

PONTIFÍCIA UNIVERSIDADE CATÓLICA  
DO RIO DE JANEIRO



**Lesly Jeaneth Mamani Paco**

**Modelamento 3D Multifásico Multicomponentes da  
Auto-Redução em Forno de Cuba**

**TESE DE DOUTORADO**

Tese apresentada como requisito parcial para obtenção do título de Doutor pelo programa de Engenharia de Materiais e de Processos Químicos e Metalúrgicos do Departamento Engenharia de Materiais da PUC-Rio.

Orientador: José Carlos D'Abreu  
Co-orientador: José Adilson de Castro

Rio de Janeiro, Julho de 2009



**Lesly Jeaneth Mamani Paco**

**Modelamento 3D Multifásico Multicomponentes da  
Auto-Redução em Forno de Cuba**

Tese apresentada como requisito parcial para obtenção do título de Doutor pelo programa de Engenharia de Materiais e de Processos Químicos e Metalúrgicos do Departamento Engenharia de Materiais da PUC-Rio. Aprovada pela Comissão Examinadora abaixo assinada.

**Prof. José Carlos D'Abreu**

Orientador

Departamento de Ciência dos Materiais e Metalurgia - PUC-Rio

**Prof. José Adilson de Castro**

Co-orientador

EEIMVR / UFF- Universidade Federal Fluminense

**Dr. Hélio Marques Kohler**

Consultor Independente

**Prof. Francisco José Moura**

Departamento de Ciência dos Materiais e Metalurgia – PUC-Rio

**Prof. Roberto José de Carvalho**

Departamento de Ciência dos Materiais e Metalurgia – PUC-Rio

**Prof. José Eugenio Leal**

Coordenador Setorial do Centro Técnico Científico - PUC-Rio

Rio de Janeiro, Julho de 2009

Todos os direitos reservados. É proibida a reprodução total ou parcial do trabalho sem autorização da universidade, da autora e do orientador.

### **Lesly Jeaneth Mamani Paco**

Graduou-se em Engenharia Química na UNSA (Universidade Nacional de San Agustín) em Arequipa, Perú, no ano de 2000; e obteve o título de Mestre em Engenharia Metalúrgica na Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, PUC-Rio, no ano de 2005.

#### Ficha Catalográfica

Paco, Lesly Jeaneth Mamani

Modelamento 3D multifásico multicomponentes da auto-redução em forno de cuba / Lesly Jeaneth Mamani Paco ; orientador: José Carlos D'Abreu ; co-orientador: José Adilson de Castro. – 2009.  
153 f. ; 30 cm

Tese (Doutorado em Engenharia de Materiais)– Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2009.  
Inclui bibliografia

1. Engenharia de materiais – Teses. 2. Auto-redução. 3. Siderurgia. 4. Modelamento matemático. I. D'Abreu, José Carlos. II. Castro, José Adilson de. III. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro. Departamento de Engenharia de Materiais. IV. Título.

CDD: 620.11

Para uma sabia e admirável mãe, Juana  
Para um pai generoso e sobre tudo amigo, Eusebio  
Para quem me demonstra no dia a dia que o amor existe, Omar  
Para meu pequeno príncipe Sebastian  
Para uns amigos incondicionais, Edgar e Yovana

## Agradecimentos

Primeiramente a Deus, pela saúde e perseverança, as quais foram essenciais para a elaboração deste trabalho.

A minha família pela ajuda incondicional que todos me brindaram para fazer possível o término deste trabalho. Muito obrigado pela compreensão e carinho.

Ao Prof. José Carlos D'Abreu pela orientação, paciência e ensinamentos durante a realização deste trabalho.

Ao Prof. José Adilson de Castro pela orientação, incentivo à realização deste trabalho e boa vontade nos momentos difíceis.

À PUC-Rio, através da Vice Reitoria Acadêmica (VRAc), pelos auxílios concedidos, sem os quais este trabalho não poderia ter sido realizado

À Coordenadoria de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior-CAPES, pela bolsa de incentivo à pesquisa.

Aos professores e funcionários do DCMM, pelos conhecimentos transmitidos e apoio administrativo.

À todo o pessoal do departamento DCMM pela oportunidade e amizade.

Aos meus amigos pelos momentos compartilhados.

## Resumo

Mamani Paco, Lesly Jeaneth. **Modelamento 3D Multifásico Multicomponentes da Auto-Redução em Forno de Cuba**. Rio de Janeiro, 2009. 153 p. Tese de Doutorado - Departamento de Ciência dos Materiais e Metalurgia, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

O desenvolvimento de novos processos de redução capazes de utilizar como matérias primas resíduos minero-metalúrgicos, ou baseados na aglomeração a frio de misturas auto-redutoras (Fastmet, ITmk3, Tecnored) tem mostrado ser uma alternativa aos processos convencionais, sendo o principal deles o alto forno. Neste contexto, torna-se importante uma análise aprofundada dos processos operando com aglomerados auto-redutores, tais como os que utilizam os reatores RHF e os fornos de cuba. O presente trabalho objetivou o desenvolvimento de um modelo matemático capaz de simular as condições da zona de redução sólida de um forno de cuba (região superior), que utiliza aglomerado auto-redutor como carga ferrosa. Este modelo permite considerar três fases (sólida e duas fases gasosas) interagindo simultaneamente, via a transferência de quantidade de movimento, energia e massa. Sua fenomenologia foi representada por equações de transporte, resolvidas com base no método de volumes finitos. A solução computacional foi feita através de código desenvolvido em linguagem de programação Fortran e a geração gráfica dos resultados realizada através do programa Tecplot. As fases consideradas no modelo desenvolvido foram: i) fase sólida: constituída por briquetes auto-redutores e o combustível sólido (booster - fração adicionada juntamente com a carga de aglomerados) e, ii) fase gasosa: formada pelo chamado “gás exterior”, constituído por um conjunto de gases que reagem na parte externa dos aglomerados (principalmente pelo gás de baixo, oriundo da parte inferior do forno, e pelo sopro nas ventaneiras secundárias - V2) e pelo denominado “gás interior”, constituído pelo conjunto de gases gerados no interior do aglomerado auto-redutor, resultantes de uma série de reações previstas em sua fenomenologia. O modelo considera 25 reações dentre as quais estão as reações de redução, gaseificação do carvão e combustão do carvão, CO, voláteis, enxofre e do polissacarídeo, além da formação do FeS. Foi possível estudar a influência da variação da vazão da V2, da temperatura e da vazão do

gás de baixo, da taxa de alimentação do briquete e da perda de calor pelas paredes do forno. Os resultados, apresentados graficamente, foram: temperaturas do sólido, do “gás exterior” e do “gás interior”; as condições de redução na atmosfera gasosa (CO do “gás exterior”, CO do “gás interior”, CO<sub>2</sub> do “gás exterior”, CO<sub>2</sub> do “gás interior”); a distribuição dos óxidos de ferro pré-reduzidos e do Fe metálico e a distribuição do grau de redução. Além disso, parâmetros operacionais tais como produção, tempo de residência dos sólidos, volume das fases gasosas, assim como sua composição foram calculados pelo modelo. A partir dessas informações foi possível obter a metalização e, o volume, a temperatura e a composição média do gás de topo. Finalmente, eles demonstraram que a simulação computacional desenvolvida é uma poderosa ferramenta para análise dos parâmetros operacionais da auto-redução em forno de cuba, de custo relativamente baixo e capazes de otimizar o processo estudado.

## **Palavras-chave**

Auto-Redução; Siderurgia; Modelamento Matemático.

## Abstract

Mamani Paco, Lesly Jeaneth. **3D Multiphasic and Multicomponent Modelling of Self-Reducing in a Shaft Furnace**. Rio de Janeiro, 2009. 153p. Thesis of Doutorado – Department of Materials Science and Metallurgy, Pontifical Catholic University of Rio de Janeiro.

The development of new reduction processes capable to use as raw materials mining and metallurgical residues, or based in cold agglomeration of self reducing mixtures (Fastmet, ITmk3, Tecnored) is regarded nowadays as an alternative to conventional processes, being the principal of these the blast furnace. In this context it becomes vital to analyze the behavior of processes operating with self-reducing agglomerates, as those utilizing the RHF and shaft furnaces. The present work aims at the development of a mathematical model capable to simulate the solid state reduction zone conditions of a shaft furnace (upper zone) that utilizes self-reducing agglomerates as the iron source. This model is capable of treating three phases, interacting simultaneously and transferring momentum, energy and mass. The set of phenomenological transport equations are treated through the finite volume method. The computational solution is achieved by the means of a software code developed in Fortran programming language and further, the graphical generation of the results, carried through the Tecplot program. The considered phases for the model are firstly the solid phase consisting in self-reducing agglomerates and a solid fuel (booster – added together with the agglomerate). Secondly, the gaseous phase, formed by a “external gas”, which constitutes on a set of gases that react in the external part of the agglomerates (mainly made out by the low gas – mixture of gases coming from the bottom part of the furnace, blended with the gases blew in the secondary level of tuyeres - V2), and a “internal gas”, another gaseous phase, consisting on the set of gases generated inside the self-reducing agglomerate as the result of a series of foreseen reactions. The model takes into account 25 reactions, amongst which are the reduction reactions, gasification of the coal, the combustions of coal, CO, volatiles, sulfur and polysaccharide and considering also the FeS formation. The model permitted the study of the V2 temperature, low gas temperature, low gas flow, agglomerate feed rate and



wall heat lost influence on the process. The results, here graphically presented, are: solid, “external gas” and “internal gas” temperatures; reduction conditions in the gaseous atmosphere (CO in “external gas”, CO in “internal gas”, CO<sub>2</sub> in “external gas”, CO<sub>2</sub> of the internal gas”); profile of pre-reduced iron oxides and Fe metallic and; distribution profile of the reduction degree. Moreover, operational parameters such as production, the residence time of solids, the volume of the gas phase, as well as its composition had been calculated by the model. From this information it was possible to compute the metallization, the volume, the temperature and the composition of the top gas. Those results confirmed that the computational simulation is a powerful tool for the shaft furnace operational parameters analysis.

## **Keywords**

Self-Reducing; Ironmaking; Mathematical Modelling.

# Sumário

1 Introdução.	19
2 Objetivos e Relevância do trabalho.	21
3 Revisão Bibliográfica	23
3.1. Fundamentação teórica dos processos da Auto-redução	23
3.1.1. Termodinâmica da auto-redução.	23
3.1.2. Cinética da auto-redução	26
3.1.3. Cinética da reação de boudouard	32
3.1.4. Aglomerado Auto-redutor.	33
3.1.5. Processos emergentes	38
3.1.6. Comportamento do enxofre na cuba	43
3.1.6.1. Cinética das reações do enxofre	48
3.2. Modelamento matemático do processo de redução	50
3.2.1. Modelos matemáticos baseados no conceito multi-fluido	53
3.2.1.1. Modelamento matemático considerando quatro fluidos em um leito compacto	54
3.2.1.2. Modelo matemático no estado transiente para um alto forno baseado no conceito multi-fluido.	58
3.2.1.3. Modelo matemático multi-dimensional no estado transiente para o alto forno baseado no conceito multi fluido	60
3.2.1.4. Análise numérica de operações inovadoras no alto forno através do modelo matemático baseado na teoria multi-fluido	62
3.2.1.5. Contribuição à simulação matemática do processo de redução direta em fornos de cuba	64
3.2.1.6. Análise da injeção de diferentes misturas de carvões utilizando o modelo total do alto forno	65
3.3. Modelamento da auto-redução dos óxidos de ferro	66
3.3.1. Modelo matemático do processo TecnoRed – Cuba Superior	66
3.3.2. Modelamento e simulação computacional da auto- redução por volumes finitos de um forno de cuba	70
3.3.3. Modelo termoquímico da auto-redução em fornos de cuba	73

4 Desenvolvimento do modelo	80
4.1. Equipamentos e infra-estrutura.	80
4.2. Formulação do modelo.	80
4.2.1. A conservação da espécie química.	81
4.2.2. Conservação de massa global	82
4.2.3. A conservação da energia	82
4.2.4. A conservação de movimento	83
4.3. Fases consideradas.	83
4.4. Termos fonte	85
4.4.1. Fontes de massa	85
4.4.2. Fonte das equações de momento	100
4.4.3. Fonte das equações de energia	101
4.5. Propriedades das fases	101
4.5.1. Propriedades do gás	101
4.5.2. Propriedades do sólido	103
4.6. Premissas para a construção do modelo.	104
4.7. Esquema do modelo	105
5 Resultados e Discussão	106
5.1. Descrição do forno modelado	106
5.2. Dados considerados para o programa (Caso Base ).	108
5.3. Dados de entrada para o modelo (Caso Base)	109
5.4. Parâmetros avaliados	112
5.5. Gráficos gerados	112
5.5.1. Caso Base	113
5.5.2. Casos comparativos	116
5.6. Análise dos resultados	128
5.6.1. Composição dos produtos sólidos	128
5.6.2. Dados operacionais do gás de topo	129
5.6.3. Parâmetros operacionais gerados	133
6 Conclusões	136
7 Referências Bibliográficas.	139
8 Apêndices	146

## Lista de figuras

Figura 1 – Diagrama de predominância Fe-C-O e Diagrama de Boudouard, mostrando o efeito da variação da pressão sobre o equilíbrio da reação de Boudouard	24
Figura 2 - Etapas da auto-redução	28
Figura 3 - Aglomerado Auto-redutor	34
Figura 4 – Processo TecnoRed	43
Figura 5 - Comportamento da partícula de combustível durante a reação.	50
Figura 6: Esquema de cálculo do modelo.	68
Figura 7 - . Exemplo básico dos resultados do software	70
Figura 8 - Campo de temperatura para o gás no forno de cuba	71
Figura 9 - Distribuição da composição do CO no forno de cuba	72
Figura 10– Divisão do forno em zonas	76
Figura 11 - Resultados da simulação de um Caso Base	79
Figura 12 – Esquema do modelo	105
Figura 13 – Gráfico de um Forno de Auto-redução indicando a parte do forno modelado	107
Figura 14 –Malha de volumes finitos associada à cuba superior de um forno de auto-redução.	107
Figura 15: Dados considerados para o programa (Caso Base)	108
Figura 16: Principais dados de entrada para o modelo (Caso Base)	111
Figura 17 - Evolução das temperaturas no interior do forno de auto-redução para o caso base.	113
Figura 18 - Condições de redução na atmosfera gasosa do caso base	114
Figura 19 - Evolução dos óxidos de ferro e do Fe metálico para as diversas etapas de auto-redução do caso base	115
Figura 20 - Evolução do grau de redução para o caso base	116
Figura 21 - Gráficos mais representativos para o caso 1	117
Figura 22 - Gráficos mais representativos para o caso 2	118
Figura 23 - Gráficos mais representativos para o caso 3	120
Figura 24 - Gráficos mais representativos para o caso 4	121
Figura 25 - Gráficos mais representativos para o caso 5	123
Figura 26 - Gráficos mais representativos para o caso 6.	124
Figura 27 - Gráficos mais representativos para o caso 7	125
Figura 28 - Gráficos mais representativos para o caso 8	127

Figura 29 - Volume do gás de topo	131
Figura 30 - Temperatura media do gás de topo	132
Figura 31 - Relação CO/CO <sub>2</sub> do gás de topo	132
Figura 32 - Grau de redução	134
Figura 33 - Metalização	135

## Lista de tabelas

Tabela 1: Principais parâmetros operacionais	72
Tabela 2: Modelo Trifásico proposto para descrever a cuba superior do processo de auto-redução.	85
Tabela 3: Termos fonte para a fração mássica de espécies químicas	86
Tabela 4: Redução pelo CO	87
Tabela 5: Taxa para redução pelo H <sub>2</sub>	89
Tabela 6: Taxa para a combustão do carbono	90
Tabela 7: Taxa da Reação de Boudouard	91
Tabela 8: Taxa da Reação “Water gás reaction”	92
Tabela 9: Taxa da Reação “ Water gás shift reaction”	92
Tabela 10: Taxa para Combustão de voláteis:	93
Tabela 11: Taxa da combustão do enxofre	94
Tabela 12: Taxa da gaseificação do enxofre	96
Tabela 13: Taxa da reação do SO <sub>2</sub> com hidrogênio	97
Tabela 14: Formação do FeS	98
Tabela 15: Combustão do C <sub>12</sub> H <sub>22</sub> O <sub>11</sub>	98
Tabela 16: Combustão do CO	99
Tabela 17: Redução direta pelo C	99
Tabela 18: Calcinação do CaCO <sub>3</sub>	100
Tabela 19: Termos fonte de momento	100
Tabela 20: Termos fonte de Energia	101
Tabela 21: Características da metade do forno considerado no modelo	106
Tabela 22: Características das fases	109
Tabela 23: Temperaturas de início da reação	109
Tabela 24: Composição da matéria volátil do booster	109
Tabela 25: Composição da matéria volátil do briquete	110
Tabela 26: Composição do aglomerado auto-redutor e dos carvões	110
Tabela 27: Dados do caso base	112
Tabela 28: Casos comparativos	112
Tabela 29: Composição química do DRI [%]	128
Tabela 30: Composição química do char [%]	128
Tabela 31: Dados operacionais do gás de topo	129
Tabela 32: Composição do gás de topo (“gás exterior” e “gás interior”)	130

Tabela 33: Composição media do gás de topo	130
Tabela 34: Parâmetros operacionais	133

## Lista de Abreviaturas, Siglas e Símbolos

$A_i$	Área superficial dos sólidos	$[m^{-1}]$
$A_{i-j}$	Área de contato entre as fases $i$ e $j$	$[m^{-1}]$
$a_j$	Coeficientes para as equações de $C_p$	$[J/kg.K]$
$b_j$	Coeficientes para as equações de $C_p$	$[J/kg.K^2]$
$C_{p,j}$	Capacidade térmica da substância $j$	$[J/kg.K]$
$c_j$	Coeficientes para as equações de $C_p$	$[-]$
$D_{i,j}^T$	Difusividade binária para a espécie $i$ e $j$	$[m/s^2]$
$d_i$	Diâmetro da partícula para a fase $i$	$[m]$
$\dot{E}_{i-j}$	Transferência de calor convectivo entre as fases $i$ e $j$	$[W/m^3]$
$e_i$	Emissividade da fase $i$	$[-]$
$\bar{F}_i^j$	Transferência de movimento entre as fases $i$ e $j$	$[N/m^3]$
$F_m$	Resistência do componente sólido $m$ ao fluxo do gás	$[kg/m^4]$
$f_m$	Fração volumétrica do componente $m$ na fase sólida	$[-]$
$H_i$	Entalpia da fase $i$	$[J/kg]$
$\Delta H_{i,j}^T$	Calor de formação da espécie $j$ na fase $i$ à temperatura $T$	$[J/kg]$



$h_{i-j}$ :	Coeficiente de transferência de calor entre as fases $i$ e $j$	[W/m <sup>2</sup> .K]
$k_{\text{Boltzman}}$ :	Constante de Boltzman	[J/K]
$k_i$ :	Condutividade térmica da fase $i$	[W/m.K]
$k_{\text{film},j}$ :	Resistência à transferência de massa no filme para espécies $j$	[m/s]
$K_{\text{eq}}$	Constante de equilíbrio	[-]
$M_j$ :	Peso molecular da espécie $j$	[kg/kmol]
$P_i$ :	Pressão da fase $i$	[Pa]
$Pr_{i-j}$ :	Número de Prandtl para as fases $i$ e $j$	[-]
$R_n$ :	Taxa da reação $n$	[kmol/m <sup>3</sup> s]
$Re_{i-j}$ :	Número de Reynolds para as fases $i$ e $j$	[-]
$Sh_i$ :	Número de Sherwood para a fase $i$	[-]
$S_\phi$ :	Termo fonte	[-]
$T_i$ :	Temperatura da fase $i$	[K]
$t$ :	tempo	[s]
$\vec{U}_i$ :	Vetor velocidade da fase $i$	[m/s]
$w$ :	Parâmetro estequiométrico da wustita	[-]
$\omega_{(i)}$ :	Fração mássica da espécie	[-]
$y_{i,j}$ :	Fração molar da espécie $j$ na fase $i$	[-]

### Símbolos gregos

$\Gamma_\phi$	Coeficiente de transferência	[-]
$\varepsilon_i$	Fração volumétrica da fase $i$	[-]
$\varepsilon_j$	Energia molecular característica de interação para a espécie $j$	[J]
$\mu_i$	Viscosidade da fase $i$	[Pa.s]
$\Omega$	Colisão integral	[-]
$\sigma_j$	Diâmetro característico da molécula (diâmetro de colisão)	[A°]
$\zeta_m$	Fator de tortuosidade de poros para o componente $m$	[-]
$\rho_i$	Densidade da fase $i$	[kg/m <sup>3</sup> ]
$\phi_i$	Variável dependente	[-]
$\varphi_i$	Fator de forma para a fase $i$	[-]

### Sobrescrito e subscrito

g:	Gás exterior, gás interior
s:	Sólidos