# MODELAMENTO BIFÁSICO E SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DA AUTO-REDUÇÃO EM FORNO DE CUBA

José Adilson de Castro <sup>1</sup> José Carlos D'Abreu <sup>2</sup> Alexandre José da Silva <sup>1</sup>

#### Resumo

Os processos baseados em aglomerados auto-redutores estão atingindo escala industrial. Sua principal vantagem é a utilização de aglomerados auto-redutores curados a frio e obtidos a apartir de uma mistura de finos de minério ou resíduos e um agente redutor. No presente trabalho um modelo é proposto para simular a zona superior de um reator que opera com aglomerado auto-redutor. O modelo baseia-se em balanços diferenciais de massa, momentum, energia e espécies químicas para as duas fases, sólido e gás, presentes na região superior do forno. A solução numérica com base na técnica de volumes finitos fornece os campos tridimensionais de velocidade, pressão, temperatura e composição. O balanço de massa de cada uma das espécies químicas inclui as reações químicas entre as fases. O modelo fornece também detalhes da cinética das principais reações químicas no interior do reator e essas informações podem ser utilizadas para otimizar a operação do processo.

Palavras-chave: Auto-redução; Simulação; Modelamento matemático.

# TWO PHASE MODEL AND COMPUTATIONAL SIMULATION OF SELF REDUCTION IN SHAFT FURNACES

## Abstract

The self reducing process is a technology which has achieved maturity and industrial scale. Its main advantages include the use of cold bonded self-reducing agglomerates obtained from a mixture of fine ore or residues and a reducing agent. In present work, a model to simulate the upper zone of the reactor is proposed. The model is based on the differential balances of mass, momentum, energy and chemical species of solid and gas phases present in the upper shaft of the reactor. The numerical solution based on the finite volumes technique gives as results the velocity, temperature, pressure and composition fields of both gas and solid phases. The results include some details of the main chemical reactions in the reactor and their kinetics. This information is useful to optimize the process operation and test new tecnologies.

Key words: Self-reducing agglomerates; Model; Shaft furnace.

## 1 INTRODUÇÃO

Nas últimas décadas, a procura por um processo ambientalmente sustentável e livre da utilização do coque para a produção de ferro tem se tornado crescente. Dentre as possibilidades, desponta a redução de misturas minério/carvão, que tem sido objeto de diversas investigações. A indústria de aço, no Brasil e em vários países, busca o desenvolvimento de um novo processo de produção de aço que não inclua as etapas da produção de coque e a aglomeração do minério de ferro. Por diversas razões tecnológicas, esses processos estão se tornando um ponto estratégico para o desenvolvimento da siderurgia mundial. Dentre as mais relevantes, está o fato que a indústria do aço em vários países necessita ampliar a produção e encontra sérias restrições do ponto de vista ambiental. O processo de coqueificação, atualmente praticado na maioria das siderúrgicas é altamente poluidor, o que demanda altos investimentos em equipamentos de tratamento dos resíduos gerados no processo. Nesse panorama, a legislação ambiental de diversos países desenvolvidos tem imposto diversas restrições e em alguns casos as coquerias em final de campanha têm sido desativadas. Outro aspecto para a indústria nacional são os custos de produção de coque, em geral dependentes do custo de matéria-prima importada, ao mesmo tempo em que a construção de novas coquerias representa um investimento com custo de capital muito elevado. Somando-se a isto, a China, um tradicional fornecedor mundial de coque, tem elevado a sua demanda interna deste insumo, o que elevou de maneira significativa o preço do coque no mercado

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Pós-Graduação em Engenharia Metalúrgica-EEIMVR-UFF, Av. dos Trabalhadores 420 – Vila Sta. Cecília – 27255-125 – Volta Redonda – RJ adilson@metal.eeimvr.uff.br, ajs@metal.eeimvr.uff.br

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Pós-Graduação em Engenharia Metalúrgica-PUC-RJ, Rua Marquês de São Vicente, 225, Rio de Janeiro – 22453-900 www.puc-rio.br

internacional. Surge, portanto, a necessidade do desenvolvimento de novos processos ou modificações nos processos atualmente em uso para a produção de gusa. O processo Tecnored, o único brasileiro, apresenta vantagens comparativas relevantes, pois utiliza aglomerados autoredutores, curados a frio, usualmente produzidos a partir de uma mistura de finos de minério de ferro ou resíduos e um agente carbonoso que pode estar in natura ou ser um derivado ou subproduto de outros processos. Os aglomerados são em geral curados em secadores ou curadores especiais, objetivando conferir-lhes propriedades adeguadas ao manuseio e utilização no processo de redução. Os reatores Tecnored possuem caracteristicas especiais, tais como alimentação lateral de combustíveis, evitando reação de solution loss na cuba superior e queima secundária, que permite um melhor aproveitamento da energia no processo. Do ponto de vista dos fenômenos que ocorrem no interior do reator, o forno pode ser dividido em três partes fundamentais: 1) a cuba superior, onde ocorrem a auto-redução e os fenômenos de troca de calor e momentum entre o gás ascendente e o sólido descendente, 2) a zona de amolecimento e fusão e 3) a cuba inferior, onde ocorrem a fusão, escorificação, incorporação de carbono, silicio e outros elementos de liga no gusa, além da combustão do coque e os fenômenos de troca de calor e momentum em um sistema de 4 fases: gás, sólido, escória e gusa. O estudo dos fenômenos fundamentais envolvidos na redução de misturas de minério e finos de carvões tem sido realizado por diversos pesquisadores.<sup>(1,2)</sup> O comportamento de misturas minério/carvão sob várias condições de auto-redução é de fundamental importância no desenvolvimento do processo.<sup>(1,2)</sup> Por outro lado, os fenômenos que ocorrem na cuba inferior do processo são muito similares àqueles encontrados no alto-forno, facilitando a sua análise por se tratar de fenômenos conhecidos.<sup>(3-6)</sup>

Na tentativa de desenvolver modelos matemáticos que representem de maneira acurada a cinética das diversas reações, bem como para elucidar os principais fenômenos de troca de calor e massa, D'Abreu e colaboradores<sup>(1,2)</sup> realizaram diversos experimentos para determinar o comportamento de pelotas auto-redutoras e briquetes em processos industriais de redução direta. Outros trabalhos direcionados ao modelamento deste fenômeno podem ser encontrados na literatura.<sup>(7,8)</sup> Neste trabalho é apresentado um modelamento conciso de tais fenômenos, focandose apenas a cuba superior. Em desenvolvimentos futuros um modelo para a simulação do processo como um todo deverá ser abordado.

## 2 MODELAMENTO MATEMÁTICO

O modelo da cuba superior do forno consiste na formulação dos fenômenos que ocorrem no interior do reator admitido como um sistema bifásico interagindo pela transferência de massa, momentum e energia. O fenômenos podem ser formulados em termos de equações de transporte similares e que podem ser descritas por uma forma geral dada pela Eq.(1). Nesta equação, os chamados termos fontes,  $S_{\rm esc}$  representam as possíveis interações de uma fase com a outra, através da troca de momentum (forças entre as fases), energia (calor) e massa(reações químicas). O coeficiente  $\Gamma$  assume diferentes significados conforme a equação a ser resolvida. Em balanços de massa para as espécies químicas ele representa difusividades, nas equações de momentum, viscosidades, e nos balanços de energia  $\Gamma$  representa a condutividade térmica da fase considerada. Para maiores detalhes sobre a formulação multifásica empregada veja, por exemplo, Castro, Nogami e Yagi.<sup>(3)</sup> Os balanços representados pela Eq(1) formam um sistema de equações diferenciais de segunda ordem resolvido pelo método de volumes finitos. Os modelos de transferência de momentum e energia foram coletados da literatura e adaptados para as condições do forno em trabalhos anteriores.(3-6)

$$\frac{\partial(\rho_i \varepsilon_i \phi_{i,k})}{\partial t} + div(\rho_i \varepsilon_i \vec{V}_i \phi_{i,k}) = div(\Gamma_{\phi_{i,k}} grad(\phi_{i,k})) + S_{\phi_{i,k}}$$
(1)

.

As fases consideradas neste modelo específico foram: a fase sólida, que compreende o aglomerado auto-redutor e a fase gasosa corresponde ao sopro de ar e gases gerados devido as diversas reações químicas. Na Tabela 1 são apresentadas todas as espécies químicas consideradas em cada fase.

O modelo considera as possíveis reações, sendo as principais: redução da carga metálica pelo CO e H<sub>2</sub>, sollution loss, combustão do carbono de maneira parcial ou total. As reações têm a cinética influenciada pela temperatura reinante e composição das fases. A transferência de massa inclui as mudanças de fases tais como vaporização ou condensação da umidade. Neste trabalho, utilizam-se modelos adicionais de reações para o carbono no interior do briguete/pelota e consegüente redução das mesmas. No interior da pelota/briquetes ocorre, principalmente no primeiro estágio, a liberação dos voláteis e posterior combustão via CO2 gerado no interior como resultado da redução dos óxidos. Simultaneamente, ocorrem as reações de "sollution loss" e "water gas" devido à presença do carbono em contato com atmosfera rica em  $CO_2$  e  $H_2O_1$  ambos resultantes da redução ou liberação de umidade no interior da pelota. Embora se admita que as reações no estado sólido possam desempenhar papel importante no estagio inicial, este mecanismo foi desconsiderado no presente modelo. Entretanto as reações na fase gasosa como "gas shift" desempenham papel importante na

Tabela 1. Espécies químicas nas fases sólida e gasosa.

Fases	Espécies químicas							
Gás	CO, CO <sub>2</sub> , O <sub>2</sub> , H <sub>2</sub> , H <sub>2</sub> O, N <sub>2</sub> , SiO							
Sólido	Briquetes auto-redutores	C, Volateis, SIC, Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> , Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub> , FeO, Fe, CaO, Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> , MgO, SiO <sub>2</sub> , H <sub>2</sub> O, ganga						

Tecnologia em Metalurgia e Materiais, São Paulo, v.2. n.4, p. 45-50, abr.-jun. 2006

homogeneização da fase gasosa, tendo sido considerada neste modelamento. A Tabela 2 apresenta a composição inicial do aglomerado redutor, onde se observa uma proporção de carbono relativamente alta e baixa proporção de voláteis, correspondentes a uma típica carga do processo tecnored. Os quadros 1 a 4 a seguir resumem as principais formulações das reações químicas e valores de constantes utilizadas no modelo.

## Reação "Sollution loss"

$$\begin{split} & \textbf{Quadro 1}_{i} \quad | \quad C(pelota/briquetes) + CO_{2}(g) \rightarrow 2CO(g) \\ & R_{2_{i}} = \frac{\rho_{g} \omega_{CO_{2}_{i0}}}{M_{CO_{1}}} \left( \frac{1}{A_{i}k_{\text{film},CO_{1}}} + \frac{1}{\eta k_{10_{i}}} \right)^{-1} \\ & k_{10_{i}} = \frac{k_{1}}{1 + k_{2}P_{CO} + k_{3}P_{CO_{2}}} \rho_{1}\varepsilon_{i}\omega_{i} 82.056 \times 10^{-3}T_{g}; \quad k_{1} = \frac{1}{60}\exp\left(19.875 - \frac{66350}{1.987T_{i}}\right); \\ & k_{2} = \exp\left(-6.688 + \frac{21421}{1.987T_{i}}\right); \quad k_{3} = \exp\left(31.615 - \frac{88168}{1.987T_{i}}\right) \\ & P_{\omega_{j}} = \frac{82.056 \times 10^{-3} \rho_{g}T_{g}\omega_{j}}{M_{\omega_{j}}}; \quad (j = CO, CO_{2}); \quad k_{\text{film},CO_{2}} = D_{CO_{2},N_{2}}^{T_{\text{even}}} \frac{Sh_{i}}{d_{i}\varphi_{i}}; \quad A_{i} = \frac{6\varepsilon_{i}}{d_{i}\varphi_{i}} \\ & \eta = \left[\frac{d_{i}}{6}\sqrt{\frac{k_{10_{i}}\delta_{i}}{\zeta_{j}D_{O_{2},N_{2}}}}\right]^{-1} \left\{\left[\tanh\left(\frac{d_{i}}{6}\sqrt{\frac{k_{10_{i}}\delta_{i}}{\zeta_{j}D_{O_{2},N_{2}}}}\right)\right]^{-1} - \left[\frac{d_{i}}{2}\sqrt{\frac{k_{10_{i}}\delta_{i}}{\zeta_{j}D_{O_{2},N_{2}}}}\right]^{-1}\right\}; \quad T_{\text{ave}} = \frac{T_{g} + T_{i}}{2} \\ & \delta_{\text{pelota}} = 1 \end{split}$$

Reação "Water gas"

Tecnologia em Metalurgia e Materiais, São Paulo, v.2. n.4, p. 45-50, abr.-jun. 2006

Reação "Water Shift"

$$\begin{split} & \begin{array}{l} \begin{array}{l} & \end{array} \\ & \end{array} \\ & \end{array} \\ & \end{array} \\ & R_{12} = \frac{1000}{\left(101325\right)^2} \, \mathcal{E}_{s} \left(f_{\text{oce}} + f_{\text{sinter}} + f_{\text{pellets}}\right) k_{12} \left(P_{\text{CO}} P_{\text{H}_{2}\text{O}} - \frac{P_{\text{CO}_{2}} P_{\text{H}_{2}}}{K_{12}}\right) \\ & P_{\omega_{j}} = \frac{82.056 \times 10^{-3} \, \rho_{g} T_{g} \omega_{j}}{M_{\omega_{j}}}; \ K_{12} = \exp \left(-3.5414 + \frac{3863.7}{T_{i}}\right) \\ & k_{12} = \alpha k_{1} + \left(1 - \alpha\right) k_{3} \quad \text{for} \quad \left(P_{\text{CO}} P_{\text{H}_{2}\text{O}} - \frac{P_{\text{CO}_{2}} P_{\text{H}_{2}}}{K_{12}}\right) \geq 0 \\ & k_{12} = \left[\alpha k_{2} + \left(1 - \alpha\right) k_{4}\right] K_{12} \quad \text{for} \quad \left(P_{\text{CO}} P_{\text{H}_{2}\text{O}} - \frac{P_{\text{CO}_{2}} P_{\text{H}_{2}}}{K_{12}}\right) \geq 0 \\ & k_{12} = \left[\alpha k_{2} + \left(1 - \alpha\right) k_{4}\right] K_{12} \quad \text{for} \quad \left(P_{\text{CO}} P_{\text{H}_{2}\text{O}} - \frac{P_{\text{CO}_{2}} P_{\text{H}_{2}}}{K_{12}}\right) < 0 \\ & k_{1} = 93.3 \exp \left(\frac{-7.32}{8.3146 \times 10^{-3} T_{g}}\right); \ k_{2} = 136 \exp \left(\frac{-7.75}{8.3146 \times 10^{-3} T_{g}}\right) \\ & k_{3} = 1.83 \times 10^{-5} \exp \left(\frac{7.84 \times 10^{-3}}{8.3146 \times 10^{-3} T_{g}}\right); \ k_{3} = 8.83 \times 10^{-2} \exp \left(\frac{4.56}{8.3146 \times 10^{-3} T_{g}}\right) \\ \end{array} \end{split}$$

### Reações de volatilização

Quadro 4  
volateis (carvão da pelota/bri quetes) + 
$$\alpha_5 \text{CO}_2(\mathbf{g}) \rightarrow \alpha_6 \text{CO}(\mathbf{g}) + \alpha_7 \text{H}_2(\mathbf{g}) + \alpha_8 \text{N}_2(\mathbf{g})$$
  
 $R_1 = 23.6 \left(\frac{\mu_g \varepsilon_t}{\rho_g k_t}\right)^{1/4} \left(\frac{\varepsilon_t}{k_t}\right) \min \left(\varepsilon_{pc} \rho_{pc} \omega_{\text{VM}_{pc}}, \varepsilon_g \rho_g \omega_{\text{CO}_2} \frac{M_{\text{VM}}}{\alpha_5 M_{\text{CO}_2}}\right) k_t = \left(0.03 \left| \vec{U}_g \right| \right)^2; \ \varepsilon_t = \frac{k_t^{0.5}}{0.01}$   
Os coeficientes estequiométricos são determinados como segue:

$$\begin{split} \delta &= \frac{\omega_{c_{\rm VM}}}{M_{\rm c}} + \frac{\omega_{\rm H_{VM}}}{M_{\rm H}} + \frac{\omega_{\rm O_{VM}}}{M_{\rm O}} + \frac{\omega_{\rm N_{VM}}}{M_{\rm N}} \\ \alpha_{\rm 5} &= \frac{\omega_{c_{\rm VM}}}{\delta M_{\rm c}} - \frac{\omega_{\rm O_{VM}}}{2\delta M_{\rm O}}; \ \alpha_{\rm 6} = \frac{\omega_{c_{\rm VM}}}{\delta M_{\rm c}} + \alpha_{\rm 5}; \ \alpha_{\rm 7} = \frac{\omega_{\rm H_{VM}}}{\delta M_{\rm H}}; \ \alpha_{\rm 8} = \frac{\omega_{\rm N_{VM}}}{2\delta M_{\rm N}} \end{split}$$

## **3 RESULTADOS/DISCUSSÕES**

Os principais resultados são apresentados na forma de campos tridimensionais no domínio de cálculo e resultados globais que descrevem os principais parametros operacionais serão apresentados na forma de tabelas:

O campo de temperaturas da fase gasosa é apresentado na Figura 1. Observa-se uma elevação considerável da temperatura do gás na região restrita às ventaneiras secundárias devido à injeção de oxigênio que promove a combustão



Figura 1. Campo de temperatura para o gás na cuba superior do forno

Tecnologia em Metalurgia e Materiais, São Paulo, v.2. n.4, p. 45-50, abr.-jun. 2006

secundária e eleva a temperatura. A rápida troca de calor com o sólido descendente faz com que a temperatura do gás decresça rapidamente, sobretudo na região central do forno onde o fluxo de sólido descendente é maior.

Na Tabela 2 é apresentada a composição química da mistura do aglomerado auto-redutor onde se observa uma proporção de carbono relativamente alta e baixa proporção de voláteis, que corresponde a uma típica carga dos processos de auto-redução. Observa-se a alta produtividade atingida pelo processo com relativo grau de metalização, o que também é uma característica importante dos processos de auto-redução em cuba.

Ao contrario do que se possa imaginar a distribuição da composição da carga metálica no interior da cuba é bastante heterogênea devido aos efeitos da distribuição da temperatura do gás e composição. Nas Figuras 2a e 2b os campos de composição da magnetita e wustita são apresentados. Observa-se alto grau de redução na região periférica devido ao fluxo gasoso periférico e a



Figura 2. Evolução da redução da carga metálica no interior da cuba do forno de auto-redução

Tabela 2. Composição do aglomerado auto-redutor[%] e principais parâmetros do processo

С	volateis	Fe2O3	Fe3O4	FeO	Fe	H2O	gan	68	SIC2	AI20	23	MgO	CaO
14,8	0.5	66,2	-	1,1	-	4,4	-		2,8	2,7		4,0	4.0
Carga[kp/t] Injeção secundária[Nm3/t]		Pro	Produtividade[t/m3/d]				Temp. Topo("C)		Metalização[%]				
1448		1032		42,	42,1				721,2			75	

REFERÊNCIAS

- 1 D'ABREU, J.C.; MARTINS, K. M. and NOLDIN JUNIOR, J.H. The iron morphology of self-reducing briquettes.ln: BRAZIL-JAPAN SYMPOSIUM ON DUST PROCESSING-ENERGY-ENVIRONMENT IN METTALLURGICAL INDUSTRIES, 4., 2002, São Paulo. São Paulo : EPUSP, 2002. p. 89-102.
- 2 NOLDIN JÚNIOR, J.H. Contribuição ao estudo da cinética de redução de briquetes auto-redutores. 2002. 143 p. Tese (Mestrado em Engenharia Metalúrgica) – Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2002.
- 3 CASTRO, J.A.; NOGAMI, H.; YAGI, J. three-dimensional multiphase mathematical modeling of the blast furnace based on the multifluid model. **Isij International**, v 42, n.1, p. 44-52, 2002.
- 4 CASTRO, J. A.; BALTAZAR, A. W. S.; SILVA, A. J. A three dimensional three phase reactive flow for simulating the pulverized coal injection into the channel of the blast furnace raceway. **WIT Transactions on Engineering Sciences**, v 50, n.3, p. 207-216, Nov. 2005. Disponível em: www.witpress.com
- 5 CASTRO, J. A.;SILVA, A. J.; NOGAMI, H.; YAGI, J. Simulação computacional da injeção de carvão pulverizado nas ventaneiras de mini altos-fornos. Tecnología em Metalurgia e Materiais, São Paulo, v.1, n.2, p. 59-62, out.-dez. 2004.

Tecnologia em Metalurgia e Materiais, São Paulo, v.2. n.4, p. 45-50, abr.-jun. 2006

composição do gás rico em CO<sub>2</sub> que promove gaseificação a CO e conseqüente redução da carga sólida. É importante salientar que embora no interior a composição da carga sólida seja bastante heterogênea, ao deixar a cuba superior o aglomerado praticamente está com um grau de metalização alto, o que restitui a homogeneidade do mesmo.

## 4 CONCLUSÕES

Neste trabalho foi desenvolvido um modelo capaz de simular a cuba superior do forno de auto-redução. O modelo mostrou-se capaz de representar de forma satisfatória os principais fenômenos relacionados à transferência de calor, momentum e cinética química. Resultados de simulação mostram que praticamente toda a carga metálica é reduzida na cuba superior. As ventaneiras da cuba superior ao injetar ar frio possibilitam a pós-combustão do CO proveniente da cuba inferior e fornece  $CO_2$ e Calor para a gaseificação do carbono no interior do aglomerado, acelerando a cinética de redução da carga metálica. O tempo de residência médio do sólido na cuba superior foi calculado em torno de 36 min e mesmo assim praticamente todos os óxidos metálicos foram reduzidos.

#### Agradecimentos

Os autores agradecem ao **CNPq** por incentivar e fomentar o desenvolvimento tecnológico nacional, através de projeto concedido no âmbito do Edital Universal 2003. (proc: 477240-03-0)

- 6 CASTRO, J.A.; SILVA, A. J.; SALGUEIRO, E.L.; NOGAMI, H.; YAGi,J. Investigation of the blast furnace top gas recycling by using one stage of reforming and injection into the blast furnace shaft. In: BRAZIL-JAPAN SYMPOSIUM ON DUST PROCESSING-ENERGY-ENVIRONMENT IN METTALLURGICAL INDUSTRIES, 4., 2002, São Paulo. São Paulo : EPUSP, 2002. p. 17-28.
- 7 SUN, S.; LU, W. K. A theoretical investigation of Kinetics and mechanisms of iron ore in na ore/coal composite. Isij International, v. 39, n. 2, p. 123-129, 1999.
- 8 SUN, S.; LU, W. K. Building of a mathematicalmodel for the reduction of iron ore in ore/coal composites. Isij International, v. 39, n. 2, p 130-138, 1999.

Recebido em: 19/05/06 Aceito em: 06/07/06 Proveniente de: CONGRESSO ANUAL DA ABM, 60., 2005, Belo Horizonte, MG. São Paulo : ABM, 2005.