

## MoSSoFreez

Process Modeling of Slag Solidification – Formation of Freeze Lining in Pyro-metallurgical Furnaces

<b>Programm / Ausschreibung</b>	Bridge, Brückenschlagprogramm, Ausschreibung Bridge 1 (GB 2021 KP)	<b>Status</b>	laufend
<b>Projektstart</b>	01.10.2021	<b>Projektende</b>	30.09.2024
<b>Zeitraum</b>	2021 - 2024	<b>Projektlaufzeit</b>	36 Monate
<b>Keywords</b>	slag; solidification; freeze lining; pyro-metallurgy; modelling		

### Projektbeschreibung

Motivation und Ziel: Die Erstarrung von Schlacke ist ein wichtiges Phänomen für die Konstruktion und Auslegung von grobkeramischen Auskleidungen für Öfen vieler pyrometallurgischer Prozesse. Um das Feuerfestmaterial, mit dem die Reaktorinnenwand ausgekleidet wird, vor Korrosion durch geschmolzene und chemisch aggressiv wirkende Schlacke zu schützen, soll durch geeignete Maßnahmen eine feste Schlackenschicht, die als „Freeze lining“ bezeichnet wird, an der Reaktorinnenwand erstarren. Damit werden Diffusionsprozesse verlangsamt und das Feuerfestmaterial vor Auflösung in der Schlacke als auch vor Abrasion geschützt. Hauptziel der erstarrten Schlackenschichten besteht in der Verlängerung der Auskleidungslebensdauer, somit tragen diese Schichten indirekt zur Einsparung von CO<sub>2</sub> Emissionen als auch zu verbesserter Nachhaltigkeit eingesetzter Rohstoffe in der Feuerfestindustrie bei. Der Wärmefluss durch die Reaktorwand muss genau kontrolliert werden, um die erstarrten Schlackenschichten aufrechtzuerhalten/zu stabilisieren. Die Motivation dieses Projekts besteht darin, ein numerisches Modell zu erstellen, um den Wärmeübergang durch die Reaktorwand unter Berücksichtigung der Bildung von erstarrter Schlacke zu simulieren. Die Hauptaufgabe besteht darin, sich mit der Erstarrungsfront von fester Schlacke an der Reaktorwand und ihrer Interaktion mit der flüssigen Schlacke zu befassen.

Stand der Technik: Obwohl die Wärme- und Strömungsfelder in verschiedenen pyrometallurgischen Reaktoren mit numerischen Methoden simuliert wurden, befindet sich die Modellierung von pyrometallurgischen Prozessschlacken und deren Erstarrung noch im Anfangsstadium. Die neuesten Erkenntnisse über die Bildung fester Schlackenschichten wurden durch sogenannte Kühlfinger-Experimente gewonnen. Die Experimente haben gezeigt, dass bei einer niedrigen Abkühlungsgeschwindigkeit die Strukturen der Schlacke im erstarrten Zustand denen einiger Metalllegierungen sehr ähnlich sind, z.B. facettierte/dendritische (äquiaxiale oder kolumnare) Kristalle. Das Wissen über die Erstarrung von Metalllegierungen und die verfügbaren numerischen Modelle sind viel ausgereifter als jene für die betrachteten Prozessschlacken. Unter den existierenden Erstarrungsmodellen (Phasenfeld, zelluläre Automaten usw.) für Metalllegierungen, ist das auf dem Volume-Average basierende Modell, das vielversprechendste für die Entwicklung von Schlackenerstarrungsmodellen. Dieses Modell hat auch die beste Eignung für technische Gussteile gezeigt. In den vergangenen 2 Jahrzehnten wurden bedeutende Fortschritte vollbracht, einschließlich der Beiträge der derzeitigen Anwendung. Das Modell für die Erstarrung von Schlacken sollte auf dieser Basis entwickelt werden.

Die Methoden: Ein mixture-continuum Erstarrungsmodell, das ursprünglich für die Erstarrung von Me-tallegierungen entwickelt wurde, soll für die Schlackenerstarrung angepasst werden. Referenzschlacken (FeO-SiO<sub>2</sub>-Ca) werden je nach Interesse des Industriepartners definiert. Es werden Laborexperimente (Kühlfinger) durchgeführt und die Strukturen/Konzentrationen im erstarrten Zustand analysiert. Das numerische Modell wird im Vergleich zum oben genannten Experiment oder zu den veröffentlichten experimentellen Ergebnissen evaluiert/verbessert. Als letzter Schritt soll das Modell für Industrieprozesse unter Berücksichtigung des Wärmeübergangs durch die Reaktorwand und während der der Bildung einer festen Schlackenschicht erweitert werden.

Erwartete Ergebnisse und Neuheiten: Es soll ein neuartiges Modell entwickelt werden, das die Bildung von festen Schlackenschichten durch Erstarrung und dessen Auswirkung auf den Wärmeübergang durch die Feuerfestmaterialien der Reaktorwand berücksichtigt. Neue Erkenntnisse über den Entstehungsmechanismus der erstarrten Schichten sollen gewonnen werden. Das experimentell verifizierte Schlackenerstarrungsmodell soll zur Optimierung der Konstruktion von pyrometallurgischen Reaktoren erweitert werden.

Das Projekt wird vom Lehrstuhl für Modellierung und Simulation metallurgischer Prozesse der Montanuniversität Leoben und dem Institut für Sustainable Materials Processing and Recycling der KU Leuven unter direkter Beteiligung der Industrie als Co-Sponsor (RHI Magnesita) durchgeführt.

## **Abstract**

Motivation and goal: Slag solidification is an important topic for the furnace/vessel design of many pyro-metallurgical processes. In order to protect the refractory material, which is used to line the furnace wall, from corrosion by the high-temperature and chemically aggressive molten slag, a solid layer of slag, called freeze lining, is expected to solidify on the furnace inner wall. The heat flux through the furnace wall must be precisely controlled to maintain/stabilize the freeze lining. The motivation of this project is to establish a numerical model to simulate the heat transfer through the furnace wall by considering the formation of freeze lining. The main challenge to the model development is to deal with the solidification front of the freeze lining and its dynamic response to the flow of the molten slag.

State of the art: Although numerical methods were tried in order to simulate the thermal and flow fields in different pyro-metallurgical furnaces, a modeling study of the freeze lining is still in its infant stages. The state-of-the-art knowledge about the formation of freeze lining, in similar conditions to that of the pyro-metallurgical furnace, was obtained by means of a so-called cooled finger experiment. The experiment has shown that at the low cooling rate, the as-solidified structures of the slag are very similar to those of certain metal alloys, e.g. facet/dendritic equiaxed or columnar dendritic crystals with some precipitates in the interdendritic region. Knowledge about the solidification of metal alloys and available numerical models is much more developed than that which was obtained for the slags. Among the existing solidification models (phase field, cellular automata, etc.) for metal alloys, the volume-average based model is the most promising, and is applicable for castings on an engineering scale. In the past two decades significant achievements, including contributions of the current applicant, have been made. The model for slag solidification should be developed on this basis.

Methods: A mixture continuum solidification model, which was originally developed for solidification of metal alloys, will be adapted for slag solidification. Reference slags (FeO-SiO<sub>2</sub>-Ca) will be defined according to the interest of the industry partner. Laboratory experiments (cooled finger) will be performed, and the as-solidified structures/concentrations will be

analyzed. The numerical model will be evaluated/improved against the aforementioned experiment or the as-published experimental results. As a final step, the model will be extended for industry processes considering the heat transfer through the furnace wall during the formation of freeze lining.

Expected results and novelties: A novel model considering the formation of freeze lining by solidification and its effect on heat transfer through the refractory of the furnace wall will be developed. New knowledge about the formation mechanism of the freeze lining should be obtained. The experimentally verified slag solidification model is to be extended in order to optimize the industry furnace design.

The project will be carried out between a numerical modeling group (Modeling and Simulation of Metallurgical Processes, University of Leoben) and an experiment group (Sustainable Materials Processing and Recycling, KU Leuven), with direct involvement of industry as co-sponsor (RHI Magnesita).

### **Projektkoordinator**

- Montanuniversität Leoben

### **Projektpartner**

- Katholieke Universiteit Leuven
- RHI Magnesita GmbH