutido no tópico 3.3.4, para o sistema real (aço/argônio) a expansão do gás por efeitos térmicos e por queda de pressão deve ser considerada. Como sugerido no trabalho de Chen *et al.* (2017), pode-se utilizar expressões matemáticas para descrever a variação do diâmetro das bolhas em função da variação de temperatura e pressão e inseri-las no *setup* da simulação computacional na forma de funções definidas pelo usuário. Assim, neste trabalho, avaliou-se o efeito da expansão das bolhas devido à queda de pressão entre a zona de injeção e a superfície da câmara de vácuo. Considerou-se o argônio como gás ideal e a pressão foi tomada como a pressão hidrostática da coluna de aço líquido. Então, o diâmetro das bolhas de argônio ficou apenas como uma função da coordenada z (eixo vertical), dado pela Equação (4.32). A densidade do argônio também variou em função de z, de modo a balancear o aumento de volume (Equação 4.33). Verificou-se que o diâmetro das bolhas na saída na superfície livre da câmara de foi cerca 2,6 vezes o diâmetro inicial, na zona de injeção, dado pela Equação (4.31).

$$d_{bp} = d_b \cdot \sqrt[3]{P_0/P} \quad (4.32)$$

$$\rho_{Ar} = \rho_0 \cdot P/P_0 \quad (4.33)$$

Onde: d_{bp} – diâmetro das bolhas de em função da pressão (m);P_0 – pressão na zona de injeção; P – pressão ao longo da perna de subida (função da altura, z); ρ_{Ar} – densidade do argônio (kg/m^3); ρ_0 – densidade inicial do argônio (kg/m^3);

As condições de contorno aplicadas a este problema foram:

- Condição de não deslizamento, aplicada em todas as paredes, regiões onde o fluido possui velocidade zero;
- Condição de simetria: nessa região as componentes de velocidade normais à fronteira são iguais a zero.
- Condição de entrada (*inlet*): bicos injetores, onde a injeção de gás é configurada considerando-se a condição de simetria de forma a simular vazões de 30L/min a 160L/min

(ar) ou 90 Nm³/h a 180Nm³/h (argônio) convertidos para valores de vazão mássica (kg/s). O regime de escoamento selecionado é o subsônico, com uma intensidade de turbulência de 5% (média).

- Condição de escorregamento livre na superfície da panela;
- Superfície da câmara de vácuo: condição de desgaseificação (*degassing*), que permite saída apenas do gás (superfície fixa); ou condição de abertura (*opening*) com pressão igual ao vácuo aplicado (com camada de gás na câmara de vácuo).

4.2.1 Regime permanente

Apesar do elevado caráter transiente do fluxo no interior do reator RH, alguns parâmetros podem ser avaliados com boa precisão a partir de simulações matemáticas em regime permanente, economizando considerável tempo computacional. Para solução das equações diferenciais do modelo computacional, foi utilizado esquema de advecção de 2ª ordem (*High Resolution* no ANSYS CFX) para todas as equações de conservação e as equações da modelo turbulência. Devido à oscilação de alguns parâmetros, foi utilizado o controle de escala de tempo física (*physical timescale*) igual a 0,005s e um máximo de 3000 iterações (sistema água/ar) e 6000 iterações (sistema aço/argônio). Além disso, na última metade das iterações foi utilizado como controle de solução multifásica para fração volumétrica acoplada, permitindo alcançar o critério de convergência de RMS (*Root Mean Square*) menor que 10^{-5}. Quando foi considerada a expansão de argônio, a simulação inicia com diâmetro constante pelas primeiras 1000 iterações, e então, o diâmetro das bolhas e a densidade do argônio foram alteradas por expressões que representam as relações descritas pelas Equações (4.32 e 4.33), continuando a simulação até que o critério de convergência fosse alcançado.

Os valores das taxas de circulação foram obtidos diretamente através do programa de tratamento dos resultados da simulação (*CFD post* – pacote Ansys®), gerando uma superfície na seção transversal da perna de descida e calculando-se a quantidade de massa de líquido que passa por esta área por unidade de tempo, utilizando a função *massflow*.

4.2.2 Regime transiente

Para avaliar a injeção de traçador no reator RH, foram realizadas simulações em regime transiente. O traçador foi representado pela função *Additional Variables*, utilizando a opção escalar volumétrica (kg/m³). O ponto de injeção de traçador foi criado utilizando a ferramenta *Source Point*, localizado na câmara de vácuo, logo acima da perna de subida, ponto equivalente ao local de injeção de sal para realização dos testes de determinação da taxa de circulação por condutivimetria (Figura 4.15a). O pulso de traçador teve duração de 1s, com vazão mássica de 0,005kg/s de sal. O passo de tempo (*timestep*) igual a 0,01s foi escolhido em função do número de Courant: o maior valor de passo de tempo que resulte em número de Courant médio menor que 1 ou valor máximo do número de Courant menor que 10. Foi utilizado esquema de advecção de 2ª ordem para discretização do tempo (*Second Order Backward Euler* no CFX).

Neste caso, o resultado da simulação matemática em regime permanente na mesma condição de vazão de gás foi utilizado como condição inicial da simulação em regime transiente, para garantir que o traçador seja inserido no modelo em uma etapa com fluxo totalmente desenvolvido. Isto é, o arquivo de resultados (“*.res”)* gerado na simulação em regime permanente foi utilizado como condição inicial no CFX-Solver, através do *Initial Values Specification -> Continue History From.* Assim, a solução começa a partir do histórico de execução do arquivo de resultados referenciado, utilizando os valores das principais variáveis resolvidas (em especial de velocidade, fração volumétrica e pressão) neste arquivo. Logo, a partir da condição inicial, para reduzir o tempo de simulação, utilizando a ferramenta *Expert Parameters* do CFX foram desabilitadas as resoluções de todas as equações, exceto aquela correspondente ao transporte de massa do escalar (*Additional Variables*). Assim, resultado com um total de 50s de dispersão do traçador pôde ser obtido em aproximadamente 30h de simulação.

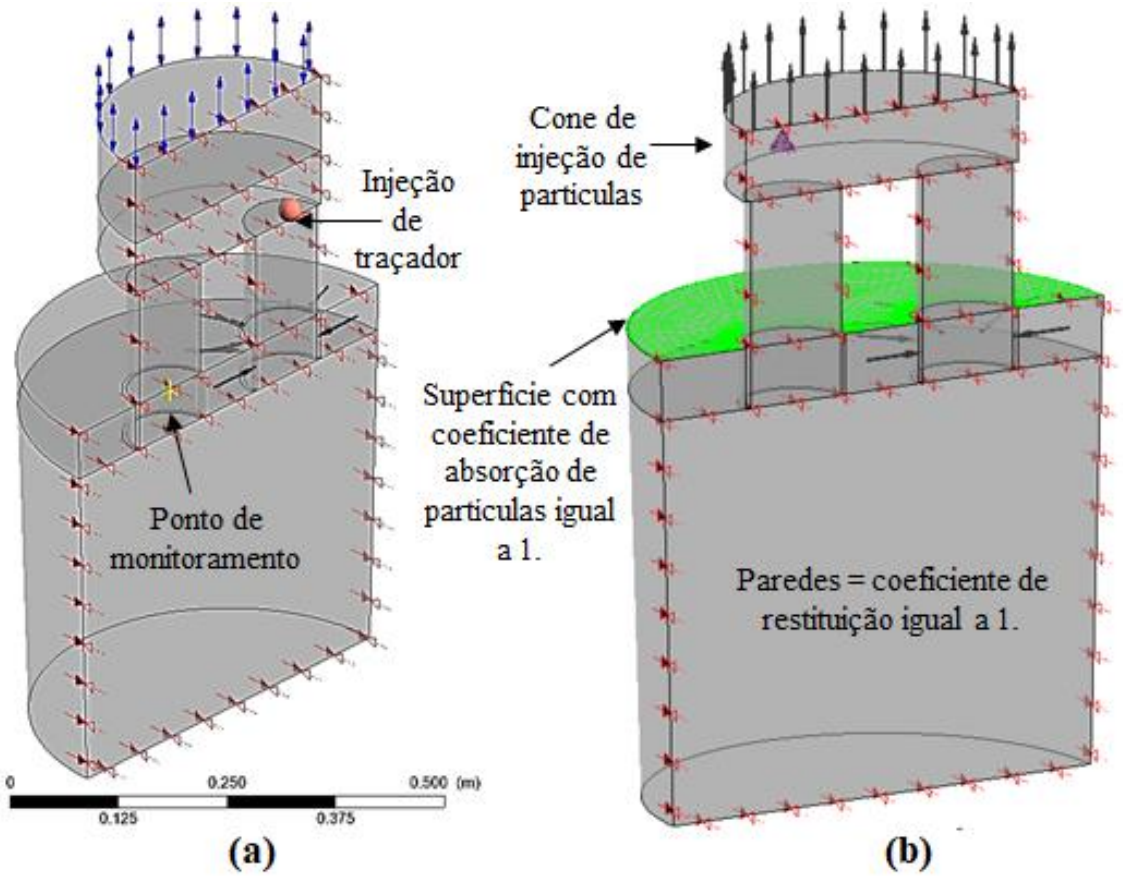

Figura 4.15 – Vista em perspectiva da geometria do reator RH: (a) simulação em regime transiente destacando os pontos de injeção de traçador e de monitoramento da concentração em função do tempo; (b) principais partes do setup para simulação da trajetória de gotas (regime permanente).

4.2.3 Simulação da dispersão de gotas

Simulações em regime permanente da trajetória de partículas fluidas foram empregadas para avaliar qualitativamente a dispersão de gotas de óleo na água e de gotas de escória no aço, a partir da injeção deste material na câmara de vácuo. A abordagem de Euler-Lagrange está implementada no CFX como um modelo de transporte de partícula. Entre as vantagens deste modelo, destaca-se menor custo computacional (para um número pequeno de partículas) e a disponibilidade de informações completas sobre o comportamento e o tempo de residência de partículas individuais (CFX-*Solver Modeling Guide*).

O modelo utiliza a teoria de Euler-Lagrange para predizer o comportamento multifásico, em particular o comportamento de uma fase dispersa pelo rastreamento de uma ou um grupo de partículas através do fluxo de utilizando a descrição lagrangeana do movimento de fluido, i. e., a integração do caminho das partículas através do domínio discreto. A fase particulada completa é modelada por apenas uma amostra de partículas individuais. O rastreamento é realizado formando um conjunto de equações diferenciais ordinárias no tempo para cada partícula (equações para posição, velocidade, massas de espécies, etc.). Partículas individuais são rastreadas a partir do seu ponto de injeção até que elas escapem do domínio ou algum critério de limite de integração seja atendido. Cada partícula é injetada, por sua vez, para obter uma média de todas as trajetórias de partículas e gerar termos fonte para as equações de massa, momento e energia do fluido. Como cada partícula é rastreada desde o ponto de injeção até o destino final, o procedimento de rastreamento (*particle tracking*) é aplicável à análise de fluxo em estado estacionário (CFX-Solver Theory Guide).

Considera-se para tal uma partícula discreta viajando em um fluido contínuo. As forças que atuam sobre a partícula que afetam a aceleração da partícula são devidas à diferença de velocidade entre a partícula e o fluido, bem como ao deslocamento do fluido pela partícula. A equação de movimento para essa partícula é dada por (CFX-Solver Theory Guide):

$$m_p \frac{dU_p}{dt} = F_D + F_B + F_R + F_{VM} + F_P \tag{4.34}$$

Onde: U_P e m_P são a velocidade e a massa da partícula; F_i são as forças que atuam na partícula, aa saber: F_D – força de arraste; F_B – força de empuxo devido à gravidade; F_R – forças devido à rotação do domínio (forças centrípeta e Coriolis); F_{VM} – força de massa virtual e F_P – força de gradiente de pressão (aplicada na partícula devido ao gradiente de pressão no fluido que envolve a partícula causado pela aceleração do fluido).

Neste trabalho foram utilizados: o modelo de Ishii-Zuber para a força de arraste sobre a partícula; o coeficiente da força de massa virtual foi 0,25; o modelo de dispersão de partículas para a força de dispersão turbulenta (interação entre o líquido e a partícula). A força de gradiente de pressão não foi incluída nestas simulações. A Figura 4.15(b) apresenta alguns detalhes das condiçoes de contorno aplicadas nestas simulações. Foi considerada a geometria com superfície

fixa (sem camada de ar) na câmara de vácuo. As gotas foram injetadas em um cone de 30°, no topo da câmara de vácuo, de forma centralizada na perna de descida, e um total de 100 posições de injeção (100 trajetórias a serem calculadas). A vazão mássica de gotas no ponto de injeção foi cerca de um décimo da taxa média de arraste de 2L de n-pentano na vazão de 110L/min (0,1x2Lx0,626kg/L÷38,6s = ~0,003kg/s). A velocidade inicial das gotas foi utilizada de acordo com a Tabela 4.6 (2m/s para óleo e 8m/s para escória). O diâmetro das gotas foi mantido constante ao logo de cada simulação.

Nas simulações óleo/água foram considerados cinco tipos de óleo: dois óleos de silicone (500cSt e 50cSt), óleo de motor 10W30, n-pentano e óleo de soja. Para os quatro primeiros óleos foram utilizadas as propriedades apresentadas na Tabela 4.7, enquanto para o óleo de soja, empregaram-se os valores mencionados no tópico 4.1.7 (tensão interfacial solução aquosa/óleo de soja igual a 15,57mN/m; densidade, viscosidade e tensão superficial iguais a 914,3kg/m³, 52,2mPa.s e 28,64mN/m, respectivamente). Foi considerada apenas uma vazão de gás (110L/min) e o resultado da simulação matemática em regime permanente com a combinação ótima das forças de interação bolha/líquido foi utilizado como condição inicial da simulação da trajetória das gotas, para garantir que as gotas fossem injetadas no fluxo de líquido totalmente desenvolvido.

As propriedades utilizadas para a escória estão na Tabela 4.9. Foi analisada a vazão de 140Nm³/h, variando-se o diâmetro das gotas iguais aos valores calculados no tópico 5.3.3 (vide Tabela 5.3). utilizando como condição inicial o resultado do fluxo obtido considerando a expansão das bolhas de argônio, como descrito anteriormente.

4.3 Análise cinética da dessulfuração do aço no RH

O modelo cinético para dessulfuração do aço durante injeção (sopro) de pó através de lança submersa em forno panela apresentado por Deo e Boom (1993) pode ser adaptado para avaliar a dessulfuração pelas gotas de escória arrastadas da câmara de vácuo para a panela. O modelo descrito por Deo e Boom (1993) prevê a seguinte relação:

$$ln(\frac{\%S_0}{\%S_{final}}) = (a_{PR} + b_{PC} + c_{BC})\frac{t_{injeção}}{V_{aço}} \quad (4.35)$$

Onde $\%S_0$ e $\%S_{final}$ são, respectivamente, as concentrações inicial e final de enxofre no aço; $t_{injeção}$ (s) é o tempo de injeção do pó dessulfurante (tempo de tratamento); $V_{aço}$ é o volume de aço na panela (m^3); a_{PR}, b_{PC} e c_{BC} são parcelas referentes às contribuições do reator permanente (PR, camada de escória), das partículas atravessando o líquido (PC) e das bolhas (contendo partículas) do gás de transporte do pó (BC), respectivamente. Os dois últimos compõem o chamado reator transitório. A equação para cada contribuição é apresentada a seguir:

$$a_{PR} = A_{PR} \cdot k_{PR} \quad (4.36)$$

$$b_{PC} = \frac{L_s W_{pó}}{\rho_{escória}}(1 - f_{BC})\left[[1 - EXP\left(-\frac{6k_{PC}t_{PC}}{d_{pó}L_S}\right)\right] \quad (4.37)$$

$$c_{BC} = \frac{L_s W_{pó}}{\rho_{escória}} f_{BC}\left[[1 - EXP\left(-\frac{2{,}38}{d_b} m_{BC}\frac{T_{aço}}{298}\frac{k_{BC}t_{BC}Q_{BC}}{W_{pó}f_{BC}L_S}\right)\right] \quad (4.38)$$

Onde A_{PR} é a área da interface metal/escória do reator permanente (m^2); k_i é o respectivo coeficiente de transferência de massa (m/s); $W_{pó}$ é a taxa de sopro de pó (kg/s); $M_{aço}$ é a massa de aço (kg); L_S é a partição do enxofre entre a escória e o metal; f_{BC} é a fração de partículas que ficam aprisionadas nas bolhas (na interface bolha/metal); t_{PC} e t_{BC} são os tempos de residência das partículas e das bolhas, respectivamente (s); $d_{pó}$ e d_b são os diâmetros da partícula de pó dessulfurante e da bolha de gás, respectivamente (m); m_{BC} é um fator adimensional chamado fator de área efetiva (para as partículas dentro das bolhas); Q_{BC} é a vazão de gás de transporte do pó (Nm^3/s); T é a temperatura do aço (K).

Deo e Boom (1993) ressaltam que no desenvolvimento deste modelo foram desprezadas a contribuição de uma fração das partículas que podem recircular devido ao fluxo (recirculatório) de aço líquido em torno da pluma gasosa e a contribuição pela formação de uma emulsão partículas/aço próxima a interface metal escória, pois estes dois mecanismos de dessulfuração apresentam elevado grau de incerteza na previsão da fração de partículas envolvidas e também

na área interfacial e coeficientes de transferência de massa (devido às mudanças nos campos de fluxo de líquido).

No caso do material dessulfurante adicionado pela calha de adição de ligas na câmara de vácuo, pode-se considerar que o material adicionado acumula-se na superfície do líquido na câmara de vácuo e devido à elevada turbulência nesta região, o material é continuamente arrastado da câmara de vácuo para a panela na forma de gotas. Essa consideração fundamenta-se nos resultados de modelamento físico do comportamento metal/escória apresentados no tópico 5.4. Então, a taxa global de dessulfuração no RH também pode ser escrita como a soma das contribuições dos reatores permanente e transitório, ou seja, a contribuição da camada de escória na câmara de vácuo e a contribuição das gotas dispersas no aço líquido (obviamente descarta-se a parcela referente às bolhas). Assim, o modelo de Deo e Boom (1993) pode ser reescrito como:

$$ln\left(\frac{\%S_0}{\%S_{final}}\right) = (a_{PR} + b_{PC})\frac{t_H}{V_{aço}} \tag{4.39}$$

$$ln\left(\frac{\%S_0}{\%S_{final}}\right) = \left\{A_{PR} \cdot k_{PR} + \frac{L_s W_{escória}}{\rho_{escória}}\left[\left[1 - EXP\left(-\frac{6k_P t_{Rp}}{d_p L_S}\right)\right]\right\}\frac{t_H}{V_{aço}}\right. \tag{4.40}$$

Onde t_H (s) é o tempo total para arraste da camada de escória (tempo de tratamento); A_{PR} é a área da interface metal/escória do reator permanente (camada de escória formada na câmara de vácuo após a adição do dessulfurante (m^2); k_{PR} é o coeficiente de transferência de massa da interface metal/escória na câmara de vácuo (m/s); k_P é o coeficiente de transferência de massa para as gotas de escória arrastada da câmara de vácuo (m/s); $W_{escória}$ é a quantidade de gotas de escória arrastadas para a panela (kg/s); t_{Rp} (s) é o tempo de residência das gotas de escória no aço (percorrendo o trajeto da câmara de vácuo até a escória de topo na panela); d_p é o diâmetro médio das gotas de escória (m);

É facilmente demonstrado que a maior contribuição se deve às gotas de escória dispersas no interior do metal (devido à sua maior área de contato). Então a equação (4.40) pode ser reescrita como:

$$\frac{\%S_0 - \%S}{\%S_0} = 1 - EXP\left\{-\frac{L_s W_{escória}}{\rho_{escória}}\left[1 - EXP\left(-\frac{6k_p t_{Rp}}{d_p L_S}\right)\right].\frac{\rho_{aço}\ t_H}{M_{aço}}\right\} \qquad (4.41)$$

Onde $M_{aço}$ é a massa de aço (kg);

O modelo cinético foi proposto com base nas seguintes premissas e considerações: as gotas de escória são esféricas; o agente dessulfurante não contém enxofre; o efeito da camada de escória de topo (panela) na dessulfuração é insignificante; a temperatura e composição do aço são uniformes; a fração de gotas de escória aprisionadas no banho e arrastadas da câmara de vácuo é assumida como a taxa de injeção ($W_{escória} = M_{escória}/t_H$) e permanece constante durante todo o processo; a remoção de enxofre do aço por gotas de escória é essencialmente uma reação controlada por transferência de massa. Este modelo permite explorar a influência da vazão de argônio (e, portanto, a agitação - taxa de dissipação da energia cinética turbulenta - o tamanho e o tempo de residência das gotas de escória) sobre a reação de dessulfuração do aço no reator RH.

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Os resultados deste trabalho foram agrupados de acordo com os assuntos abordados, e são apresentados nos subitens abaixo. Na introdução de cada subitem é realizada uma contextualização com algum artigo correlacionado a esta tese que tenha sido publicado anteriormente, vide o Apêndice I para lista de publicações.

5.1 Taxa de Circulação

Os primeiros trabalhos publicados abordaram a determinação da taxa de circulação utilizando água e solução salina ($ZnCl_2$) como fluido de recirculação, comparando-se métodos da ponte de *strain gages* e técnica PIV, considerando uma panela em formato retangular, que é fundamental para possibilitar a medição do diâmetro das gotas de óleo arrastadas (assunto dos tópicos 5.3 e 5.4). Este artigo foi apresentado oralmente durante o 47º Seminário de Aciaria – Internacional, parte integrante da ABM Week 2016, sendo publicado nos anais do congresso.

Outros resultados sobre taxa de circulação utilizando água e solução de cloreto de sódio (NaCl) em panela de formato cilíndrico foram incorporados. Para a água, foi utilizado ainda o método da condutivimetria, de modo a validar os resultados de taxa de circulação obtidos pelo método da ponte de *strain gages*.

5.1.1 Comparação das técnicas de medição

Os perfis de velocidade obtidos via técnica PIV para diferentes vazões de gás são mostrados na Figura 5.1. Valores de velocidade em linhas horizontais coincidentes com o diâmetro da perna traçadas a 15mm, 30mm e 45mm acima da saída da perna de descida (Figura 5.2). Nota-se que os valores de velocidade não variam consideravelmente à medida que a linha de medição se afasta da saída da perna de descida (de 15mm para 45mm). Deve-se destacar também que para a vazão de 110L/min a distribuição de velocidades é completamente assimétrica, devido à presença de grande quantidade de bolhas arrastadas pelo fluxo e que interferem consideravelmente na captura e tratamento das imagens - as bolhas refletem a luz do laser, sendo identificadas pelo software de determinação de velocidade como partículas, e como

velocidade das bolhas é diferente das partículas utilizadas pela técnica PIV, o perfil de velocidades calculado pelo programa fica comprometido. Assim, consideraram-se apenas os valores de velocidade do líquido para vazões de gás menores ou igual a 90L/min. A partir destes valores, calculou-se a velocidade média do líquido no interior da perna e então determinou-se a vazão de água na perna de descida (taxa de circulação).

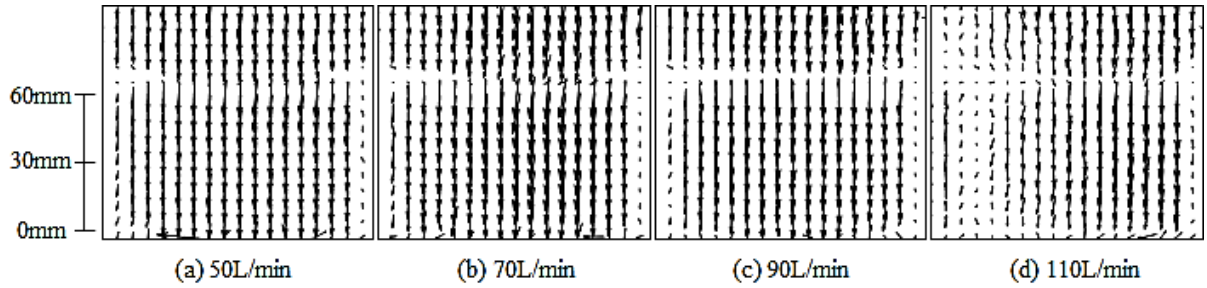

Figura 5.1 – Perfil de velocidades na perna de descida obtido via técnica PIV utilizando água para imersão da perna igual a 6cm e vazão de gás: (a) 70L/min; (b) 110L/min; (c) 90L/min; e (d) 110L/min.

Os valores de taxa de circulação para a caixa (vaso inferior em formato retangular), utilizando água como fluido de circulação, obtidos pelas três técnicas foram comparados para fins de calibração/validação do método da ponte de *strain gages* (Figuras 5.3b). Esta calibração adicional se faz necessária porque o fluxo na perna de descida se mostra extremamente turbulento, o que dificulta a aplicação da condição de fluxo unidirecional e simétrico ao redor do corpo esférico, conforme descrito no desenvolvimento da técnica, tópico 4.1.2. Destaca-se que os valores obtidos pelo MPSG e da condutivimetria foram muito próximos, e estes são consideravelmente superiores (~ 2 vezes) aos obtidos por velocimetria PIV. Nota-se ainda grande queda nos valores calculados a partir da técnica PIV para vazões superiores à 90L/min. Quando a vazão de gás aumenta, uma maior fração do mesmo é arrastada através da perna de descida (vide Figura 5.4), dificultando as medições via PIV, visto que as bolhas de gás refletem a luz do laser e são interpretados pelo software para cálculo da velocidade do líquido, e as bolhas possuem velocidade muito inferior ao líquido.

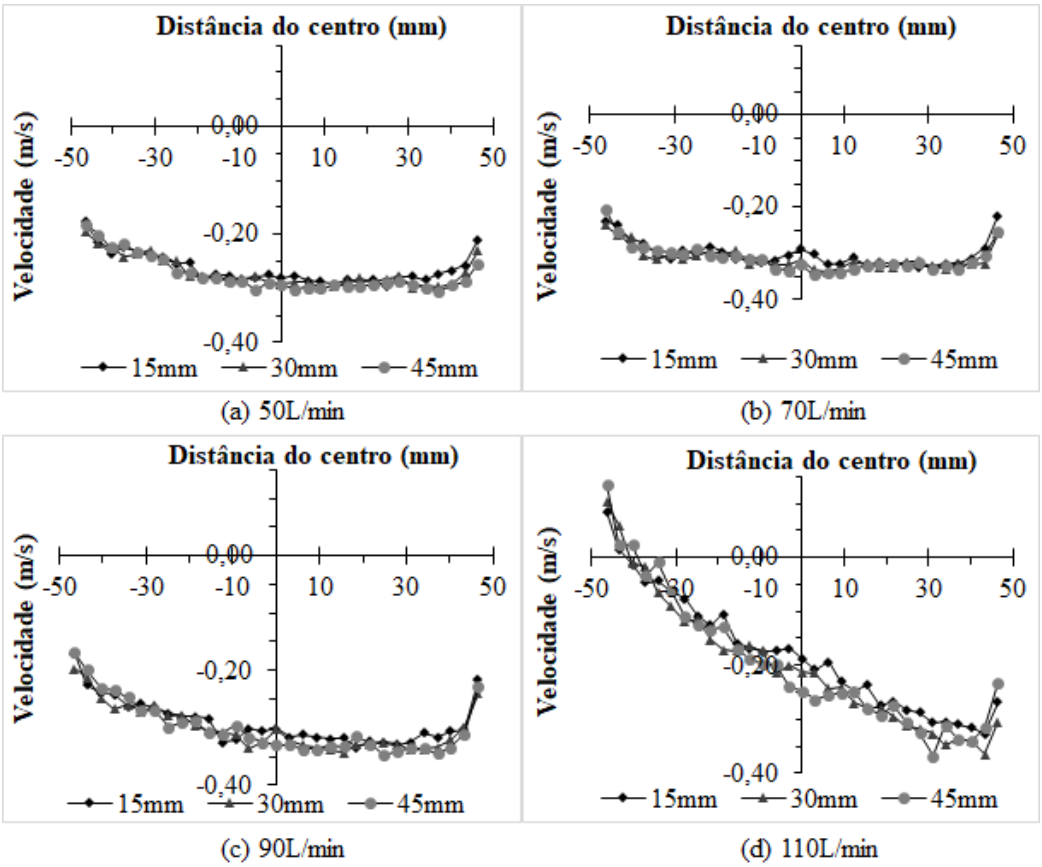

Figura 5.2 – Distribuição de velocidade ao longo de uma linha horizontal coincidente com o diâmetro da perna de descida para vazão de gás: (a) 70L/min; (b) 110L/min; (c) 90L/min; e (d) 110L/min.

Sobre resultados do PIV, recentemente Luo *et al.* (2018) calcularam a taxa de circulação a partir do valor médio de velocidade medido pela técnica PIV, porém ressalta-se que as vazões de gás (20-25L/min) adotadas são consideravelmente baixas visto que as dimensões do seu modelo físico são superiores às dimensões do modelo do presente trabalho. Menores valores de vazão de gás reduzem o problema de presença de bolhas na perna de descida. Como pode ser observado na Figura 5.3(b), para a vazão de 30L/min, a taxa de circulação obtido pela técnica PIV estava próximo dos valores determinados pelas outras duas técnicas. Porém, para vazões superiores, a presença de quantidade excessiva de bolhas na perna de descida interferiu nos valores de velocidade medidos pela técnica PIV, e assim, os valores de taxa de circulação medidos por esta técnica foram consideravelmente inferiores aos resultados obtidos pela técnica da condutivimetria, usualmente empregada para este fim.

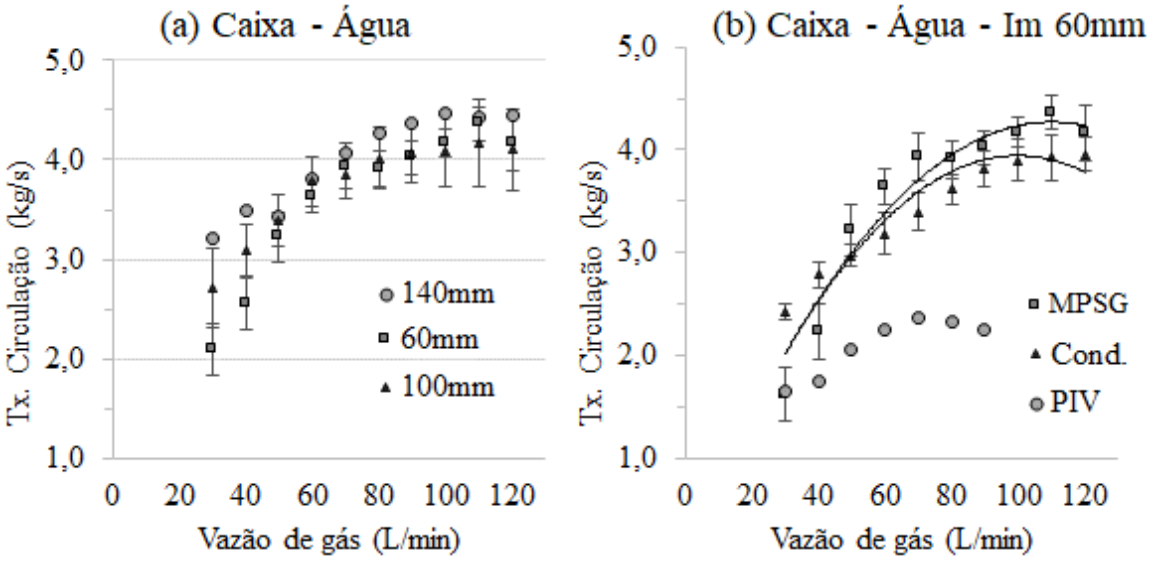

Figura 5.3 – Taxa de circulação para o vaso inferior de formato retangular, utilizando água como fluido de circulação: (a) influência da profundidade de imersão das pernas via MPSG; (b) comparação entre as técnicas de medição: Cond. – condutivimetria; MPSG - método da ponte de *strain gages* e pela técnica PIV, profundidade de imersão de 60mm.

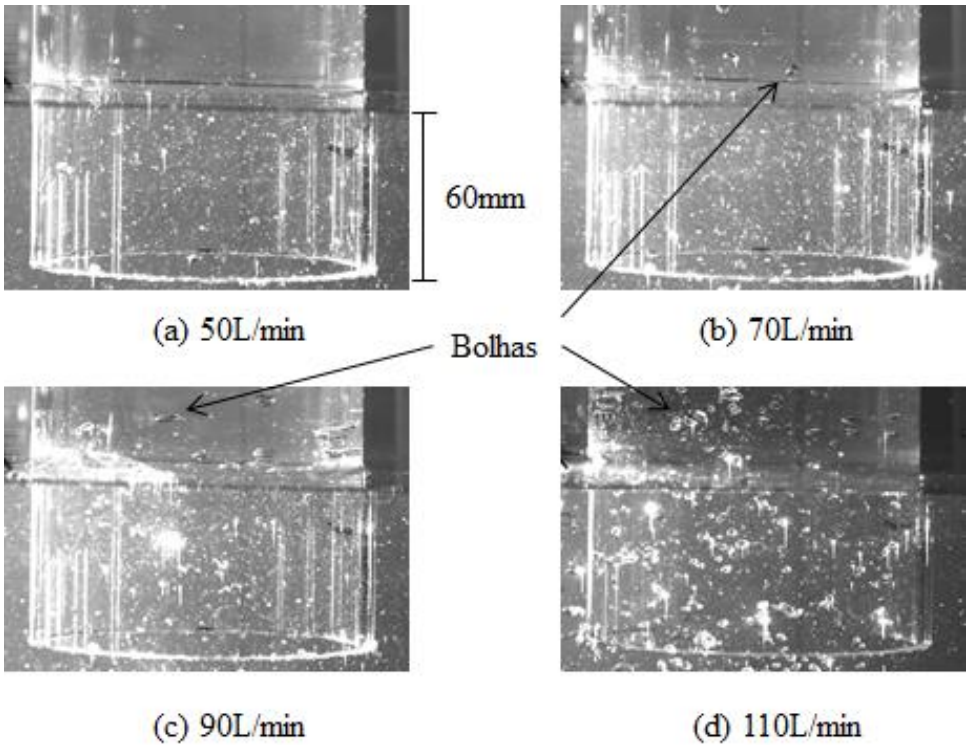

Figura 5.4 – Presença de bolhas na perna de descida em imagens obtidas via técnica PIV. Vazão de gás: (a) 70L/min; (b) 110L/min; (c) 90L/min; e (d) 110L/min.

A Figura 5.5 apresenta valores de taxa de circulação utilizando o vaso inferior em formato cilíndrico. Como o método da condutivimetria é usualmente empregado para avaliar taxa de circulação em modelo físico de reator RH, a proximidade entre resultados apresentados nas Figuras 5.3(b) e 5.5(a) valida o método da ponte de *strain gages* (MPSG) e permite utilizar o MPSG para determinação da taxa de circulação utilizando-se solução salina como fluido de circulação. Valores de taxa de circulação para a caixa utilizando-se soluções salinas como fluido de circulação são exibidos na Figura 5.6, para diferentes profundidades de imersão das pernas. Não foi observada influência significativa da profundidade de imersão sobre a taxa de circulação.

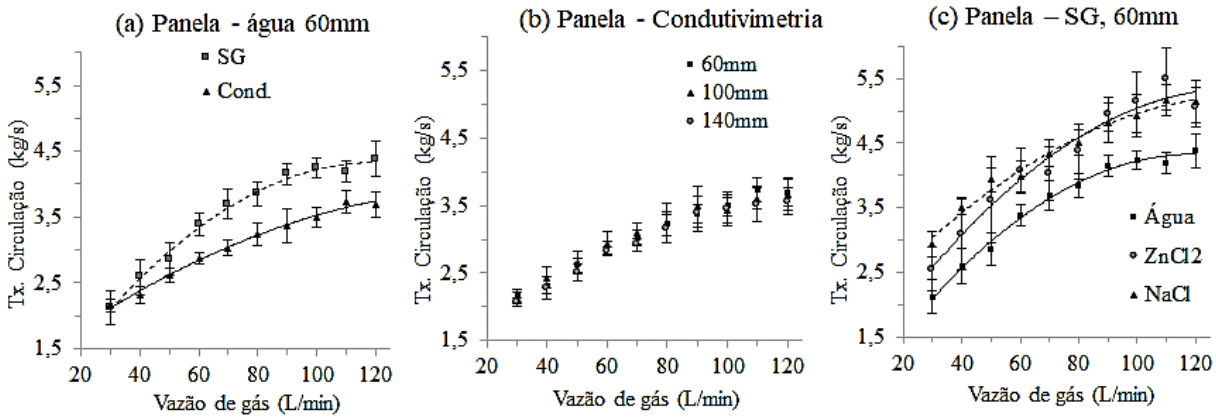

Figura 5.5 – Taxa de circulação para o vaso inferior de formato cilíndrico (panela): (a) comparação entre as técnicas de medição utilizando água como fluido de circulação; (b) influência da profundidade de imersão das pernas; (c) influência da densidade do fluido de circulação, imersão de 60mm.

Nos gráficos das figuras anteriores (Figuras 5.3 a 5.6) que apresentam resultados de taxa de circulação, destaca-se que a influência da profundidade da imersão das pernas foi desprezível na faixa trabalhada. Vargas (2000), utilizando um modelo físico (1:5) verificou que a profundidade de imersão da perna pode influenciar na taxa de circulação, sendo que o aumento da profundidade de imersão de 60mm para 90mm provocou um aumento de cerca de 19% na taxa de circulação. Porém, alterando a profundidade de imersão de 90mm para 120mm, não influenciou a taxa de circulação de modo significativo. De acordo com o fator de escala do presente trabalho e de Vargas (2000), nota-se que as imersões de 90mm e 120mm corresponderiam às imersões de 60mm e 80mm no modelo físico do presente trabalho,

corroborando com a observação de que a variação da profundidade de imersão de 60mm para 140mm não afetou significativamente a taxa de circulação.

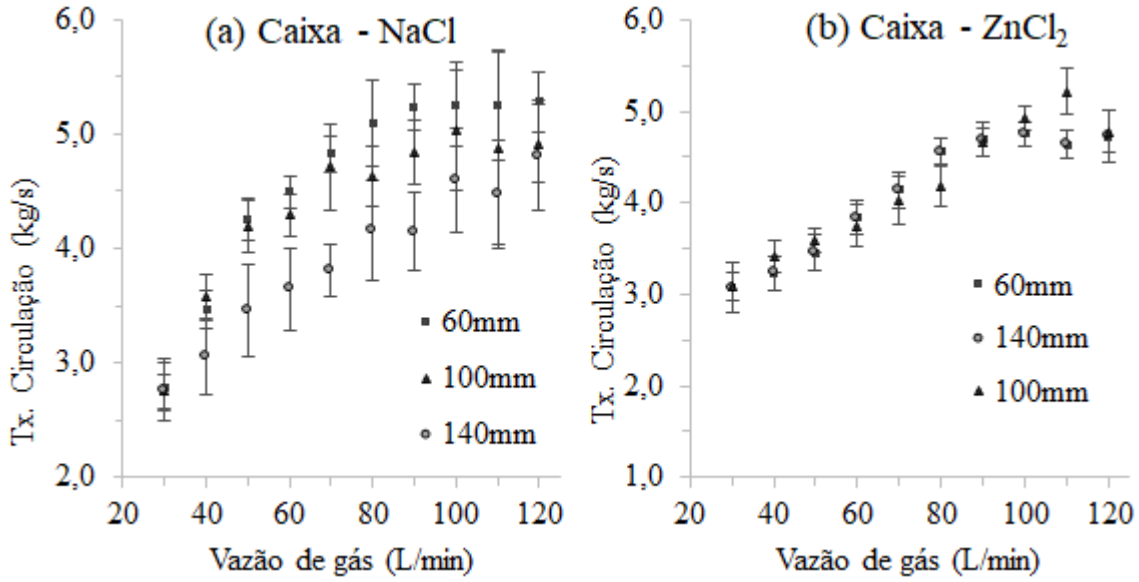

Figura 5.6 – Taxa de circulação em função da profundidade de imersão das pernas para o vaso inferior de formato retangular (caixa), utilizando fluido de circulação a solução aquosa de: (a) NaCl (ρ = 1,17g/cm³); (b) $ZnCl_2$ (ρ = 1,22g/cm³).

5.1.2 Correlação pela Equação de Kuwabara

Observa-se nas figuras anteriores que a taxa de circulação aumenta com o aumento da vazão de gás injetado, tal como esperado. A equação de Kuwabara *et al.* (1988) para cálculo da taxa de circulação, como descrito no tópico 3.1.2 prevê uma relação entre taxa de circulação (Q_c) no reator RH e vazão de gás de acordo com a Equação (5.1):

$$Qc \propto G^{\frac{1}{3}} D_l^{\frac{4}{3}} \left[\ln\left(\frac{P_1}{P_2}\right)\right]^{\frac{1}{3}} \quad (5.1)$$

Onde: G - vazão de gás (Nm³/s); D_l: Diâmetro da perna (m); P_1 e P_2, pressão na ponta dos bicos de injeção e na câmara de vácuo, respectivamente.

A relação entre taxa de circulação e $G_g^{1/3}$ para os três fluidos de circulação é apresentada na Figura 5.7. O parâmetro R^2 foi maior que 0,85 para os resultados obtidos utilizando o vaso

inferior no formato cilíndrico. Além disso, para a água, os coeficientes angulares das duas curvas foram muito próximos, indicando a equivalência entre os valores de taxa de circulação utilizando o vaso inferior de diferentes formatos. Os coeficientes angulares das curvas utilizando solução salina como fluido de circulação também foram próximos, e são maiores que para a água. Isto pode ser explicado devido a maior densidade das soluções e consequentemente maior pressão na saída dos bicos para uma mesma vazão de gás e menor pressão na câmara de vácuo, ou seja, maior razão P_1/P_2. O desvio observado para vazões mais baixas na curva de $ZnCl_2$ justificado pela maior viscosidade desta solução.

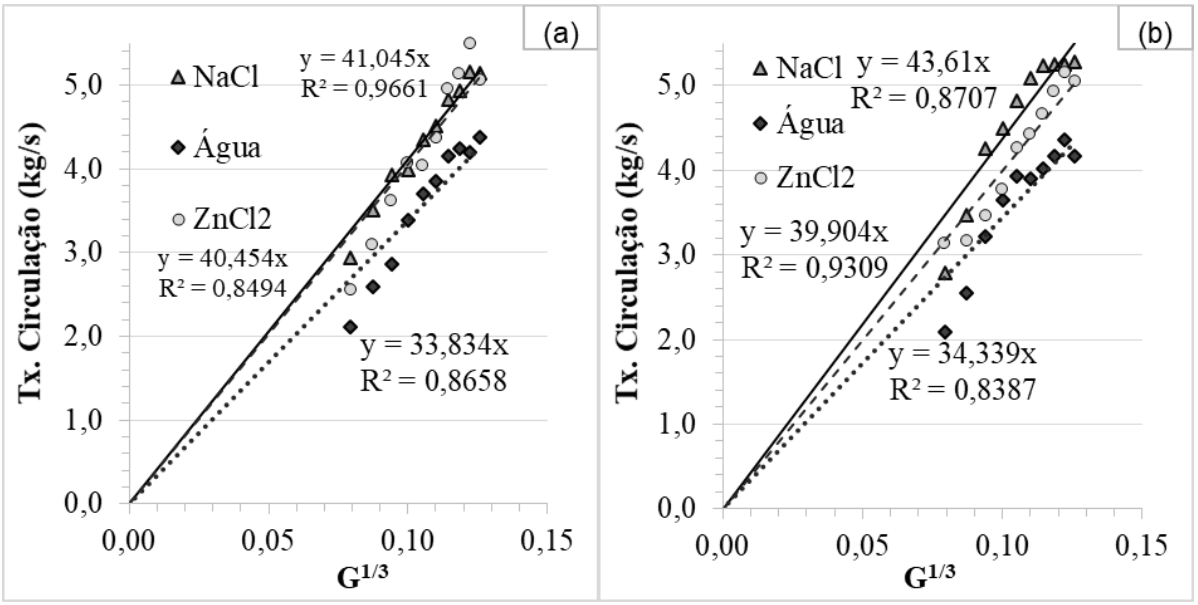

Figura 5.7 – Relação entre valores de taxa de circulação obtidos pelo método da ponte de *strain gages* e $G^{1/33}$ para o vaso inferior: (a) panela; (b) caixa.

5.1.3 Influência da densidade do fluido de circulação

Na Figura 5.8 tem-se uma comparação entre os valores de taxa de circulação obtidos pelo MPSG utilizando água e soluções aquosas (NaCl e $ZnCl_2$) para o vaso inferior nos formatos retangular (caixa) e cilíndrico (panela). Como era já esperado, o formato do vaso inferior pouco influenciou sobre os valores de taxa de circulação, indicando que a velocidade na câmara de vácuo (vaso superior) é a mesma, independente do formato do vaso inferior. Desta forma, o vaso retangular pode ser utilizado para avaliar o tamanho das gotas de óleo arrastadas da câmara

de vácuo, sem prejuízo à similaridade, pois as imagens são capturadas logo na saída da perna de descida.

Nota-se também que o aumento na densidade do fluido de circulação resultou em aumento da taxa de circulação, cerca de 22%, quando se utiliza a panela e 30% para a caixa retangular. Como este aumento é próximo ao aumento na densidade (17% e 22%), a velocidade média do fluido na câmara de vácuo e na perna de descida sofreu pequena alteração (lembrando que velocidade é vazão mássica divido por densidade e por área da seção transversal da perna). Portanto, pode-se considerar que os efeitos sobre o comportamento do óleo adicionado na câmara de vácuo são devidos à diferença de densidade (entre fluido de circulação e óleo) e viscosidade.

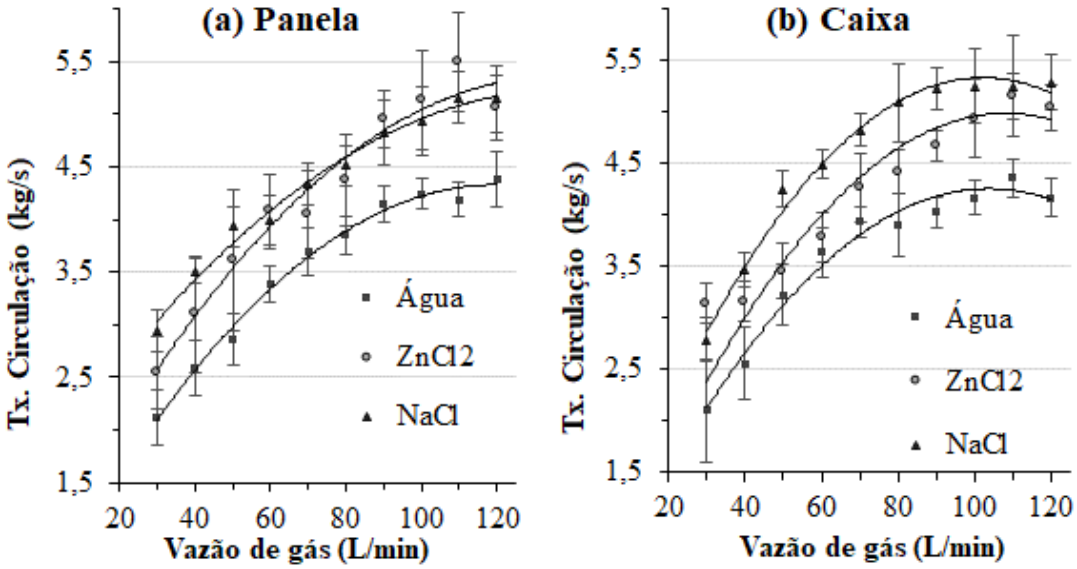

Figura 5.8 – Comparação dos valores da taxa de circulação utilizando água e solução aquosa (NaCl ou $ZnCl_2$) com o vaso inferior: (a) panela; (b) caixa.

5.2 Simulação Matemática do Desgaseificador RH

Durante o 48º Seminário de Aciaria – Internacional, parte integrante da ABM Week 2017, foi apresentado e publicado nos anais do congresso um artigo relacionado a esta tese sobre simulação numérica do reator RH, abordando a influência das forças de interação bolha/líquido sobre a previsão da distribuição de gás na perna de subida e a determinação da taxa de

circulação. O modelo foi validado com imagens da zona de injeção e valores de taxa de circulação obtidos pelo método da condutivimetria, via modelagem física.

Posteriormente, foram realizadas filmagens na perna de subida utilizando apenas 2 bicos de injeção, para permitir uma melhor caracterização da zona de injeção. Novas simulações matemáticas foram realizadas nestas condições e os coeficientes das forças de interação bolha/líquido foram aprimorados. Os resultados finais são apresentados e discutidos a seguir.

5.2.1 Penetração do gás na perna de subida

Como descrito no tópico 3.3, há grande necessidade de otimização da previsão da penetração do gás na perna de subida para melhor representação do fluxo circulatório do aço entre a câmara de vácuo e a panela de modo a aumentar a confiabilidade das simulações matemáticas do reator RH. Neste tópico, investigou-se o efeito da combinação de forças de arraste e forças de não-arraste para previsão da penetração do gás na perna de subida e da taxa de circulação no modelo físico do reator RH, em função da vazão de gás nos bicos injetores.

Modelos físicos do Reator RH permitem a caracterização da zona de injeção (pluma gasosa) na perna de subida, parte fundamental para comparação e validação do modelo matemático, como realizado em trabalhos anteriores (Neves 2012; Silveira, 2011]). Neste sentido, na Figura 5.9 nota-se que a penetração do gás logo na saída dos bicos é pequena (cerca de 1cm), e à medida que sobe pela perna, a penetração do gás aumenta, atingindo o centro da perna antes de entrar na câmara de vácuo. Quando se utiliza apenas dois bicos de injeção é possível observar a seção longitudinal da perna de subida, numa altura de 88mm acima dos bicos, conforme Figura 5.10. Nota-se que para a vazão de 10L/min as bolhas de gás sobem próximo a parede da perna, enquanto para a vazão de 50L/min, os jatos provenientes dos dois bicos atingem o centro da perna.

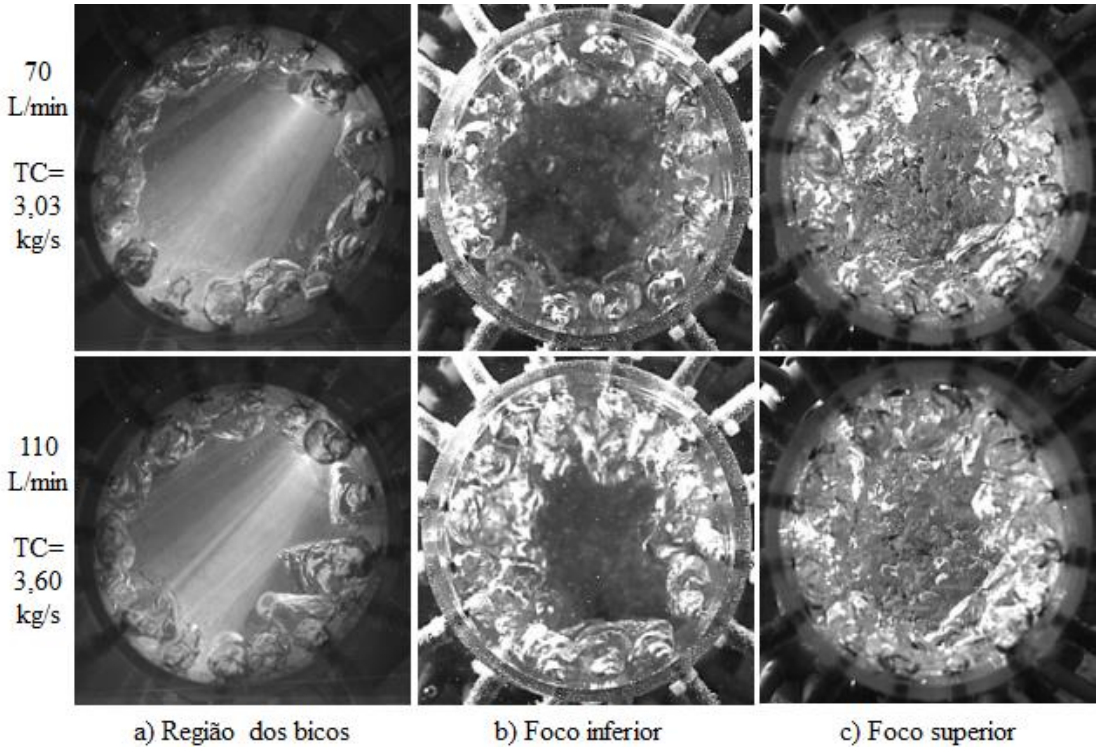

Figura 5.9 – Penetração do gás na zona de injeção do modelo físico, vazão de gás 70L/min (superior) e 110L/min (inferior), com o foco da câmera na região: (a) dos bicos de injeção; (b) inferior da perna e (c) superior da perna. TC – Taxa de circulação.

A Figura 5.11 apresenta imagens da zona de injeção obtidas por simulação matemática para diferentes combinações das forças de arraste e de não-arraste. A força de arraste foi considerada em todos os casos, devido a sua importância no fluxo viscoso. Estas imagens foram obtidas através de dois planos transversais à perna de subida passando nos dois níveis de injeção, sendo que no plano do nível inferior foi utilizado transparência de 50% para permitir a visualização simultânea dos dois níveis de injeção. Pela Figura 5.11(a), quando se utiliza apenas a força de arraste, qualquer dos três modelos, a penetração do gás e a taxa de circulação de líquido são muito inferiores aos resultados do modelo físico. Neves (2012) também não identificou aumento na penetração de gás do fluxo ascendente de líquido com introdução das forças sustentação e dispersão turbulenta. Nota-se que apenas a força de massa virtual (Figura 5.11c) foi responsável pelo aumento efetivo da penetração do gás no fluxo de líquido, sendo superior a penetração observada no modelo físico (Figura 5.9ª). Isto é ajustável pelo coeficiente C_{VM}, uma vez que o valor 0,5 é indicado para o fluxo de bolhas esféricas isoladas. Esta análise é apresentada na Figura 5.12 (todos os bicos de injeção) e Figura 5.13 (utilizando apenas dois

bicos). Os valores de C_{VM}= 0,2 e 0,3 alcançam boa penetração do gás em comparação ao modelo físico, porém, o valor de taxa de circulação foi abaixo do valor experimental (70L/min = 3,03kg/s e 110L/min = 3,60kg/s).

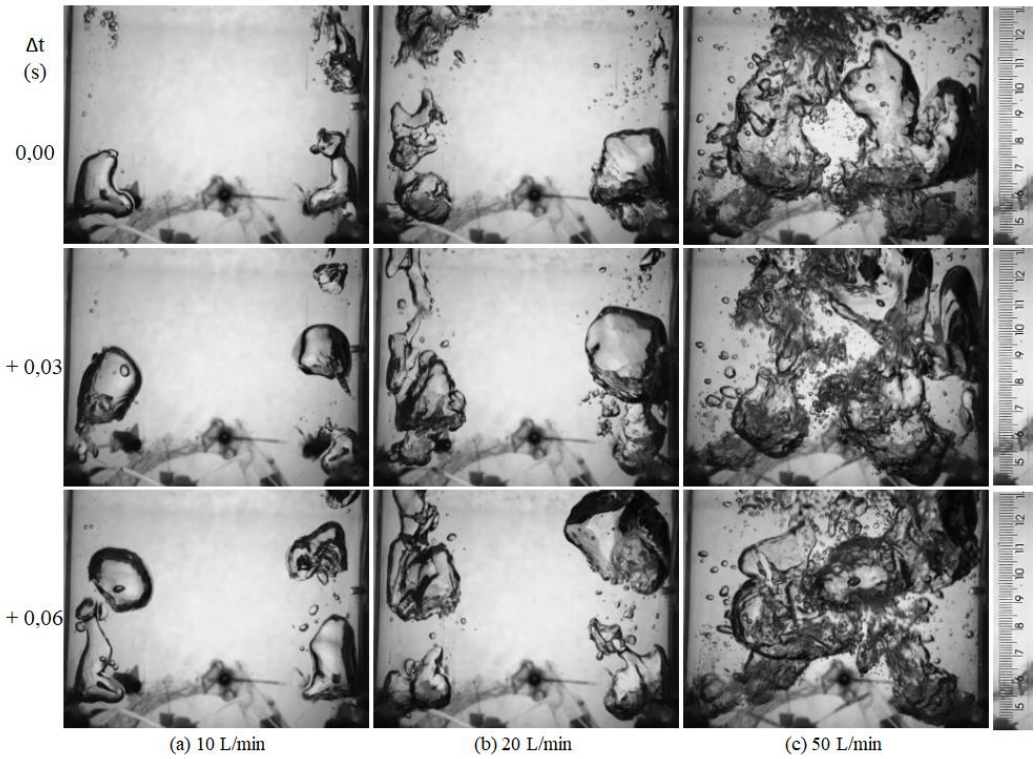

Figura 5.10 – Penetração do gás na zona de injeção do modelo físico com injeção de gás em apenas em dois bicos, vazão de gás (superior) e 110L/min (inferior), com o foco da câmera na região: (a) 10L/min; (b) 20L/min e (c) 50L/min.

Utilizando-se apenas dois bicos, o valor de C_{VM}= 0,25 resultou na melhor representatividade da penetração do gás em comparação ao modelo físico (Figura 5.10), sendo a taxa de circulação muito inferior aos valores medidos no modelo físico (20L/min = 1,04kg/s e 50L/min = 2,14kg/s). Ressalta-se que, no caso de apenas dois bicos de injeção, devido aos valores elevados de vazões por bico (alta velocidade do gás nos bicos), o aumento nos valores de C_{VM} resulta em penetração excessiva do gás e consequente redução da taxa de circulação. Este fenômeno não é observado quando se utiliza todos os dezesseis bicos, visto que para os valores de vazão 70L/min e 110L/min a vazão por bico é inferior a 10L/min.

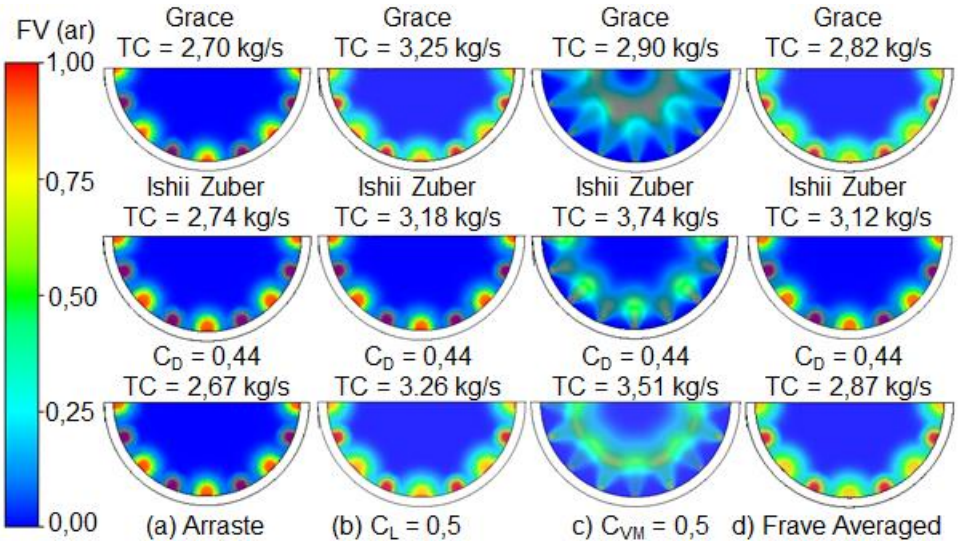

Figura 5.11 – Penetração do gás na zona de injeção do modelo matemático, vazão de gás 110L/min. Influência das forças de interação gás/líquido, força de: (a) arraste (apenas); (b) sustentação; (c) massa virtual; (d) dispersão turbulenta. FV - fração volumétrica de ar.

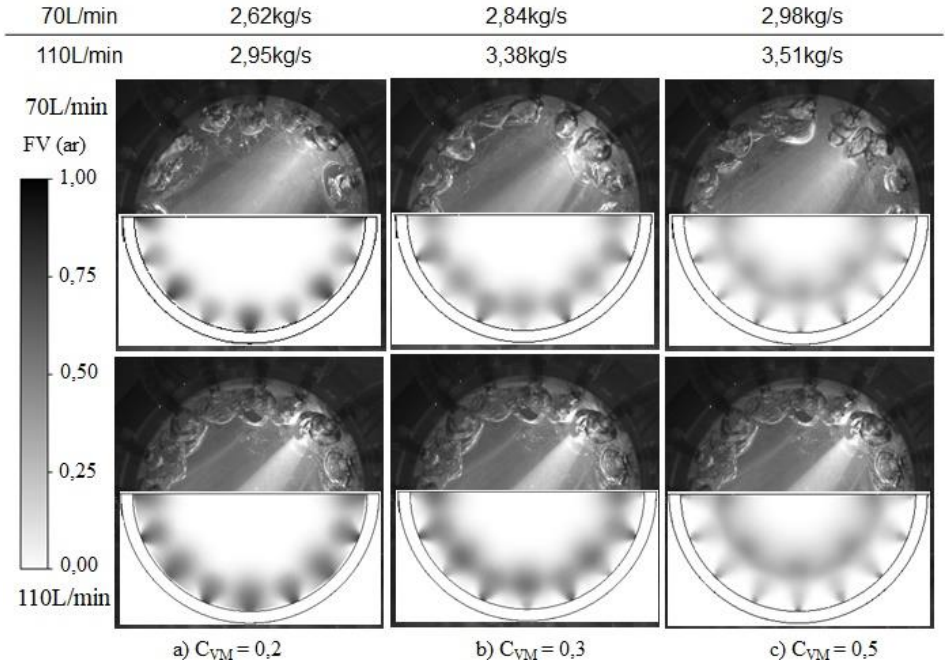

Figura 5.12 – Profundidade de penetração do gás na zona de injeção, vazão de gás 70L/min (superior) e 110L/min (inferior), modelo físico versus matemático utilizando C_D = 0,44 e : (a) C_{VM} = 0,2; (b) C_{VM} = 0,3; (c) C_{VM} = 0,5.

Os resultados descritos até aqui indicam que o problema de penetração de ar encontrado na literatura está relacionado com a atuação da força de massa virtual, como sugerido por Geng *et*

al. (2010) e observado em outros trabalhos recentes sobre RH que utilizaram C_{VM} = 0,5 (KISHAN e DASH, 2009; LING *et al.*, 2016; ZHU *et al.*, 2017). No entanto, não existe consenso sobre a atuação da força de massa virtual, visto que outros pesquisadores atestam que seu efeito é negligenciável (CHEN *et al.*, 2016; BRAGA *et al.*, 2016). Porém, a utilização de C_{VM} = 0,5 para baixas vazões de gás por bico pode implicar em superestimativas da penetração do gás na perna de subida, apesar de resultar em aumento na taxa de circulação.

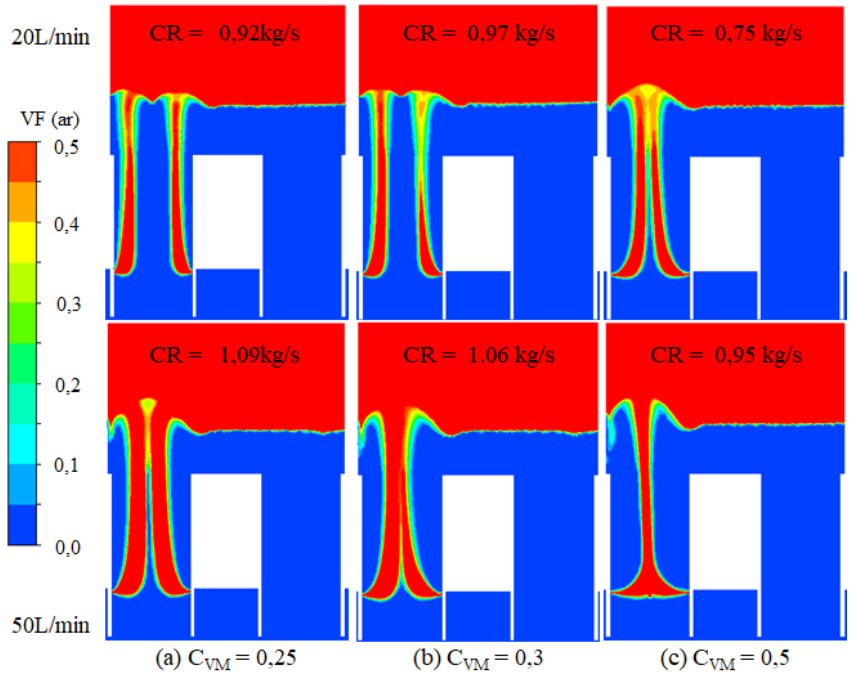

Figura 5.13 –Profundidade de penetração do gás na perna de subida utilizando apenas dois bicos, vazão de gás 20L/min (superior) e 50L/min (inferior), modelo matemático utilizando modelo de Ishii-Zuber para força de arraste e força de massa virtual: (a) C_{VM} = 0,25; (b) C_{VM} = 0,3; (c) C_{VM} = 0,5.

A força de massa virtual promoveu melhorias na previsão da penetração do gás na zona de injeção do gás, mas apenas na região próxima aos bicos onde a aceleração relativa entre as fases é alta. Isto era esperado, como relatado por Mendez *et al.* (2005) em simulações bifásicas de panela de aciaria, a inclusão da força de massa virtual afeta a fração de volume de gás principalmente na região próxima aos bicos de injeção, onde as acelerações relativas entre as fases são maiores. Desta forma ao longo da perna de subida o gás permaneceu aderido à parede da perna, conforme Figura 5.14(a). Para solucionar tal problema, acrescenta-se ao modelo a força de lubrificação da parede, que remove o acúmulo de gás na parede (Figura 5.14b), no

entanto, com efeito insignificante sobre a taxa de circulação de líquido e sobre a distribuição do gás para o centro da perna de subida do RH. As forças de sustentação e de dispersão turbulenta foram acrescentadas para melhorar a distribuição do gás na parte superior da perna de subida e elevar a taxa de circulação. Pode-se ainda ajustar o valor de C_L, uma vez que ele depende fortemente do formato das bolhas e decresce com o diâmetro da bolha- d_b (Zhang *et al.*, 2013).

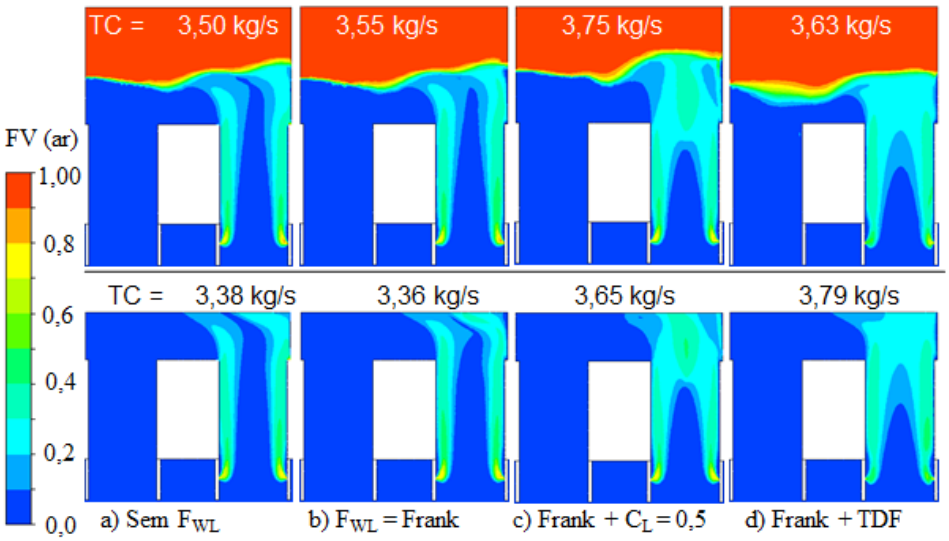

Figura 5.14 – Influência das forças de não-arraste sobre a penetração do gás no fluxo ascendente de líquido, utilizando todos os bicos de injeção; combinação de forças C_D = Ishii-Zuber, C_{VM} = 0,25 e: (a) sem F_{WL}; (b) F_{WL} = modelo de Frank; (c) F_{WL} + C_L=0,5; (d) F_{WL} + F_{TD}. Vazão de gás 110L/min.

Utilizando-se apenas dois bicos de injeção, as forças de sustentação (C_L=0,3) e de dispersão turbulenta foram acrescentadas para melhorar a distribuição do gás na parte superior da perna de subida e elevar a taxa de circulação do aço líquido entre a câmara de vácuo e a panela, Figura 5.15. Nota-se que os valores da taxa de circulação aumentaram para as duas forças, mas para a força de dispersão turbulenta os valores foram mais próximos dos resultados do modelo físico, assim como a distribuição de gás foi mais coerente com as imagens da Figura 5.10 (b e c).

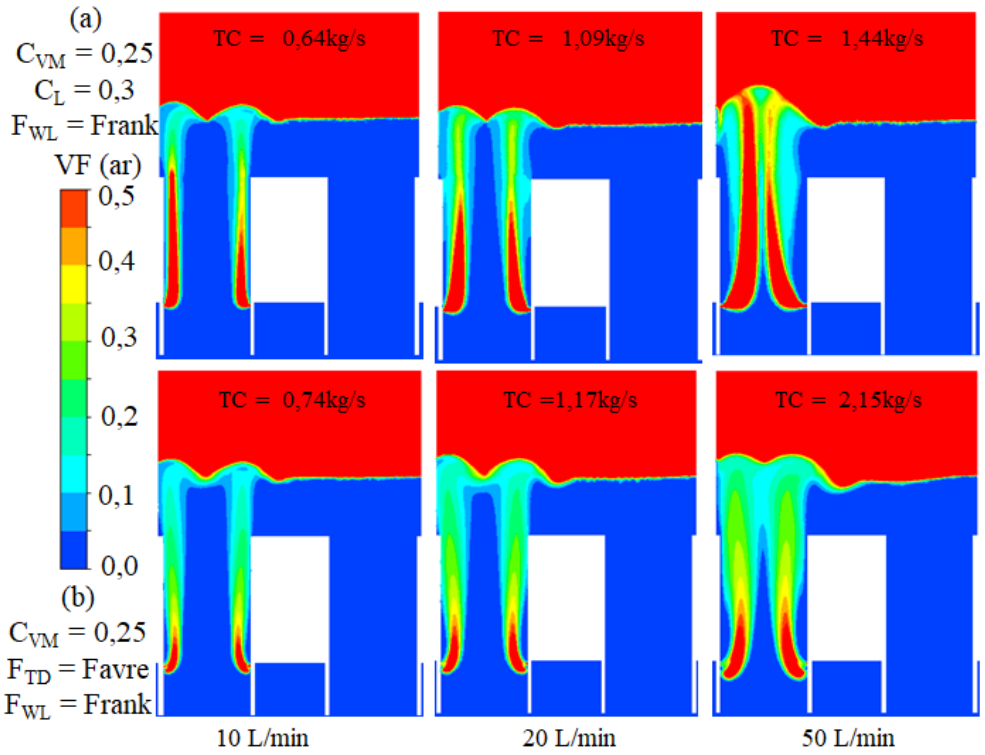

Figura 5.15 – Profundidade de penetração do gás na perna de subida utilizando apenas dois bicos, vazão de gás 20L/min (superior) e 50L/min (inferior), modelo matemático utilizando C_D = Ishii-Zuber, C_{VM} = 0,25, F_{WL} = modelo de Frank: (a) C_L = 0,3 e (b) F_{TD} = média Favre da força de arraste.

As Figuras 5.16 e 5.17 apresentam comparações entre imagens da distribuição de gás na perna de subida em diferentes alturas (distância dos bicos de injeção) para as vazões de 80L/min e 160L/min (equivalentes, respectivamente, as vazões de 5L/min e 10L/min por bico). Nota-se que considerável acréscimo na taxa de circulação quando se utiliza a força de dispersão turbulenta, além de uma distribuição mais uniforme de gás, enquanto a incorporação simultânea das forças de sustentação (C_L = 0,3) e de dispersão turbulenta não apresentou diferenças significativas quanto ao emprego apenas da força de dispersão turbulenta (mantidas as configurações com C_D = modelo de Ishii-Zuber, C_{VM} = 0,25 e F_{WL} = modelo de Frank). Mendez *et al.* (2005) também observou para panelas de aciaria que as forças de sustentação e de dispersão turbulenta alteram a fração volumétrica de gás em toda a altura da coluna de pluma gasosa. Porém, ele observou ainda que o efeito da força de dispersão turbulenta sobre a distribuição de gás é menos sensível a alterações no coeficiente desta força, enquanto variações do coeficiente da força de sustentação alteraram de forma pronunciada a pluma gasosa.

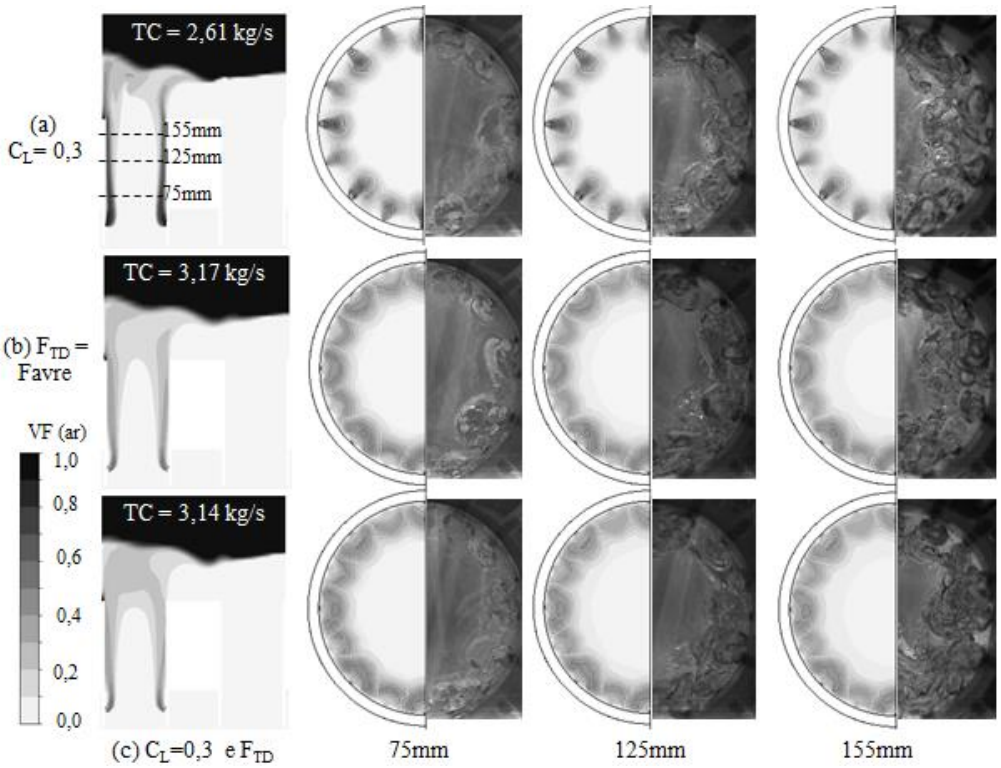

Figura 5.16 – Comparação da penetração do gás em diferentes alturas da perna de subida entre modelo físico e simulação matemática utilizando C_D = Ishii-Zuber, C_{VM} = 0,25, F_{WL} = Frank: (a) C_L = 0,3; (b) F_{TD} = Favre; (c) F_{TD} = Favre + C_L = 0,3. Injeção de gás em todos os bicos, vazão de gás 80L/min.

Utilizando apenas dois bicos de injeção, e a combinação das C_D = Ishii-Zuber, C_{VM}= 0,25, F_{WL} = Frank e F_{TD} = Favre, a Figura 5.18 compara a penetração do gás para diferentes vazões. Observa-se que o modelo matemático foi capaz de prever a penetração do gás, para vazões na faixa de 10L/min a 50L/min (apenas dois bicos) e de 70L/min a 160L/min (com todos os 16 bicos). Logo, de acordo com os resultados anteriores, o efeito da força de sustentação sobre a penetração do gás e sobre a taxa de circulação foi inferior a força de dispersão turbulenta e, portanto, pode ser negligenciada. Trabalhos anteriores (Chen *et al.*, 2016; Zhu *et al.*, 2017) também sugeriram que esta força pode ser ignorada.

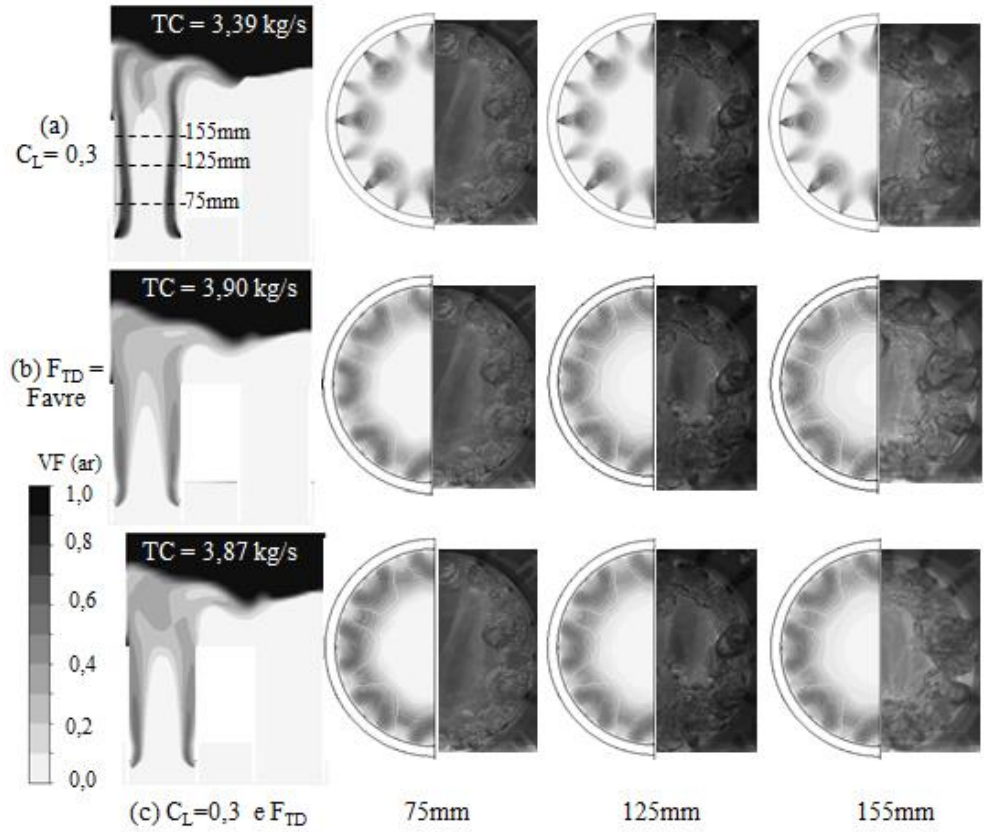

Figura 5.17 – Comparação da penetração do gás em diferentes alturas da perna de subida entre modelo físico e simulação matemática utilizando C_D = Ishii-Zuber, C_{VM} = 0,25, F_{WL} = Frank: (a) C_L = 0,3; (b) F_{TD} = Favre; (c) F_{TD} = Favre + C_L = 0,3. Injeção de gás em todos os bicos, vazão de gás 160L/min.

5.2.2 Previsão da taxa de circulação de líquido

As Figuras 5.19 e 5.20 apresentam comparação entre os valores de taxa de circulação medidos no modelo físico e previsto pela simulação matemática com combinação de forças C_D = Ishii-Zuber, C_{VM}= 0,25, F_{WL} = Frank e F_{TD} = *Favre averaged*. Observa-se que o modelo matemático foi capaz de prever com grande precisão a taxa de circulação para vazões na faixa de 10L/min a 50L/min (apenas dois bicos) e de 30L/min a 160L/min (com todos os 16 bicos). A relação entre taxa de circulação e $G^{1/3}$ (da Equação de Kuwabara) é apresentada na Figura 5.20(b). Nota-se boa concordância entre os resultados obtidos pela técnica da condutivimetria e os valores calculados via CFD, sendo os coeficientes angulares das duas curvas muito próximos, indicando que a simulação matemática com este ajuste de forças foi capaz de prever os valores da taxa de circulação de líquido entre a câmara de vácuo e a panela. Ressalta-se que na Figra

5.20 (a) a inversão observada nas curvas de taxa de circulação (CFD vs modelo físico) pode ser relacionada à influência da fração de gás sobre os valores dos coeficientes das forças de arraste e não arraste. Por exemplo, Neves (2012) adotou dois coeficientes da força de dispersão turbulenta em função da faixa de vazão de gás, para que seus valores de taxa de circulação fossem coerentes com o modelo físico.

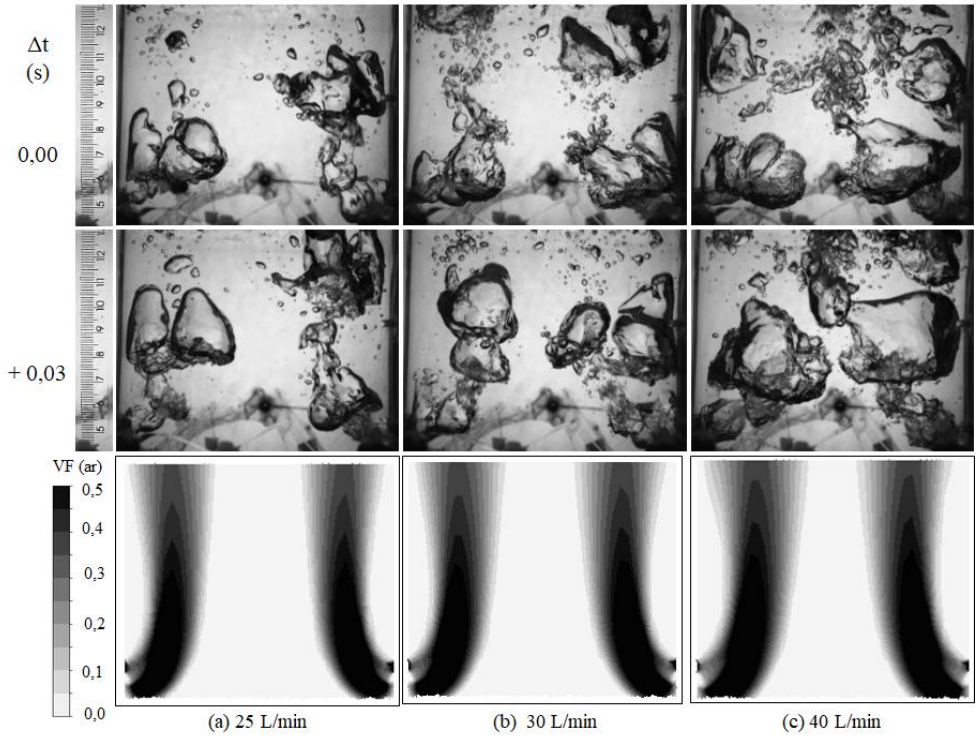

Figura 5.18 – Análise da penetração do gás na zona de injeção com injeção de gás em apenas em dois bicos. Simulação matemática utilizando C_D = Ishii-Zuber, C_{VM} = 0,25, F_{WL} = Frank e F_{TD} = Favre, vazão de gás: (a) 25L/min; (b) 30L/min e (c) 40L/min.

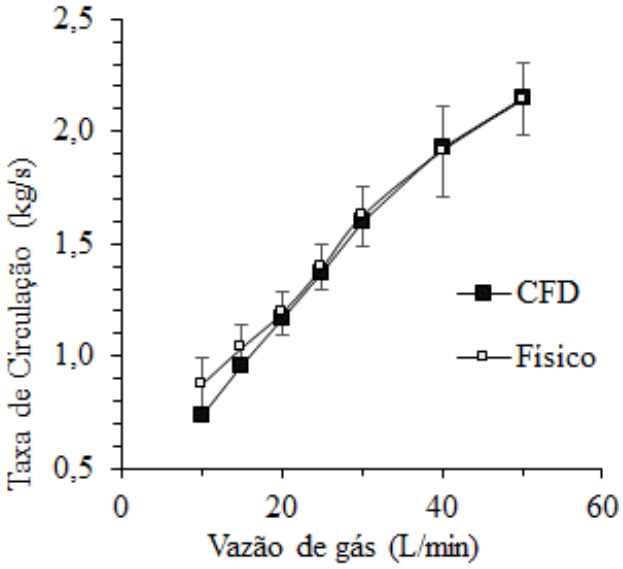

Figura 5.19 – Comparação entre taxa de circulação utilizando-se apenas dois bicos para injeção de gás obtida no modelo físico e prevista pelo modelo CFD com C_D= Modelo de Ishii-Zuber, C_{VM} = 0,25; F_{WL} = Frank e F_{TD} = Favre.

A análise da dispersão de traçador via simulações em regime transiente, calculadas a partir dos resultados do fluxo bifásico em regime permanente, é apresentada nas Figuras 5.21 e 5.22. A concentração do sal foi avaliada no centro da perna de descida, e o pulso de solução salina foi injetado na câmara de vácuo, logo acima da perna de subida. As curvas obtidas nos experimentos do modelamento físico foram utilizadas para cálculo da taxa de circulação pelo método da condutivimetria (como descrito no tópico 4.1.1). Tanto com todos os bicos ou apenas dois bicos de injeção, as curvas de experimentos no modelo físico e simulação matemática exibem o mesmo comportamento: um pico correspondente a passagem do primeiro pulso de traçador, retornando ao líquido limpo (sem traçador), e um segundo pulso de menor amplitude, correspondente ao retorno do líquido a câmara de vácuo; um terceiro pulso seguido pela estabilização da concentração de sal. Maior a vazão de gás injetado pelos bicos na perna de subida do reator RH, menor a duração dos pulsos e mais rápida a estabilização da concentração do sal. Zhu *et al.* (2018) utilizaram simulações matemáticas de dispersão de traçador como o método de otimização do local de amostragem na panela durante o tratamento do aço no reator RH. O modelo matemático permite a análise de vários pontos simultaneamente, facilitando a caracterização do fenômeno de mistura do aço na panela, e a determinação do tempo de misturamento nas diferentes regiões.

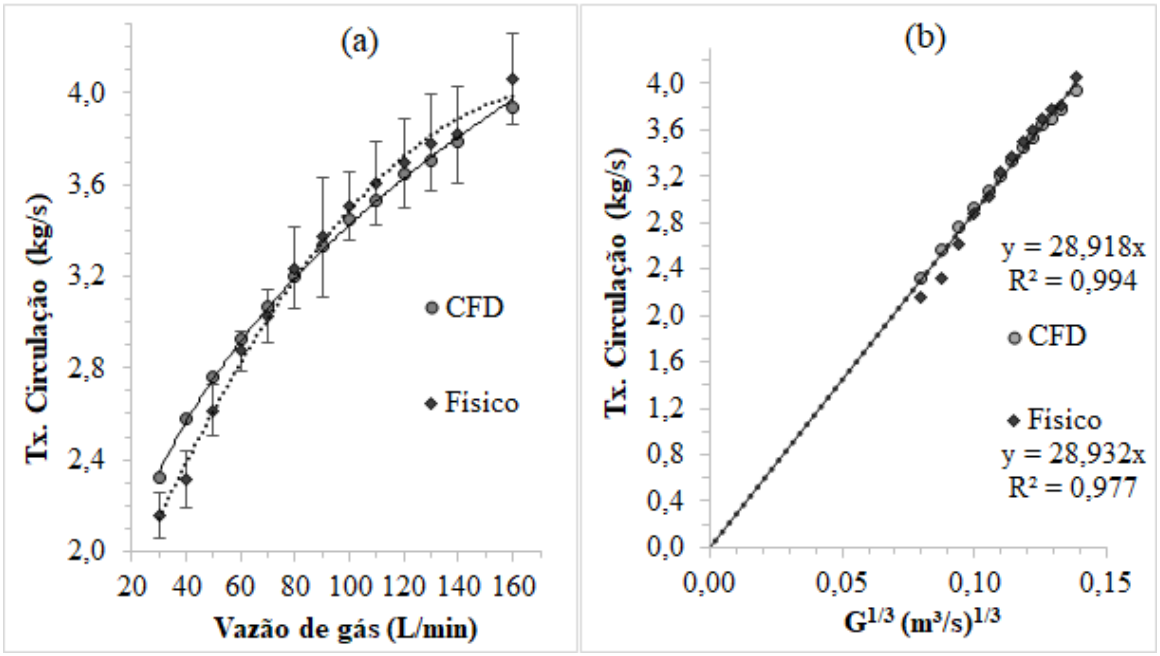

Figura 5.20 – (a) Taxa de circulação obtida no modelo físico e no modelo CFD com C_D= 0,44, C_{VM} = 0,25; F_{WL} = Frank e F_{TD} = Favre; (b) Relação entre taxa de circulação e vazão de gás ($G^{1/3}$).

Portanto, imagens da distribuição de gás na perna de subida e medidas da taxa de circulação obtidas, via modelo físico, foram utilizadas para validar a simulação matemática com incorporação das forças de não-arraste. A utilização dos modelos para as forças de não-arraste em simulações em regime permanente do reator RH como proposto neste trabalho reduz consideravelmente os custos computacionais, sendo necessário apenas algumas horas para se obter resultados coerentes ao observado no modelo físico. Seu emprego apresenta grande vantagem frente à simulação em regime transiente como realizado em trabalhos anteriores (BRAGA *et al.*, 2016; LING *et al.*, 2016a) e pode ser utilizado para se determinar resultados preliminares para o fluxo no interior do RH que serão utilizados como condição inicial de simulações em regime transiente, reduzindo o tempo computacional total para solução do problema.

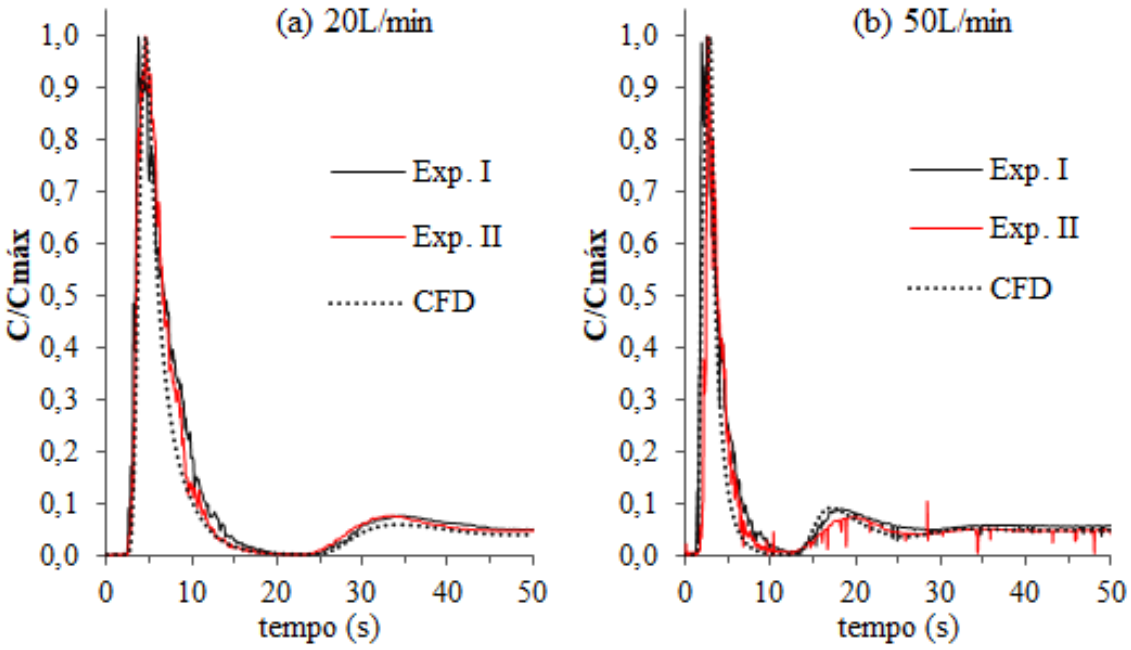

Figura 5.21 – Comparação entre resultados de simulação matemática e experimentos no modelo físico das curvas normalizadas de espalhamento de traçador obtidos em experimentos utilizando apenas dois bicos de injeção de gás: (a) 20L/min; (b) 50L/min. Exp. = Experimento I ou II.

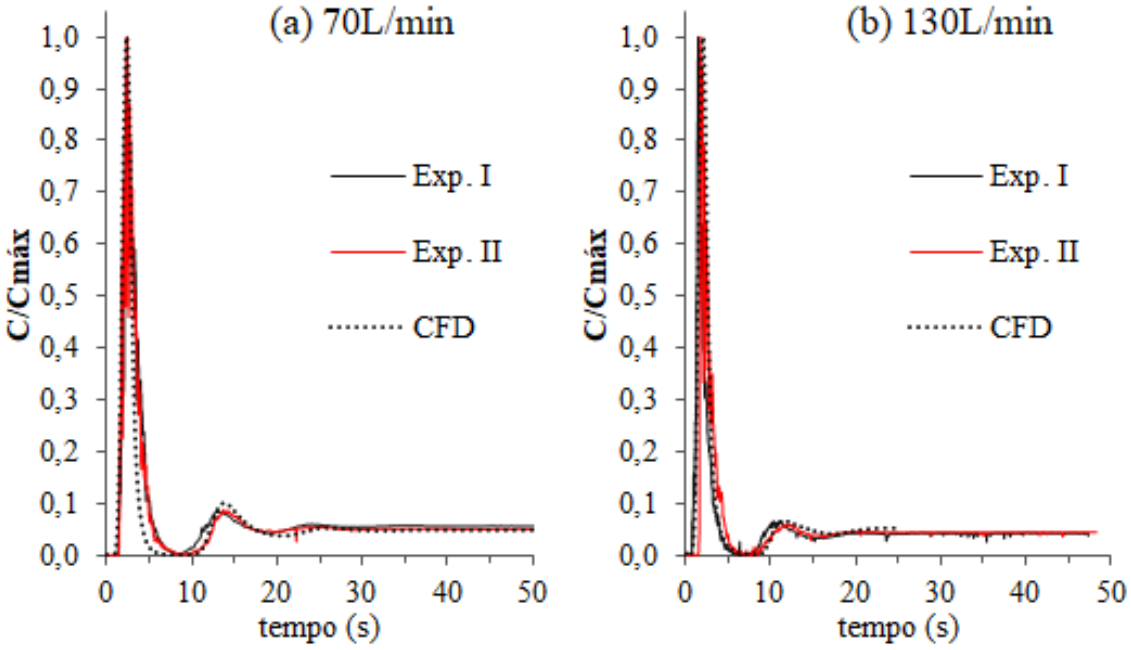

Figura 5.22 – Comparação entre resultados de simulação e experimentos no modelo físico das curvas normalizadas de espalhamento de traçador para as vazões de gás: (a) 70L/min; (b) 130L/min.

5.3 Análise da Dessulfuração do Aço no Reator RH

Neste tópico apresentam-se os resultados que foram publicados no artigo *"Numerical Simulation of Recirculating Flow and Physical Model of Slag–Metal Behavior in an RH Reactor: Application to Desulfurization"*, na revista *METALLURGICAL AND MATERIALS TRANSACTIONS B.* Foram analisados o efeito da injeção de gás na distribuição espacial do gás, na taxa de circulação do aço e no perfil de velocidade dentro da panela, das pernas e da câmara de vácuo. Óleo N-pentano foi empregado no modelo físico para avaliar o tempo médio de residência, assim como a distribuição do tamanho das gotas de escória. A distribuição radial de gás e a taxa de circulação previstas pela simulação numérica foram validadas com dados experimentais do modelo físico em escala 1:7,5. Os resultados com a incorporação da força de massa virtual com C_{VM} = 0,25 e da força de dispersão turbulenta resultaram em melhores previsões de distribuição de gás na perna de subida e de taxa de circulação. Simulações em escala real (sistema aço/argônio) também foram realizadas e a taxa de circulação prevista foi significativamente afetada pela consideração da expansão das bolhas de argônio. Dados de taxa de dissipação de energia cinética turbulenta (ε) obtidos nestas simulações foram usados para analisar o grau de dessulfuração que pode ser alcançado pela adição de material dessulfurantes dentro da câmara de vácuo pela calha de adição de ligas. Um modelo cinético de dessulfuração baseado nos resultados do modelo físico e na simulação CFD e na dispersão de escória no interior do aço líquido foi capaz de prever graus de dessulfuração similares aos resultados industriais relatados na literatura.

5.3.1 Padrão de fluxo

Modelamento físico do reator RH permite caracterizar a zona de injeção (pluma gasosa) na perna de subida. Na Figura 5.23(a), nota-se que a penetração do gás na saída dos bicos é pequena, e à medida que o gás sobe pela perna, a penetração da pluma aumenta, atingindo o centro da perna antes de entrar na câmara de vácuo (Figura 5.23(a)). As bolhas fluindo para cima, próximas às paredes da perna de subida, ocupam uma fração da área transversal da mesma, resultando num tipo de anel gasoso. Este anel de gás é responsável pelo bombeamento do líquido em direção à câmara de vácuo. Como já foi observado em alguns trabalhos, (GENG et al., 2010; LING et al., 2016b; ZHU et al., 2017) a força de massa virtual é responsável pelo

aumento efetivo da penetração da pluma de gás na zona de injeção. No entanto, a utilização do coeficiente da força de massa virtual (C_{VM}) igual a 0,5 resulta em pronunciada penetração de gás, podendo alcançar o centro da perna de subida ainda na zona de injeção. Conforme detalhado no tópico de resultados do modelamento matemático, neste trabalho o valor C_{VM} = 0.25 resultou na melhor representação da penetração do gás comparada a imagens da zona de injeção no modelo físico.

A força de dispersão turbulenta e a força de lubrificação da parede foram incorporadas para aprimorar a previsão da distribuição de gás na parte superior da perna de subida e para evitar o acúmulo de gás nas paredes da perna, respectivamente (ver Figura 5.23(b)). Esta mesma configuração de forças de não-arraste foi adotada na simulação do reator em escala real, utilizando os fluidos: aço líquido e argônio. Observa-se que a distribuição de argônio na simulação do reator industrial (Figuras 5.23(c) e (d)) é semelhante à distribuição de ar no modelo físico, isto é, o gás forma uma única coluna gasosa em forma de anel até a entrada da câmara de vácuo, onde as plumas de gás se expandem e se encontram antes de atingir a superfície livre do líquido.

A Figura 5.24(a) apresenta uma comparação entre os valores de taxa de circulação obtidos pelo método de condutivimetria para o vaso inferior nos formatos retangular (caixa) e cilíndrico (panela). Como afirmado anteriormente, a influência da forma do vaso inferior nos valores da taxa de circulação foi insignificante (<10%). Desta forma, o vaso retangular pode ser usado para avaliar o tamanho das gotículas de óleo arrastadas da câmara de vácuo, sem comprometer os princípios de similaridade, uma vez que as imagens são capturadas na saída da perna de descida. Nota-se também que para o sistema de água/ar, os valores medidos da taxa de circulação foram bem previstos pelas simulações fluidodinâmicas.

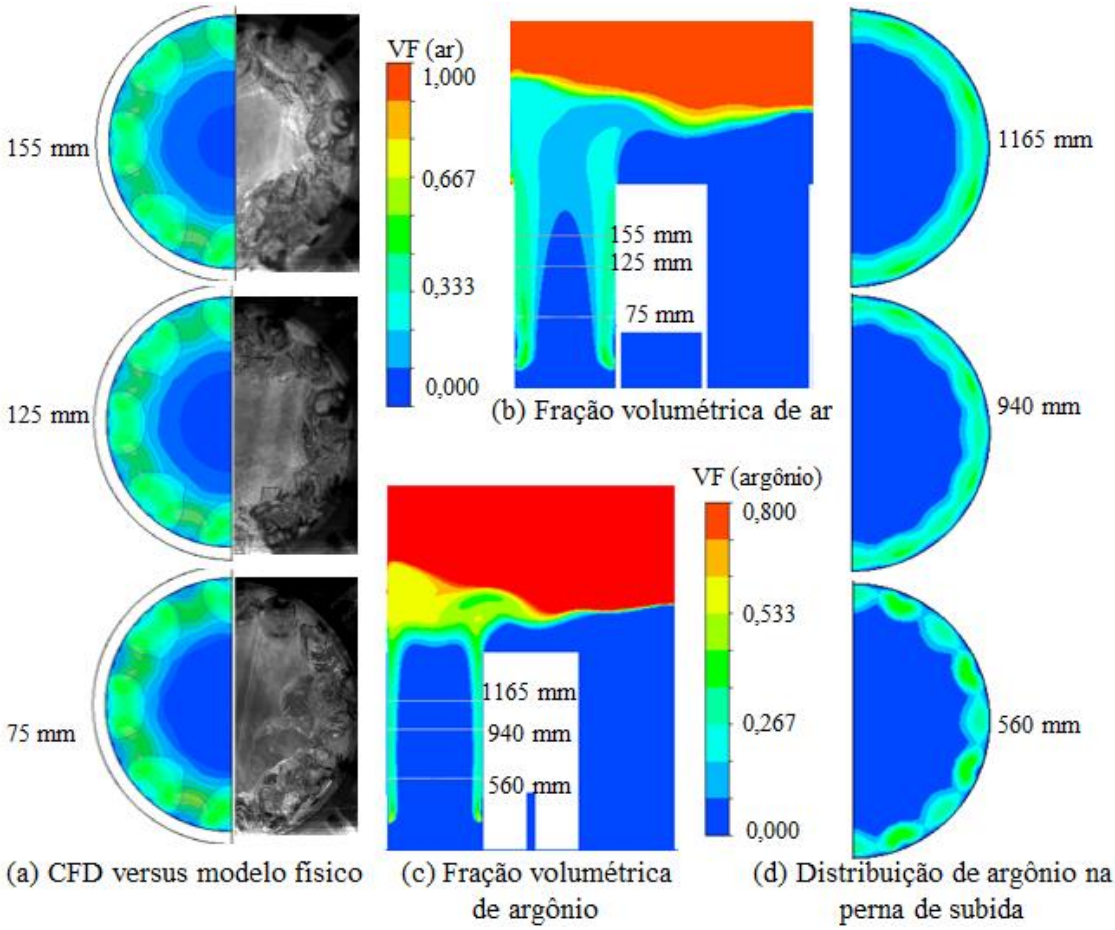

Figura 5.23 – Distribuição da fração volumétrica de gás na perna de subida: (a) CFD versus o modelo físico para diferentes alturas e (b) fração volumétrica de ar, vazão de 120 L/min; (c) e (d) fração volumétrica de argônio para vazão de 150 Nm³/h, considerando expansão de gás.

Para o sistema aço/argônio (Figura 5.24(b)), os valores de taxa de circulação sem expansão de gás são cerca de 60% dos valores teóricos de acordo com a equação de Kuwabara (Equação 3.7) para taxa de circulação (KUWABARA *et al.*, 1988). Quando uma equação simplificada, considerando a expansão das bolhas em função da pressão estática no interior do reator, é introduzida, a taxa de circulação prevista aumenta significativamente; torna-se mais de 80% dos valores teóricos. Melhores resultados podem ser alcançados se a expansão térmica também for levada em conta, mas é mais difícil estimar a temperatura das bolhas ao longo da perna. Não obstante, o presente método pode prever com boa precisão a taxa de circulação em um reator RH usando a simulação matemática (CFD).

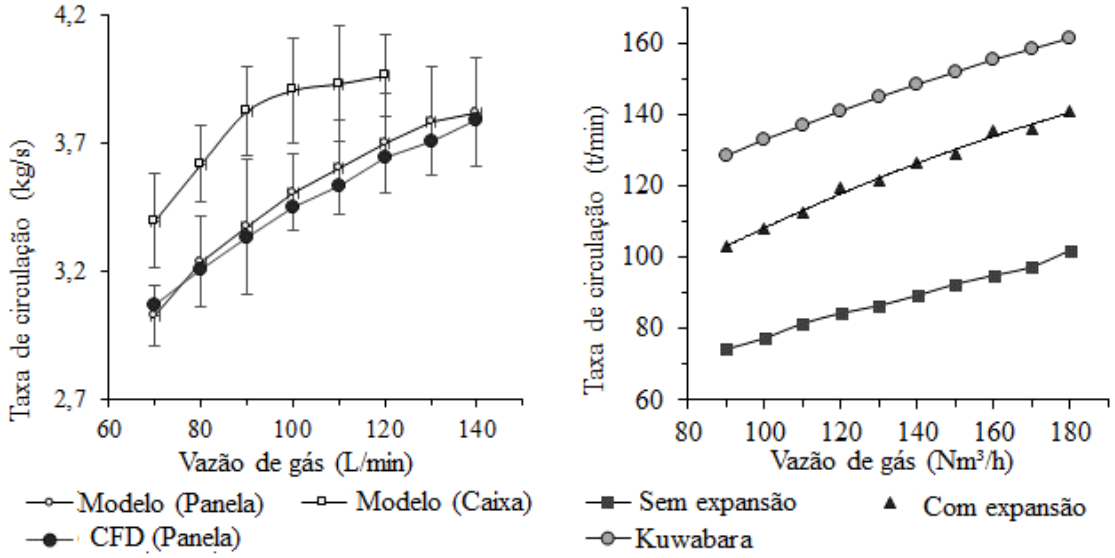

Figura 5.24 — Taxa de circulação em função da vazão de gás para: (a) modelo físico; (b) simulação matemática em escala real.

Os padrões de fluxo do líquido na panela e na câmara de vácuo foram simulados sob vazões de gás variando de 70L/min a 140L/min (água/ar) e 90Nm³/h a 180Nm³/h. Na Figura 5.25 são apresentados os resultados da velocidade do líquido no plano de simetria do reator RH. Esses resultados correspondem a condições com vazão de gás de 120L/min (água/ar) e 150Nm³/h (aço/argônio). Dois grandes redemoinhos são gerados na panela devido à colisão do fluxo descendente contra o fundo da panela. Os campos de velocidade previstos pelo modelo são consistentes com aqueles medidos pela técnica PIV em um modelo físico (utilizando água) de outros trabalhos (LING *et al.*, 2016b; ZHANG e LI, 2014). O padrão de fluxo do aço líquido exibe dois redemoinhos no interior da perna de subida, próximo à câmara de vácuo (Figura 5.25 (b)). Esses redemoinhos foram observados por Zhu *et al.* (2017) sem considerar o efeito da força de massa virtual, enquanto os dois redemoinhos desapareceram e a taxa de circulação aumentou consideravelmente quando adotaram C_{VM} = 0,5. No entanto, eles obtiveram uma penetração de gás na perna de subida muito maior do que no presente trabalho. Como o valor C_{VM} = 0,25 foi escolhido em comparação com imagens de modelos físicos da zona de injeção de gás, e o aço líquido que flui pela perna de subida empurra as bolhas de gás injetadas em direção às paredes da perna, é aceitável que as bolhas de argônio não sejam capazes de atingir o centro da perna de subida.

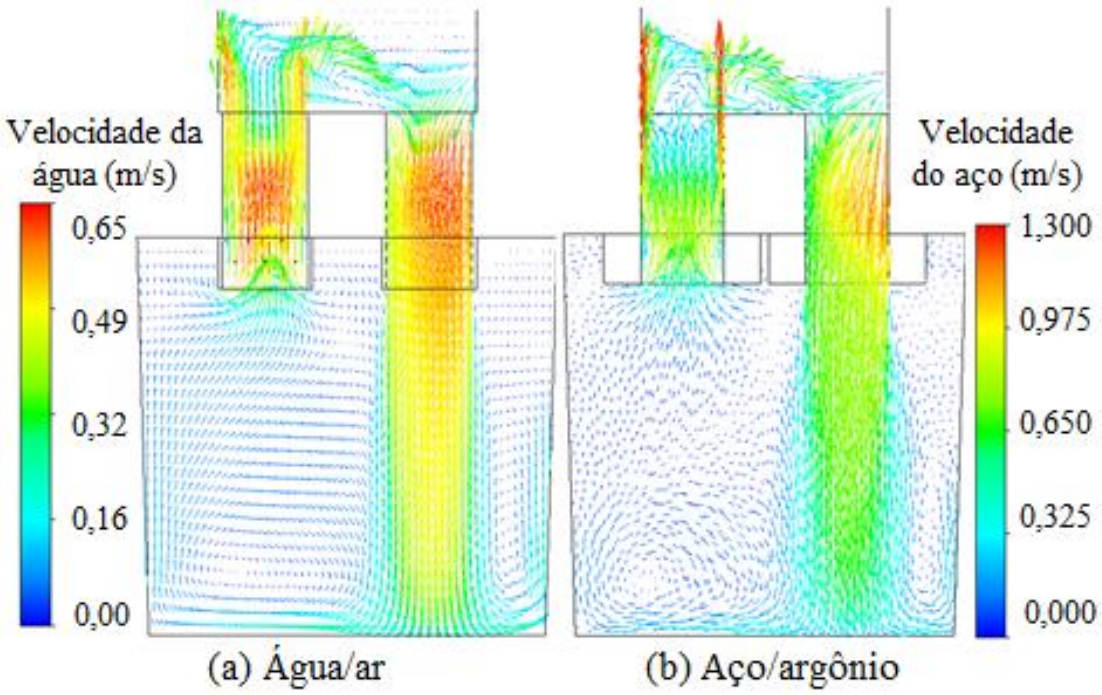

Figura 5.25 – Perfil de velocidades no plano de simetria do reator RH para vazão de gás igual a: (a) 120L/min de ar; (b) 150Nm³/h de argônio, simulação em escala real, considerando expansão das bolhas de argônio.

5.3.2 Comportamento aço/escória

A sequência de imagens na Figura 5.26 resume o comportamento das gotas de N-pentano que são arrastadas da câmara de vácuo para a panela, destacando a influência da vazão de gás no tempo total necessário para arrastar 500mL de N-pentano adicionados na câmara de vácuo. Apesar da injeção quase instantânea do óleo (<3,5s), haviam gotas de óleo dispersas na água por tempos superiores a 25s. No início, uma considerável fração do óleo se acumula na superfície do líquido acima da perna de descida. Devido à turbulência no interior da câmara de vácuo, a formação de pequenos vórtices acima da perna é responsável pelo entranhamento do óleo da superfície livre, e a recirculação do líquido arrasta as gotículas para o vaso inferior (panela). A frequência de ocorrência destes redemoinhos e a sua capacidade de promover o arraste de óleo aumentam para maiores vazões de gás e, consequentemente, reduz o tempo total de permanência do óleo no interior do líquido.

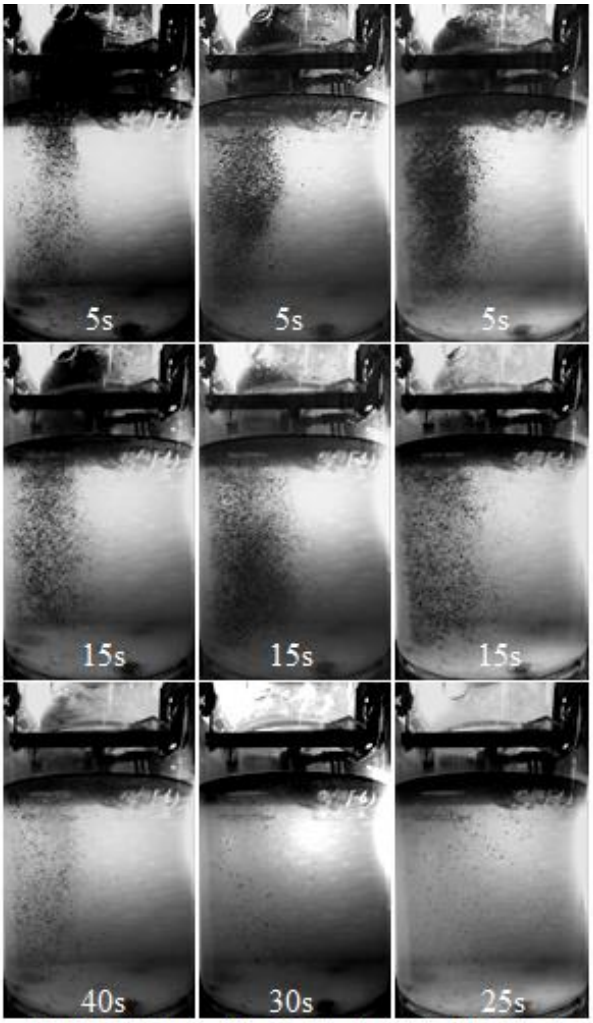

Figura 5.26 – Dispersão de gotas de N-pentano no interior da panela do modelo físico do reator RH em função do tempo para vazão de gás igual a (L/min): (a) 70, (b) 90 e (c) 110.

Pode-se notar também que as gotas são arrastadas até perto do fundo da panela, e pela ação do empuxo flutuam rapidamente para a superfície livre do líquido. O movimento das partículas é governado principalmente pelo empuxo, e as partículas ficam restritas à região abaixo e ao redor da perna de descida. Apenas gotas muito pequenas acompanham o fluxo do líquido e atingem a perna de subida, resultando em uma recirculação entre a panela e a câmara de vácuo.

O tempo médio total de arraste de óleo (tempo de arraste) e o tempo médio de residência (t_{Rp}) de uma única gota no seio do líquido (média das dez primeiras gotículas que passam pela perna) são mostrados na Tabela 5.1. Uma considerável redução no tempo de arraste do óleo é notada para a maior vazão de gás, enquanto o tempo de residência para uma única gota é ligeiramente

reduzido com o aumento da vazão de gás. O tempo necessário para que todas as gotas atinjam a superfície livre da panela varia entre 29s e 51s. Como o tempo de circulação é de cerca de 25s (para modelo físico), então há tempo disponível para promover o contato entre água e gotas de óleo.

As imagens capturadas logo abaixo da saída da perna de descida foram utilizadas para avaliar o tamanho das gotas de óleo arrastadas para o vaso inferior. A Figura 5.27 apresenta algumas imagens para diferentes vazões de gás. Um maior número de gotas é observado com o aumento da vazão. Os diâmetros das gotas estão entre 2mm e 9mm para todas as vazões de gás, e os valores médios são próximos a 4mm. O gráfico da Figura 5.27(c) elucida estes aspectos. O diâmetro médio de Sauter (d_{32}) das gotas é mostrado na Tabela 5.1. Novamente, os valores médios dos diâmetros das gotas são muito próximos, ou seja, a vazão de gás teve pouca influência no diâmetro das gotas.

Tabela 5.1 – Resumo do comportamento de gotas de n-pentano (500mL) no modelo físico.

Vazão de gás (L/min)	**Tempo de arraste: t_H (s)**		**Tempo de residência: t_{Rp} (s)**		**Diâmetro de Sauter d_{32} (mm)**
	Média	DP	Média	DP	
70	51,0	8,9	6,6	2,1	4,7
90	35,0	2,0	5,4	1,0	4,8
110	29,4	1,8	5,0	1,8	4,4

* DP – desvio padrão

É óbvio que vazão de gás ótima para o processo de dessulfuração do aço deve fornecer menor valor de diâmetro médio (maior área de superfície) e um tempo de residência mais longo das gotas, parâmetros essenciais para aumentar a taxa de dessulfuração. Assim, a escolha da vazão de gás para a adição do material dessulfurante deve considerar um equilíbrio entre tais parâmetros e tempos de tratamento mais longos. Como destacado por Yang *et al.* (2014), a melhor forma de aumentar a taxa de dessulfuração no RH é aumentar o tempo de residência do dessulfurante no interior do aço líquido. Primeiramente, esses autores observaram no modelo físico qual era a vazão de gás para que maximizava o tempo de residência do óleo na água. Então, eles obtiveram bons resultados de dessulfuração em testes industriais, reduzindo a vazão

de argônio de 60Nm³/h para 50Nm³/h em um reator de RH de 100t de capacidade, retornando ao valor normal de trabalho 5 minutos após a dessulfuração. No entanto, é necessário ter cautela, pois velocidades mais baixas do gás implicam em maiores quedas de temperatura e menores taxas de circulação, o que pode reduzir a eficiência da dessulfuração.

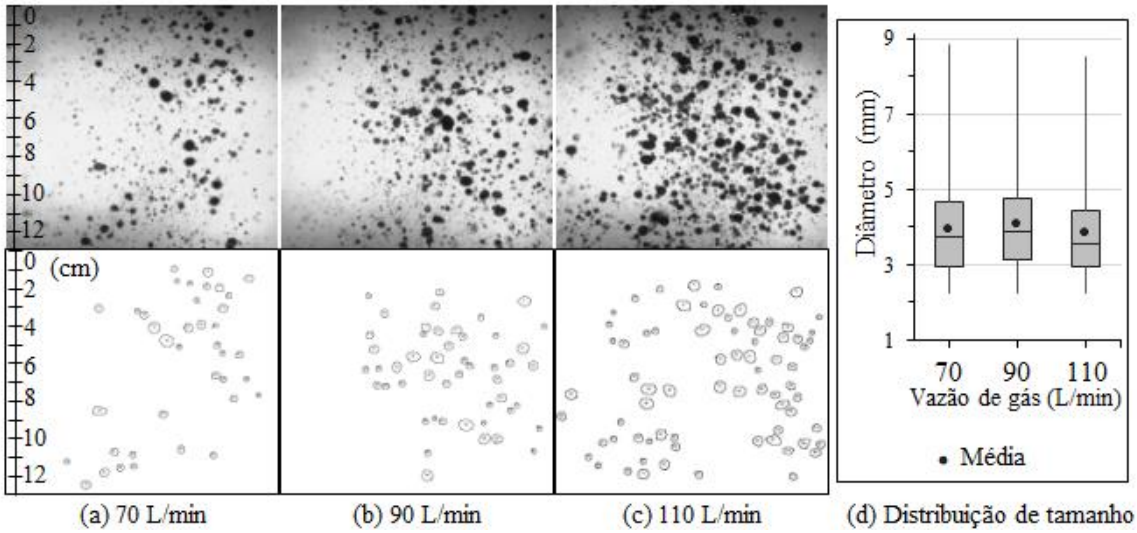

Figura 5.27 – Morfologia das gotas de n-pentano logo abaixo da perna de descida, 5 segundos após a passagem da primeira gota de óleo e os contornos das gotas mensuradas pelo programa ImageJ. Vazão de gás (L/min): (a) 70, (b) 90 e (c) 110; (d) Box plot da distribuição de tamanhos das gotas.

Cálculos preliminares podem ser realizados para avaliar as condições para o transporte de gotas de escória através da perna de descida até a panela. Como estimativa inicial pode-se considerar um tamanho de gota com uma velocidade terminal ($V_{terminal}$) igual à velocidade média do aço dentro da perna, o que representa uma primeira abordagem para estimar o maior diâmetro de gota que pode ser arrastada da câmara de vácuo. Nesta situação crítica, a força de arraste é balanceada pelas forças peso e de empuxo que atuam na gota. Isto leva a:

$$v_{aço} = \frac{4\,Q}{\rho_{aço}\,\pi D^2} \approx V_{terminal} = \sqrt{\frac{4}{3}\,\frac{d_p\,g\,\Delta\rho}{\rho_{aço}\,f}} \qquad (5.2)$$

Aqui Δρ é a diferença de densidade entre aço e escória (kg/m³), d_p é o diâmetro da gota (m), f é o fator de atrito (~ 0,44 para as condições altamente turbulentas dentro da perna). Assim, para

a vazão de gás de 1,833Nm³/min (110 Nm³/min), diâmetro da perna (D) de 0,75m, pressão de gás no ponto de injeção (P_1) de 1bar e pressão na câmara de vácuo (P_2) de 50mbar, a equação de Kuwabara (KUWABARA et al., 1988) fornece uma taxa de circulação de 137,1t/min. Considerando este valor de circulação e $\rho_{aço}$ = 7000kg/m³, $\Delta\rho$ = 4000kg/m³, encontra-se um diâmetro crítico de gota de escória igual a d_p = 0,032m (dado pela Equação 5.2). Gotas com diâmetros menores que esse valor crítico seriam arrastadas através da perna de descida. Cálculos similares utilizando dados do modelo físico e propriedades da água e do N-pentano fornecem um diâmetro crítico de 0,0135m, 0,0168m e 0,0205m para vazões de gás de 70L/min, 90L/min e 110L/min, respectivamente. Como o valor máximo para o diâmetro das gotas de óleo mostrado na Figura 5.27(d) é 9mm, e o diâmetro Sauter varia de 4.4 a 4.8mm (~ 25% do tamanho crítico), é razoável supor que um diâmetro médio das gotas de escória em aço é igual a 25% do valor máximo estimado. Portanto, isso ampara o uso de uma equação tão simples para estimar o valor médio do diâmetro das gotas de escória que são arrastadas da câmara de vácuo para a panela.

5.3.3 Taxa de dessulfuração do aço

A taxa de dissipação de energia cinética turbulenta é um parâmetro importante que pode ser avaliado a partir de simulações fluidodinâmicas (CFD), uma vez que desempenha um papel essencial na cinética da reação. A simulação numérica apresentada neste trabalho pode ser usada para avaliar a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta nas regiões mais prováveis onde haverá gotas de escória. Essas regiões são metade da câmara de vácuo, a perna de descida e metade da panela abaixo da perna de descida (veja Figura 5.26). Então, a perna de subida não foi analisada. Como mostrado na Figura 5.28, há uma considerável variação dos níveis da taxa de dissipação de energia cinética turbulenta de acordo com o ponto de medição: panela, perna de descida e câmara de vácuo. Os valores para a panela são notavelmente menores que os da perna e da câmara de vácuo. Isso é esperado devido às altas velocidades nos dois últimos locais. Destaca-se que os valores mais altos de taxa de dissipação da energia cinética turbulenta coincidem com a trajetória das gotas de óleo no modelo físico.

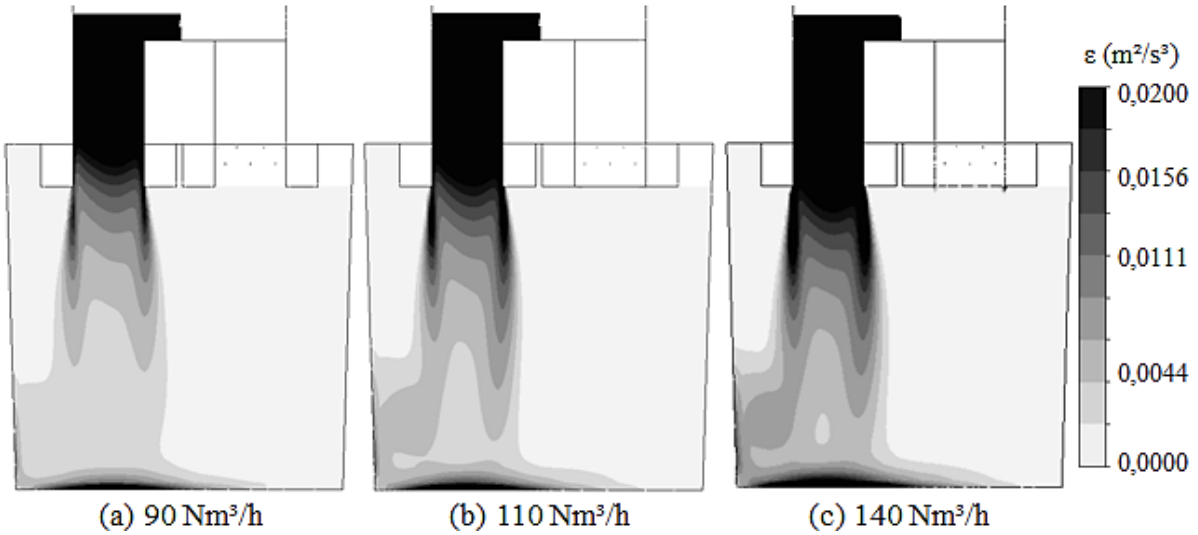

Figura 5.28 – Perfis de taxa de dissipação de energia cinética turbulenta nas regiões da perna de descida e panela para vazão de argônio (Nm³/h): (a) 90; (b) 110; (c) 140.

Relata-se que níveis mais altos da taxa de dissipação de energia cinética turbulenta melhoram a cinética de reação e a coalescência de inclusões. Com base em simulações referentes apenas à panela de um RH (320t, taxa de circulação de 180t/min), Lacosqui (2006) obteve um valor médio para a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta igual a 0,01m²/s³. Segundo este pesquisador, a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta no interior da panela é afetada principalmente pela taxa de circulação e pela geometria da perna.

A Figura 5.29 apresenta valores médios (no volume) da taxa de dissipação de energia cinética turbulenta para os três locais que provavelmente contêm gotas de escória. Uma vez que a perna de descida tem valores mais altos do que as outras regiões (veja a Figura 5.28), o valor médio na região denominada 1/4 RH é muito superior ao valor na panela. O local chamado Volume 1 é uma união das outras duas regiões; assim, tem um valor intermediário para a taxa dissipação de energia cinética turbulenta. Além disso, é importante destacar que o aumento da vazão de gás aumenta significativamente a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta.

A dessulfuração de aço no reator RH pode ser realizada por adições de material dessulfurante na câmara de vácuo. A elevada agitação leva à quebra da fase líquida de escória, em seguida, as gotas de escória são arrastadas para a panela através da perna de descida. Altas taxas de

dessulfuração resultam da dispersão da escória e de condições favoráveis de transferência de massa.

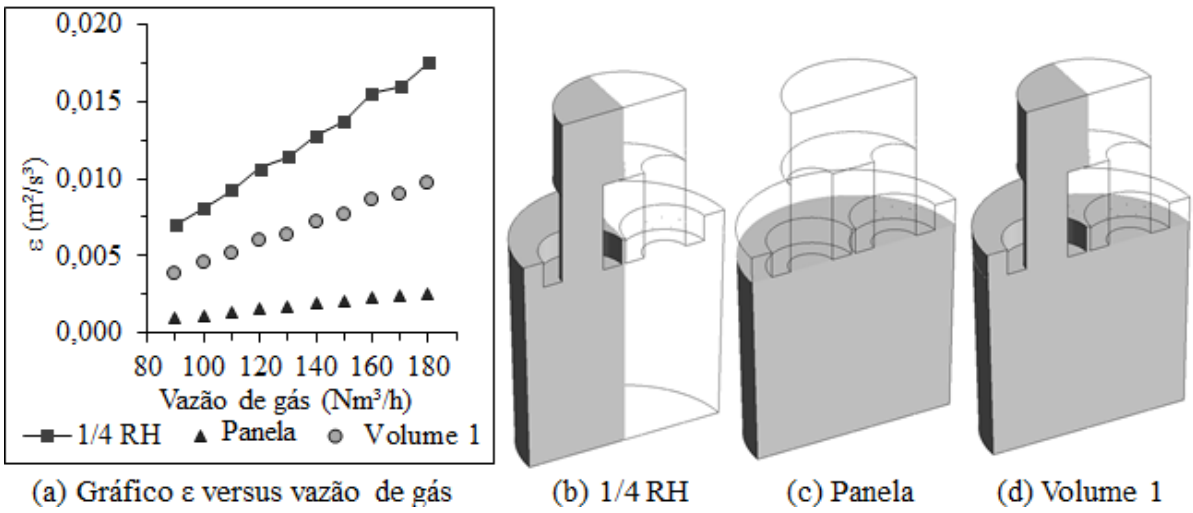

Figura 5.29 – (a) Gráficos de taxa de dissipação de energia cinética turbulenta (ε) versus vazão de gás nas regiões: (b) 1/4 RH; (c) panela; (d) Volume 1 (exceto perna de subida).

Para discutir alguns aspectos da dessulfuração do aço em um reator RH, são considerados os resultados experimentais apresentados por Silva *et al.* (2015). Uma série de corridas de aço foi tratada em um reator RH de 240 toneladas, de uma usina brasileira. Para a dessulfuração, adicionou-se escória sintética (dessulfurante) e cal calcinada à câmara de vácuo. A composição e as características médias desta escória sintética são as seguintes: % CaO = 7 (máx); % Al_2O_3 = 4 (máx); % CaF_2 = 42 a 48; % Cr_2O_3 = 4 a 8; % SiO_2 = 10,0 (máx); % MgO = 18 a 24; % Fe_2O_3 = 1,5 (máx); % outros = 4,0 (máx); densidade aparente da escória: 1,4 ~ 1,6 g/cm^3. A cal (calcinada) apresenta composição média de: % CaO> 93,0; % P <0,20; % MgO <2,0; % S <0,01; %SiO_2 <2,5. O diâmetro médio das partículas de cal foi de 10 ~ 20 mm. Cal e escória sintética foram adicionados seguindo uma proporção de 1:1, resultando em uma adição total de 10,41kg/t de aço. A Tabela 5.2 fornece os dados médios dos testes industriais. O grau médio de dessulfuração foi de 35%. Este valor está na mesma ordem daqueles reportados por He *et al.* (2012), que alcançou 34,1% de dessulfuração usando uma escória pré-fundida.

Os resultados das modelagens física e matemática aqui relatados representam um reator RH de 315 toneladas de outra usina brasileira. No entanto, a mesma proporção (10,41kg/t de aço) e

composição de escória podem ser utilizadas para estimar a taxa de dessulfuração neste reator. Como as corridas são desoxidadas com alumínio, o teor de oxigênio é baixo e espera-se que os coeficientes de partição de enxofre (entre escória e aço) sejam altos. Assim, espera-se um processo de dessulfuração controlado por transferência de massa. O estudo de El-Kaddah e Szekely (1981) fornece uma equação para o coeficiente de transferência de massa (K_p) como uma função da taxa de dissipação de energia cinética turbulenta, propriedades físicas do aço e difusividade do enxofre:

$$K_p(m/s) = \frac{D_S}{d_p}\left[2 + 1{,}3\left(\frac{\varepsilon^{\frac{1}{3}}\ d_p^{\frac{4}{3}}\ \rho_{\text{aço}}}{\eta_{\text{aço}}}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{\eta_{\text{aço}}}{D_S\ \rho_{\text{aço}}}\right)^{\frac{1}{3}}\right] \tag{5.3}$$

Aqui D_S é a difusividade do enxofre no aço, tomada como $5x10^{-8}m^2/s$, d_p é o diâmetro da gota de escória no interior do aço (m), $\eta_{aço}$ é a viscosidade dinâmica do aço (Pa.s) e ε é a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta (m^2/s^3).

Tabela 5.2 – Resultados de dessulfuração do aço em testes industriais em reator RH – pressão de vácuo 50mbar e vazão de gás $110Nm^3/h$ (SILVA *et al.*, 2015).

Corrida	Temperatura Panela (°C)	Al (%)	BOF escória (kg/t de aço)	*Adição (kg/t de aço)	$[\%S]_o$ ppm	De_S (%)
1	1608	0,037	10,42	10,83	190,8	26,62
2	1596	0,052	7,92	10,41	135,7	41,04
3	1591	0,054	5,83	10,41	89,4	44,07
4	1647	0,043	4,58	10,33	82,1	26,91
5	1586	0,04	9,17	10,33	115	30,43
6	1621	0,04	8,33	10,54	108	25,92
7	1584	0,04	7,92	10,54	115	39,13

* Adição = cal + escória sintética; De_S – grau de dessulfuração.

Assim, considerando gotas de escória com diâmetro d_p = 0,008m (1/4 do tamanho crítico) e taxa de dissipação de energia cinética turbulenta (ε) igual a $0{,}0092m^2/s^3$ (para 110 Nm^3/h),

valores para o coeficiente de transferência de massa na camada limite ao redor da gota e para a área total da interface de escória de metal (dada pela Equação 4.30) podem ser encontrados como:

$$K_p(m/s) = 4{,}27\ x\ 10^{-4} \qquad \text{and} \qquad A = \frac{6\ M_{escória}}{\rho_{escória}\ d_p} = 820{,}3\ m^2$$

Onde $\rho_{escória}$ é a densidade da escória (3000kg/m³), e $M_{escória}$ é a massa total de escória (10.41kg/t de aço x 315t de aço).

Como observado nos resultados do modelo físico, durante o tempo de circulação, uma porção das gotas encontra seu caminho para a camada de escória em um curto período de tempo. O desenvolvimento de Guthrie (1989) baseado nos critérios de similaridade entre o modelo físico e protótipo da trajetória de uma partícula dispersa em um líquido leva à Equação (5.4), que representa um número de Froude modificado (Fr_{modp} = força inercial / força de empuxo atuando sobre a gota). Assim, o tempo de residência das gotas de escória dentro do metal líquido pode ser estimado pela Equação (5.5).

$$\left(Fr_{modp}\right)_m = \left(Fr_{modp}\right)_p \therefore \left(\frac{\rho_{aço} U_{r,p}^2}{(\rho_{aço} - \rho_{escória}) g d_p}\right)_p = \left(\frac{\rho_w U_{r,m}^2}{(\rho_w - \rho_{óleo}) g d_m}\right)_m \qquad (5.4)$$

$$t = \frac{L}{U_r} \therefore \frac{t_p}{t_m} = \frac{L_p}{L_m}\left(\frac{\rho_{aço}(\rho_w - \rho_{óleo}) d_m}{\rho_w(\rho_{aço} - \rho_{escória}) d_p}\right)^{1/2} \therefore \frac{t_p}{t_m} = \frac{1}{\lambda}\left(\frac{\rho_{aço}(\rho_w - \rho_{óleo}) d_m}{\rho_w(\rho_{aço} - \rho_{escória}) d_p}\right)^{1/2} \qquad (5.5)$$

onde ρ_w e $\rho_{óleo}$ são a densidade da água e do óleo N-pentano, respectivamente (kg⁄m³); os índices m e p referem-se, respectivamente, ao protótipo e modelo físico; d_p e d_m são os diâmetros da gota de escória e de óleo, respectivamente (m); L_p e L_m são os comprimentos característicos (m); t_p e t_m são tempo (s);

Este critério resulta numa razão t_p/t_m = 4,6. A Tabela 5.3 apresenta a estimativa de tempo para gotas de escória no interior aço. Por outro lado, uma primeira abordagem para avaliar a remoção de enxofre pode ser dada pela Equação (5.6).

$$\Delta S(kg) = A \,.\, K_p . \frac{\%S_0}{100} \cdot \rho_{steel} \cdot \Delta t \qquad (5.6)$$

Onde $\%S_0$ é a concentração inicial de enxofre e Δt (s) é o tempo de contato. Então, para a vazão de gás de 110 Nm³/h, a quantidade de enxofre transferida do aço para as gotas de escória seria 6,1kg, após um tempo de contato de 24,8s se o teor de enxofre do aço for da ordem de 0,01% (100ppm). Assim, um grau de dessulfuração de 19,2% (± 3%) poderia ser alcançado. Esta é uma aproximação grosseira, uma vez que o valor de $\%S_0$ varia enquanto um certo número de gotas atravessa pelo aço líquido.

O modelo de dessulfuração de Deo e Boom (1993) pode ser usado para explorar a influência da vazão de argônio (e, portanto, a agitação - a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta - e o tamanho das gotas de escória). A taxa global de dessulfuração pode ser escrita como a soma das contribuições dos reatores permanente e transitório, ou seja, a contribuição da camada de escória na câmara de vácuo e a contribuição das gotas dispersas no aço líquido. É facilmente demonstrado que a maior contribuição se deve às gotas de escória dispersas no interior do metal (devido à sua maior área de contato). Então, de acordo com este modelo, o grau de dessulfuração é dado por:

$$\frac{\%S_0 - \%S}{\%S_0} = 1 - EXP\left\{-\frac{L_s W_{escória}}{\rho_{escória}}\left[\left[1 - EXP\left(-\frac{6K_p t_{Rp}}{d_p L_S}\right)\right].\frac{\rho_{aço}\ t_H}{M_{aço}}\right\}\right. \qquad (5.7)$$

Onde $W_{escória}$ é a quantidade de gotas de escória arrastadas para a panela (kg/s); $M_{aço}$ é a massa de aço (kg); L_S é a partição do enxofre entre a escória e o metal.

Tabela 5.3 – Resumo de parâmetros relacionados a dispersão das gotas de escória em um reator RH de 315t baseado em estimativas do modelamento físico.

Vazão de gás (Nm³/h)	**Tempo de arraste: t_H (s)**		**Tempo de residência: t_{Rp} (s)**		**Diâmetro da gota de escória d_{32} (mm)**
	Média	DP	Média	DP	
90	234,6	40,9	30,4	9,7	7,0
110	161,0	9,2	24,8	4,6	8,0
140	135,2	8,3	23,0	8,3	9,4

* DP – desvio padrão

O coeficiente de partição de enxofre pode ser avaliado a partir da composição da escória e sua basicidade ótica, temperatura e teor de oxigênio do aço. Dados do Slag Atlas (1995) para aços com baixo teor de enxofre e oxigênio sugerem a relação:

$$\log L_S = \frac{21920 - 54640\,\lambda_0}{T} + 43{,}6\,\lambda_0 - 23{,}9 - \log \%O \qquad (5.8)$$

Onde λ_0 é a basicidade ótica da escória; T é a temperatura (K); %O é o teor de oxigênio do aço. O teor de oxigênio pode ser estimado assumindo o equilíbrio da reação de desoxidação com a alumínio, i.e:

$$\log \frac{h_{Al}^2 \,.\, h_O^3}{a_{Al2O3}} = -\frac{64000}{T} + 20{,}57 \qquad (5.9)$$

onde h_{Al} e h_O são as atividades de alumínio e oxigênio no aço; a_{Al2O3} é a atividade de alumina, considerada unitária.

Na Figura 5.30 é apresentado o grau de dessulfuração em função da vazão de gás. Uma taxa de dessulfuração tão alto quanto 26,0% (± 7%) poderia ser alcançada para vazão de argônio de 90Nm³/h em aproximadamente 4min. Aumentar a vazão de gás leva a um menor grau de dessulfuração. Como pode ser visto (Tabela 5.3), o efeito principal é do menor tempo de retenção de escória na câmara de vácuo e depois de um menor tempo de contato entre gotas de escória e metal. Durante a adição do material pela calha de adição de ligas, uma quantidade considerável de escória sintética e cal é adicionada à câmara de vácuo, e seria útil se um produto líquido dessa mistura fosse lentamente liberado para a panela. A distribuição de tamanho das gotas, relacionada à área total de reação, também é importante. Este gráfico deve ser considerado como uma estimativa aproximada, uma vez que não considera a distribuição de tamanho de gotas e a variação do tempo de residência (contato) das gotas de escória. Apesar disso, tais cálculos descrevem o comportamento geral do processo de dessulfuração no reator RH e permitem inferir como é afetado por alguns parâmetros como vazão de gás e dispersão da escória.

Zhan *et al.* (2006) reportam resultados industriais com um grau médio de dessulfuração de 28,1%, para um consumo de 5kg de dessulfurante pré-fundido por tonelada de aço. O material

pré-fundido aumenta a possibilidade de dessulfuração, porém a custos mais altos.

Levando-se em conta os resultados apresentados anteriormente, a escolha da vazão de gás mantida durante a adição do material dessulfurante na câmara de vácuo do RH deve considerar principalmente sua influência no tempo de arraste do material para a panela e o tempo de residência das gotas de escória dentro do aço líquido.

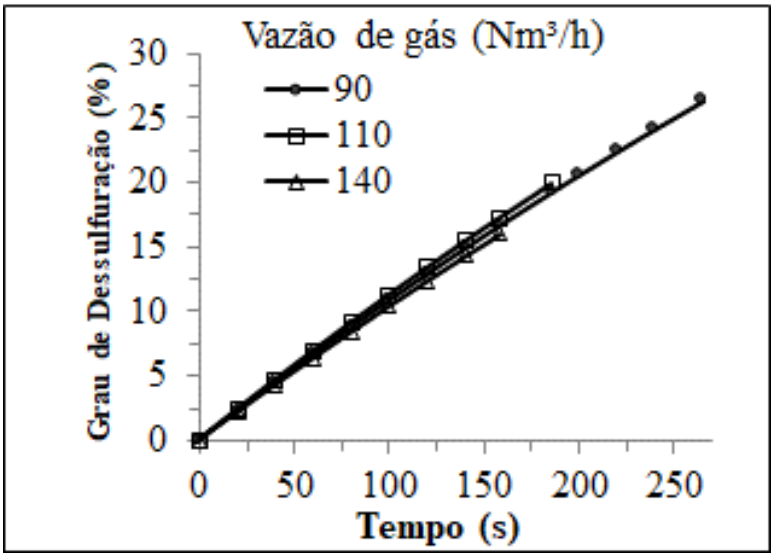

Figura 5.30 – Grau de dessulfuração do aço em função do tempo para diferentes vazões de argônio (em Nm³/h).

5.4 Avaliação do Comportamento Metal/Escória

Durante o 48º Seminário de Aciaria – Internacional, parte integrante da ABM Week 2017, foi apresentado e publicado nos anais do congresso um artigo relacionado a análise via modelamento físico das condições para o arraste de escória adicionada na câmara de vácuo do reator RH, cujo título é “Comportamento Metal-Escória em Modelo Físico de um Reator RH: Aplicação à Dessulfuração”. Foram utilizados dois tipos de fluidos (água e solução de NaCl) para simular o aço, partículas de polipropileno e óleo de silicone 500cSt para simular a escória no estado sólido e líquido, respectivamente. Foi avaliada a influência da diferença de densidade sobre as condições de arraste: tempo de residência e diâmetro das gotas arrastadas. Outros testes foram realizados posteriormente, variando o tipo de óleo, para verificar a influência da

viscosidade da escória sobre o diâmetro médio entranhado. Estes resultados são apresentados e comparados neste tópico.

Como descrito no tópico 5.1, o sistema de medição indireta da taxa de circulação a partir de uma ponte de *strain gage* foi validado e os resultados obtidos para água e solução aquosa de $ZnCl_2$ e NaCl foram coerentes, permitindo a utilização destas soluções salinas para avaliar o comportamento da escória (simulada por diferentes óleos) adicionada na câmara de vácuo do RH. Porém, devido a maior viscosidade da solução de $ZnCl_2$, que durante a recirculação no modelo físico do reator RH leva ao aprisionamento de pequenas bolhas no fluxo de líquido e resultando em considerável turbidez do fluido na região da panela. Desta forma, esta solução não foi utilizada nos testes de medição de diâmetro de gotas de óleo. A seguir são apresentados os resultados para os sistemas água/óleo e solução aquosa de NaCl/óleo.

5.4.1 Tempo de residência do material injetado no modelo físico

A sequência de imagens da Figura 5.31 resume o comportamento das partículas injetadas no interior da câmara de vácuo a 20cm da superfície. Nota-se que ao atingir a superfície do fluido com velocidade de aproximadamente 1,9m/s, as partículas imergem no fluido, e na água grande parte é arrastada para a panela, enquanto na solução de NaCl, uma considerável fração das partículas acumula-se na superfície do fluido sobre a perna de descida. Devido à turbulência no interior da câmara de vácuo, a formação de pequenos vórtices sobre a perna de descida é responsável pelo arraste das partículas na superfície do líquido para o interior da panela. Assim, o tempo de residência das partículas na câmara de vácuo se reduz com o aumento da vazão de gás. Portanto, após 10s a quantidade de partículas dispersas na água é muito inferior à quantidade dispersa na solução salina, o que destaca a influência da diferença de densidade sobre o arraste das partículas. As partículas levam entre 8s e 25s para serem completamente arrastadas da câmara de vácuo.

Nas Figuras 5.32 e 5.33, observa-se o comportamento das partículas no interior da panela (vaso cilíndrico). Nota-se que as partículas são arrastadas até próximo ao fundo da panela, e pela ação do empuxo rapidamente flotam para a superfície livre da panela. Para a solução salina, o movimento das partículas é regido principalmente pelo empuxo, e as partículas ficam restritas

à região abaixo e ao redor da perna de descida. Enquanto para a água, devido à redução na diferença de densidade, uma quantidade considerável de partículas acompanha o fluxo de líquido e alcança a perna de subida, resultando em uma recirculação de partículas entre a panela e a câmara de vácuo. Frente à elevada razão entre densidade do aço e da escória dessulfurante, é improvável que este fenômeno de recirculação ocorra no sistema real. O tempo total de permanência das partículas no interior do fluido está entre 22 e 30s.

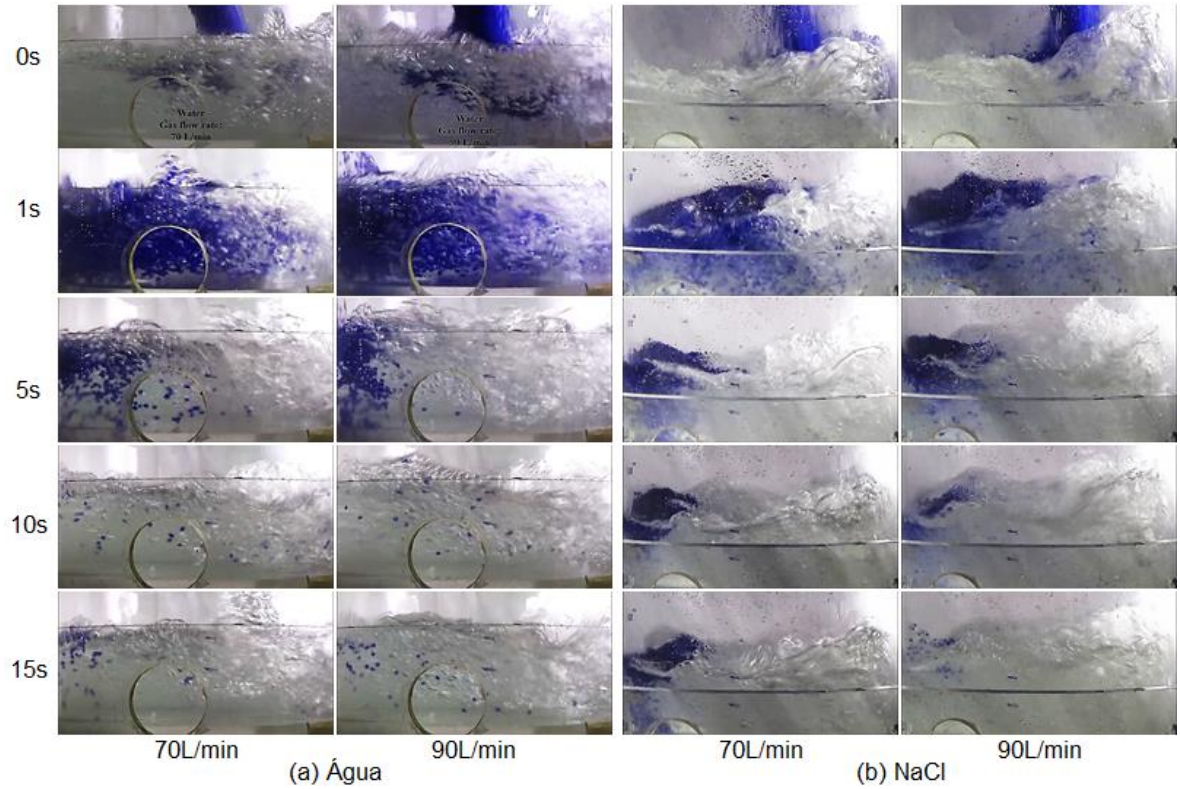

Figura 5.31 - Dispersão das partículas de polipropileno no interior da câmara de vácuo do modelo do reator RH em função do tempo para: (a) água; (b) solução aquosa de NaCl.

O tempo médio para arraste das partículas da câmara de vácuo e o tempo médio de permanência das partículas na panela são apresentados na Figura 5.34. Utilizando água, a diferença entre o tempo de arraste da câmara de vácuo e de permanência da panela é devido à recirculação de partículas. Para a solução salina, nota-se uma considerável redução no tempo de residência das partículas para as duas vazões (de gás) mais altas, e o tempo necessário para que todas as partículas alcancem a superfície livre da panela varia entre 19s e 27s.

De acordo com os resultados desta análise se nota que, em relação à dispersão de partículas, na água, após 10s todas as partículas injetadas foram arrastadas da câmara de vácuo, e que existe recirculação de uma quantidade considerável de partículas. Por outro lado, no caso da solução de NaCl grande parte das partículas acumula-se na superfície do fluido sobre a perna de descida, requerendo entre 17 e 25s para serem completamente arrastadas da câmara de vácuo. Observa-se que a redução da vazão de gás pode prolongar o tempo de residência das partículas de dessulfurante.

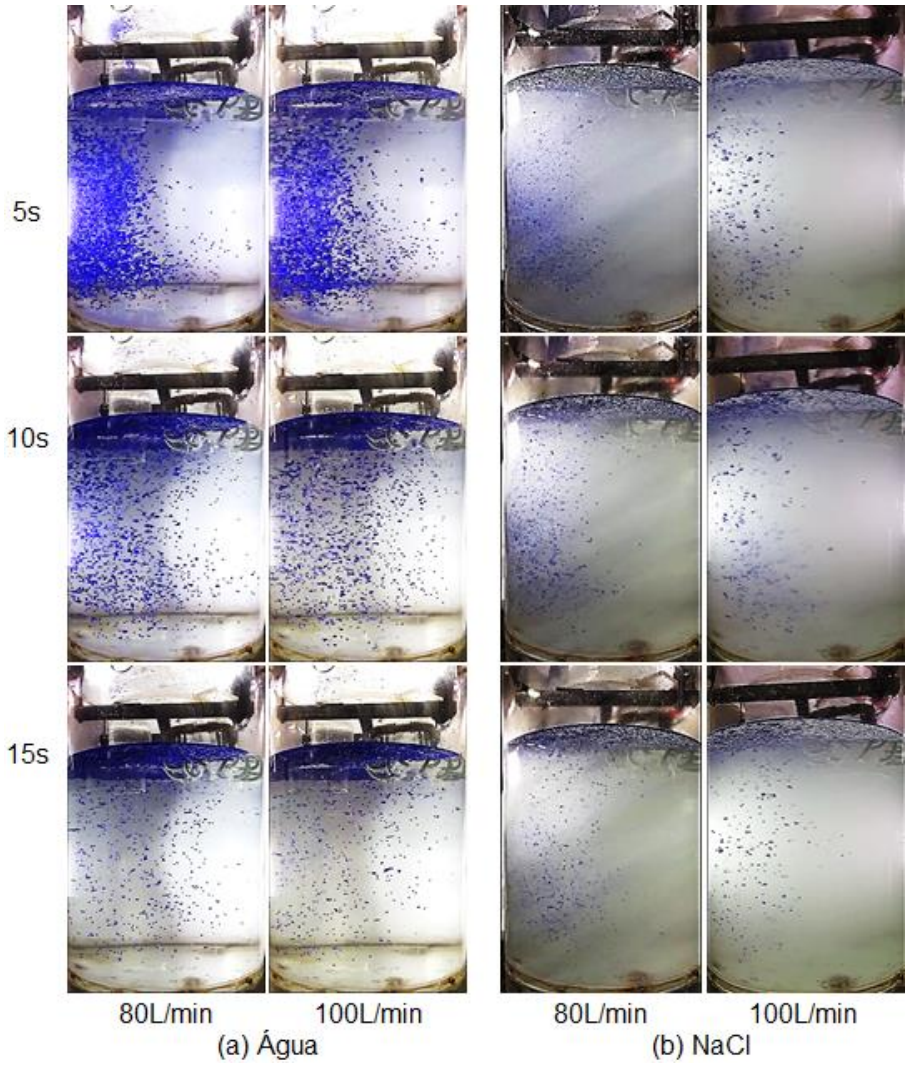

Figura 5.32 - Dispersão das partículas de polipropileno no interior da panela do modelo físico do reator RH em função do tempo para: (a) água; (b) solução salina NaCl.

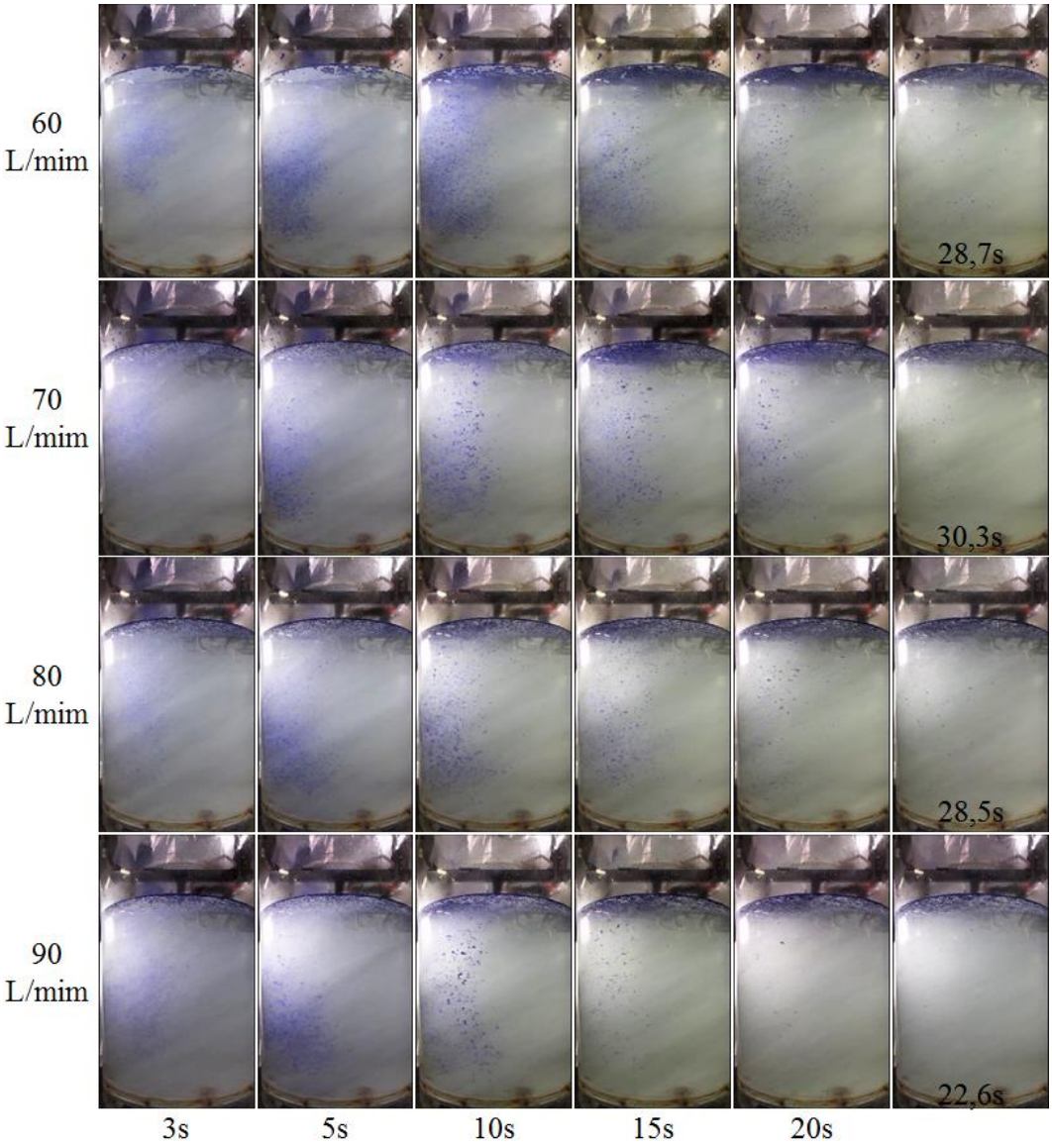

Figura 5.33 - Dispersão das partículas de polipropileno no interior da panela do modelo físico do reator RH em diferentes vazões utilizando solução aquosa de NaCl como fluido similar a aço.

Os resultados de tempo para arraste de material apresentados até aqui foram obtidos em testes utilizando pequenas quantidades de materiais (250g de partículas de polipropileno ou 500mL n-pentano). Estes testes mostraram a grande influência da diferença de densidade entre o material injetado e o fluido de circulação no tempo necessário para arraste de todo o material da câmara de vácuo. Então foram realizados testes adicionando 2L de óleo na câmara de vácuo (volume correspondente ao consumo médio de 10kg/t de aço de material dessulfurante). O tempo de adição de 2L de n-pentano na câmara de vácuo foi inferior a 10s. Os resultados são

apresentados na Figura 5.35 e os valores de tempo observados são resumidos na Tabela 5.4. Em nenhuma das vazões avaliadas foi observada a recirculação de gotas de n-pentano entre a panela e a câmara de vácuo.

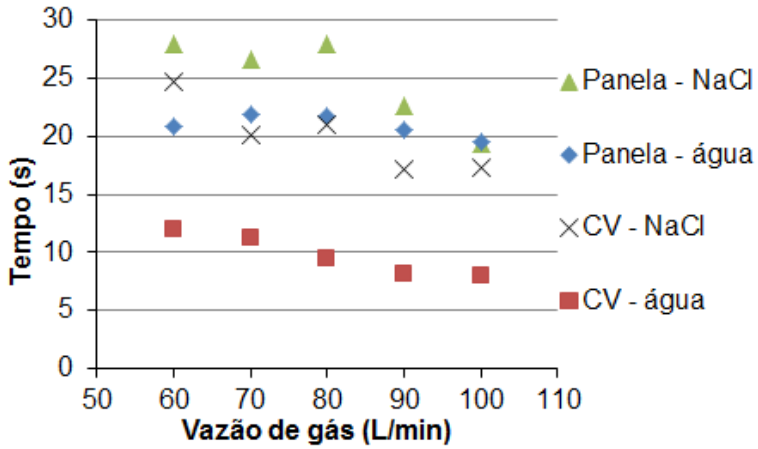

Figura 5.34 - Tempo total para arraste de 250g de partículas de polipropileno da câmara de vácuo para a panela – CV: câmara de vácuo.

Como discutido anteriormente, nota-se que o aumento na vazão de gás reduz consideravelmente o tempo necessário para arrastar todo o material da câmara de vácuo. Obviamente o tempo de arraste de 2L é superior ao tempo de arraste de 500mL (Tabela 5.1), mas em proporção muito inferior à razão entre as quantidades de óleo. Isto sugere que, para elevar o tempo de contato do material dessulfurante e o aço, o material não seja adicionado em uma única vez. Quanto ao tempo de residência das gotas, o valor máximo apresentado na Tabela 5.4 refere-se ao tempo observado para trajetória de gotas de óleo que alcançam o fundo da panela, enquanto o tempo mínimo corresponde às gotas que flotam para a superfície livre da panela logo após a saída da perna de descida. Nota-se ligeira redução no tempo de residência das gotas com o aumento da vazão. O valor médio de tempo equivale à média das 10 primeiras e das 10 últimas gotas que saíram pela perna de descida. A elevada quantidade de gotas impossibilita a avaliação do tempo de residência ao longo do teste.

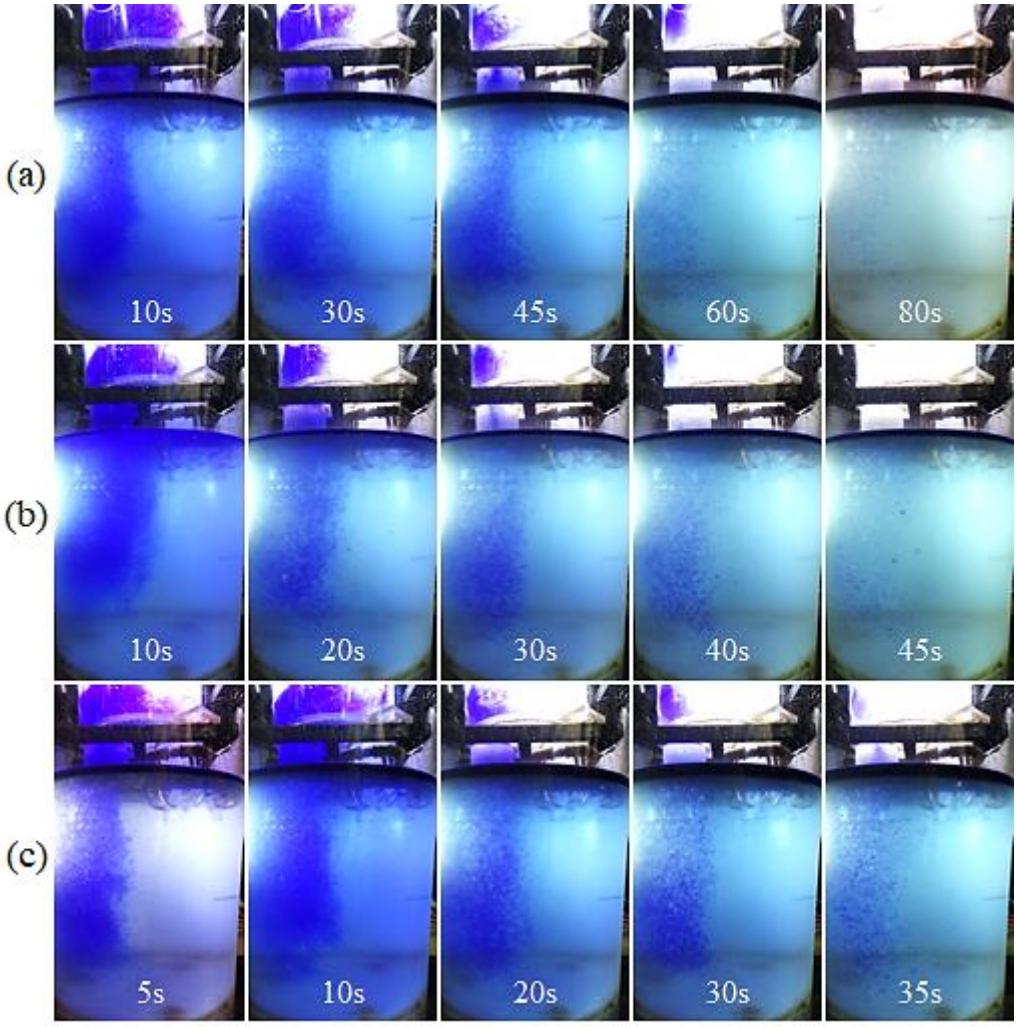

Figura 5.35 – Dispersão de gotas de 2L de N-pentano adicionados na câmara de vácuo do modelo físico do reator RH em função do tempo para vazão de gás igual a (L/min): (a) 70, (b) 90 e (c) 110.

Yang *et al.* (2014) sugerem que a melhor maneira para se elevar a taxa de dessulfuração no RH é aumentando o tempo de residência do dessulfurante no interior do aço líquido, e que tal pode ser obtido ao reduzir a vazão de gás de 60Nm³/h para 50Nm³/h num reator RH de 100t de capacidade, retornando ao valor normal de trabalho 5 minutos após a injeção do agente dessulfurante. Porém, estes pesquisadores ressaltam que utilizar vazões de gás mais baixas (inferiores a 50Nm³/h) podem levar a maior queda de temperatura e redução na taxa de circulação, o que pode reduzir a eficiência de dessulfuração. Neste sentido, os resultados anteriores sugerem que o maior tempo de residência das partículas aliado a maior taxa de

circulação de líquido é obtido para a vazão de gás igual a 80L/min, o que corresponde à vazão de 100Nm³/h no reator industrial (capacidade 315t de aço).

Tabela 5.4 – Resumo do comportamento de gotas de n-pentano (2L) no modelo físico de reator RH.

Vazão de gás (L/min)	**Tempo de arraste para 2L de N-pentano: t_H (s)**		**Tempo de residência (N-pentano): t_{Rp} (s)**			
	Médio	DP	Mínimo	Máximo	Médio (10 gotas)	DP
70	84,1	6,2	2,5	9,3	6,0	2,1
90	45,1	3,4	2,4	9,2	5,6	2,3
110	38,6	1,8	2,2	7,3	4,7	1,7

* DP – desvio padrão

5.4.2 Diâmetro das gotas de óleo arrastadas pelo fluxo

É importante ressaltar que o formato do vaso inferior teve influência desprezível sobre os valores de taxa de circulação, o que deu suporte à utilização do vaso retangular para avaliar o tamanho das gotas formadas pela injeção de óleo na câmara de vácuo. As imagens capturadas logo abaixo da saída da perna de descida foram utilizadas para avaliar o tamanho das gotas de óleo arrastadas para o vaso inferior. Mediram-se gotas em doze imagens pré-selecionadas, nas quais a variação de tempo foi de 0,5s (até 2s) e de 1s (de 2s a 8s). A escolha deste tempo máximo foi em função da ocorrência de recirculação de gotas de óleo após 8s (Figura 5.36), o que afeta a morfologia das gotas arrastadas da câmara de vácuo. Destaca-se novamente que para o n-pentano não foi observada a recirculação, sendo que após 25s ainda havia uma quantidade considerável de óleo na câmara de vácuo.

A quantidade média de gotas analisadas por teste é apresentada na Tabela 5.5. Os testes foram realizados sempre em duplicata, em função das combinações de materiais apresentada na Tabela 4.8. A Figura 5.37 apresenta a morfologia geral das gotas em função do tempo para a vazão de 90L/min. Utilizando água, observam-se gotas maiores e mais deformadas com o aumento de vazão de gás. Para a solução salina, nota-se uma maior quantidade de gotas, que são menores e

mais uniformes. A mudança do óleo 500cSt para o óleo 10W30 (menor densidade e viscosidade) resultou em gotas menores e mais uniformes, aumentando consideravelmente a quantidade de gotas nas imagens.

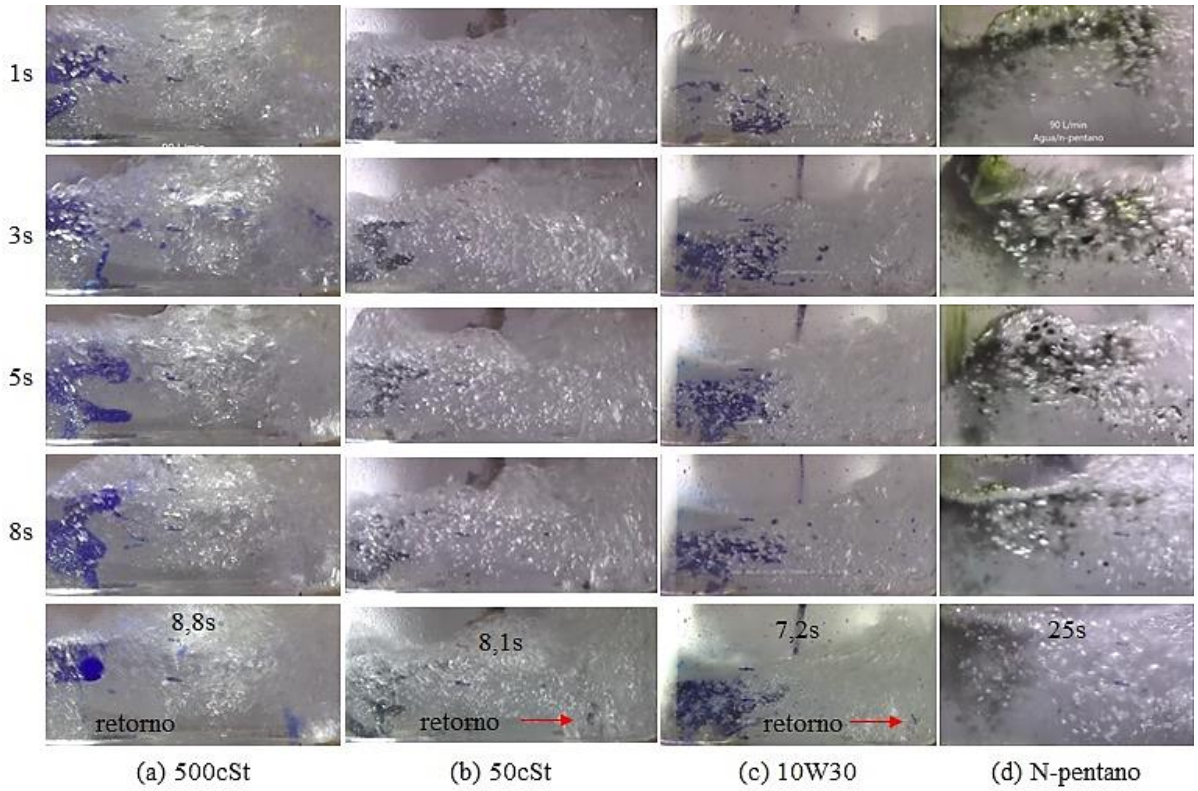

Figura 5.36 - Comportamento dos diferentes tipos de óleo (500mL) na câmara de vácuo durante as filmagens para medição de diâmetro de gotas: (a) óleo 500cst; (b) óleo 50cst; (c) óleo 10w30; (d) n-pentano. Vazão de gás 90L/min.

Tabela 5.5 – Quantidade média de gotas mensuradas em cada teste com as diferentes combinações fluido de circulação/óleo.

Agua - 50cSt	Agua - 500cSt	Agua - 10W30	Agua - N-pentano	NaCl - 50cSt	NaCl - 500cSt	NaCl - 10W30
435	**225**	**355**	**636**	**322**	**284**	**318**

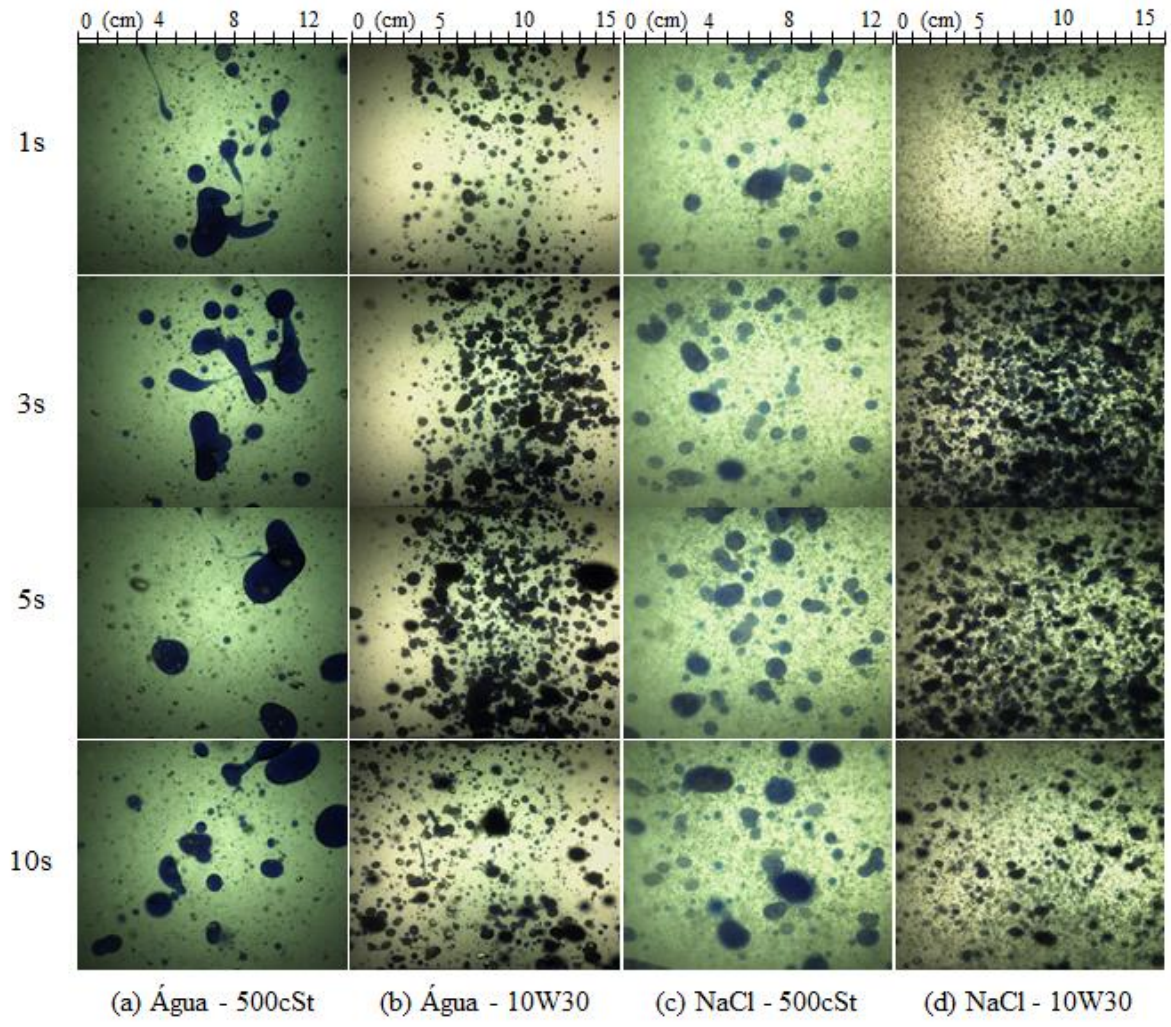

Figura 5.37 - Morfologia das gotas de óleo logo abaixo da perna de descida em função do tempo: (a) água - 500cSt; (b) água - 10W30; (c) NaCl - 500cSt; (c) NaCl – 10W30. Vazão de gás 90L/min.

A Figura 5.38 apresenta algumas imagens para diferentes vazões para o óleo de 500cSt. Utilizando água, observam-se gotas maiores e mais deformadas com o aumento de vazão de gás. Para a solução salina, nota-se uma maior quantidade de gotas, que são menores e mais uniformes. Quando se utiliza o n-pentano (densidade 626kg/m³), as gotas formadas em água são de tamanho visivelmente inferiores aos óleos anteriores, conforme Figura 5.39. Além disso, o aumento da vazão de gás implica em aumento na quantidade de gotas arrastadas no tempo observado.

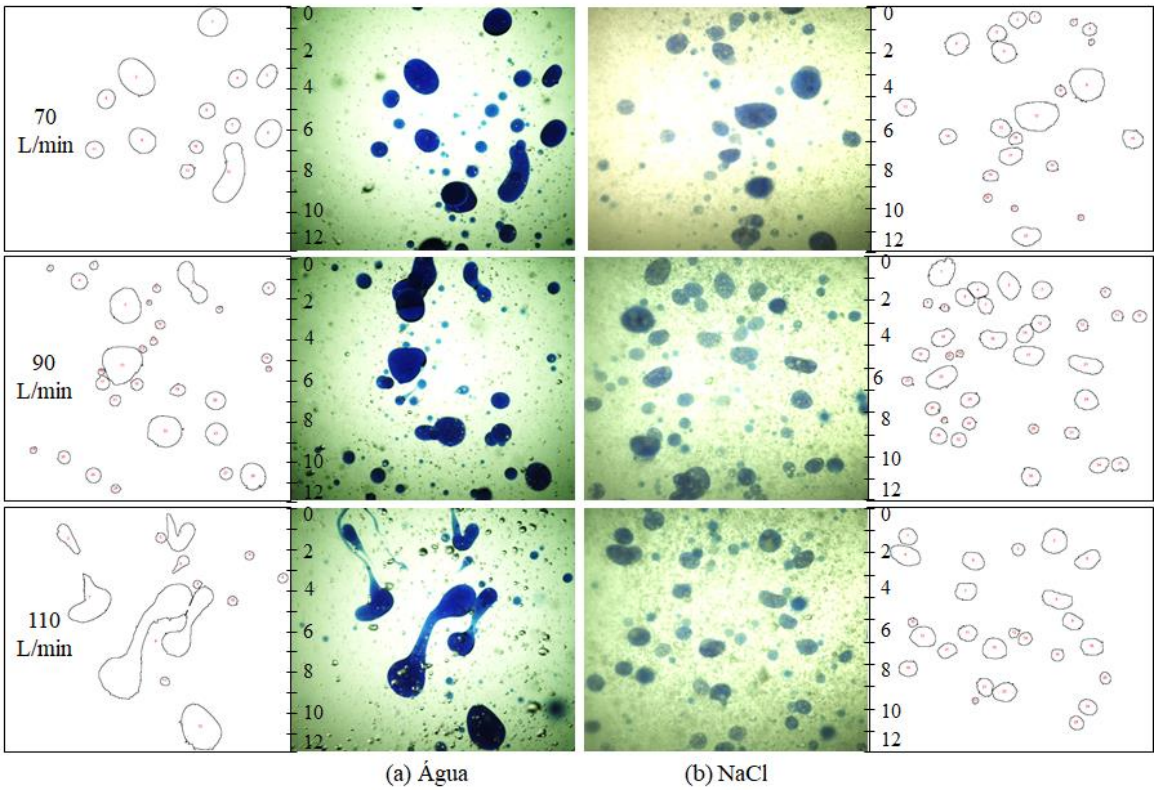

Figura 5.38 - Morfologia (e contornos das gotas avaliadas pelo programa ImageJ) das gotas de óleo (500cSt) logo abaixo da perna de descida, 2 segundos após a passagem da primeira gota de óleo, utilizando como fluido de circulação: (a) água; (b) NaCl.

Os gráficos das Figuras 5.40 e 5.41 apresentam os diagramas de caixa para a dispersão do tamanho das gotas, e ajudam a elucidar a influência das propriedades como densidade e viscosidade sobre o arraste do material injetado. Na Figura 5.40 destaca-se:

- Óleo 500cSt: para a água observou-se grande dispersão no tamanho das gotas, entre 2,5mm e 35mm, enquanto para a solução aquosa de NaCl a dispersão no tamanho das gotas foi consideravelmente menor, entre 2,5mm e 15mm. Porém o tamanho médio foi semelhante ao obtido quando se utiliza água, a saber: 9mm. Não foi possível notar influência da vazão de gás sobre o tamanho das gotas;
- Óleo 50cSt: em comparação ao óleo 500cSt, a redução da viscosidade implicou em menor dispersão no tamanho das gotas, entre 2,5mm e 23mm (utilizando água), e entre 2,5mm e 13mm (utilizando NaCl). O tamanho médio foi 6,5mm (água) e 5,3mm (NaCl). Também não foi possível notar influência da vazão de gás sobre o tamanho médio das gotas.

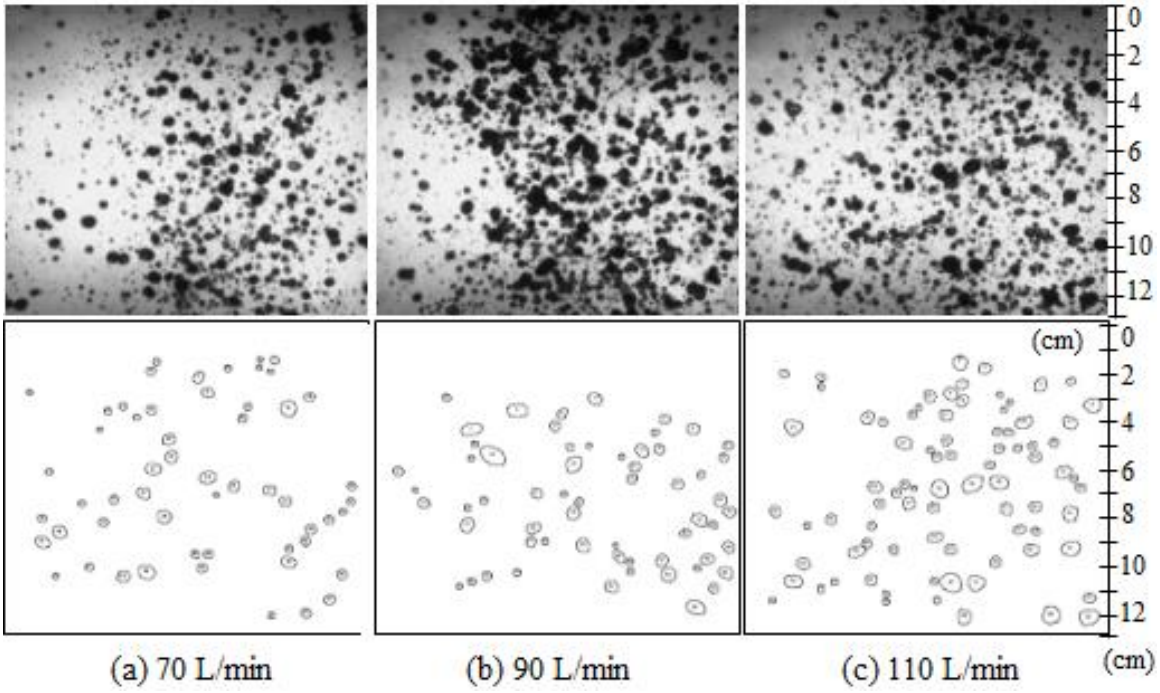

Figura 5.39 - Morfologia das gotas de óleo logo abaixo da perna de descida, 5 segundos após a passagem da primeira gota de óleo (n-pentano) e os contornos das gotas mensuradas pelo programa ImageJ, utilizando água como fluido de circulação, Vazão de gás (L/min): (a) 70, (b) 90 e (c) 110.

Na Figura 5.41 destaca-se:

- Óleo 10W30: a redução de densidade em comparação aos óleos de silicone (50cSt e 500cSt) implicou em menores tamanhos de gotas, variando de 2,5mm a 13mm (utilizando água), e de 2,5mm a 11mm (utilizando NaCl). O tamanho médio foi 5mm (água) e 4,4mm (NaCl). Nota-se uma certa tendência de o tamanho das gotas diminuir com o aumento da vazão de gás;
- Água/óleo n-pentano: Observou-se dispersão no tamanho das gotas, entre 2mm e 9mm. O tamanho médio foi 4mm. A maior diferença de densidade e menor viscosidade do óleo resultaram na formação de gotas de óleo com os menores diâmetros observados.

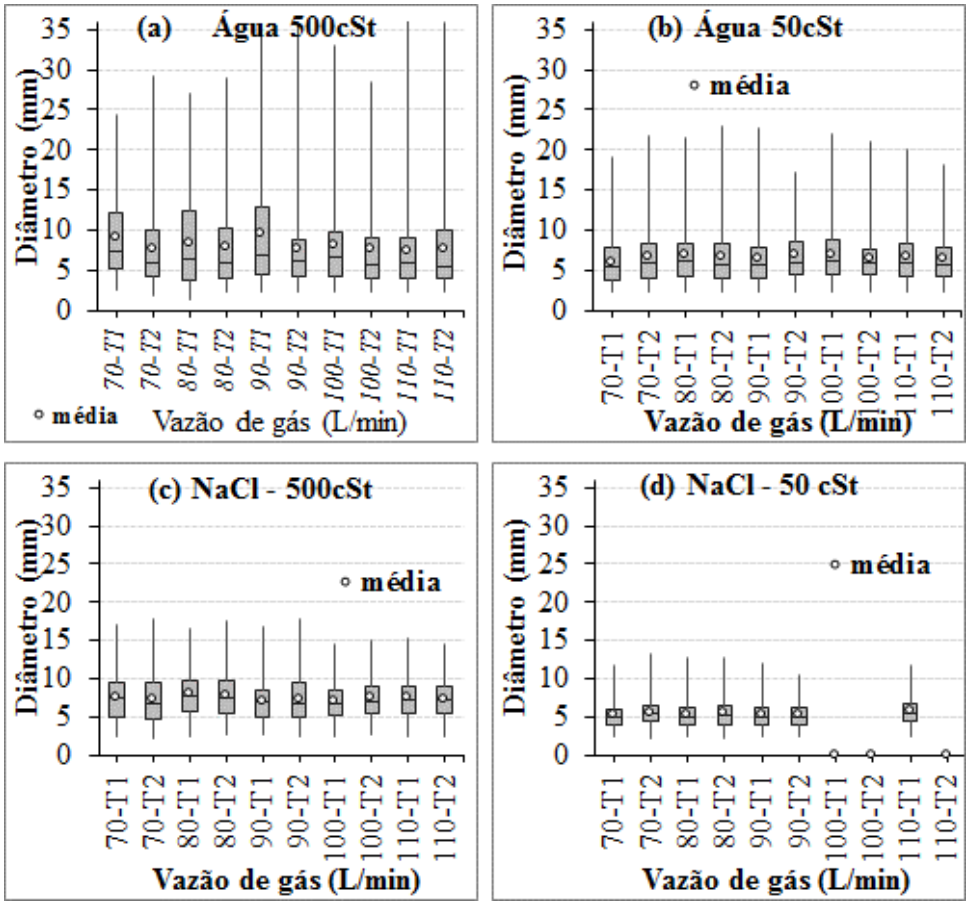

Figura 5.40 - Diagrama de caixa e valor médio do diâmetro das gotas de óleo arrastadas da câmara de vácuo para: (a) água/óleo 500cSt; (b) água/óleo 50cSt; (c) solução aquosa NaCl/ óleo 500cSt; (d) solução aquosa NaCl/ óleo 50cSt. *T1 – teste 1 e T2 – teste 2.

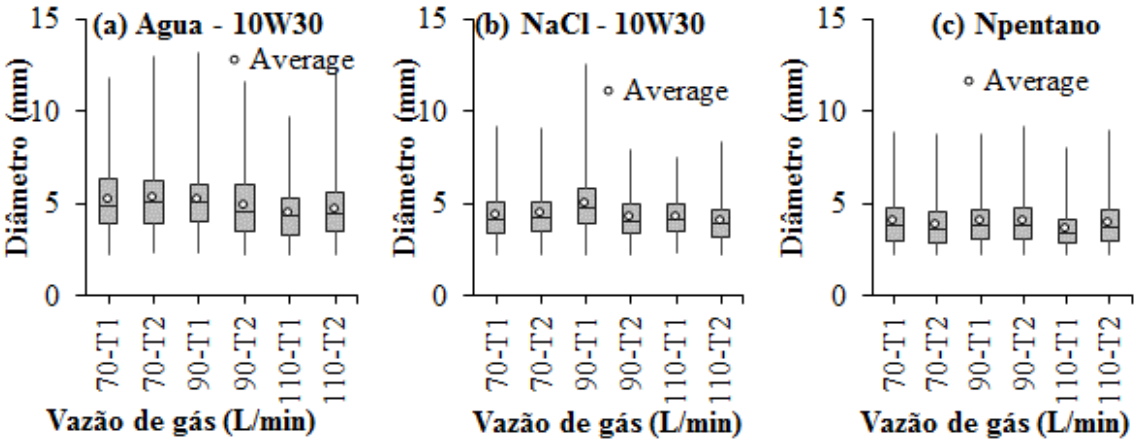

Figura 5.41 - Diagrama de caixa e valor médio do diâmetro das gotas de óleo arrastadas: (a) água/óleo 10W30 ; (b) solução aquosa NaCl/óleo 10W30; (c) água/n-pentano. *T1 – teste 1 e T2 – teste 2.

Estes resultados indicam que o aumento da diferença de densidade entre o fluido de circulação e o óleo resulta na diminuição do tamanho médio das gotas de óleo arrastadas. A redução da viscosidade também resultou em menores tamanhos das gotas arrastadas. Nota-se ainda que os diâmetros máximos das gotas arrastadas na água são muito superiores àqueles na solução salina. Apesar da maior dispersão no tamanho das gotas de óleo na água quando comparada à solução salina, os valores médios de diâmetro são próximos. Os valores de diâmetro médio de Sauter (d_{32}) das gotas está apresentado na Figura 5.42. Este gráfico torna mais claro a influência da diferença de densidade sobre o tamanho das gotas de óleo arrastadas. Por exemplo, para o óleo 500cSt o diâmetro médio de Sauter indicou significativa diferença no tamanho das gotas entre a solução de NaCl (9mm) e a água (16mm). Para um mesmo fluido (água, por exemplo) a redução da densidade (ou viscosidade) do óleo implica em significativa redução dos valores de d_{32}. O efeito do aumento da vazão de gás não é evidente, mas nota-se ligeira tendência na redução dos valores de d_{32} (exceto para o óleo 500cSt). Diante dos resultados expostos anteriormente, destaca-se a importância de se utilizar fluidos com maior diferença de densidade para simular o comportamento escória/aço.

Savolainen *et al*. (2009) também observaram considerável influência da diferença de densidade entre os fluidos sobre o diâmetro médio das gotas de óleo formadas em seus testes de modelamento físico sobre entranhamento de escória durante os processos de fabricação de aço. Este efeito foi explicado pela força de empuxo: mais alta a diferença de densidade então maior é a força de empuxo agindo sobre as gotas, o que evita a formação de gotas maiores. Estudos complementares sobre o tempo de residência dessas gotas no interior do fluido devem auxiliar na determinação da vazão ótima de gás para maximizar as taxas de dessulfuração do aço no reator RH. Além disso, uma avaliação sobre a transferência de massa entre os fluidos também poderá auxiliar na otimização dos parâmetros de processo para condução da dessulfuração do aço no reator RH pela adição de material dessulfurante na câmara de vácuo.

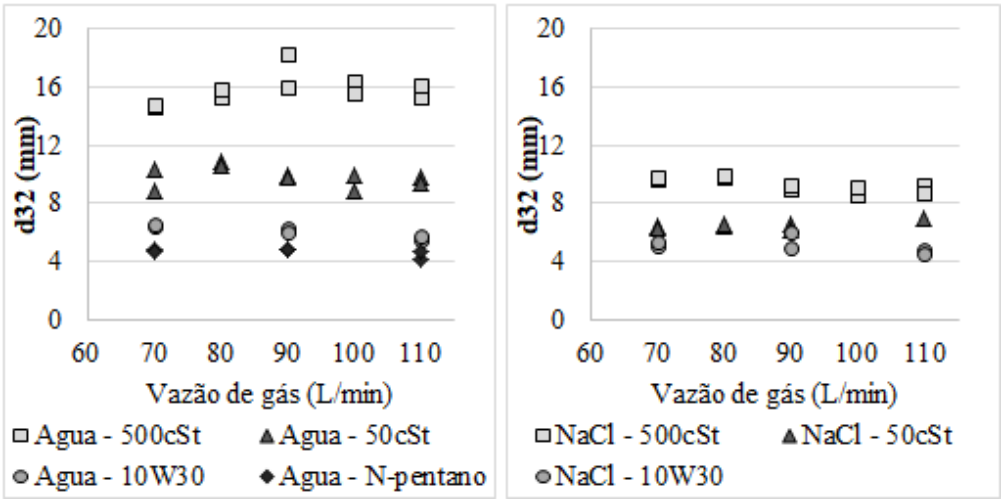

Figura 5.42 – Diâmetro médio de Sauter das gotas de óleo arrastadas da câmara de vácuo, fluido de circulação: (a) água; (b) solução NaCl.

Estes experimentos deixam claro que o aumento da diferença de densidade (quando se utiliza a solução NaCl) faz com que o diâmetro médio das gotas arrastadas diminua consideravelmente. Observou-se ainda que os diâmetros máximos das gotas arrastadas na água são muito superiores àqueles na solução salina. Para o óleo 500cSt o diâmetro médio de Sauter (d_{32}) indicou significativa diferença no tamanho das gotas entre a solução de NaCl (9mm) e a água (16mm). Para um mesmo fluido de circulação (água ou NaCl) a redução da densidade (ou viscosidade) do óleo implica em significativa redução dos valores de d_{32}. Mas a comparação entre os resultados para óleo 10W30 (855kg/m³ e 0,1353Pa.s) e óleo de silicone 50cSt (950kg/m³ e 0,0475Pa.s) indicam que o aumento na diferença de densidades possui maior efeito sobre o diâmetro médio de Sauter das gotas do que a viscosidade do óleo.

5.4.3 Análise da transferência de massa via modelamento físico

A Tabela 5.6 apresenta os principais parâmetros e resultados dos testes em bancada para determinação do coeficiente de partição de timol entre óleo e água (L_{timol} = $[timol]_{óleo}/[timol]_{água}$). Nota-se que os coeficientes de partição de timol para óleos de silicone (500cSt e 50cSt) e óleo de motor são baixos e relativamente próximos (de 27,8 a 40,9). Enquanto que para o óleo de soja, o valor é da ordem de 439,2, o que é mais próximo do valor de 350 entre água e uma mistura 50/50 (em volume) de óleo de parafina e óleo de algodão relatado por Kim e Fruehan (1987). Levando em consideração a conveniência de se conduzir

ensaios também em sistemas com coeficiente de partição comparáveis com aqueles do sistema industrial optou-se por realizar os testes no reator RH utilizando óleo de motor 10W30 e óleo de soja.

Tabela 5.6 – Parâmetros e resultados dos testes em bancada para determinação do coeficiente de partição de timol entre óleo e água.

Óleo	**m_O (g)**	**m_S (g)**	**$[timol]_i$ (ppm)**	**$[timol]_f$ (ppm)**	**L_{timol}**	**L (Média)**	**DV**
10W30	21,41	1000	91,36	52,26	34,95	35,3	2,0
	43,07	1000	97,99	39,18	34,85		
	102,70	500	87,67	20,00	32,95		
	21,35	1000	97,00	53,22	38,53		
50 cSt	23,89	1000	97,94	50,07	40,02	40,9	0,9
	23,68	1000	92,09	46,07	42,18		
	47,96	1000	95,12	32,36	40,44		
500cSt	24,05	1000	92,05	55,13	27,85	27,8	2,3
	24,02	1000	94,08	58,83	24,95		
	48,18	1000	97,14	39,24	30,63		
Soja	23,28	1000	107,00	9,17	458,27	439,2	42,2
	15,49	1000	113,20	12,99	498,02		
	15,01	990	68,18	9,41	411,80		
	20,11	1000	108,43	12,30	388,63		

m_O; m_S - massa de óleo e de solução; i – inicial; f – final (~ equilíbrio); DV - desvio padrão

Devido à baixa diferença de densidade entre o óleo (10W30 ou de soja) e a água, pouco ou praticamente nenhum material se acumula na superfície livre da câmara de vácuo após a adição dos 2L de óleo. Assim, o tempo de injeção de óleo foi escolhido em função do tempo de arrastes de 2L de n-pentano, conforme descrito no tópico anterior. Desta forma, foram realizados experimentos com injeção instantânea do óleo (~15s), injeção em 35s (tempo de arraste de n-pentano correspondente à vazão de 110L/min) e injeção em 85s (tempo de arraste de n-pentano correspondente a vazão de 70L/min. Esta variação do tempo de injeção foi realizada pela alteração do diâmetro de saída do tubo de injeção de óleo.

Apesar do menor valor de coeficiente de partição do óleo 10W30 quando comparado ao óleo de soja, testes em bancada (Figura 5.43) sob forte agitação (que promovia a dispersão do óleo em gotas) mostraram capacidade de remoção de aproximadamente 20% de timol em 5min de experimento. Porém, no reator RH o baixo tempo de contato das gotas de óleo dispersas no óleo implicou em uma extração de timol inferior a 5%, Figura 5.43(b) em 5min após a adição de 2L de óleo na câmara de vácuo (injeção do óleo durante 85s). A extração de timol foi muito baixa, e não se observa influência mensurável da vazão de gás sobre a taxa de extração. Apesar disso, ressalta-se que a maior queda na concentração de timol ocorreu nos dois primeiros minutos de teste, período no qual existe maior quantidade de gotas de óleo dispersas na solução aquosa de timol.

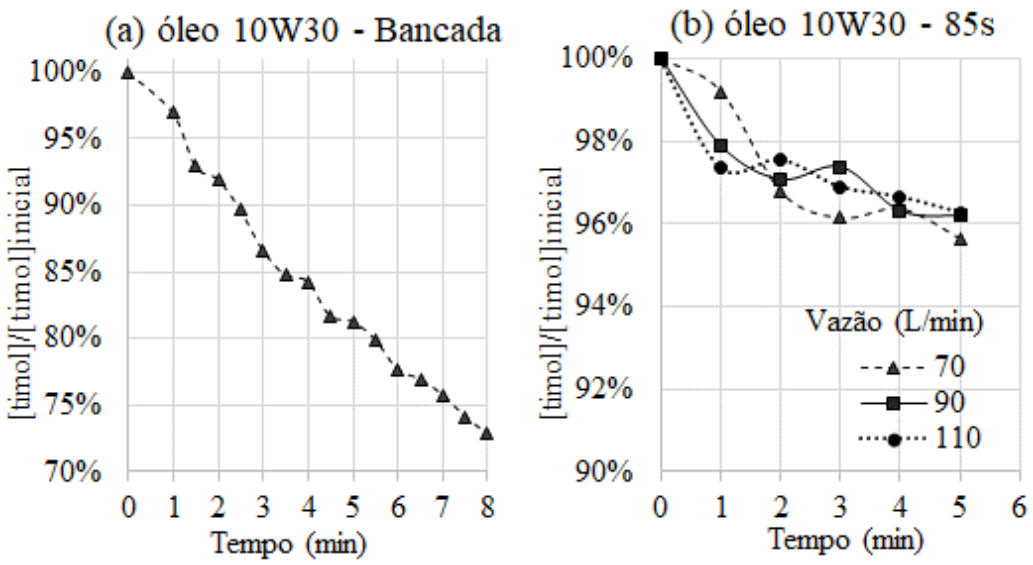

Figura 5.43 – Variação da concentração de timol em função do tempo: (a) teste em bancada (1L de solução; 24mL de óleo 10W30), sob forte agitação; (b) testes no reator RH em diferentes vazões (89L de solução; 2L de óleo 10W30, com tempo de injeção de 85s).

O elevado valor de coeficiente de partição do óleo de soja resultou em extração de timol entre 15% e 25% no reator RH, para diferentes tempos de injeção de óleo e vazões de gás (Figuras 5.44 e 5.45). Na Figura 5.44, os menores tempos de injeção do óleo resultaram em oscilação dos valores de concentração de timol, possivelmente devido ao tempo necessário para homogeneização, pois nota-se certa periodicidade dos pontos de baixa concentração, além deste comportamento ter sido observado nos dois testes em duplicata. Este problema não foi

observado para o tempo de injeção do óleo igual a 85s (Figura 5.45). Neste último, a concentração de timol decresceu de forma acentuada até cerca de quatro minutos. Em todos os tempos, nota-se que ocorre redução na concentração de timol após quatro minutos. Isto deve-se a recirculação de gotas de óleo, que ocorre devido à baixa diferença de densidade do sistema água/óleo.

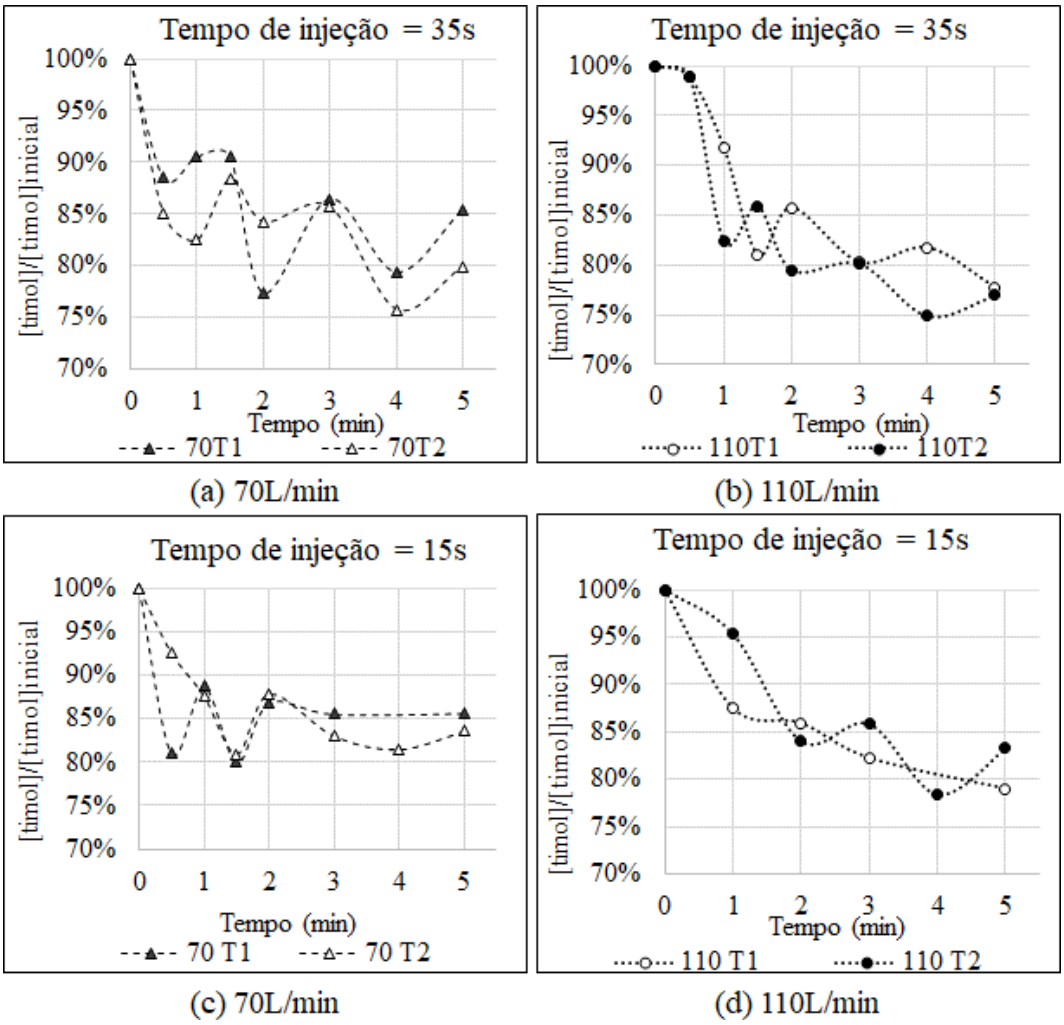

Figura 5.44 – Extração de timol para diferentes tempos de injeção, e vazão de gás: (a) e (c) 70L/min; (b) e (d) 110L/min. T1 e T2 são testes 1 e 2, respectivamente.

Esta recirculação de gotas de óleo entre panela e câmara de vácuo é mostrada na sequência de imagens da Figura 5.46, e destacada na Figura 5.47. Nota-se que ainda existem pequenas gotas de óleo dispersas no líquido, 5 minutos após o término da injeção. Observa-se na Figura 5.46 que em 60s uma camada de óleo de espessura considerável já se formou na superfície da panela, porém é difícil estimar a pequena fração de óleo que fica recirculando. Apesar de ser quantidade

de óleo que recircula, seu efeito sobre a extração de timol é significante, visto que possuem elevada área superficial.

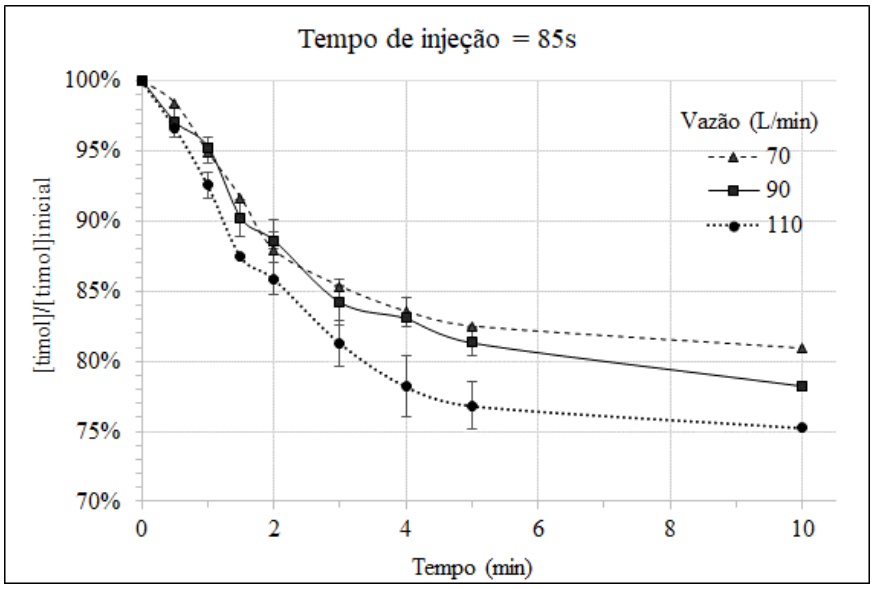

Figura 5.45 – Extração de timol para diferentes vazões de gás, e tempo de injeção de óleo igual a 85s.

As dificuldades citadas anteriormente não permitiram tirar conclusões efetivas sobre o efeito da vazão de gás sobre a taxa de extração de timol. De qualquer modo, os resultados foram promissores, uma vez que para as duas vazões estudadas, o material (óleo de soja) com coeficiente de partição de timol igual a 439,2 resultou em uma extração média de 15% em 2min de experimento (baixo valor de tempo, menor efeito da recirculação de gotas). Este nível de extração não seria suficiente para produzir aços com teores de enxofre muito baixos, mas deve permitir a correção do teor de enxofre em corridas “fora de faixa” (por exemplo, no conversor a oxigênio pode ocorrer a ressulfuração do aço pela escória oxidante ou pela sucata, contrapondo aos benefícios metalúrgicos decorrentes da operação de pré-tratamento do gusa - LOU e ZHU, 2017), sem a necessidade de passar com o aço em vários tratamentos (forno panela e RH por exemplo).

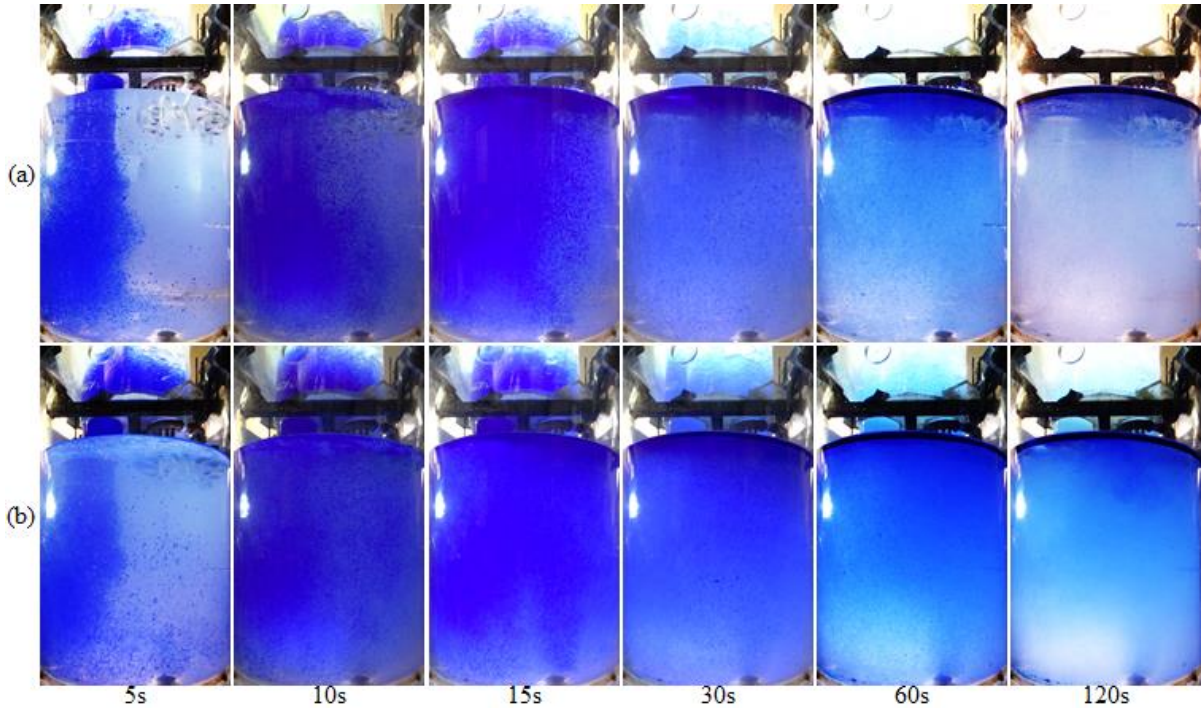

Figura 5.46 - Dispersão das gotas de óleo de soja no interior da panela do modelo físico do reator RH, utilizando 2L de óleo e tempo de injeção de 15s, vazão de gás: (a) 70L/min; (b) 110L/min.

Encontram-se na literatura trabalhos como por exemplo, Ghorai *et al.* (2004, utilizando ácido benzoico como traçador) e Kim e Fruehan (1987, utilizando timol como traçador) que reportam resultados de modelamento físico de transferência de massa aplicados a dessulfuração do aço em forno panela. Nestes trabalhos foram determinados valores para o coeficiente de transferência de massa e como este é afetado pelas condições de vazão de gás e propriedades do óleo simulando a escória. Kim e Fruehan (1987) relataram uma vazão de gás crítica, acima da qual a forte agitação que provocava o entranhamento e recirculação de gotas de óleo na água, aumentando a área interfacial água/óleo e consequentemente o coeficiente de transferência de massa aparente. Ghorai *et al.* (2004) também notaram que a contribuição transitória (devido às gotas dispersas no líquido) aumenta significativamente com o aumento na vazão de gás. Ressalta-se que no caso de experiências em modelos físicos de panelas, o tempo de contato das gotas de óleo com o líquido é muito superior ao tempo de contato observado no modelo físico do reator RH, a partir da adição do dessulfurante pela calha na câmara de vácuo. Além disso, os efeitos devido à pequena diferença de densidade entre óleo e água (quando comparado ao

sistema escória/aço) não afetam tão negativamente os experimentos em modelo de panela como influenciam nos testes em modelo de reator RH.

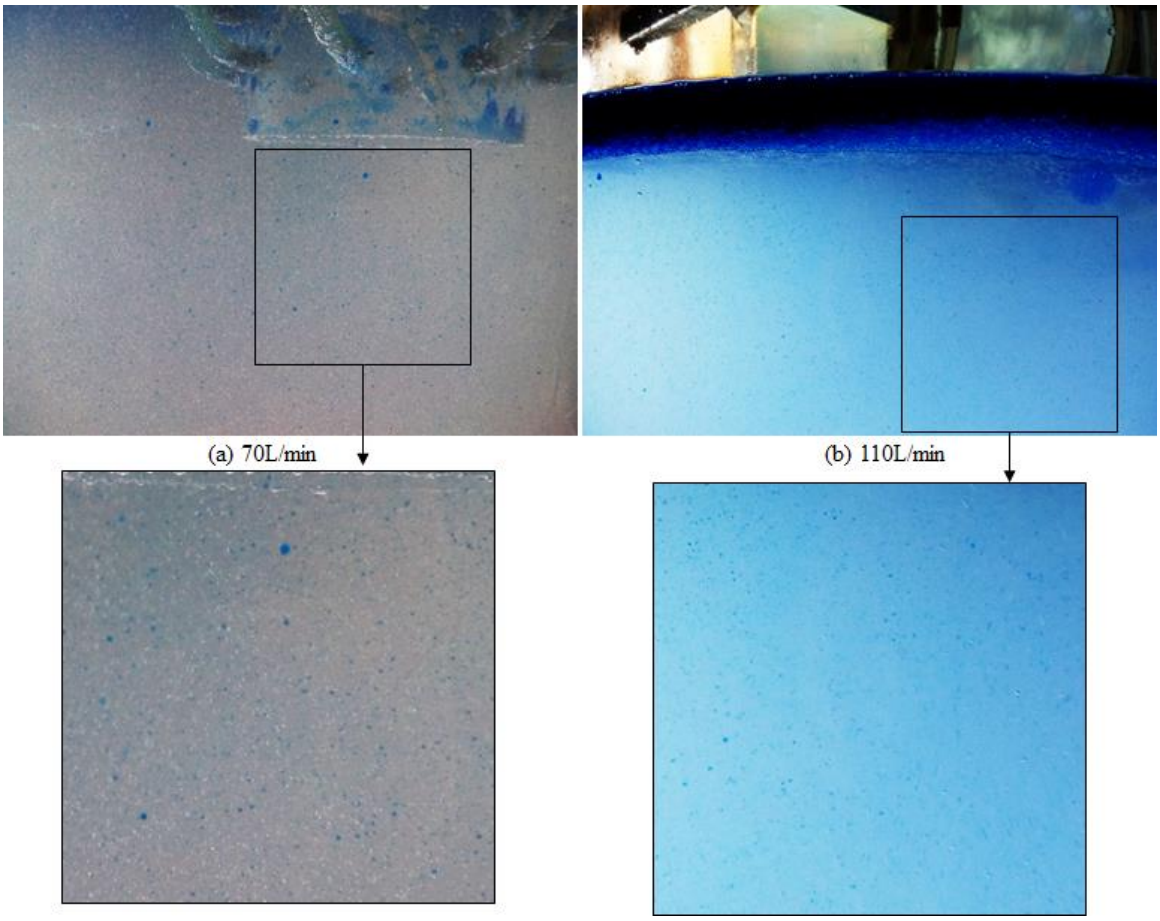

Figura 5.47 – Presença de gotículas de óleo de soja dispersas na água 5min após o término da injeção do óleo na câmara de vácuo do modelo físico, vazões de gás: (a) 70L/min e (b) 110L/min. Tempo de injeção de óleo igual a 15s.

5.4.4 Avaliação qualitativa da dispersão de gotas no interior do reator RH

Foram conduzidas simulações matemáticas da trajetória das gotas de óleo no interior do reator RH. Na Figura 5.48 nota-se como a trajetória das gotas é afetada pela diferença de densidade entre óleo e água. Para os três primeiros tipos de óleos (silicone 500 cSt, silicone 50cSt e 10W30) ocorre recirculação de gotas da panela para a câmara de vácuo, mas o aumento na diferença de densidades restringe o fluxo de gotas para a região abaixo da perna de descida, e assim, o n-pentano não apresenta tal recirculação. Este retorno de gotas de óleo (de maior

densidade) para a câmara de vácuo foi observado no modelo físico, vide Figura 5.36. O comportamento das gotas de n-pentano (Figura 5.48d) é idêntico ao apresentado na Figura 5.35 (imagens obtidas no modelo físico). Destaca-se ainda que os tempos calculados pelo modelo matemático para as gotas que retornam à câmara de vácuo foram próximos dos valores observados no modelo físico (Figura 5.36): 8,8s, 8,1s e 7,2s para os óleos 500cSt, 50cSt e 10W30, respectivamente.

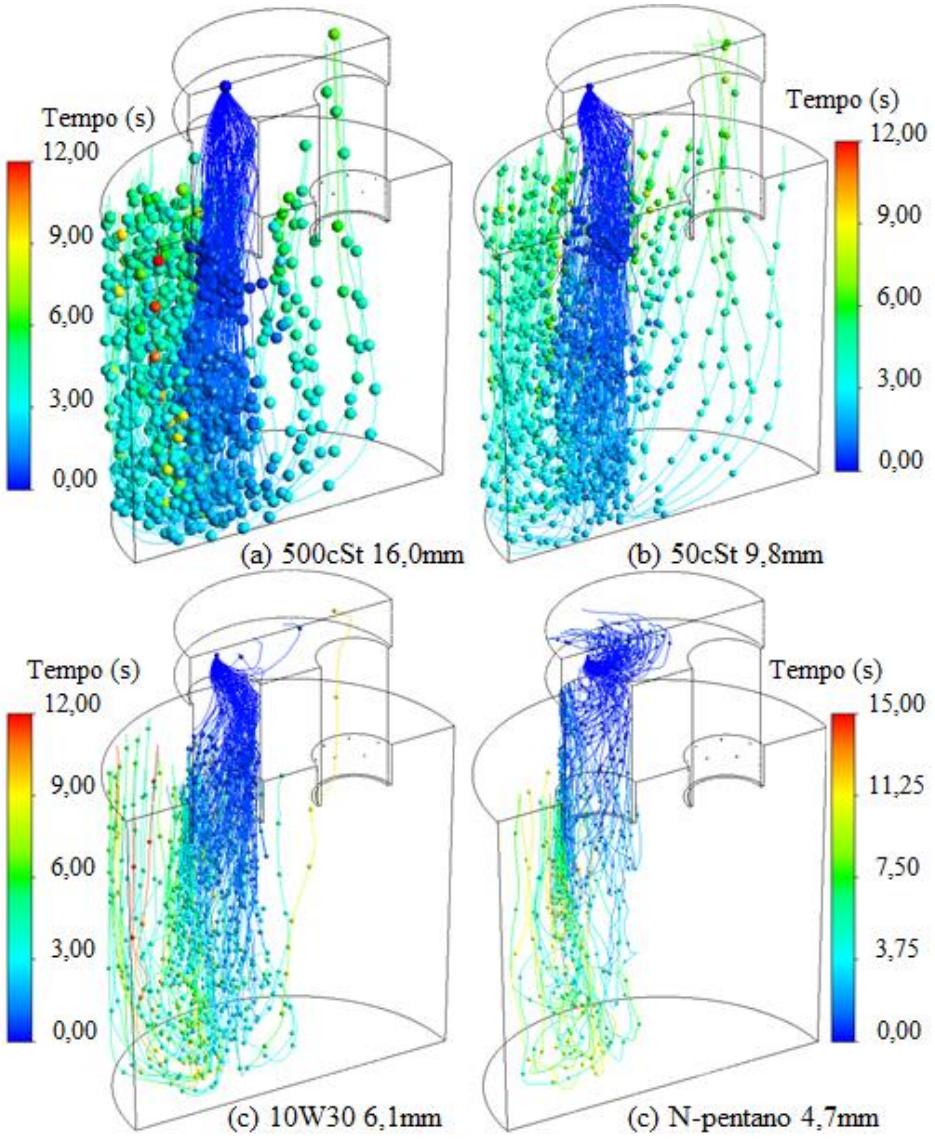

Figura 5.48 – Resultados de simulação matemática das trajetórias de gotas dos diferentes óleos, considerando diâmetros iguais aos valores médios de d_{32} (diâmetro de Sauter): (a) óleo 500cSt 16mm; (b) óleo 50cSt 9,8mm; (c) óleo 10W30 6,1mm e (d) n-pentano 4,7mm. Vazão 110L/min.

A Figura 5.49 apresenta uma comparação do comportamento das gotas de n-pentano observado no modelo físico 7,5s após a adição na câmara de vácuo e obtido pela simulação matemática. Destaca-se a variação no tempo de residência das gotas que alcançam o fundo da panela e aquelas que flotam (i.e., retornam para a superfície da panela) logo abaixo da saída da perna. Estes valores de tempo são coerentes com os resultados obtidos no modelo físico, apresentados na Tabela 5.4.

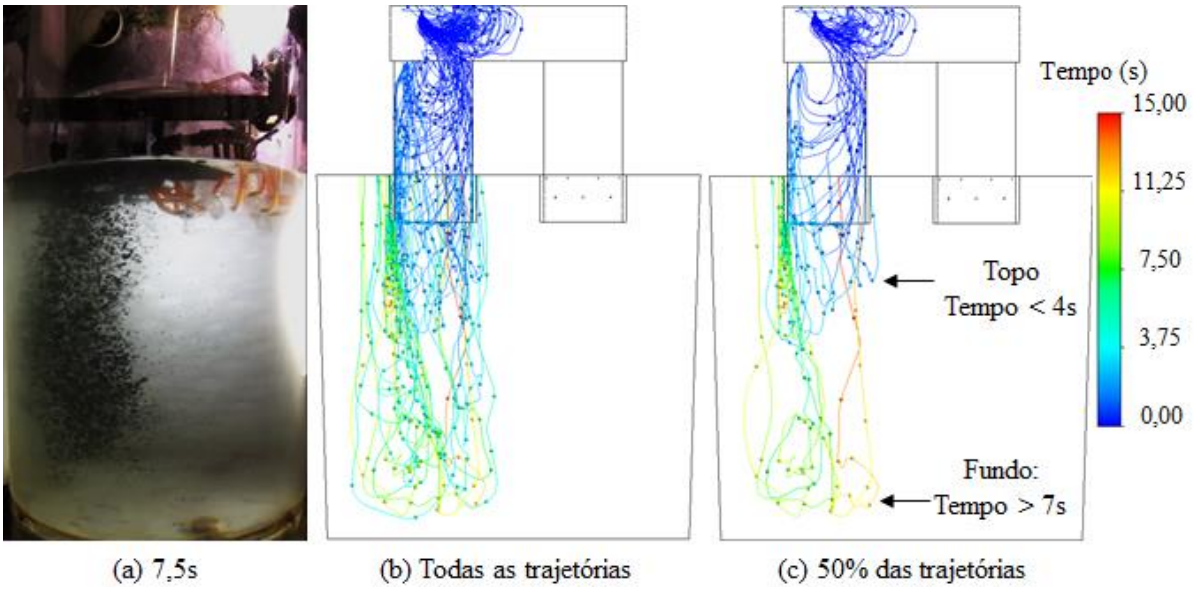

Figura 5.49 – Comparação entre modelo físico (a) e simulação matemática da trajetória das gotas de n-pentano, considerando (b) todas as trajetórias e (c) 50% das trajetórias. Vazão de gás 110L/min.

Na Figura 5.50 são apresentados resultados da trajetória das gotas de óleo de soja. O diâmetro das gotas de óleo de soja não foi mensurado, então utilizou-se diâmetros médios iguais ao óleo de silicone 50cSt e ao n-pentano. Para o maior diâmetro (9,8mm), a menor densidade do óleo de soja implicou em recirculação muito inferior ao observado para o óleo 50cSt (Figura 5.48b). Para o menor diâmetro como era esperado, comparado ao n-pentano a maior densidade do óleo de soja resultou em grande recirculação. Na Figura 5.51 compara-se o comportamento das gotas de óleo de soja obtido pela simulação matemática e observado no modelo físico em 6s e 8s após o início da adição na câmara de vácuo. Nota-se grande recirculação das gotas de óleo de soja de menor diâmetro (3mm), uma vez que gotas de menores tamanho possuem maior tendência

em seguir o fluxo de líquido. Tanto no modelo físico, quanto nas simulações matemáticas, o tempo médio para a maioria das gotas alcançar a superfície da panela é inferior a 10s, e a redução no tamanho das gotas aumenta o tempo de residência máximo, 15s e 20s para gotas de 4,7mm e 3mm respectivamente. Apesar destas simulações matemáticas utilizarem valor de diâmetro constante, foram capazes de reproduzir de forma aceitável a dispersão das gotas no interior da panela.

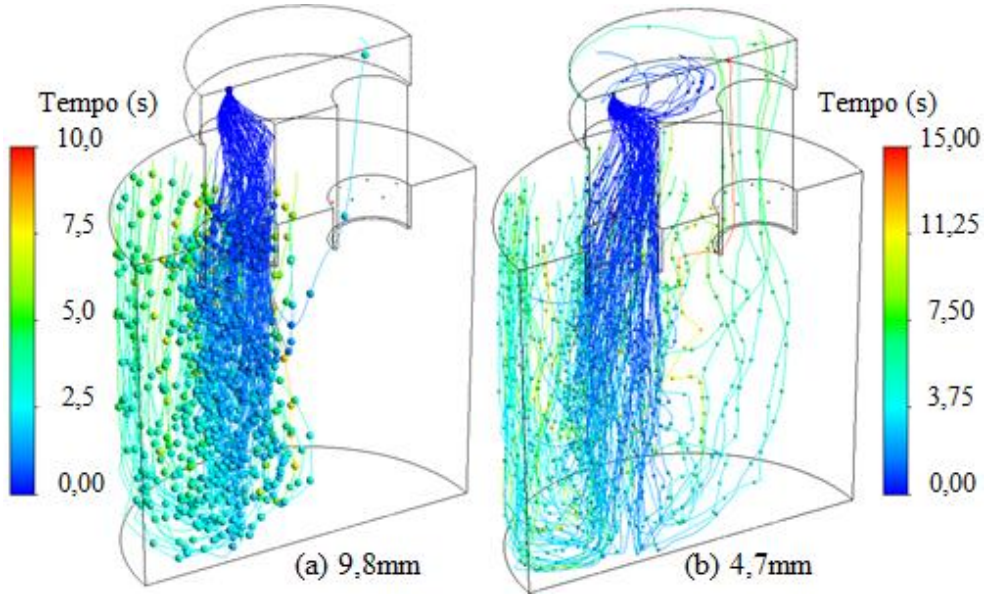

Figura 5.50 – Resultados de simulação matemática da trajetória das gotas de óleo de soja, considerando diâmetros iguais: (a) 9,8mm; (b) 4,7mm.

De forma geral, nota-se boa concordância entre os resultados obtidos pelas simulações fluidodinâmicas e o comportamento das gotas de óleo observado no modelo físico, indicando que a simulação matemática foi capaz de prever o efeito da diferença de densidade óleo/água e do tamanho das gotas de óleo sobre sua trajetória e sobre seu tempo de residência no interior do líquido. Portanto, esta mesma configuração pode ser utilizada para prever o comportamento de gotas de escória no aço. Foi analisado o caso da vazão de 140Nm³/h, variando-se o diâmetro das gotas de acordo com os valores calculados no tópico 5.3.3 (vide Tabela 5.3). Observa-se na Figura 5.52 que a dispersão das gotas de escória fica restrita a região da panela abaixo e ao redor da perna de descida. O tempo máximo de residência de uma gota aumentou consideravelmente com a redução do diâmetro das gotas.

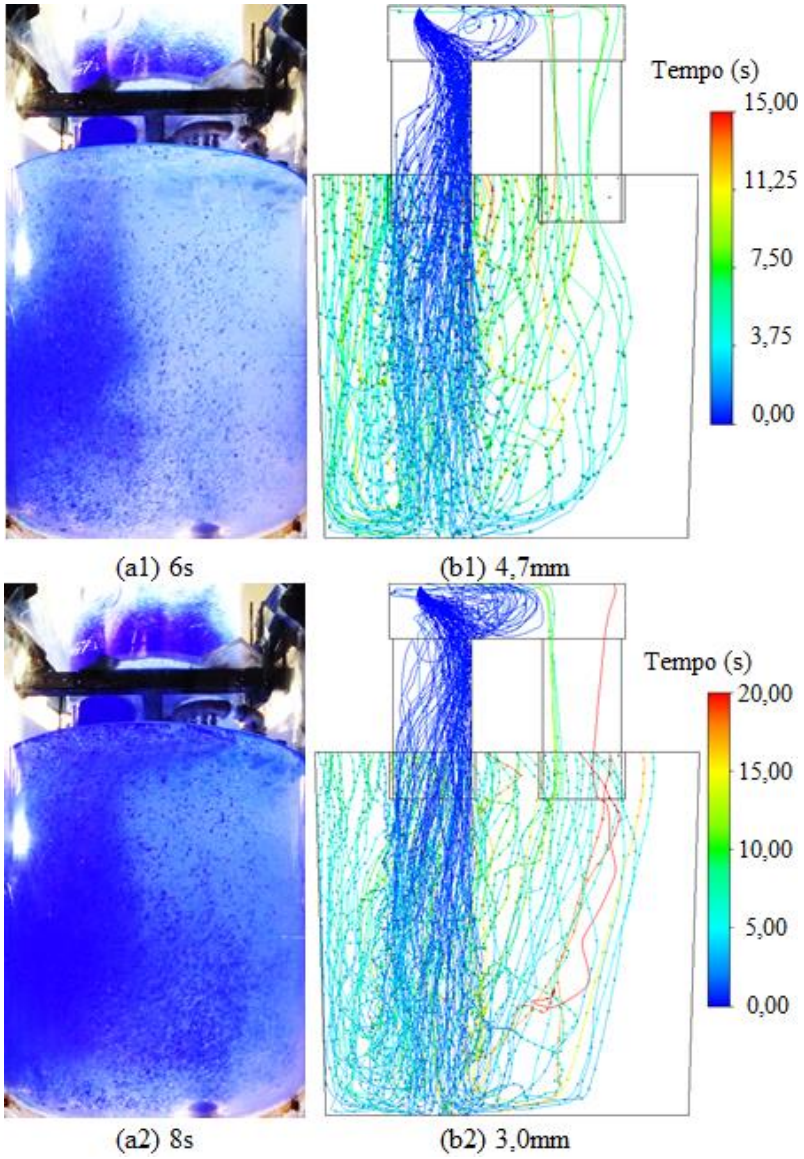

Figura 5.51 – Comparação entre modelo físico (a1 e a2) e simulação matemática da trajetória das gotas de óleo de soja, considerando diâmetro igual a: (b1) 4,7mm; (b2) 3mm. Vazão 110L/min.

O tempo para a maioria das gotas de escória alcançar a superfície da panela foi inferior a 43s, 70s e 100s para as gotas de diâmetro igual a 10mm, 8mm e 7mm, respectivamente (metade inferior da escala de tempo). Tais valores são consideravelmente superiores àqueles apresentados na Tabela 5.3, mas deve-se lembrar que os dados contidos nesta tabela correspondem aos valores médios de tempo de residência estimados a partir do modelo físico. Além disso, o tempo máximo da trajetória de gotas de n-pentano calculado pelo modelo matemático (15s) é cerca de 3 vezes o tempo médio mensurado no modelo físico (4,7s, Tabela

5.4). Desta forma, o tempo máximo obtido na simulação estaria dentro desta margem para a vazão de 140Nm³/h (diâmetro das gotas igual 10mm e tempo de residência médio estimados em 23s ±8s, Tabela 5.3). Ressalta-se que os valores estimados a partir de resultados do modelo físico representam uma boa estimativa para o tempo médio de residência das gotas de escória, uma vez que existem gotas de diferentes diâmetros, cujo tempo de residência também varia.

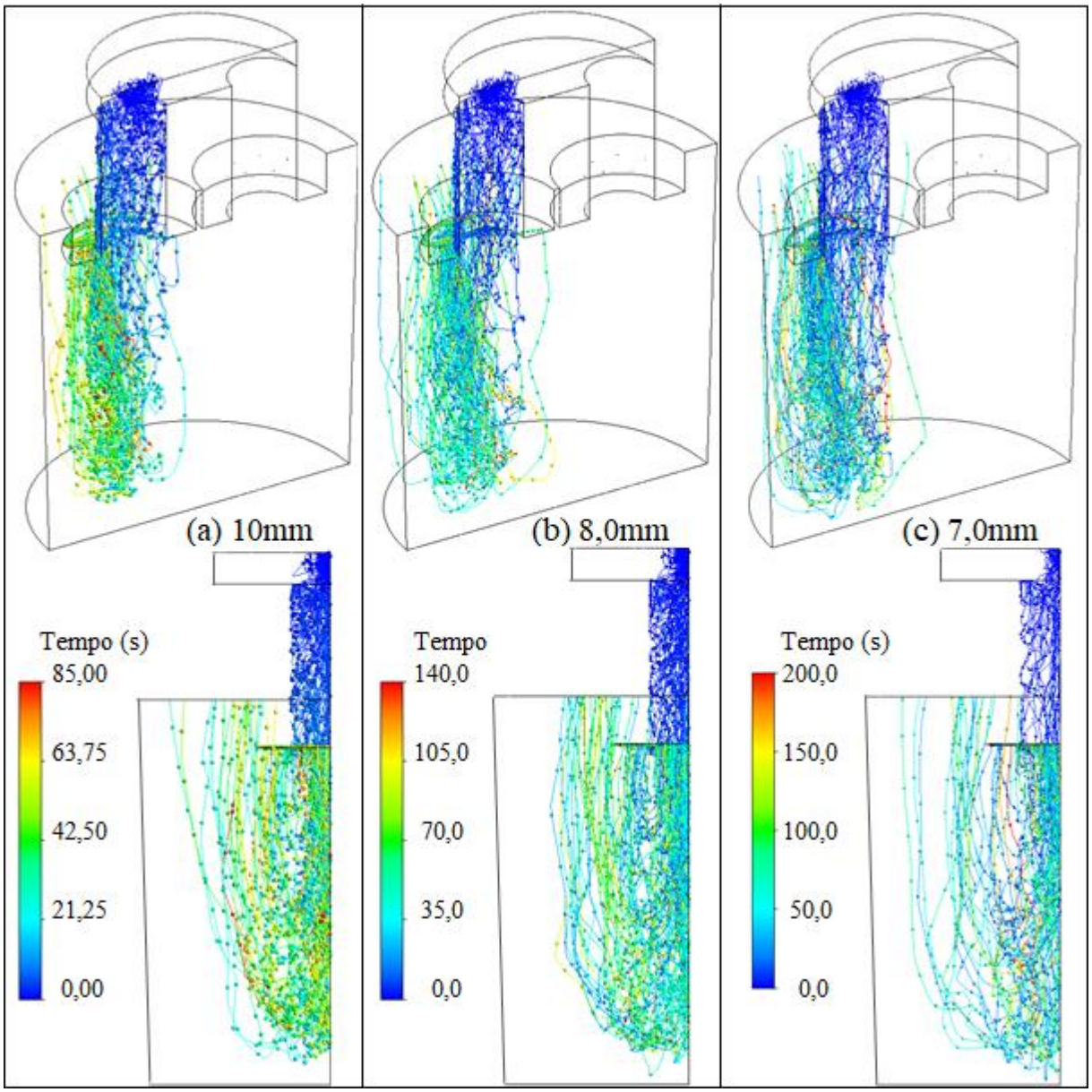

Figura 5.52 – Resultados de simulação matemática da trajetória de gotas de escória, considerando diâmetro igual a: (a) 10mm; (b) 8mm; (c) 7mm. Vazão de argônio 140Nm³/h.

O sistema n-pentano/água foi o que melhor representou no modelo físico este comportamento das gotas de escória. A dispersão das partículas de polipropileno no interior da solução salina (NaCl) também foi capaz de representar a trajetória das gotas escória no interior da panela. Estas observações indicam que o parâmetro de maior influência na trajetória das gotas é a elevada diferença de densidade entre o fluido de circulação e as gotas.

Estes resultados referentes à trajetória das gotas de escória arrastadas da câmara de vácuo fundamentam a análise feita no tópico 5.3.3, corroborando com o uso do modelo cinético adaptado de Deo & Boom (1993) para previsão da taxa de dessulfuração do aço que pode ser obtida pela adição de material dessulfurante pela calha na câmara de vácuo do desgaseificador RH.

6 CONCLUSÕES

A operação de um reator RH foi analisada através de simulação fluidodinâmica e modelagem física. Buscou-se caracterizar o comportamento escória/aço resultante da adição de material dessulfurante pela calha na câmara de vácuo. Os resultados podem ser sumarizados como se segue.

- Foi desenvolvido e validado um método (denominado aqui de método da ponte de strain gages) para determinar taxa de circulação em modelo físico de reator RH quando se utiliza soluções salinas como fluido de circulação, para avaliar o comportamento metal/escória no interior do reator;
- A taxa de circulação variou em função da vazão de gás, em uma relação do tipo $Q_c \propto G^{1/3}$, quando se utiliza tanto água como soluções salinas de maior densidade (NaCl e $ZnCl_2$) como fluido de circulação;
- O aumento na densidade do fluido de circulação (utilizando soluções salinas com alta concentração) elevou a taxa de circulação de modo proporcional ao aumento na densidade (~20%). Assim, os valores de velocidade na câmara de vácuo mantiveram-se praticamente constantes;
- A comparação da distribuição de ar na perna de subida obtida no modelo físico e em simulações matemáticas mostrou que a incorporação da força de massa virtual é a principal responsável por aumentar a penetração do gás na região da zona de injeção, sendo que o melhor ajuste para o coeficiente (C_{VM}) foi 0,25;
- A força de dispersão turbulenta é importante para aumentar a penetração das bolhas de gás nas regiões superiores da perna, melhorando a distribuição do gás e garantindo taxas de circulação próximas às observadas no modelo físico. Além disso, em simulações em regime permanente, a força de lubrificação das paredes deve ser utilizada para evitar o acúmulo de gás próximo às paredes da perna de subida;
- Em simulações do reator industrial (aço/argônio), a expansão das bolhas de argônio tem um impacto notável na taxa de circulação do aço, e uma simples expressão que considera o efeito da queda de pressão sobre o diâmetro médio das bolhas aumenta em mais de 70% a taxa de circulação prevista pela simulação;
- A vazão de gás teve pouca influência sobre o diâmetro das gotas de óleo e o tempo de residência de uma única gotícula. No entanto, tem um efeito considerável no tempo

necessário para todas as gotas serem arrastadas da câmara de vácuo e para alcançar a superfície livre da panela;

- O grau de dessulfuração foi avaliado, utilizando um modelo cinético que leva em consideração a dispersão de gotas de escória no interior do metal líquido, sendo possível alcançar de 19% a 33% de dessulfuração. Estes resultados estão em boa concordância com dados de testes industriais reportados na literatura;
- Notadamente em função da elevada diferença de densidade entre metal e escória, os tempos de residência das partículas de dessulfurante na panela são curtos. Os experimentos em modelo físico sugerem que também a permanência de reagente na câmara de vácuo é breve. Para contornar estes entraves, o dessulfurante deve ser adicionada na forma de escória sintética pré-fundida.

7 RELEVÂNCIA DOS RESULTADOS

O processo de dessulfuração no reator RH foi proposto há mais de duas décadas, inicialmente pelo sopro de pó na câmara de vácuo, sendo que alguns resultados da adição de dessulfurante pela calha de adição de ligas também são reportados na literatura. Porém, estudos sobre o comportamento dessa escória adicionada na câmara de vácuo são escassos, e alguns modelos de dessulfuração propostos anteriormente são carentes neste sentido.

Assim, a análise do comportamento da escória adicionada na câmara de vácuo, via modelamento físico, possibilitou uma estimativa do tamanho médio das gotas de escória que são arrastadas da câmara de vácuo para a panela. Os resultados sugerem que existe uma vazão de gás ótima para maximizar o tempo de residência do material no interior do líquido. Notou-se ainda, que o material adicionado na câmara de vácuo rapidamente é arrastado para a panela e alcança a escória de topo na panela de refino secundário. A região de contado aço/escória dessulfurante é restrita a perna de descida e a parte inferior da panela sob a perna de descida. A adaptação do modelo cinético de Deo & Boom (1993) com dados da simulação matemática e resultados do modelo físico permitiu uma boa previsão da taxa de dessulfuração, sendo muito próximo de resultado disponível na literatura (SILVA et al., 2015). Outros testes industriais são necessários para corroborar a escolha da vazão ótima para a dessulfuração, isto é, a vazão de gás que maximize o tempo de residência das gotas de escória dispersas no fluxo de aço líquido). Os tempos de residência das partículas de dessulfurante na panela e na câmara de vácuo são curtos. Testes de transferência de massa no modelo confirmam possíveis efeitos de baixos tempos de residência e da rápida separação entre dessulfurante e metal. Para contornar estas limitações, o dessulfurante deve ser adicionado na forma de escória sintética pré-fundida.

Os testes de transferência de massa no modelo físico, utilizando timol como traçador, não permitiram inferir a influência da vazão de gás sobre a taxa de transferência de massa, mas mostraram que é possível alcançar uma extração em torno de 15% em aproximadamente 2min, após a adição do material na câmara de vácuo do modelo físico. Este nível de extração sugere que é possível realizar a dessulfuração do aço pela adição de material dessulfurante através da calha no reator RH, sendo esta técnica mais indicada para realizar correções moderadas do teor de enxofre.

No tocante às simulações matemáticas, o estudo da combinação de forças de arraste e de não-arraste, a partir de imagens da zona de injeção de gás e medidas de taxa de circulação obtidas no modelo físico, permitiram encontrar um valor mais adequado para o coeficiente da força de massa virtual, aliado ao uso da força de dispersão turbulenta. Assim, foi possível alcançar boa previsão da penetração e dispersão do gás na perna de subida do reator RH, numa ampla faixa de vazão de gás.

8 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

- Realizar testes industriais de dessulfuração do aço no reator RH variando a vazão de gás;
- Considerar outros materiais para avaliar a transferência de massa em modelo físico;
- Analisar como o desgaste de refratários seria afetado pela adição de dessulfurantes na câmara de vácuo, principalmente nas regiões da perna de descida e câmara de vácuo acima da perna de descida;
- Avaliar os tipos de materiais dessulfurante disponíveis e a viabilidade de utilização no reator RH;
- Analisar, via modelagem física e matemática, o processo de dessulfuração do aço quando o agente dessulfurante é injetado sob a perna de subida do reator RH;
- Conduzir simulações matemáticas trifásicas (utilizando o software Fluent, por exemplo) para avaliar o comportamento das gotas de escória (quebra e coalescência);
- Desenvolver simulações matemáticas do reator RH com reação química para avaliar a dessulfuração do aço.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AJMANI, S. K.; DASH, S. K.; CHANDRA, S.; BHANU, C. Mixing Evaluation in the RH Process Using Mathematical Modeling, ISIJ International, Vol. 44, N° 1, pp. 82-90, 2004.

Ansys Inc.: ANSYS CFX- Solver Theory Guide, Release 18.2, Canonsburg, PA, pp. 153-308, 2017.

Ansys Inc.: CFX- Solver Modeling Guide, Release 18.2, Canonsburg, PA, 2017, pp. 231-348.

ARRUDA, José Dimas de. Análise Via Modelagem Física e Matemática da Turbulência na Interface Metal/Escória na Região do Menisco em um Molde de Lingotamento Contínuo de Placas. 2015. 111 folhas. Dissertação (Mestrado em Engenharia de Materiais) – REDEMAT, UFOP, Ouro Preto, 2015.

BARRAL, C. E. P. Efeitos da Incorporação de Modelos de Quebra e Coalescência de Bolhas em Simulações Multifásicas de Processos de Refino de Aços. 2016. 148 folhas. Tese (doutorado em Engenharia Metalúrgica e de Minas). PPGEM/UFMG, Belo Horizonte, 2016.

BRAGA, B.M.; NEVES, L. e TAVARES R.P. Simulação Física e Matemática da Penetração de Gás na Perna de Subida de um Modelo Físico de Desgaseificador RH. In: 47° Seminário de Aciaria - Internacional, 2016, Rio de Janeiro. Anais eletrônicos... São Paulo: Associação Brasileira de Metalurgia, Materiais e Mineração, p. 354-363, 2016.

CHEN, G.; HE, S., LI, Y., GUO, Y.; WANG Q. Investigation of Gas and Liquid Multiphase Flow in the Rheinsahl–Heraeus (RH) Reactor by Using the Euler–Euler Approach. JOM, v. 68, n° 8, p. 2138-2148, 2016.

CHEN, G.; HE; S. and LI, Y. Investigation of the Air-Argon-Steel-Slag Flow in an Industrial RH Reactor with VOF–DPM Coupled Model. Metall. Mater. Trans. B, v. 48B, pp. 2176–86, 2017.

COSTA, L.T. "Simulação fluidodinâmica computacional para estudo do tratamento de dessulfuração do aço", 2012. 105 folhas. Dissertação (Mestrado em Engenharia Metalúrgica) – PPGEM/UFMG, Belo Horizonte, 2012.

COSTA, L. T. e TAVARES, R. P. Dessulfuração do aço em desgaseificador RH por meio de modelo matemático. In: Anais do 46º Seminário de Aciaria - Internacional; 2015; Rio de Janeiro, Brasil. São Paulo: ABM; pp. 552-561, 2015.

COSTA, L.T. “Análise Integrada e Dinâmica dos Processos de Dessulfuração na Fabricação do Aço por Meio de Fluidodinâmica e Termodinâmica Computacional”, 2016. 177 folhas. Tese (Doutorado em Engenharia Metalúrgica, Materiais e de Minas) – PPGEM/UFMG, Belo Horizonte, 2016.

DAVIDSON, M.A. and SCHULER, B.O.G. Bubble Formation at an Orifice in a Viscous Liquid. Trans. Inst. Chem. Eng. v. 38, p.105-115, 1960. (In: JUBILEE SUPPLEMENT-Trans IChemE, Vol 75, 1997).

DEO, B. and BOOM, R. Fundamentals of Steelmaking Metallurgy, Prentice Hall International, London, pp. 254–61, 1993.

EMI, T- Steelmaking Technology for the Last 100 Years: Toward Highly Efficient Mass Production Systems for High Quality Steels. ISIJ International, Vol. 55, N. 1, pp. 36–66, 2015.

GENG, D. Q.; LEI, H. and HE, J. C. Numerical simulation of the multiphase flow in the Rheinsahl–Heraeus (RH) system, Metallurgical and Materials Transactions B, v.41, N.1, pp. 234-247, 2010.

GENG, D.-Q.; LEI, H. e HE, J.-G. Effect of Traveling Magnetic Field on Flow, Mixing, Decarburization and Inclusion Removal during RH Refining Process. ISIJ Int., v.52, N.6, pp. 1036–1044, 2012a.

GENG, D.-Q.; LEI, H. e HE, J.-G. Simulation on flow field and mixing phenomenon in RH degasser with ladle bottom blowing. Ironmaking and Steelmaking, v.39, N.6, pp. 43-438, 2012b.

GENG, D.Q.; ZHENG, J.X.; WANG, K.; WANG, P.; LIANG, R.Q.; LIU, H.T.; LEI, H. and HE, J.C. Simulation on Decarburization and Inclusion Removal Process in the Ruhrstahl–Heraeus (RH) Process with Ladle Bottom Blowing. Metall. Mater. Trans. B, v. 46B, pp. 1484–1493, 2015.

GHORAI, S.; ROY, G. G. and ROY, S. K. Physical Simulation of Impurity Removal through Submerged Liquid Slag Injection in Steel Melt. ISIJ Int., v. 44, n. 1, p. 37–42, 2004.

GHOSH, A. Chap. 6: Degassing and decarburization of liquid steel. In: GHOSH, A. **Secondary steelmaking: principles and applications**. Flórida: CRC Press LLC, p. 147- 183, 2001a.

GHOSH, A. Chap. 7: Degassing and decarburization of liquid steel. In: GHOSH, A. **Secondary steelmaking: principles and applications**. Flórida: CRC Press LLC, p. 187-223, 2001b.

GUTHRIE, R. I. L. Engineering in Process Metallurgy, Oxford University Press, New York, pp. 151–76, 1989.

HE, S.; ZHANG, G. e WANG, Q. Desulphurisation Process in RH Degasser for Soft-killed Ultralow- carbon Electrical Steels. ISIJ Int., v. 52, N. 6, pp. 977–983, 2012.

JOHANSEN, S.T. E BOYSAN, F. Fluid Dynamics in Bubble Stirred Ladles: Part II. Mathematical Modeling. Metallurgical and Materials Transactions B, v.19B, p.755-764, 1988.

El-KADDAH, N. and SZEKELY, J. Ironmak. Steelmak., v. 8, pp. 269–78, 1981.

KATO, Y.; NAKATO, H.; FUJLL, T.; OHMIYA, S. e TAKATORI, S. Fluid Flow in Ladle and Its Effect on Decarburization Rate in RH Degasser. ISIJ Int., v. 33, n.10, pp. 1088-1094, 1993.

KANG, S.-M.; KIM, D.-Y.; KIM, J.-S. and LEE, H.-G. Sulfur Transfer in Dynamic Conditions of Liquid Steel Drops Falling through Slag Layer. ISIJ Int., v. 43, n. 11, p. 1683–1690, 2003.

KIM, S. and FRUEHAN, R.J. Physical Modeling of Liquid/Liquid Mass Transfer in Gas Stirred Ladles, Metallurgical Transactions B, v.18B, pp. 381-390, 1987.

KISHAN, P. A. e DASH, S. K. Numerical and experimental study of circulation flow rate in a closed circuit due to gas jet impingement, Int. Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow, v.16 n.8, pp. 890-909, 2006. https://doi.org/10.1108/09615530610702050

KISHAN, P.A. and DASH, S.K. Prediction of Circulation Flow Rate in the RH Degasser Using Discrete Phase Particle Modeling, ISIJ Int., v.49, n.4, pp. 495–504, 2009.

KISHIMOTO, Y.; YAMAGUCHl, K.; SAKURAYA, T. e FUJII, T. Decarburization Reaction in Ultra-low Carbon lron Melt Under Reduced Pressure. ISIJ Int., v.33, N.3, p. 391-399, 1993.

Van der KNOPP, W. and TIEKINK, W. Desulphurization during RH Treatment at Hoogovens Staal, La Revue de Metallurgie – CIT, Avril 1996 (*apud* Zulhan *et al.*, 2013).

Van KREVELEN, D. W. and HOFTIJZER, P. J. Chemical Engineering. Progr., v. 46, p.29, 1950 (*apud* DAVIDSON and SCHULER, 1960).

KUROKAWA, N. Proc. of 5th Int. Conf. for Licenses of the RH Process, Thyssen Stahl Aktiengesellschaft, Vienna, Duisburg, p.61, 1987 (apud Park *et al.*, 2000).

KUWABARA, T; UMEZAWA, K; MORI, K e WATANABE, H - Investigation of decarburization behavior in RH-Reactor an its operation improvement. Transactions ISIJ, v.28, p. 305-314, 1988.

LACOSQUI, P.S.B - Avaliação da Limpidez do Aço Líquido Através da Modelagem Matemática do Desgaseificador – RH da Companhia Siderúrgica de Tubarão – CST. 2006. 98 folhas. Dissertação (Mestrado em Engenharia de Materiais) – REDEMAT, UFOP, Ouro Preto, 2006**.**

LIN, Z. & GUTHRIE R.I.L. Modeling of Metallurgical Emulsions. Metallurgical and Materials Transactions B. v. 25B, pp.855-864, 1994.

LIN, L.; BAO, Y.; YUE, F.; ZHANG, L. and OU, H. Physical model of fluid flow characteristics in RH-TOP vacuum refining process. Int. J. of Minerals, Metallurgy and Materials, v. 19, n. 6, pp. 483-489, 2012.

LI, Y.; BAO, Y.; WANG, R.; WANG, M.; HUANG, Q. and LI, Y. Modeling of Liquid Level and Bubble Behavior in Vacuum Chamber of RH Process. Iron and Steel Research Int. v. 23, n. 4, pp. 305-313, 2016.

LING, H.; ZHANG, L. and LIU, C. Effect of snorkel shape on the fluid flow during RH degassing process: mathematical modelling, Ironmaking & Steelmaking, v. 45, n. 2, pp. 145-156, 2016a.

LING, H.; LI, F.; ZHANG, L and CONEJO, A. N. Investigation on the Effect of Nozzle Number on the Recirculation Rate and Mixing Time in the RH Process Using VOF + DPM Model, Metal. Mat. Trans. B, v. 47B, pp. 1950-1961, 2016b.

LUO, Y.; LIU, C.; REN, Y. and ZHANG, L. Modeling on the Fluid Flow and Mixing Phenomena in a RH Steel Degasser with Oval Down-Leg Snorkel. Steel Research int., 2018. https://doi.org/10.1002/srin.201800048.

LOU, W. and ZHU, M. A Mathematical Model for the Multiphase Transport and Reaction Kinetics in a Ladle with Bottom Powder Injection, Metal. Mat. Trans. B, v. 48B, pp. 3196-3212, 2017.

MARINS, A. M. F. Modelagem Física e Computacional do Fluxo de Aço em Panela com Agitação por Gás Inerte, com Ênfase na Separação de Inclusões. 2011. 111 folhas. Dissertação (Mestrado em Engenharia de Materiais) – REDEMAT, UFOP, Ouro Preto, 2011.

MARTINS, E. M. C. Estudos de otimização de um desgaseificador RH por meio de modelagem física. 2004. 105 folhas. [Dissertação de Mestrado] – REDEMAT-UFOP, Ouro Preto, 2004.

MENDEZ, C. G.; NIGRO, N. and CARDONA, A. Drag and non-drag force influences in numerical simulations of metallurgical ladles. Journal of Materials Processing Technology, v. 160, p. 296–305, 2005.

MIKI, Y.; THOMAS, B.G.; DENISSOV, A. e SHIMADA, Y. Model of Inclusion Removal During RH Degassing of Steel. Iron and Steelmaker, v.24, n.8, p. 31-38, 1997.

MORALES, B. B. Simulação Numérica do Escoamento em Modelo Físico da Estação de Refino Secundário RH. 2008. 97 folhas. Dissertação (Mestrado em Engenharia) – PPGEM/UFRGS, 2008.

MUKHERJEE, D.; SHUKLA, A.K. e SENK, D.G. Cold Model-Based Investigations to Study the Effects of Operational and Nonoperational Parameters on the Ruhrstahl–Heraeus Degassing Process, Metallurgical and Materials Transactions B, v. 48B, p.763-771, 2017.

NAKASHIMA, K. and Mori, K. Interfacial Properties of Liquid Iron Alloys and Liquid Slags Relating to Iron- and Steel-making Processes. ISIJ Int., v. 32, n. 1, p. 11-18, 1992.

NEVES, L. Avaliação dos Efeitos da Injeção de Gás na Câmara de Vácuo do Modelo Físico de Um Desgaseificador RH. 2008. 119 folhas. Dissertação (Mestrado em Engenharia Metalúrgica e de Minas) – PPGEM/UFMG, Belo Horizonte, 2008.

NEVES, L.; OLIVEIRA, H. P. O.; TAVARES, R. P. Evaluation of Gas Injection in the Vacuum Chamber of a RH Degasser on Melt Circulation and Decarburization Rates, ISIJ International, v.49, n.8, p. 1141, 2009.

NEVES L. Modelagem do escoamento multifásico no desgaseificador RH e no distribuidor de lingotamento contínuo. 2012. 293 folhas. Tese (doutorado em Engenharia Metalúrgica e de Minas). PPGEM/UFMG, Belo Horizonte, 2012.

NEVES, L. e TAVARES, R. P. Modelo Matemático das Forças de Não-Arraste no Escoamento Bifásico do Desgaseificador RH. Tecnol. Metal. Mater. Miner., v. 14, n. 4, p. 296-302, 2017.

OKANO, H.; TAJIRI, Y.; SATOH, M.; FUKAGAWA, S. and SHINME, K. Development of technology for producing ultra-low sulphur steel by RH top blowing method. The Sumitomo Search, v. 59, pp. 91-95, 1997.

PARK, Y-G.; DOO, W-C.; YI, K-W. e AHN, S.B. Numerical Calculation of Circulation Flow Rate in the Degassing Rheinstahl- Heraeus Process. ISIJ Int., v.40, n.8, p. 749-755, 2000.

SANO, M., MORI, K., Size of Bubbles in Energetic Gas Injection into Liquid Metal, Transactions Iron Steel Institute Japan, volume 20, pg. 675–681; 1980.

SAVOLANEIN, J.; FABRITIUS, T. & MATTILA, O. Effect of Fluid Physical Properties on the Emulsification. ISIJ International. v. 49, n. 1, pp. 29-36, 2009.

SCHRADE, C.; NICOLAI, H. and ZULHAN, Z. Desulfurization of molten steel in RH-degasser by powder blowing to produce silicon steel – Operational Results Maanshan ISCO. In: METEC. 2° ESTAD; 2015; Düsseldorf, Alemanha. Düsseldorf: METEC; 2015. p. 1-5.

SESHADRI, V & COSTA, S.L.S. Cold Model of RH Degassing, Trans. ISIJ, v.26, p.133-138, 1986.

SESHADRI, V.; SILVA, C. A.; SILVA, I. A.; VARGAS, G. A. and LASCOSQUI, P. S. B. Decarburization rates in RH–KTB degasser of CST steel plant through physical modelling study, Ironmaking and Steelmaking, v. 33, n° 1, pp. 34-38, 2006.

SHIRABE, K. e SZEKELY, J. A Mathematical Model of Fluid Flow and Inclusion Coalescence in the R-H Vacuum Degassing System. (1983), Transactions ISIJ, v.23, p.465-474,1983.

SICORSKI, R. S. Modelagem Numérica Aplicada aos Fenômenos de Escoamento e Mistura em Modelos Físicos de Panelas de Aciaria. Dissertação (Mestrado em Engenharia Metalúrgica) PPGEM/UFRGS, Porto Alegre, 2006.

SILVA, C. A; SILVA. I. A; MARTINS, E.M.C; SESHADRI, V; PERIM, C.A e VARGAS FILHO, G.A - Fluid flow and mixing characteristics in RH degasser of Companhia Siderúrgica de Tubarão, and influence of bottom gas injection and nozzle blockage through physical modelling study. Ironmaking Steelmaking, v.31, n.1, pp. 37-42, 2004.

SILVA, M. J. A. Variação da taxa de descarburação para vários padrões de injeção de argônio na perna de subida do desgaseificador a vácuo RH. 2010. 109 folhas. Dissertação (Mestrado em Engenharia Metalúrgica e de Minas) – PPGEM/UFMG, Belo Horizonte, 2010.

SILVA, M. J. A. e TAVARES, R. P. Estudo da Variação da Taxa de Descarburação em Função da Vazão de Argônio Utilizada na Perna de Subida do Desgaseificador a Vácuo RH. Tecnol. Metal. Mater. Miner., São Paulo, v.9, N.1, p. 53-58, 2012.

SILVA, T. C.; RODRIGUES, E. F.; SOARES, C.; SILVA, C.A. e SILVA, I.A. Simulação Numérica Do Fluxo Recirculatório em um Reator RH: Aplicação à Dessulfuração. In: 46º Seminário Internacional de Aciaria, Rio de Janeiro, p. 1-10, 2015.

SILVEIRA W.J. Modelamento matemático do escoamento de fluidos no processo RH para previsão da taxa de circulação do aço [dissertação de mestrado]. Belo Horizonte: UFMG; 74 p., 2011.

Slag Atlas. Ed: Verein Deutscher Eisenhűttenleute, Verlag Stahleisen m.b.h, 2nd ed., 1995.

SUSAKI, K.; SILVA, C.A.; MARTINS, A.A.; FERREIRA, M.A.C. e AZEVEDO, F.R.S. Capítulo 5: Tratamento Sob Vácuo. In: RIBEIRO, D.B (Coord.). Refino Secundário dos Aços. São Paulo: ABM, 2014. P. 270-389.

TAVARES, R. P.; NASCIMENTO, A. A.; PUJATTI, H. L. V. Mass Transfer Coefficients During Steel Decarburization in a RH Degasser, Defect and Diffusion Forum, v. 273-276 © (2008) Trans Tech Publications, Switzerland, pp. 679-684, 2008.

TEMBERGEN, D.; TEWORTE, R.; ROBEY, R. RH metallurgy. Millennium Steel, p.104-108, 2008.

TSUJINO, R.; NAKASHIMA, J; HIRAI, M & SAWADA, I - Numerical Analysis of Molten steel flow in ladle of RH process. ISIJ International, v.29, N.7, pp. 589-595, 1989.

TUSSET, V.; MARIQUE, Ch.; MATHY, H.; GOMMERS, B. & Van POECK, N. Cleanness assessment of high-quality steel produced by RH treatment, Ironmaking & Steelmaking, v. 30, n. 2, pp. 142-145, 2003.

VARGAS, G.A. Modelagem Matemática e Física do Desgaseificador a Vácuo RH da Companhia Siderúrgica Tubarão – CST. 2000. 158 folhas. Dissertação (Mestrado em Engenharia Metalúrgica e de Minas) – PPGEM/UFMG, Belo Horizonte, 2000.

WANG, X.F.; TANG, F.P.; LIN, Y. e WU, C.J. Development of novel RH degassing process with powder injection through snorkel nozzles. Ironmaking and Steelmaking, v.41, N.9, p. 694-698. 2014.

WATANABE, H.; ASANO, K.; SAEKI, T. Some chemical engineering aspects of RH degassing process. Electrical Furnace Steel, v.9, p.487-501, 1966 (*apud* SESHADRI e COSTA, 1986).

WEI, J.H., ZHU, S.J. AND YU, N.W. "Kinetic model of desulphurization by powder injection and blowing in RH refining of molten steel", Iron. and Steelmaking, v.27, N.2, pp. 129-137, 2000.

WEI, J.-H., WANG, M. AND YU, N.-W. Mass transfer characteristics between molten steel and particles in RH–PTB refining, Ironmaking and Steelmaking, v. 28, n.6, pp. 455-464, 2001.

WEI, J-H. e HU, H-T. Mathematical modelling of molten steel flow in a whole degasser during RH refining process, Ironmaking and Steelmaking, v.32, n.5, pp. 427-434, 2005.

WEI, J.-H., JIANG, X.-Y., WEN, L.-J. and BO LI. Mass Transfer Characteristics between Molten Steel and Particles under Conditions of RH-PB(IJ) Refining Process, ISIJ International, v. 47, n. 3, pp. 408–417, 2007.

WEINGARTNER, H.; MULLER, K. J.; HERTZ, H. G.; EDGE, A. V. J. and MILLS, R. Unusual Behavior of Transport Coefficients in Aqueous Solutions of Zinc Chloride at 25 ºC. J. Phys. Chem., v. 88, n. 10, p. 2173-2178, 1984.

YAMASHITA, S. and IGUCHI, M. Control of Reverse Emulsification and Mixing Time in a Bottom Blown Bath Covered with Top Slag. ISIJ International, v. 43, n. 9, pp. 1326–1332, 2003.

YANG, H.; LI, J.; GAO, Z.; SONG, F. and YANG, W. Study on Flow-Reaction Desulfurization of RH By Physical Experiment. Materials Processing Fundamentals, edited by: Lifeng Zhang et al., TMS (The Minerals, Metals & Materials Society), p. 45-52, 2013.

YANG, H.; YANG, S.; LI, J. and ZHANG, J. A Mathematical Model to Characterize RH Desulfurization Process. J. of Iron and Steel Research Int., v.21, n.11, p. 995-1001, 2014.

YOSHITOMI, K.; NAGASE, M.; UDDIN, Md. A. and KATO, Y. Fluid Mixing in Ladle of RH Degasser Induced by Down Flow. ISIJ International, v. 56, n. 7, pp. 1119–1123, 2016.

ZAIDI, A. and SOHN H.Y. Measurement and Correlation of Drop-Size Distribution in Liquid-Liquid Emulsions Formed by High-Velocity Bottom Gas Injection. ISIJ Int. v. 35, n. 3, pp. 234-241, 1995.

ZHAN, D. P.; JIANG, Z. H.; WANG, W. Z. Development of deep desulfurization technology with premelted slag during RH-KTB refining. Dev. Chem. Eng. Mineral Process. v. 14, n^0 3/4, pp. 375-384, 2006.

ZHANG, M.; ZENG, J. H. e PAN, H. Study on Desulphurization Technology in RH Refining for Electric Steel. Applied Mechanics and Materials, Vols. 217-219, pp. 449-453, 2012.

ZHANG Y, BAI Y, WANG H. CFD analysis of inter-phase forces in a bubble stirred vessel. Chemical Engineering Research and Design. v. 9 (I): 29–35, 2013.

ZHANG, J.; LIU, L.; ZHAO, X.; LEI, S. e DONG, Q. Mathematical Model for Decarburization Process in RH Refining Process. ISIJ International, v. 54, N. 7, p. 1560–1569. 2014.

ZHANG, L. e LI, F. Investigation on the Fluid Flow and Mixing Phenomena in a Ruhrstahl-Heraeus (RH) Steel Degasser Using Physical Modeling. JOM, v.66, N.7, p. 1227-1240. 2014.

ZHENG, S. and ZHU, M. Modelling Effect of Circulation Flow Rate on Inclusion Removal in RH Degasser. Iron and Steel Research Int., v. 23, n. 12, pp. 1243-1248, 2016.

ZHU, C.; CHEN, P.; LI, G.; LUO, X. and ZHENG, W. A Mathematical Model of Desulphurization Kinetics for Ultra-low sulfur Steels Refining by Powder Injection during RH Processing, ISIJ Int., v.56, n.8, p. 1368–1377, 2016a.

ZHU, B.; LIU, Q.; ZHAO, D.; REN, S.; XU, M.; YANG, B. and HU, B. Effect of Nozzle Blockage on Circulation Flow Rate in Up-Snorkel during the RH Degasser Process, Steel Research Int., v. 87, n^o 2, p. 136-145, 2016b.

ZHU, B.; LIU, Q.; KONG, M.; YANG, J.; LI, D. and CHATTOPADHYAY, K. Effect of Interphase Forces on Gas–Liquid Multiphase Flow in RH Degasser, Metall. Mater. Trans. B, v. 48B, p. 2620–2630, 2017.

ZHU, B.; CHATTOPADHYAY, K.; HU, X.; ZHANG, B.; LIU, Q. and CHEN, Z. Optimization of sampling location in the ladle during RH vacuum refining process. Vacuum, v. 152, pp. 30-39, 2018.

ZULHAN, Z.; SCHRADE, C. e PATRIONA, Y.A. Desulphurization of Molten Steel in RH-Degasser by Powder Blowing to Produce Non-Grain Oriented (NGO) Silicon Steel. In: SEAISI Conference and Exhibition, Session 6A-6, 2013. Pattaya – Thailand. p. 1-9, 2013.

APÊNDICE I – LISTA DE PUBLICAÇÕES

Lista de publicações relacionadas a este trabalho (ordem cronológica)

1. PEIXOTO, J.J.M.; GABRIEL, W. V.; OLIVEIRA, T.A.S; SILVA, C.A.; SILVA, I.A.; SESHADRI, V. Numerical Simulation of Recirculating Flow and Physical Model of Slag–Metal Behavior in an RH Reactor: Application to Desulfurization. Metal. and Mat. Transactions B. v.49, p.2421 - 2422, 2018. https://doi.org/10.1007/s11663-018-1355-z
2. PEIXOTO, J.J.M.; GABRIEL, W. V.; OLIVEIRA, T.A.S; BARONY, N.B.; SILVA, C.A.; SILVA, I.A.; SESHADRI, V. Study of Slag–Metal Behavior in a Physical Model of a RH Reactor, With Special Reference to Desulfurization. In: AISTech 2018, Pennsylvania. AIST2018 Proceedings, p. 1397-1408, 2018.
3. PEIXOTO, J.J.M.; GABRIEL, W. V.; OLIVEIRA, T.A.S; BARONY, N.B.; SILVA, C.A.; SILVA, I.A.; SESHADRI, V. Comportamento Metal-Escória em Modelo Físico de um Reator RH: Aplicação à Dessulfuração. In: 48º Seminário de Aciaria, Fundição e Metalurgia de Não-Ferrosos, 2017, São Paulo: Editora Blucher, v.48. p.733 – 744, 2017. http://dx.doi.org/10.5151/1982-9345-30815
4. PEIXOTO, J.J.M.; GABRIEL, W. V.; OLIVEIRA, T.A.S; BARONY, N.B.; SILVA, C.A.; SILVA, I.A.; SESHADRI, V. Influência das Forças de Interação Líquido/Gás na Análise Via CFD do Reator RH. In: 48º Seminário de Aciaria, Fundição e Metalurgia de Não-Ferrosos, 2017, São Paulo: Editora Blucher, v.48. p.356 – 367. http://dx.doi.org/10.5151/1982-9345-30378
5. PEIXOTO, J.J.M.; BARONY, N.B.; SILVA, H.H.S.; GABRIEL, W.V.; SILVA, C.A.; SILVA, I.A.; SESHADRI, V. Assessment of Slag Entrainment in a RH Degasser Through Physical Modelling Using Circulating Fluids of Different Densities/Oil Systems for Simulating Steel Melt/Slag. In: Hwang JY. et al. (eds) 8th International Symposium on High-Temperature Metallurgical Processing, The Minerals, Metals & Materials Series. 1ed.: Springer Int. Publishing, 2017, p.121-131. http://dx.doi.org/10.1007/978-3-319-51340-9_13
6. PEIXOTO, J.J.M.; GABRIEL, W.V.; BARONY, N.B.; SILVA, C.A.; SILVA, I.A.; SESHADRI, V. Taxa de Circulação e Previsão do Comportamento Metal/Escória em Modelo Físico de um Reator RH. In: 47th Steelmaking Seminar - International, Rio de Janeiro, 2016. Anais eletrônicos... São Paulo: Associação Brasileira de Metalurgia e Materiais, p. 639-648, 2016. http://dx.doi.org/10.5151/1982-9345-28017

APÊNDICE II – TESTES DE TRANSFERÊNCIA DE MASSA

Particularidades dos testes de transferência de massa

Vale ressaltar aqui algumas peculiaridades importantes para realização dos testes de transferência de massa, a começar pelo preparo da solução aquosa de timol: dois métodos podem ser utilizados para facilitar a dissolução do timol. O primeiro consiste diluir a massa de timol necessária para o preparo de 1L de solução em 10mL de álcool etílico P.A. e depois adicionar lentamente a solução de álcool na água. O segundo método é aquecer a água a 40ºC (não mais que isso, para evitar a volatilização do timol), e utilizando um agitador magnético em velocidade suficiente para formar um vórtice na superfície da água, adicionar a massa de timol no interior deste vórtice, mantendo a agitação por cerca de 10min para completa dissolução do timol.

Outra questão importante tange a limpeza das cubetas de quartzo do espectrofotômetro (volume de 5ml, caminho ótico de 10mm): após a leitura da concentração de timol, a amostra era descartada e a cubeta passava por limpeza com cotonete e água com detergente desengordurante, enxaguado duas vezes com solução de álcool etílico PA (diluição 1:5 em água destilada), e enxaguado mais duas vezes com água destilada. Para a leitura da próxima amostra, inicialmente faz-se o ambiente na cubeta com um pouco de solução, e depois preenche-se a cubeta com 5mL de amostra.

APÊNDICE III – RESUMOS DOS ARTIGOS PUBLICADOS

1. METALLURGICAL AND MATERIALS TRANSACTIONS B v.49 (2018)

NUMERICAL SIMULATION OF RECIRCULATING FLOW AND PHYSICAL MODEL OF SLAG–METAL BEHAVIOR IN RH REACTOR: APPLICATION TO DESULFURIZATION

JOHNE JESUS MOL PEIXOTO[1], WESLEI VIANA GABRIEL[1], THIAGO ARAÚJO SANTOS DE OLIVEIRA[1], CARLOS ANTONIO DA SILVA[1], ITAVAHN ALVES DA SILVA[1], and VARADARAJAN SESHADRI[2]

Computational fluid dynamics (CFD) techniques and a 1:7.5 physical model of an RH degasser have been used to evaluate the flow of gas and metal inside an RH reactor for vacuum degassing of liquid steel. The effect of gas injection on the gas spatial distribution, steel circulation rate and flow field inside the ladle, snorkels and vacuum chamber have been assessed. N-pentane oil was employed to evaluate the average residence time as well as the slag droplet size distribution. The predicted radial gas distribution and liquid circulation rate have been validated against experimental data from a physical model. The results with incorporation of the virtual mass force coefficient of 0.25 and the turbulence dispersion force showed better predictions of gas distribution in the up-snorkel as well as circulation rate. Full-scale simulations were performed, and the predicted circulation rate was significantly affected by the argon bubble expansion. Data from these simulations were used to analyze the degree of desulfurization performed by the addition of desulfurizing agents inside the vacuum chamber. A model of the kinetics of desulfurization based on the results from the physical model and CFD simulation and on slag dispersion inside liquid steel yields degrees of desulfurization similar to the industrial trials reported in the literature.

Keywords: RH reactor, modeling, desulfurization, CFD.

[1]Department of Metallurgical Engineering and Materials, Federal University of Ouro Preto, Morro do Cruzeiro, Ouro Preto, MG 35400-000, Brazil. Contact e-mail: johnepeix@yahoo.com.br

[2]Department of Metallurgical Engineering and Materials, Federal University of Minas Gerais, 6627, Av. Antonio Carlos, Belo Horizonte 31270-901, Brazil.

https://doi.org/10.1007/s11663-018-1355-z
The Minerals, Metals & Materials Society and ASM International 2018

2. AISTech 2018

Study of Slag–Metal Behavior in a Physical Model of a RH Reactor: with Special Reference to Desulfurization

Johne Jesus Mol Peixoto[1] Weslei Viana Gabriel[1] Thiago Araújo Santos de Oliveira[1] Natalia Barros Barony[1] Carlos Antonio da Silva[1] Itavahn Alves da Silva[1] Varadarajan Seshadri[2]

Abstract

A 1:7.5 model of a RH degasser was employed to evaluate the average residence time as well as the slag droplet size distribution as a function of gas flow rate and metal slag density difference. These are parameters related to the rate of desulfurization. The predicted radial gas distribution and liquid circulation have been validated against experimental data from physical model. The results via mathematical modeling using CFX with incorporation of the virtual mass force coefficient of 0.3 and the lift force coefficient of 0.1 showed better predictions of gas distribution in the up-leg as well as circulation rate.

Keywords: CFD; Desulphurization; Physical Modelling; RH Degasser; Non drag forces.
[1]Department of Metallurgical Engineering and Materials, Federal University of Ouro Preto, Morro do Cruzeiro, Ouro Preto, MG, Brazil, 35400-000, Phone: (+55031) 35591101
[2]Department of Metallurgical Engineering and Materials, Federal University of Minas Gerais Av. Antonio Carlos 6627, Belo Horizonte, MG, Brazil, 31.270-901, Phone: (+55031) 32861854, Email: seshadri@demet.ufmg.br

AISTech 2018 Proceedings. © 2018 by AIST.

3. 8th International Symposium on High-Temperature Metallurgical Engineering and Materials (2017)

ASSESSMENT OF SLAG ENTRAINMENT IN A RH DEGASSER THROUGH PHYSICAL MODELLING USING CIRCULATING FLUIDS OF DIFFERENT DENSITIES/OIL SYSTEMS FOR SIMULATING STEEL MELT/SLAG

Johne Jesus Mol Peixoto[1] Natalia Barros Barony[1] Heric Henrique Souza e Silva[1] Weslei Viana Gabriel[1] Carlos Antonio da Silva[1] Itavahn Alves da Silva[1] Varadarajan Seshadri[2]

Abstract

In this work the circulation rates have been determined in a 1:7.5 scale physical model of RH reactor (Ruhrstal Heraeus) and using oil/water and oil/zinc chloride solution to simulate steel melt/slag in the prototype with the objective of evaluating the influence of density and viscosity on the entrainment of oil simulating slag. A technique based on strain gage bridge and particle image velocimetry was developed to assess the circulation rate, as the usual tracer method is not feasible due to the presence of chloride ions in $ZnCl_2$. The critical velocity and critical diameter of oil drops for slag (oil) entrainment in water/oil and $ZnCl_2$/oil systems were estimated using equations from the literature. Due to the difference in density, the $ZnCl_2$/oil system, showed a critical velocity that is 28% higher than the silicone oil/water system while the maximum size of the entrained droplets was about 65% lower than that for water/oil system.

Keywords: RH degassing, Circulation Rate; Slag entrainment.

[1]Department of Metallurgical Engineering and Materials, Federal University of Ouro Preto, 35400-000, Ouro Preto, MG, Brazil

[2]Department of Metallurgical Engineering and Materials, Federal University of Minas Gerais, 6627, Av. Antonio Carlos, 31.270-901 Belo Horizonte, Brazil

The Minerals, Metals & Materials Society 2017. 8th International Symposium on High-Temperature Metallurgical Processing, http://dx.doi.org/10.1007/978-3-319-51340-9_13

4. 48º Seminário de Aciaria, Fundição e Metalurgia de Não-Ferrosos (ABM *Week* 2017)

COMPORTAMENTO METAL-ESCÓRIA EM MODELO FÍSICO DE UM REATOR RH: APLICAÇÃO À DESSULFURAÇÃO*

Johne Jesus Mol Peixoto[1] Weslei Viana Gabriel[1] Thiago Araújo Santos de Oliveira[2] Natalia Barros Barony[3] Carlos Antonio da Silva[4] Itavahn Alves da Silva[5] Varadarajan Seshadri[6]

Resumo

Utilizando um modelo físico de um reator RH em escala 1:7,5, simulou-se o processo de injeção de material dessulfurante na câmara de vácuo, buscando evidenciar a influência da vazão de gás e da diferença de densidade entre as fases sobre o tempo de residência e sobre o tamanho das gotas de escória arrastadas pelo metal, parâmetros essenciais para uma estimativa da taxa de dessulfuração. O aumento na densidade do fluido similar ao aço resultou em considerável prolongamento no tempo de residência e diminuição do diâmetro médio das gotas de óleo arrastadas. Para a solução salina (NaCl) como fluido de circulação, observou-se que a redução da vazão de gás aumenta o tempo de residência das partículas de dessulfurante. Tais resultados sugerem que existe uma vazão ótima de gás para alcançar maior eficiência de dessulfuração no RH, isto é, maior tempo de residência do material dessulfurante e arraste de gotas de escória de menor diâmetro.

Palavras-chave: Desgaseificador RH; Dessulfuração; Modelamento Físico.

Abstract

A 1:7.5 model of a RH degasser was employed in order to evaluate the average residence time as well as the slag droplet size distribution as a function of gas flow rate and metal slag density difference. These are parameters related to the rate of desulphurization. Increasing the density difference leads to increasing residence time and decreasing droplet size. The lower the gas flow rate the lower the circulation rate and the higher the residence time. This result suggests an optimum gas flowrate as far as desulphurization is concerned due to a combination of smaller size and higher residence time.

Keywords: Desulphurization; Physical Modelling; RH Degasser.

[1] *Eng. Metalurgista, MSc., Universidade Federal de Ouro Preto, Ouro Preto, MG, Brasil.*
[2] *Graduando em Engenharia Metalúrgica, Escola de Minas-UFOP, Ouro Preto, MG, Brasil.*
[3] *Eng. Metalurgista, Escola de Minas-UFOP, Ouro Preto, MG, Brasil.*
[4] *Eng. Metalurgista, Ph.D., Professor, (DEMET), EM-UFOP, Ouro Preto, MG, Brasil.*
[5] *Eng. Metalurgista, DSc., Professor, DEMET, EM-UFOP, Ouro Preto, MG, Brasil.*
[6] *Eng. Metalurgista, Dr. Ing., Professor Emérito, UFMG, Belo Horizonte, MG, Brasil.*

** Contribuição técnica ao 48º Seminário de Aciaria, Fundição e Metalurgia de Não-Ferrosos, parte integrante da ABM Week, realizada de 02 a 06 de outubro de 2017, São Paulo, SP, Brasil.*

5. 48º Seminário de Aciaria, Fundição e Metalurgia de Não-Ferrosos (ABM *Week* 2017)

INFLUÊNCIA DAS FORÇAS DE INTERAÇÃO LÍQUIDO/GÁS NA ANÁLISE VIA CFD DO REATOR RH

Johne Jesus Mol Peixoto[1] Weslei Viana Gabriel[1] Thiago Araújo Santos de Oliveira[2] Natalia Barros Barony[3] Carlos Antonio da Silva[4] Itavahn Alves da Silva[5] Varadarajan Seshadri[6]

Resumo

No modelamento matemático do reator RH, a penetração do gás no líquido na perna de subida é o fator chave para determinar a distribuição do gás injetado e obter uma previsão confiável da taxa de circulação do líquido entre a câmara de vácuo e a panela. Neste trabalho, através de simulações numéricas via CFX, investigou-se o efeito das forças de arraste, de sustentação, de lubrificação da parede, dispersão turbulenta e de massa virtual. A distribuição do gás na perna de subida e os valores de taxa de circulação previstos via CFX foram validados com resultados de modelo físico. A melhor predição da penetração do gás e da taxa de circulação foi obtida na simulação com incorporação da força de massa virtual e da força de sustentação, cujos coeficientes foram iguais a 0,3 e 0,1, respectivamente. A força de lubrificação da parede deve ser utilizada para evitar o acúmulo de gás próximo às paredes da perna, mas possui efeito desprezível sobre a taxa de circulação. Os resultados do modelo físico e da simulação matemática se ajustaram com a equação de Kuwabara para cálculo da taxa de circulação.

Palavras-chave: CFD; Forças de não-arraste; Modelamento Físico; Desgaseificador RH.

Abstract

Evaluation of gas penetration in the RH up leg is of primary importance as far as mathematical modeling of gas distribution and circulation features are regarded. In this study CFX has been used in order to assess the effects of drag force, lift force, wall lubrication force and turbulent dispersion force on gas penetration and circulation rate. The predicted radial gas distribution and liquid circulation have been validated against experimental data of physical model. The simulation results with incorporation of the virtual mass force coefficient of 0.3 and the lift force coefficient of 0.1 showed better predictions of gas distribution at the up-leg and circulation rate. In order to avoid the gas concentration near the up-leg walls, the wall lubrication force needs to be incorporated in the simulation, but it has a negligible effect on the circulation rate. The experimental data and values predicted fit to the Kuwabara equation for circulation rate.

Keywords: CFD; Non-drag Forces; Physical Modelling; RH Degasser.

[1] *Eng. Metalurgista, MSc., Universidade Federal de Ouro Preto, Ouro Preto, MG, Brasil.*
[2] *Graduando em Engenharia Metalúrgica, Escola de Minas-UFOP, Ouro Preto, MG, Brasil.*
[3] *Eng. Metalurgista, Escola de Minas-UFOP, Ouro Preto, MG, Brasil.*
[4] *Eng. Metalurgista, Ph.D., Professor, (DEMET), EM-UFOP, Ouro Preto, MG, Brasil.*
[5] *Eng. Metalurgista, DSc., Professor, DEMET, EM-UFOP, Ouro Preto, MG, Brasil.*
[6] *Eng. Metalurgista, Dr. Ing., Professor Emérito, UFMG, Belo Horizonte, MG, Brasil.*

* Contribuição técnica ao 48º Seminário de Aciaria, Fundição e Metalurgia de Não-Ferrosos, parte integrante da ABM Week, realizada de 02 a 06 de outubro de 2017, São Paulo, SP, Brasil.

6. 47º Seminário de Aciaria - Internacional (ABM *Week* 2016)

TAXA DE CIRCULAÇÃO E PREVISÃO DO COMPORTAMENTO METAL/ESCÓRIA EM MODELO FÍSICO DE UM REATOR RH *

Johne Jesus Mol Peixoto[1] Natália Barros Barony[2] Weslei Viana Gabriel[1] Carlos Antonio da Silva[3] Itavahn Alves da Silva[4] Varadarajan Seshadri[5]

Resumo

No reator RH, a otimização do fluxo recirculatório de aço entre a câmara de vácuo e a panela é a chave para promover as reações de refino. Neste trabalho, foram utilizados água e solução de cloreto de zinco ($ZnCl_2$) como fluido similar ao aço para investigar a taxa de circulação no modelo a frio de um reator RH em escala 1:7,5. A taxa de circulação foi determinada utilizando

o método de pontes de *Strain Gages.* A técnica PIV foi utilizada de modo a calibrar e validar os resultados. O aumento da vazão de gás de 30l/min para 120l/min resultou na elevação da taxa de circulação para ambos os fluidos. Cálculos preliminares demonstraram que há grande diferença nas condições de arraste de escória entre os sistemas água/óleo e $ZnCl_2$/óleo.
Palavras-chave:Modelamento Físico; PIV; Desgaseificador RH.

Abstract

In RH reactor, the optimization of the steel circulatory flow between the vacuum chamber and the ladle is the key factor to promote the refining reactions. In this work, water and zinc chloride solution ($ZnCl_2$) were employed as similar fluid to steel in order to investigate the circulation rate in a cold model of a RH reactor built on 1:7.5 scale. The circulation rate was determined using the method of strain gage bridges. The PIV technique was used to calibrate and validate the results. With an increasing on gas flow rate from 30l/min to 120l/min, the recirculation flow rate increased for both fluids (Water and $ZnCl_2$). Initial calculations showed that there is a great difference in the conditions of slag dragging between water/oil and $ZnCl_2$/oil systems.
Keywords: Physical Modelling; PIV; RH Degasser.

[1] *Eng. Metalurgista, Msc., Universidade Federal de Ouro Preto (UFOP), Ouro Preto, Minas Gerais, Brasil.*
[2] *Graduanda em Engenharia Metalúrgica, Escola de Minas, Universidade Federal de Ouro Preto (UFOP), Ouro Preto, Minas Gerais, Brasil.*
[3] *Eng. Metalurgista, Ph.D., Professor, DEMET, Escola de Minas, Universidade Federal de Ouro Preto (UFOP), Ouro Preto, Minas Gerais, Brasil.*
[4] *Eng. Metalurgista, DSc., Professor, DEMET, Escola de Minas, Universidade Federal de Ouro Preto (UFOP), Ouro Preto, MG, Brasil.*
[5] *Eng. Metalurgista, Dr. Ing., Professor Emérito, Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG), Belo Horizonte, Minas Gerais, Brasil.*

** Contribuição técnica ao 47º Seminário de Aciaria – Internacional, parte integrante da ABM Week, realizada de 26 a 30 de setembro de 2016, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.*