

ESTUDO NUMÉRICO DA INFLUÊNCIA DE PROPRIEDADES DE AMOLECIMENTO E FUSÃO NA CINÉTICA DE FORMAÇÃO DE (CAFE₂O₄-CA₂FE₂O₅) NA SINTERIZAÇÃO DE MINÉRIO DE FERRO

José Adilson de Castro¹
Alexandre Bôscaro França²
Vagner Silva Guilherme³
Yasushi Sazaki⁴

Resumo

O presente trabalho apresenta um modelo matemático capaz de prever a influência das propriedades de amolecimento e fusão da mistura de matérias primas na cinética de formação dos constituintes cálcio ferrita e dicálcio ferrita na sinterização de minério de ferro. O modelo é baseado na solução simultânea das equações de transporte de *Momentum*, energia e espécies químicas formuladas para sistemas multifásico e multicomponente, acoplado à cinética de reações químicas e transformações de fases que ocorrem no interior da esteira de sinterização. A solução numérica é obtida utilizando-se o método de volumes finitos validado com resultados de monitoramento de uma planta industrial de sinterização. Os resultados indicam que as temperaturas de início de amolecimento, contração volumétrica e intervalo de fusão são os principais parâmetros a serem controlados visando obtenção de formação de fase líquida que confere resistência mecânica e redutibilidade adequadas ao sínter. Neste estudo confirma-se que matérias primas com alto ponto de amolecimento e fusão combinado com alta contração volumétrica e grande intervalo de temperatura da zona pastosa podem diminuir até 20% o volume de fase líquida formada e, conseqüentemente, diminuir em mais de 30% a formação de cálcio ferritas o que deterioraria consideravelmente as propriedades finais do sínter.

Palavras-chave: Sinterização; Minério de ferro; Modelagem matemática; Cinética de formação.

NUMERICAL EVALUATION OF THE EFFECTS OF SOFT-MELTING PROPERTIES ON THE KINETIC OF (CAFE₂O₄-CA₂FE₂O₅) FORMATION IN THE IRON ORE SINTERING PROCESS

Abstract

This paper presents a mathematical model able to predict the influence of soft-melting properties of the blend of raw materials used in the iron ore sintering process in the kinetic formation of calcium ferrite and di-calcium ferrite constituents. The model is based on the simultaneous solution of transport equations of *Momentum*, energy and chemical species in multiphase multicomponent systems coupled with the chemical reactions kinetics and phase transformations that occur within the sinter bed. The numerical solution is obtained using the finite volume method and the model is validated using monitoring data from an industrial scale sintering plant. After validation, the model was used to predict processing conditions using raw materials with different soft-melting properties. Results indicate that the temperatures of starting soft-melting, shrinkage and melting range are the main parameters to be controlled in order to attain liquid phases formation responsible to confer good mechanical and reducibility properties for the sinter product. In this study was found that raw materials with high soft-melting temperature and wider temperature of mushy zone could decrease up to 30% the calcium ferrites formation and hence deteriorates the metallurgical properties of the sinter.

Key words: Sintering; Iron ore; Mathematical modeling; Kinetic formation.

¹Ph.D. Programa de Pós-graduação em Engenharia Metalúrgica, Escola de Engenharia Industrial Metalúrgica de Volta Redonda – EEIMVR, Universidade Federal Fluminense – UFF, Vila Santa Cecília, Cep 27255-125, Volta Redonda, RJ, Brasil. E-mail: jose.adilson@pq.cnpq.br

²M.Sc. Programa de Pós-graduação em Engenharia Metalúrgica, Escola de Engenharia Industrial Metalúrgica de Volta Redonda – EEIMVR, Universidade Federal Fluminense – UFF, Vila Santa Cecília, Cep 27255-125, Volta Redonda, RJ, Brasil. e Departamento de Química, Instituto de Ciências Exatas – IcEX, Polo Universitário de Volta Redonda – PUVR, Universidade Federal Fluminense – UFF, Campus Aterrado, Cep 27213-415, Volta Redonda, RJ, Brasil. E-mail: alexandre.boscaro@ig.com.br

³M.Sc. Programa de Pós-graduação em Engenharia Metalúrgica, Escola de Engenharia Industrial Metalúrgica de Volta Redonda – EEIMVR, Universidade Federal Fluminense – UFF, Vila Santa Cecília, Cep 27255-125, Volta Redonda, RJ, Brasil. E-mail: vsghuilherme@bol.com.br

⁴Environmental Metallurgy Laboratory-GIFT/POSTECH, San 31 Hyojay-Dong, Nam-Gu, Pohang, 790-784, Coréia do Sul. E-mail: yassk@postech.ac.kr

I INTRODUÇÃO

O processo de sinterização de minério de ferro é responsável pelo fornecimento de matéria prima para o processo subsequente de redução no alto forno de usinas siderúrgicas integradas visando produzir o gusa líquido. Do ponto de vista fenomenológico, o processo é complexo e envolve vários fenômenos físicos e químicos, tais como transferência de calor, massa e *Momentum* de forma acoplada às reações químicas que aumentam consideravelmente a complexidade da análise e previsibilidade do processo.⁽¹⁻⁵⁾ As matérias primas utilizadas no processo de sinterização de minério de ferro são proveniente de várias fontes, sendo a principal os finos de minério ($< 7 \text{ mm} > 0,1 \text{ mm}$). Entretanto, devido à necessidade de se reciclar finos gerados no interior das usinas, atualmente as sinterizações trabalham com altas taxas de materiais recirculados internamente, desde pós de aciaria, alto forno e sínter de retorno até materiais carbonáceos utilizados com o objetivo de incinerar e fornecer calor ao processo.^(6,7) Alguns materiais são adicionados visando acertar a composição química e conferir propriedades físicas e metalúrgicas adequadas ao alto forno. Neste sentido, o processo de sinterização tem mostrado significativa evolução e atualmente pode trabalhar

com uma flexibilidade alta de matérias primas. Na operação convencional da sinterização, a combustão dos combustíveis sólidos (finos de coque ou antracito) começa na parte superior da camada, induzida por um forno de ignição e, com o movimento da esteira, é formada uma frente de combustão gerando uma banda estreita de sinterização através do leito. A Figura 1 mostra um desenho esquemático das zonas no interior da esteira de sinterização onde se identificam a frente de combustão, as zonas de aquecimento e de resfriamento. As características da frente de sinterização dependem fortemente das matérias primas escolhidas e da velocidade de movimento da esteira e da sucção dos gases. A qualidade final do sínter produzido vai depender do histórico das matérias primas na zona de sinterização e das fases formadas. As fases e microestruturas formadas dependerão da cinética das diversas reações químicas, da transferência de calor e da composição local dos gases.

A reatividade do combustível utilizado e as propriedades de amolecimento e fusão desempenham papel fundamental para promover o fornecimento de calor, ao mesmo tempo que propiciam a permeabilidade do leito para passagem do gás responsável pelo fornecimento de oxigênio, aquecimento na região à frente da zona de combustão e resfriamento na região de saída da máquina.

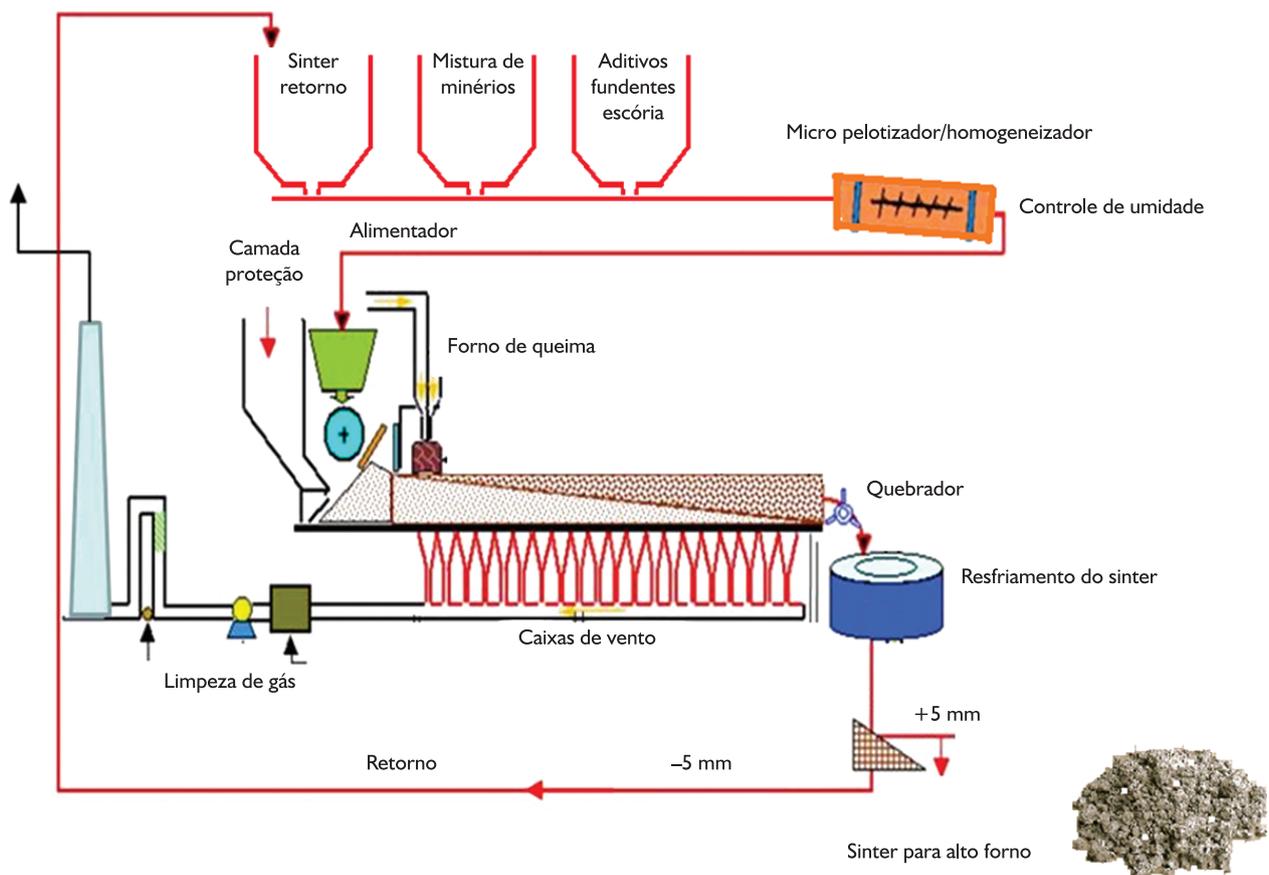


Figura 1. Fluxograma do processo de sinterização de minério de ferro.

O início de amolecimento acontece quando a temperatura de início de fusão do sólido é alcançada para uma dada composição do sólido local; a continuidade da fusão acontece quando calor suficiente é fornecido para continuar a fusão e as transformações de fases que são, na sua maioria, endotérmicas. Na zona de resfriamento, a solidificação ocorre controlada pela taxa de solidificação e ocorre a agregação de solutos, formando estruturas típicas de solidificação tais como dendritas primárias, secundárias e terciárias com composições químicas bastante heterogêneas. A Figura 2 apresenta a evolução do fenômeno de sinterização e exemplos de estruturas encontradas no sinter final. Conforme observado inicialmente, o leito apresenta maior permeabilidade (Figura 2a), e com o avanço da sinterização, as pequenas partículas e fundentes se liquefazem e obstruem a passagem do gás e diminui de forma considerável a troca de calor entre o gás e o leito e aumenta a pressão necessária para a sucção (Figura 2b). Nesta fase do processo a condução de calor do líquido para as partículas desempenha papel importante. Na fase seguinte são os fenômenos de solidificação que desempenham papel importante rejeitando calor para o leito e,

novamente, a troca de calor entre o gás e o leito controla a velocidade de solidificação da massa de sinter. Após a formação do sinter são formadas grandes fissuras pela ação do resfriamento rápido e movimento da esteira, aumentando a permeabilidade do leito até o descarregamento onde se encontra um sistema para realizar a quebra dos grandes blocos e seguir ao resfriador final, conforme mostrado na Figura 1. As micrografias apresentadas na Figura 2c-d foram obtidas pela técnica de microscopia eletrônica de varredura (MEV) de um sinter produzido em escala piloto.

O tamanho e a fração volumétrica das fases formadas dependem da fração de líquido formada, que por sua vez depende da transferência de calor local e evolução da composição dos constituintes na mistura. Devido a sua complexidade e vasta possibilidade de condições de processamento, a previsão dos fenômenos que ocorrem no interior do leito de sinterização tem sido abordada por meio de formulação e implementação de modelos matemáticos com diversos níveis de detalhamento e complexidade.

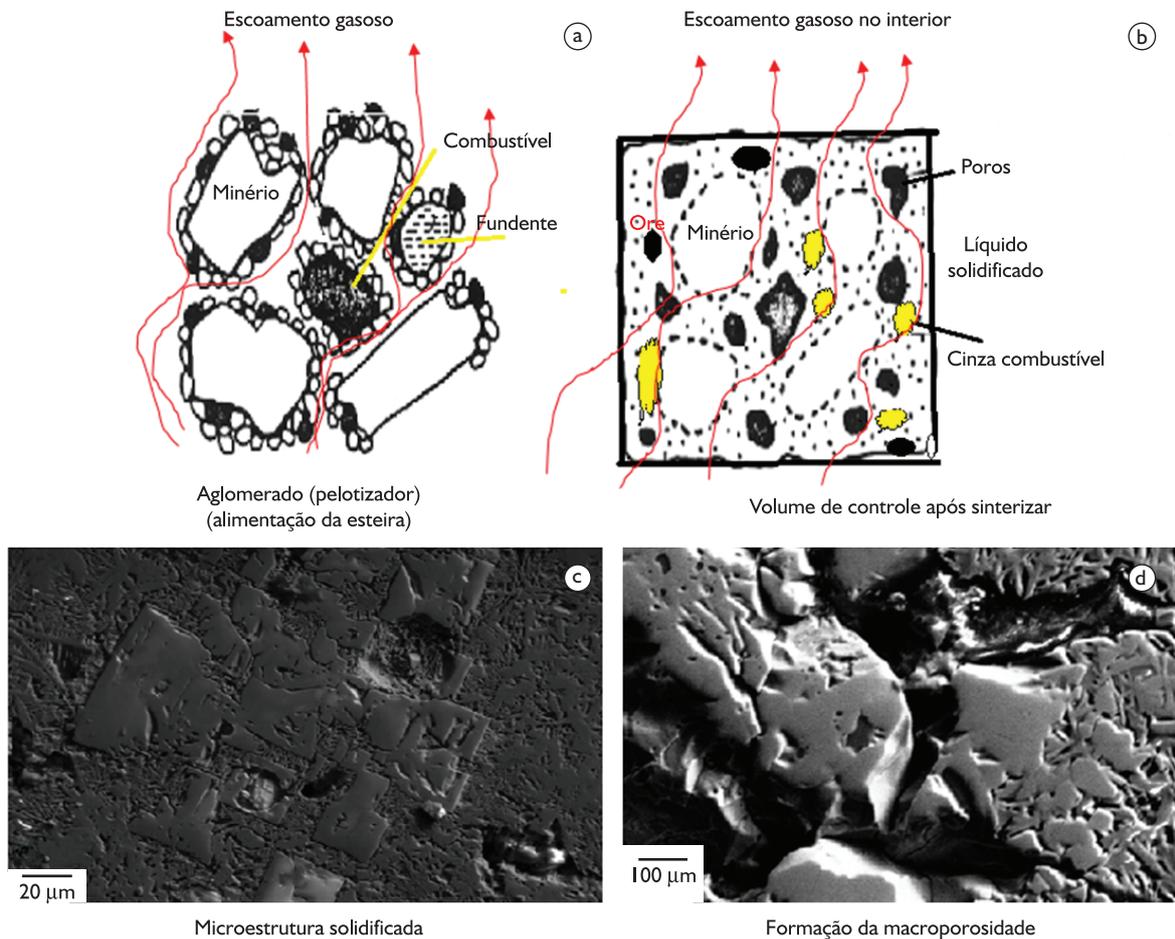


Figura 2. Mecanismos de sinterização no interior da esteira e microestruturas típicas do sinter produzido.

Dentre estes modelos desenvolvidos para simular o processo de sinterização em esteira móvel de minério de ferro destacam-se Cumming e Thurlby,⁽¹⁾ Nath, Silva e Chakraborti,⁽²⁾ Yamaoka e Kawaguchi,⁽³⁾ Castro et al.⁽⁴⁾ e Mitterlehner et al.,⁽⁵⁾ que tratam o leito de sinterização como um meio poroso e consideram as diversas reações químicas, transferência de calor e transformações de fases acopladas ao escoamento gasoso e de sólidos na esteira de sinterização. Embora alguns modelos tenham tratado de forma detalhada os fenômenos de sinterização no interior da esteira móvel, alguns fenômenos importantes ainda precisam ser considerados e fases importantes precisam ser quantificadas visando aprimorar as previsões e, conseqüentemente, desenvolver ferramentas mais precisas para estudar novas possibilidades de operação. No tocante a novas matérias primas, um tópico cada vez mais atual é a reciclagem de resíduos siderúrgicos ou industriais nas plantas de sinterização sem comprometer seu desempenho e qualidade final do sinter. Neste contexto, o presente trabalho visa apresentar uma implementação da cinética de previsão dos constituintes cálcio ferrita ($CaFe_2O_4$) e dicálcio ferrita ($Ca_2Fe_2O_5$) no modelo de sinterização desenvolvido por Castro et al.⁽⁴⁾ e aplicá-lo na previsão dos efeitos de propriedades de amolecimento e fusão de misturas de sinterização. São considerados quatro casos de estudo correspondendo às propriedades de minérios de sinterização disponíveis atualmente para a siderurgia e num futuro próximo. Estes casos são confrontados com um cenário de operação praticado numa planta de sinterização de grande porte que opera com elevada produtividade.

2 METODOLOGIA

2.1 Descrição do Modelo

O modelo baseia-se em equações de transporte de *momentum*, energia e espécies químicas para cada fase considerada. Neste estudo considera-se a fase gasosa, os sólidos da carga (mistura de minérios, combustível sólido, finos de reciclagem, fundentes, aditivos e sinter de retorno), a fase líquida formada durante a sinterização e a fase solidificada durante o resfriamento. Para cada uma dessas fases considera-se um conjunto de espécies químicas ou constituintes que podem sofrer transformações ou reações químicas durante o processo de sinterização. Algumas dessas reações são exotérmicas e são responsáveis pelo aporte térmico ao processo e outras são endotérmicas e consomem energia. Do ponto de vista energético as reações de combustão são as principais fornecedoras de energia, enquanto as reações de vaporização da umidade e desidratação, calcinação e fusão são as mais importantes consumidoras de energia pela extensão que ocorrem e as entalpias envolvidas. A Tabela 1 apresenta as fases e espécies químicas ou constituintes consideradas neste modelo. A Tabela 2 resume as principais reações químicas e as transformações de fases implementadas no modelo. As equações de transporte que governam os fenômenos de transferência de *momentum*, energia e espécies são formuladas para o domínio computacional apresentado na Figura 3, com a identificação das principais zonas de reações no interior do leito de sinterização. As zonas são indicadas apenas para fins didáticos, já que o processo não apresenta esta divisão nítida de subdomínios.

Tabela 1. Fases e espécies químicas ou constituintes consideradas no modelo

Variáveis				
Gás	Momentum		$U_{1,g}, U_{2,g}, U_{3,g}, P_g, \epsilon_g$	
	Energia		h_g	
	Espécie química		$N_2, O_2, CO, CO_2, H_2O, H_2, SiO, SO_2, CH_4$	
Variáveis				
Sólido	Momentum		$U_{1,s}, U_{2,s}, U_{3,s}, P_s, \epsilon_s$	
	Energia		h_s	
		Combustível		C, Voláteis, $H_2O, Al_2O_3, SiO_2, MnO, MgO, CaO, FeS, P_2O_5, K_2O, Na_2O, S_2$
		Mistura de minérios		$Fe_2O_3, Fe_3O_4, FeO, Fe, H_2O, Al_2O_3, SiO_2, MnO, MgO, CaO, FeS, P_2O_5, K_2O, Na_2O$
		Sinter de retorno		$Fe_2O_3, Fe_3O_4, FeO, Fe, H_2O, Al_2O_3, SiO_2, MnO, MgO, CaO, FeS, P_2O_5, K_2O, Na_2O$
		Material solidificado		$Fe_2O_3, Fe_3O_4, FeO, Fe, H_2O, Al_2O_3, SiO_2, MnO, MgO, CaO, FeS, P_2O_5, K_2O, Na_2O, Ca_2Fe_3O_5, Al_2MgO_4$
		Fluxante(calcário)		$(MgOCaO)CO_3, CaO, H_2O, Al_2O_3, SiO_2, MnO, MgO, TiO_2$
		Sinter		$Fe_2O_3, Fe_3O_4, FeO, Fe, H_2O, Al_2O_3, SiO_2, MnO, MgO, CaO, FeS, P_2O_5, K_2O, Na_2O, Ca_2Fe_3O_5, Al_2MgO_4$
		Líquido	Líquido intersticial	$Fe_2O_3, Fe_3O_4, FeO, Fe, H_2O, Al_2O_3, SiO_2, MnO, MgO, CaO, FeS, P_2O_5, K_2O, Na_2O, Ca_2Fe_3O_5, Al_2MgO_4$
		Espécie química		

Na realidade o modelo reproduz a transição que ocorre entre as zonas de forma natural através de formulação contínua para um volume de controle representativo. As equações de transporte que representam os fenômenos no interior do leito de sinterização são representadas pelas Equações 1-9.

As Equações 1-4 representam balanços de *momentum*, massa e energia acoplados à cinética de reações e transformação de fases. Nestas equações aparecem os termos de acumulação (transitórios), convectivos, difusivos e os chamados termos fontes, que representam

as forças externas, geração de massa acompanhada de geração ou absorção de calor de transformação e trocas térmicas entre as fases. As Equações 5 e 6 representam as interações de *momentum* e transferência de calor entre as fases, enquanto as Equações 7 a 9 representam os efeitos de contração, geração de líquidos e ligações entre as partículas no leito de sinterização. Estas equações representam, portanto, os principais efeitos da qualidade das matérias primas no tocante a propriedades de amolecimento e fusão no modelo, adicionalmente aos efeitos devido a sua composição química.

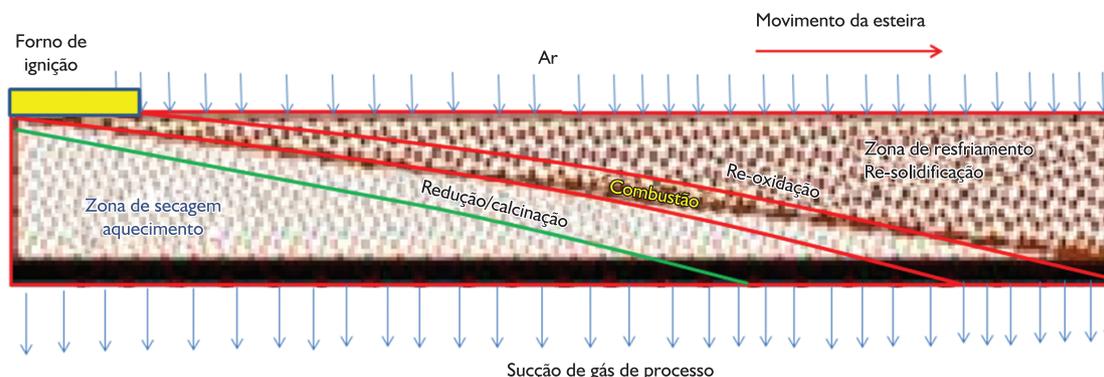


Figura 3. Domínio computacional com as principais zonas de reação no interior do leito de sinterização.

Tabela 2. Reações químicas consideradas no modelo

Combustível sólido ⁽⁸⁻¹³⁾	
$C(i) + O_2(g) \rightarrow CO_2(g)$ (Combustão completa)	$C(i) + \frac{1}{2} O_2(g) \rightarrow CO(g)$ (Combustão parcial)
$C(i) + CO_2(g) \rightarrow 2CO(g)$	$C(i) + H_2O(g) \rightarrow CO(g) + H_2(g)$
voláteis (i) + $\alpha_1 O_2 \rightarrow \alpha_2 CO_2(g) + \alpha_3 H_2O(g) + \alpha_4 N_2(g)$ voláteis (i) + $\alpha_5 CO_2 \rightarrow \alpha_6 CO(g) + \alpha_7 H_2(g) + \alpha_8 N_2(g)$ - (i=finos de coque, antracito ou carepa) Nota: Os coeficientes estequiométricos são calculados pela análise elementar do combustível	
Decomposição de carbonatos ⁽¹⁰⁾	
$CaCO_3 \rightarrow CaO + CO_2(g)$	$MgCO_3 \rightarrow MgO + CO_2(g)$
Redução / Reoxidação dos óxidos de ferro ⁽¹⁰⁾	
$Fe_2O_3(i) + CO/H_2(g) \rightarrow Fe_3O_4(i) + CO_2/H_2O(g)$	(i = minério, sinter de retorno e carepa)
$\frac{w}{4w-3} Fe_3O_4(i) + CO/H_2(g) \rightarrow \frac{3}{4w-3} Fe_wO(i) + CO_2/H_2O(g)$	(i = minério, sinter de retorno e carepa)
$Fe_wO(i) + CO/H_2(g) \rightarrow wFe(i) + CO_2/H_2O(g)$	(i = minério, sinter de retorno e carepa)
$wFe(i) + \frac{1}{2} O_2(g) \rightarrow Fe_wO(i)$	(i = minério, sinter de retorno e carepa)
$\frac{3}{4w-3} Fe_wO(i) + \frac{1}{2} O_2(g) \rightarrow \frac{w}{4w-3} Fe_3O_4(i)$	(i = minério, sinter de retorno e carepa)
$2Fe_3O_4(i) + \frac{1}{2} O_2(g) \rightarrow 3Fe_2O_3(i)$	(i = minério, sinter de retorno e carepa)
Vaporização de umidade/condensação/equilíbrio gasoso/pós combustão ^(9,10)	
$H_2O(i) \leftrightarrow H_2O(g)$	(i = finos de coque, antracito, minério, sinter de retorno e carepa)
$CO_2(g) + H_2(g) \leftrightarrow CO(g) + H_2O(g)$ (equilíbrio)	$CO + \frac{1}{2} O_2 \rightarrow CO_2$ $H_2 + \frac{1}{2} O_2 \rightarrow H_2O$

Momentum:

$$\frac{\partial(\rho_i \varepsilon_i u_{i,j})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_i \varepsilon_i u_{i,k} u_{i,j})}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\mu_i \frac{\partial u_{i,j}}{\partial x_k} \right) - \frac{\partial P_i}{\partial x_j} - F_j^{i-1} \quad (1)$$

Continuidade:

$$\frac{\partial(\rho_i \varepsilon_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_i \varepsilon_i u_{i,k})}{\partial x_k} = \sum M_n r_m \quad (2)$$

Energia:

$$\frac{\partial(\rho_i \varepsilon_i h_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_i \varepsilon_i u_{i,k} h_i)}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{k_i}{C_p i} \frac{\partial h_i}{\partial x_k} \right) + E^{i-1} + \sum \Delta h_m r_m \quad (3)$$

Espécies químicas ou constituintes:

$$\frac{\partial(\rho_i \varepsilon_i \phi_n)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_i \varepsilon_i u_{i,k} \phi_n)}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(D_n^{eff} \frac{\phi_n}{\partial x_k} \right) + \sum M_n r_m \quad (4)$$

Interações de *momentum* entre as fases, dada pela equação de Ergun modificada:⁽¹⁻¹²⁾

$$F_j^{i-1} = \left[1.75 \rho_i + \frac{150 \mu_i}{|\bar{U}_i - \bar{U}_j|} \left(\frac{\varepsilon_{eff}}{d_{eff} \varphi_{eff}} \right) \right] \left(\frac{\varepsilon_{eff}}{(1 - \varepsilon_{eff})^3 d_{eff} \varphi_{eff}} \right) |\bar{U}_i - \bar{U}_j| (u_{i,j} - u_{j,i}) \quad (5)$$

Trocas térmicas entre as fases:

$$E^{i-1} = \frac{\varepsilon_{eff}}{d_{eff} \varphi_{eff}} \frac{k_i}{(d_{eff} \varphi_{eff})} \left[2 + 0.39 (Re_{i-1})^{1/2} (Pr)^{1/3} \right] (T_i - T_j) \quad (6)$$

Fração volumétrica de sólidos no leito poroso:⁽⁴⁻⁹⁾

$$\varepsilon_m = 1 - \left(0.403 [100 d_m]^{0.14} \left(1 - \text{MAX} \left(0, \text{MIN} \left(1, \left(\frac{T_i - T_m}{\Delta T_m} \right) \right) \right) \right) \frac{S_m}{100} \right) \quad (7)$$

Fração efetiva de volume ocupada pelo sólido e fases formadas:

$$\varepsilon_{eff} = \sum \varepsilon_m + \varepsilon_i + \varepsilon_{ls} \quad (8)$$

Diâmetro efetivo de partícula no leito de sinterização utilizado nas Equações 5 e 6:

$$d_{eff} \varphi_{eff} = d_{inicial} \varphi_{inicial} + (d_{final} \varphi_{final} - d_{inicial} \varphi_{inicial}) \left(\frac{\varepsilon_i + \varepsilon_{ls}}{\varepsilon_{eff}} \right) \quad (9)$$

As propriedades termofísicas de cada fase são calculadas em função da temperatura e composição local da fase. Os parâmetros ε_{eff} , d_{eff} , φ_{eff} são dependentes da temperatura e representam a fração volumétrica local de material no leito, diâmetro efetivo de partícula e fator de forma, respectivamente. Estes parâmetros são utilizados nas Equações 5 e 6, visando considerar os efeitos de amolecimento e fusão do leito, com formação de fase líquida e solidificada, formação de porosidade e ruptura do material devido a fortes gradientes térmicos, força de sucção do gás e movimento da esteira.^(3,9-11) O diâmetro e o fator de forma médios dos sólidos carregados ($d_{inicial} \varphi_{inicial}$) são calculados pela média ponderada da distribuição granulométrica do material que sai do pelletizador - homogeneizador. Os parâmetros relativos às propriedades de amolecimento e fusão da mistura (T_m , ΔT_m and S_m) são obtidos por ensaios de amolecimento e fusão padronizados em um forno de leito fixo com temperatura e composição do gás controladas.⁽¹³⁻¹⁸⁾

Total de 118 equações diferenciais parciais que são numericamente resolvidas aplicando-se a técnica de volumes finitos.

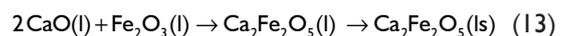
2.2 Cinética de Formação de $CaFe_2O_4-Ca_2Fe_2O_5$

Em condições normais de sinterização tem sido observada a formação principalmente dos constituintes $Ca_2Fe_2O_5$, $CaFe_2O_4$ e $CaFe_4O_7$, tanto no estado sólido quanto no estado líquido. Entretanto, observações experimentais indicam que nos tempos normais de processamento do processo industrial, a maior contribuição é devida à formação no estado líquido dos constituintes $CaFe_2O_4$ e $Ca_2Fe_2O_5$. A cinética de formação destes constituintes depende fortemente da temperatura e da disponibilidade de reagentes na fase líquida. Nesse modelo os mecanismos e correspondentes taxas representados pelas Equações 10-15 são considerados ocorrendo de forma simultânea e competitiva pelos reagentes em solução no líquido. As constantes cinéticas utilizadas nesse modelo são obtidas por ajuste de dados experimentais de sínter obtido em escala piloto:⁽¹⁷⁾



$$\frac{d(CaFe_2O_4(l_s))}{dt} = k_1(T) [CaO(l)] [Fe_2O_3(l)] \quad (11)$$

$$k_1(T) = \text{EXP} \left(9,8 - \frac{11.517}{T} \right) \quad (12)$$



$$\frac{d(Ca_2Fe_2O_5(l_s))}{dt} = k_2(T) [CaO(l)] [Fe_2O_3(l)] \quad (14)$$

$$k_2(T) = \text{EXP}\left(17,4 - \frac{20.731}{T}\right) \quad (15)$$

As equações de taxas são implementadas no modelo com o objetivo de analisar a influência das variáveis de processamento na formação de cálcio ferita (CaFe_2O_4) e dicálcio ferrita ($\text{Ca}_2\text{Fe}_2\text{O}_5$) no sinter produzido. Conforme pode ser observado na formulação apresentada nas Equações 10-15, que resolvidas simultaneamente com as equações de conservação de massa, *momentum* e energia – Equações 1-4 –, conjuntamente às Equações 6-9, fornecem o completo acoplamento dos efeitos devidos às propriedades de amolecimento e fusão na formação destes constituintes do sinter final.

2.3 Condições Iniciais, de Contorno e Solução Numérica

Para que o sistema de equações diferenciais que compõem o modelo possa ser resolvido faz-se necessária a imposição de condições de contorno e condições iniciais. As condições de contorno são dadas pelos dados operacionais de velocidade de esteira, vazão de sucção, composição inicial da carga e temperatura de ignição do forno. As demais condições de fronteiras são consideradas de gradientes nulos, ou completamente desenvolvidos. Para a transferência de calor dos materiais na esteira com o ambiente são considerados coeficientes de transferência de calor de convecção e por radiação efetivos. Em todos os cálculos executados neste estudo adota-se coeficiente de convecção efetivo de $50 \text{ W/m}^2\text{K}$ e emissividade 0,8 para todas as superfícies. As condições de saída da esteira e de sucção são consideradas como de escoamento completamente desenvolvido ajustando-se o balanço integral de massa. A pressão de entrada dos gases no leito é considerada atmosférica, enquanto a pressão de saída é calculada pelo modelo. A solução numérica do escoamento das fases no interior do leito é calculada aplicando-se a técnica de volumes finitos com o algoritmo SIMPLE e o esquema da lei de potência.⁽¹⁹⁾ A solução do sistema algébrico resultante é obtida utilizando-se o método iterativo linha por linha conjugado com o algoritmo de solução do sistema tridiagonal.⁽¹⁸⁾ Detalhes da implementação destes algoritmos são facilmente encontrados na literatura.^(8,19) A malha adotada neste estudo ($12 \times 120 \times 15$) é obtida por contínuo refinamento com erro menor que 1%, ao passo que é adotado o critério de convergência para os campos de velocidade, e temperatura em 10^{-4} e o fechamento global de todas as espécies químicas menor que 1%.

2.4 Condições de Simulação

Objetivando estabelecer uma base de cálculo para comparação inicialmente é escolhida uma condição comum de operação da planta de sinterização. Os dados de processo são monitorados com relação à qualidade de matérias primas, balanço de massa, produtividade, consumo de combustíveis e qualidade final do sinter. Para se estabelecer esta base de cálculo a planta foi monito-

rada por um turno de trabalho completo correspondendo a 6 h de operação ininterrupta com baixa variação dos parâmetros operacionais. Adicionalmente as temperaturas das caixas de vento e composição dos gases foram medidas a cada hora. Assim, obtém-se um conjunto de seis medições no intervalo de 6 h na planta. Os resultados globais coletados neste turno foram comparados com os dados históricos da planta visando observar discrepâncias e consistência dos dados coletados. Para comparação e entrada de dados do modelo foram utilizados os valores médios do turno. O modelo assim ajustado foi então utilizado para prever os efeitos de variação de propriedades de amolecimento e fusão. Para esta etapa foram selecionadas quatro misturas com propriedades distintas de amolecimento e fusão. A composição química dessas misturas e propriedades de amolecimento e fusão dos casos estudados são apresentadas na Tabela 3.

3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

3.1 Validação do Modelo

O modelo é validado utilizando-se dados de uma planta industrial de grande porte (482 m^2 de esteira e forno de ignição de 22 m^2 , vazão de sucção dos sopradores máxima de $25.000 \text{ Nm}^3/\text{min}$). Para simulação de um caso base foi escolhido um turno de trabalho de 6 h que apresentou pequena variação nas condições operacionais e de matérias primas. A Figura 4 apresenta a distribuição de temperaturas e os vetores de velocidade do gás para o plano vertical central da esteira evidenciando a propagação da frente de queima e variação da permeabilidade do leito ao longo da esteira. Observa-se que, embora seja desejável uma queima uniforme, a mesma não acontece ao longo de toda a esteira devido à menor fração de oxigênio para o leito na zona de ignição.^(6,7)

Na Figura 5 apresenta-se uma comparação de valores de temperatura medidos nas caixas de vento com os valores calculados pelo modelo na saída do leito. É observada uma excelente concordância com os resultados medidos. Os valores calculados são sistematicamente superiores aos valores medidos e podem ser explicados pela condensação de vapor e perdas na entrada das caixas de vento. Esta excelente concordância pode ser confirmada com a comparação dos valores medidos e calculados para a composição dos gases de saída com os valores das caixas de vento, conforme apresentados na Figura 6. De uma forma geral, todos os parâmetros globais, tais como produtividade, pressão de sucção (depressão), temperatura de final de queima, consumo de combustíveis e tamanho final do sinter são comparados com erro menor que 2%, o que valida o modelo proposto dentro de uma margem de erro aceitável, levando-se em consideração a complexidade do processo e da modelagem, que envolve vários submodelos de alta sensibilidade às variações de temperatura, velocidade local do gás e composição química, principalmente aqueles relacionados às taxas de reações e transferência de calor.

Tabela 3. Composição química e propriedades de amolecimento e fusão das matérias primas utilizadas neste estudo com dados de entrada para o modelo

	Base	Caso 1	Caso 2	Caso 3	Caso 4
Produtividade (tsinter/m ² /dia)	41,3	41,3	41,2	41,3	41,3
Consumo de combustível (kg/tsinter)	46,5	46,5	46,6	46,6	46,5
Pressão de sucção (kPa)	15,2	16,1	13,2	23,6	11,6
Volume de gás (Nm ³ /min)	13.288	13.286	13.308	13.289	13.288
Velocidade esteira (m/min)	3,2	3,2	3,2	3,2	3,2
Tamanho inicial (dinicial) Equação 9	7,5	7,5	7,5	7,5	7,5
Composição da mistura (% massa)					
Fe ₂ O ₃	63,6	64,5	63,1	61,6	64,3
Fe ₃ O ₄	1,3	1,1	0,2	0,8	2,6
CaO	3,2	3,1	3,8	3,8	3,6
CaCO ₃	9,4	9,6	9,2	9,8	9,8
MgCO ₃	2,4	2,6	2,8	2,1	1,2
Al ₂ O ₃	1,2	1,4	1,8	2,6	1,3
MnO	2,2	2,6	2,4	2,5	1,1
MgO	2,1	1,2	1,8	1,1	2,4
SiO ₂	3,2	3,2	3,2	3,8	3,1
P ₂ O ₅	0,0022	0,0005	0,0035	0,0015	0,0018
FeS	0,001	0,002	0,001	0,003	0,002
TiO ₂	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01
H ₂ O(hidratação)	1,2	0,4	1,7	1,6	0,2
C	3,5	3,4	3,7	3,6	3,5
Voláteis	0,2	0,3	0,1	0,2	0,4
Umidade	6,5	6,5	6,5	6,5	6,5
Amolecimento e fusão - Equação 7					
T _m (°C)	1.085	1.048	1.178	1.235	1.050
ΔT _m (°C)	225	265	105	205	225
Sm(%)	50	70	40	60	25

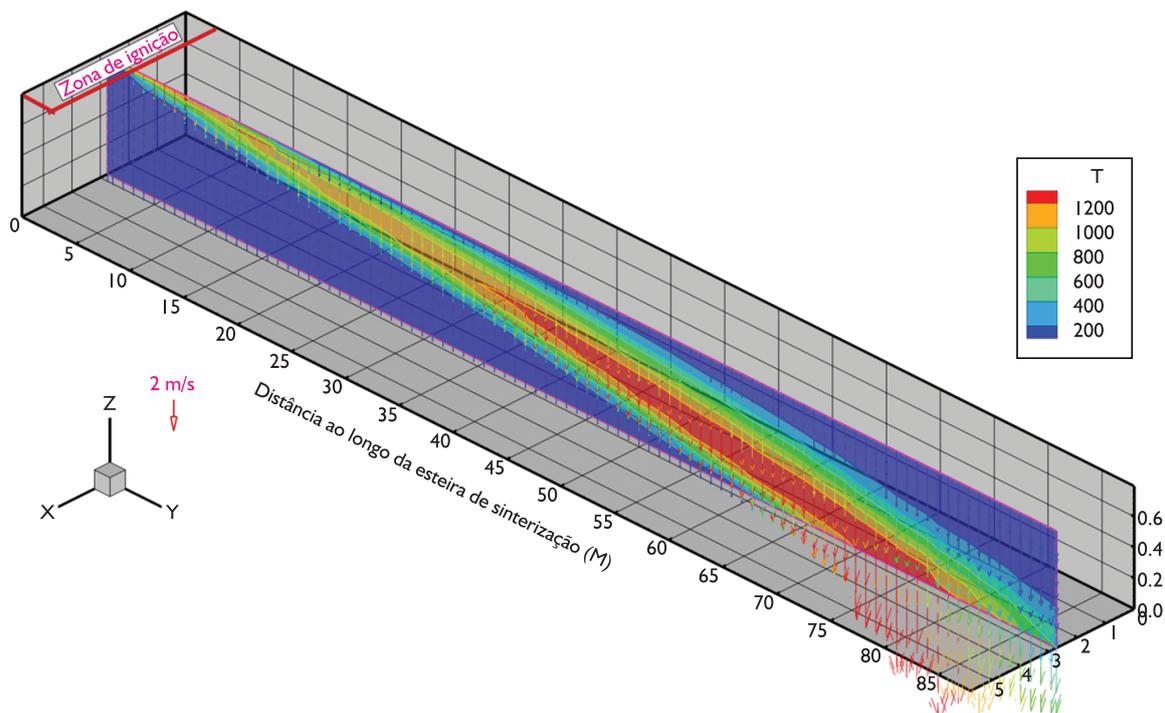


Figura 4. Distribuição de temperatura e escoamento gasoso na esteira de sinterização para condição atual de operação (base).

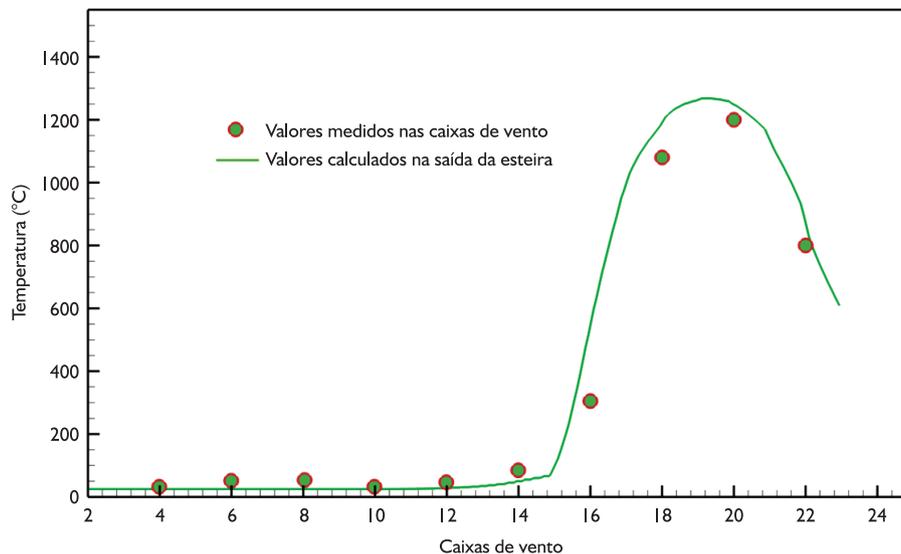


Figura 5. Comparação de resultados medidos e calculados para operação atual (base).

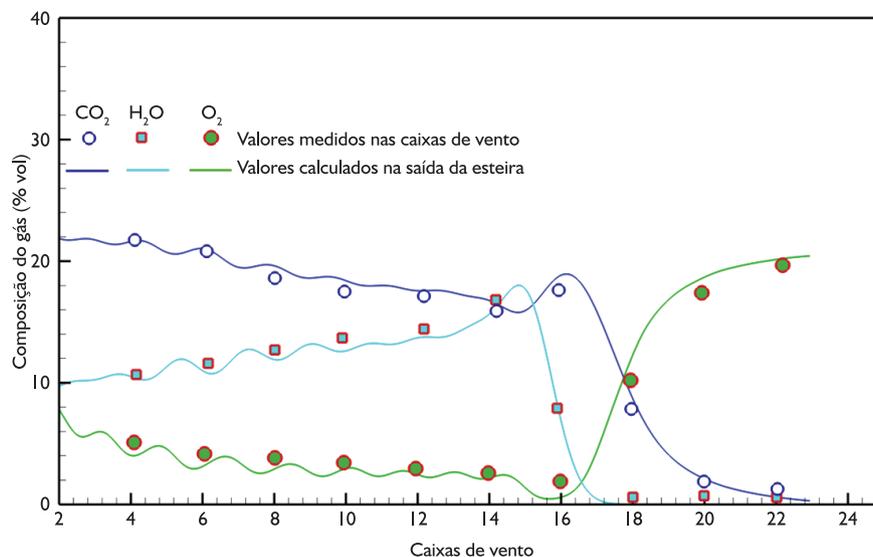


Figura 6. Comparação de resultados do modelo e medidos para a composição do gás de saída.

3.2 Influência das Propriedades de Amolecimento e Fusão

O modelo com as novas implementações de cinética apresentadas nas Equações 10-14 é utilizado para prever a formação de cálcio ferrita (CaFe_2O_4) e dicálcio ferrita ($\text{Ca}_2\text{Fe}_2\text{O}_5$). Conforme enfatizado na formulação, a formação desses constituintes depende fortemente do ciclo térmico e da composição da fase líquida da formada. Na Figura 7 são mostrados os campos de temperaturas calculados pelo modelo para comparação com o caso base. O caso 1 mostra-se similar ao caso base com um ligeiro afinamento da zona de sinterização, porém com distribuição muito próxima ao caso base indicando que o efeito devido à temperatura de início menor foi neutralizado pelo maior intervalo de temperatura de fusão e maior grau de contração volumétrica, conforme apresentado na

Tabela 3. No caso 2 o efeito é mais pronunciado com uma temperatura de início de amolecimento maior, intervalo de fusão menor e contração volumétrica menor levando à diminuição da zona de sinterização e consequente menor formação de fase líquida. O caso 3 mostra os efeitos de uma mistura de alto ponto de amolecimento, largo intervalo de temperatura e alta contração volumétrica. Conforme observado, a região de alta temperatura aumenta.

No caso 4 (Tabela 3) busca-se uma mistura que combine os efeitos de baixa temperatura de amolecimento, largo intervalo de temperatura e baixa contração volumétrica. A Figura 8 apresenta os resultados para a distribuição de temperaturas e os vetores de velocidade do gás. Conforme observado, as condições do leito de sinterização são restauradas comparativamente ao caso base. As Figuras 9a, b mostram as frações de cálcio ferritas formadas e líquido na zona de sinterização, respectiva-

mente. Confirmando os resultados esperados devido aos campos de temperaturas apresentados nas Figuras 7-8, a formação de cálcio e dicálcio ferritas diminuiram consideravelmente para os casos 2 e 3 com correspondente diminuição da fase líquida. Os resultados apresentados confirmam a forte dependência da combinação das propriedades de amolecimento e fusão das misturas e condições de processamento na formação de constituintes importantes do sínter que conferem propriedades

de redutibilidade e resistência mecânica.⁽¹³⁻¹⁸⁾ Deve-se ressaltar que tais propriedades estão também relacionadas com a morfologia e distribuição desses constituintes na massa sinterizada. A previsão da morfologia desses constituintes não é foco do presente estudo. Entretanto, para uma análise comparativa, já que o caso base apresenta comprovadamente sínter de propriedades adequadas, considera-se que os resultados obtidos neste estudo sejam compatíveis com as morfologias adequadas para o sínter.

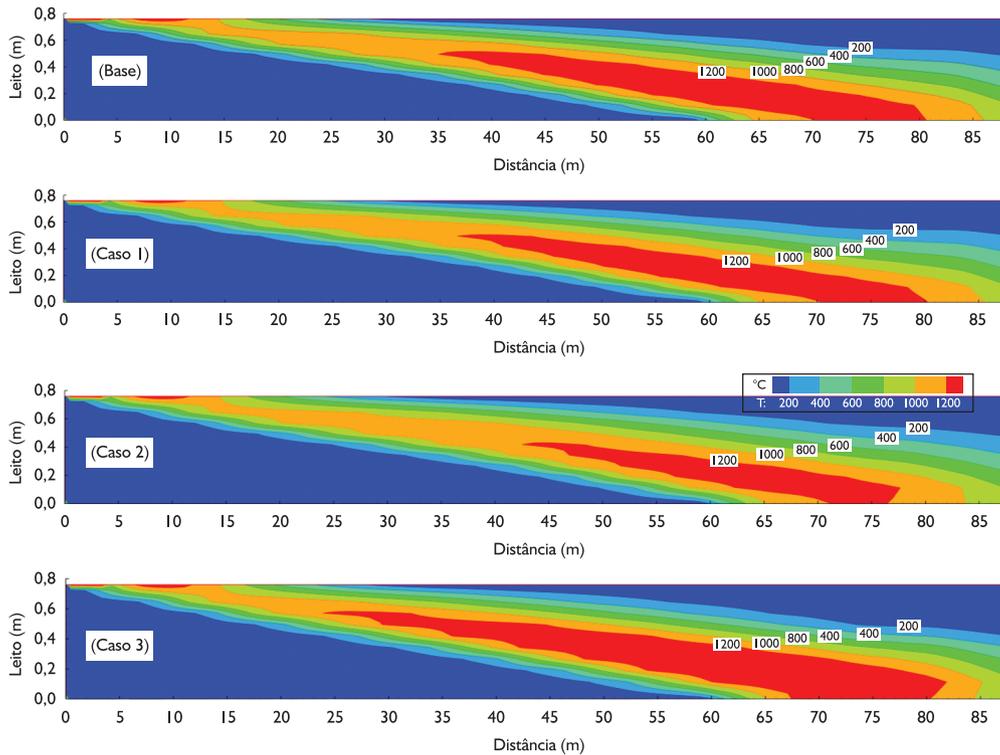


Figura 7. Distribuição de temperaturas do leito no plano vertical central da esteira de sinterização.

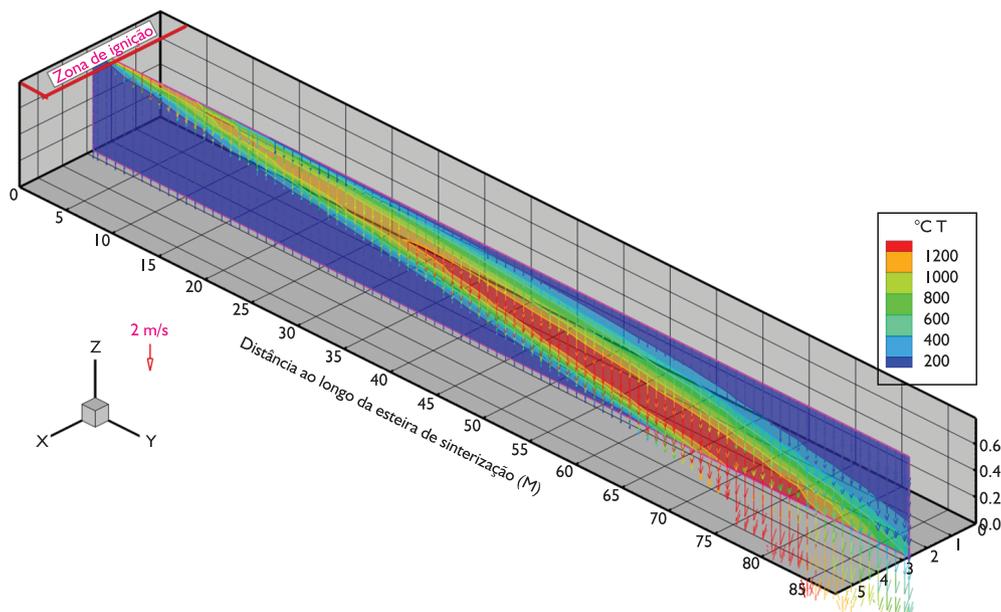


Figura 8. Distribuição de temperatura prevista para o caso 4.

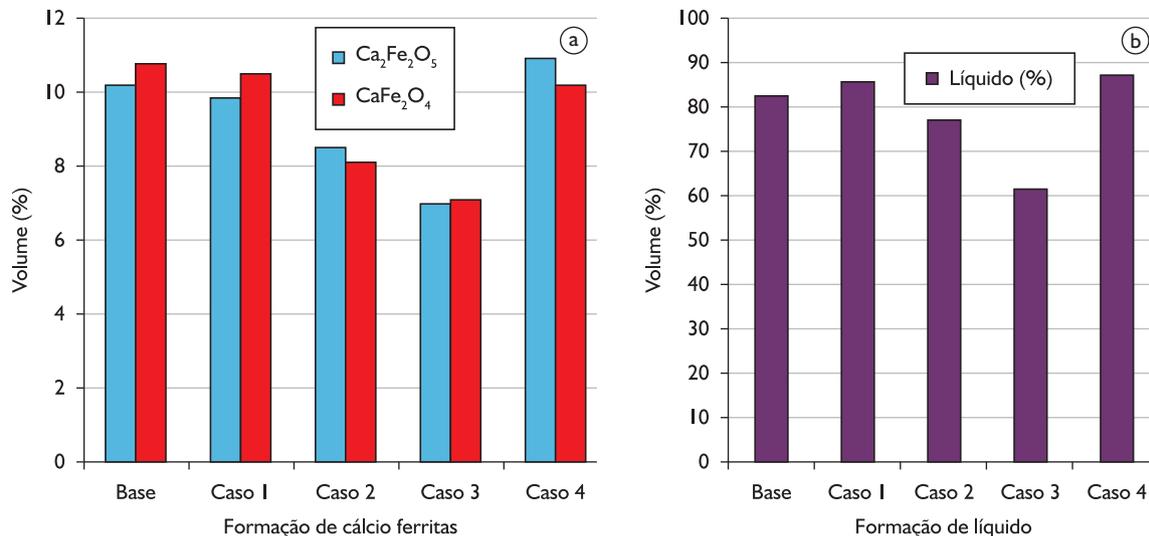


Figura 9. Previsão de formação de cálcio ferrita e dicálcio ferrita para os casos analisados e correspondentes frações de líquido formado na zona de sinterização.

4 CONCLUSÕES

Neste estudo é discutido um modelo matemático capaz de prever os principais fenômenos que ocorrem no interior do leito de sinterização de forma detalhada. O modelo leva em consideração transporte de *momentum*, massa e energia de forma simultânea e acoplada a cinética de reações e transformação de fases. Resultados do modelo, quando confrontados com dados operacionais de planta de sinterização em escala industrial, apresentam excelente concordância (erro global relativo menor que 2% para todos os parâmetros). O modelo é utilizado para previsão dos efeitos de propriedades de amolecimento e fusão de misturas de sinterização de minério de ferro.

Podem ser formuladas as seguintes conclusões:

- Os casos 1 e 4 apresentam comportamento similar à prática operacional e, com base nos resultados de simulação, pode-se recomendar sua utilização como mistura de sinterização na planta industrial; e
- Os casos 2 e 3 mostram decréscimo de fase líquida formada com conseqüente diminuição de constituintes CaFe_2O_4 e $\text{Ca}_2\text{Fe}_2\text{O}_5$, o que indicaria uma piora nas propriedades de redutibilidade e, possivelmente, aumento do sinter de retorno, tornando o processo menos eficiente do ponto de vista energético e diminuindo sua produtividade. Recomenda-se, portanto cautela na utilização dessas misturas.

REFERÊNCIAS

- 1 CUMMING, M. J.; THURLBY, J. A. Developments in modeling and simulation of iron ore sintering. *Ironmaking and Steelmaking*, v. 17, n. 4, p. 245-254, April 1990.
- 2 NATH, N. K.; SILVA, A. J.; CHAKRABORTI, N. Dynamic process modeling of iron ore sintering. *Steel Research*, v. 68, n. 7, p. 285-292, July 1997.
- 3 YAMAOKA, H.; KAWAGUCHI, T. Development of a 3-D sinter process mathematical simulation model. *ISIJ International*, v. 45, n. 4, p. 522-531, Mar. 2005. <http://dx.doi.org/10.2355/isijinternational.45.522>
- 4 CASTRO, J. A. et al. Modelo matemático tridimensional multifásico da geração de dioxinas no leito de sinterização. *Tecnologia em Metalurgia e Materiais*, v. 2, n. 2, p. 45-49, jul.-set. 2005. <http://dx.doi.org/10.4322/tmm.00202009>
- 5 MITTERLEHNER, J. et al. Modeling and simulation of heat front propagation in the iron ore sintering process. *ISIJ International*, v. 44, n. 1, p. 11-20, Jan. 2004. <http://dx.doi.org/10.2355/isijinternational.44.11>
- 6 OYAMA, N. et al. Development of secondary-fuel injection technology for energy reduction in the iron ore sintering process. *ISIJ International*, v. 51, n. 7, p. 913-921, Jul. 2011. <http://dx.doi.org/10.2355/isijinternational.51.913>
- 7 KANG, H. et al. Influence of oxygen supply in iron ore sintering process. *ISIJ International*, v. 51, n. 7, p. 1065-1071, Jul. 2011. <http://dx.doi.org/10.2355/isijinternational.51.1065>
- 8 CASTRO, J. A.; NOGAMI, H.; YAGI, J. Three dimensional multiphase mathematical modeling of the blast furnace based on multifluid theory. *ISIJ International*, v. 42, n. 1, p. 44-52, Jan. 2002. <http://dx.doi.org/10.2355/isijinternational.42.44>

- 9 AUSTIN, P. R.; NOGAMI, H.; YAGI J. A Mathematical model for blast furnace reaction analysis based on the four fluid model. *ISIJ International*, v. 37, n. 8, p. 748-755, Aug. 1997. <http://dx.doi.org/10.2355/isijinternational.37.748>
- 10 OMORI, Y. *The blast furnace phenomena and modeling*. London: Elsevier Applied Science, 1987.
- 11 HOU, P. et al. Application of intraparticle combustion model for iron ore sinter bed. *Materials Science and Applications*, v. 2, n. 4, p. 370-380, April 2011. <http://dx.doi.org/10.4236/msa.2011.25048>
- 12 CASTRO, J. A. et al. A six-phases 3-D model to study simultaneous injection of high rates of pulverized coal and charcoal into the blast furnace with oxygen enrichment. *ISIJ International*, v. 51, n. 5, p. 748-758, May 2011. <http://dx.doi.org/10.2355/isijinternational.51.748>
- 13 NOGUEIRA, P. F.; FRUEHAN, R. J. Blast furnace burden softening and melting phenomena. Part III: melt onset and initial microstructural transformations in pellets. *Metallurgical and Materials Transactions B*, v. 37, n. 8, p. 551-558, Aug. 2006.
- 14 NOGUEIRA, P. F.; CASTRO, A. A.; PIMENTA, H. P. High temperature properties of sinters and pellets produced with brazilian ores. In: INTERNATIONAL CONGRESS ON THE SCIENCE AND TECHNOLOGY OF IRONMAKING, 4., 2006, Osaka. *Proceedings...* Osaka: Iron and Steel Institute of Japan, 2006. v. 1, p. 671-674.
- 15 NANDY, S. et al. Assessment of blast furnace behaviour through softening-melting test. *Ironmaking and Steelmaking*, v. 33, n. 2, p. 111-119, Feb. 2006. <http://dx.doi.org/10.1179/174328106X94744>
- 16 UMADEVI, T. et al. Influence of iron fines feed size on microstructure, productivity and quality of iron ore sinter. *ISIJ International*, v. 51, n. 6, p. 922-929, Jun. 2011. <http://dx.doi.org/10.2355/isijinternational.51.922>
- 17 LV, X. et al. Behavior of liquid phase formation during iron ores sintering. *ISIJ International*, v. 51, n. 5, p. 722-727, May 2011. <http://dx.doi.org/10.2355/isijinternational.51.722>
- 18 YGUCHI, K. TANAKA, T. and SATO, T. Reaction Behavior of Dolomite Accompanied with Formation of Magnetite Solid Solution in Iron Ore sintering Process, *ISIJ International*, v. 47, n. 5, p. 669- 678, May 2007. <http://dx.doi.org/10.2355/isijinternational.47.669>
- 19 MELAEN, M. C. Calculation of fluid flows with staggered and nonstaggered curvilinear nonorthogonal grids-the theory. *Numerical Heat Transfer B*, v. 21, n. 1, p. 1-19, Jan. 1992. <http://dx.doi.org/10.1080/10407799208944919>

Recebido em: 05/11/2012

Aceito em: 10/12/2012