

## 4 Desenvolvimento do modelo

O presente capítulo descreve a metodologia utilizada para a simulação da operação de um forno de cuba utilizando briquetes auto-redutores, booster (fração do combustível adicionada pela cuba central combinada com a carga de aglomerados) e os gases participantes do processo de auto-redução.

A metodologia utilizada baseia-se na teoria multi-fluido, na qual todas as fases se comportam como fluidos e interagem entre si. (Castro et. al. (a, b), 2005). A técnica de volumes finitos foi empregada para a discretização das equações de transporte de massa, momento e energia para um sistema trifásico.

O programa, desenvolvido em três dimensões, permitiu simular a forma real do forno e trabalhar com dados industriais.

### 4.1. Equipamentos e infra-estrutura.

Para a realização do presente trabalho foi utilizado um computador Pentium com os softwares Compaq Visual Fortran e Tecplot.

### 4.2. Formulação do modelo.

O modelo matemático para a descrição dos processos físicos consiste de um conjunto de equações diferenciais baseado na teoria de múltiplos fluidos. A teoria de múltiplos fluidos oferece a possibilidade de introdução de interações de outras fases assim como a auto-interação através do princípio geral representado pela equação de conservação.

As equações de conservação para as três fases estão expressas em uma equação onde se utiliza os índices  $i$  para representar as fases presentes e  $k$  para representar a grandeza pertencente à fase  $i$  correspondente, apresentada no capítulo anterior e que independe do sistema de coordenadas. O parâmetro  $\Gamma_\phi$  é o coeficiente efetivo de transporte por difusão que depende da variável de

estado a ser resolvida ( $\phi$ ). Esta variável genérica  $\phi$  representa a quantidade transportada por unidade de massa.

$$\frac{\partial (\rho_i \phi_k)}{\partial t} + \text{div} (\rho_i \bar{U}_i \phi_k) = \text{div} (\Gamma_{\phi_i} \text{grad} \phi_k) + S_{\phi_i} \quad (22)$$

O primeiro termo do lado esquerdo representa a contribuição transiente, enquanto o outro termo deste lado da equação é o termo de transporte por convecção. No lado direito, o primeiro termo corresponde ao transporte difusivo, sendo o último chamado de termo fonte que representa as diversas interações com as outras fases ou geração/sorvedouro devido a reações químicas.

No caso do presente trabalho o primeiro termo foi desconsiderado, pois o interesse nas previsões do estado estacionário é maior devido à sua correspondência à condição de estabilidade do processo, foco do presente estudo. Portanto, a equação (22) resume-se à equação (23), que foi utilizada para o desenvolvimento do modelo. Nela o termo convectivo representa o transporte devido ao movimento da própria grandeza transportada pelo campo de velocidade; o termo difusivo se refere ao transporte devido a gradientes de concentração ou temperatura; e o termo fonte se refere à geração ou consumo de massa, calor ou momento devido às interações com outras fases ou reações químicas.

$$\text{div} (\rho_i \bar{U}_i \phi_k) = \text{div} (\Gamma_{\phi_i} \text{grad} \phi_k) + S_{\phi_i} \quad (23)$$

O método dos volumes finitos foi utilizado para obter as equações aproximadas, a qual satisfaz a conservação da propriedade em nível de volumes elementares. (Patankar, 1980)

#### 4.2.1. A conservação da espécie química.

Se  $\omega_i$  é a fração mássica de uma espécie química, e na presença de um campo de velocidade  $\mathbf{u}$ , a conservação da espécie química no escoamento de um fluido é denotada por:

$$\operatorname{div}(\rho_i \mathbf{u}_i \omega_k) = \operatorname{div}(\rho_i \operatorname{grad} \omega_k) + S_{\phi_i} \quad (24)$$

Onde:

$\rho_i \mathbf{u}_i \omega_k$  é o fluxo por convecção das espécies

$\operatorname{div}(\rho_i \operatorname{grad} \omega_k)$  representa o fluxo por difusão que é causado normalmente pelos gradientes de  $\omega_i$ . Normalmente ela é expressa pela lei de Fick.

$S_{\phi_i}$  é o termo fonte, ou seja, a taxa de geração ou consumo de espécies químicas por unidade de volume causada pelas reações químicas

$(x, y, z)$  são as três coordenadas cartesianas

$\mathbf{u}$  representa  $u, v$  e  $w$  que são as três componentes do vetor velocidade correspondentes às direções  $x, y$  e  $z$ , respectivamente.

#### 4.2.2. Conservação de massa global

A equação 25 representa a conservação da massa global quando  $\phi$  é igual a 1, isto quer dizer que o total é conservado, pois, por definição, a massa no interior de um sistema não se altera como o tempo para um sistema estacionário, (Patankar, 1980);  $\Gamma_\phi$  assume o valor de zero porque se considera que a massa é homogênea, ou seja, sem transporte efetivo.

$$\operatorname{div}(\rho_i \mathbf{u}_i) = S_i \quad (25)$$

#### 4.2.3. A conservação da energia

A equação da conservação da energia na sua forma mais geral recebe um grande número de influências, conforme equação 26:

$$\text{div} \left( \rho_i \mathbf{u}_i T_k \right) = \text{div} \left( \frac{k_i}{c_{p_i}} \text{grad} T_k \right) + S_{T_i} \quad (26)$$

Onde:

$S_T$  representa a taxa de geração/consumo de calor no meio por unidade de volume devido a convecção,

$\text{div} \left( \frac{k_i}{c_{p_i}} \text{grad} T_k \right)$  representa a influência da transferência de calor por condução entre o fluido, de acordo com a lei de Fourier.

#### 4.2.4. A conservação de movimento

A equação diferencial que governa a conservação de momento é baseada na Segunda Lei de Newton. Esta equação, numa dada direção, para um fluido newtoniano é complicada, não somente devido às tensões cisalhantes e normais que devem ser levados em consideração, mas também porque a lei da viscosidade de Stokes é mais complicada que a lei de Fick e Fourier. Sendo  $\mathbf{u}$  a velocidade na direção  $x$  e  $\mu$  a viscosidade dinâmica, a equação de momento é:

$$\text{div} \left( \rho_i \mathbf{u}_i u_k \right) = \text{div} \left( \mu \text{grad} u_k \right) - \text{grad}(P_i) + F_{u_k}^i \quad (27)$$

Onde  $u_k$  representa as componentes de velocidade  $u, v, w$  nas direções  $x, y, e z$ .

#### 4.3. Fases consideradas.

As fases consideradas neste modelo são:

Fase sólida: constituída de briquetes auto-redutores e booster;

Fase “gás exterior” : que é o conjunto dos gases que reagem na parte externa dos aglomerados e é formada pelo gás de baixo (mistura que ingressa pela parte inferior do forno) e do sopro na V2 (gás de injeção pelas ventaneiras); Nesta fase se realizam as principais reações exotérmicas para a geração de calor.

Fase “gás interior”: os gases próprios do processo de auto-redução que toma lugar dentro do briquete. Nesta fase se realizam principalmente as reações de redução e de Boudouard, a qual, é fortemente endotérmica, por este motivo esta fase consome o calor gerado na fase externa do briquete.

Vale ressaltar, que a diferenciação destes dos tipos de fontes gasosas é uma características importantes no processo da auto-redução, fato que não acontece no processo do alto forno.

Na Tabela 2 são apresentadas todas as espécies químicas que são resolvidas para cada fase. Cada espécie química corresponde a uma equação diferencial parcial, conforme apresentado nas equações (23) e (24).

Tabela 2 – Modelo Trifásico proposto para descrever a cuba superior do processo de auto-redução.

Fases	Espécies químicas	
Gás exterior	CO, CO <sub>2</sub> , O <sub>2</sub> , H <sub>2</sub> , H <sub>2</sub> O, N <sub>2</sub> , SO, SO <sub>2</sub> , H <sub>2</sub> S	
Gás interior	CO, CO <sub>2</sub> , H <sub>2</sub> , H <sub>2</sub> O	
Sólido	Briquetes auto-redutores	C, Voláteis, Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> , Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub> , FeO, Fe, C <sub>12</sub> H <sub>22</sub> O <sub>11</sub> , CaO, Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> , MgO, SiO <sub>2</sub> , H <sub>2</sub> O, S, ganga
	Booster	C, Voláteis, S, CaO, Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> , MgO, SiO <sub>2</sub> , ganga

#### 4.4. Termos fonte

Os termos fontes  $S_{\phi}$  representam a geração ou consumo de energia, massa e momento na unidade de volume. Fontes de massa provêm das equações de continuidade e de espécies devido às reações químicas. Fontes de movimento surgem do arraste entre fases e de gradientes de pressão. Fontes de energia surgem da transferência de calor entre fases devido à convecção, condução e radiação, transferência de calores sensível e de reação acompanhadas de transferência de massa devido às reações químicas, como indicado anteriormente.

##### 4.4.1. Fontes de massa

As fontes relacionadas às espécies químicas são mostradas na Tabela 3.

Tabela 3: Termos fonte para a fração mássica de espécies químicas

Espécies	Termo Fonte
$\text{CO}_{(g)}$	$S_{\text{CO}} = M_{\text{CO}} \sum R$
$\text{CO}_{2(g)}$	$S_{\text{CO}_2} = M_{\text{CO}_2} \sum R$
$\text{H}_{2(g)}$	$S_{\text{H}_2} = M_{\text{H}_2} \sum R$
$\text{H}_2\text{O}_{(g)}$	$S_{\text{H}_2\text{O}} = M_{\text{H}_2\text{O}} \sum R$
$\text{N}_{2(g)}$	$S_{\text{N}_2} = M_{\text{N}_2} \sum R$
$\text{O}_{2(g)}$	$S_{\text{O}_2} = M_{\text{O}_2} \sum R$
$\text{SO}_{2(g)}$	$S_{\text{SO}_2} = M_{\text{SO}_2} \sum R$
$\text{Fe}_{(i)}$	$S_{\text{Fe}_{(i)}} = M_{\text{Fe}_{(i)}} \sum R$
$\text{Fe}_w\text{O}_{(i)}$	$S_{\text{FeO}_{(i)}} = M_{\text{FeO}_{(i)}} \sum R$
$\text{Fe}_3\text{O}_{4(i)}$	$S_{\text{Fe}_3\text{O}_4\text{C}} = M_{\text{Fe}_3\text{O}_4\text{C}} \sum R$
$\text{Fe}_2\text{O}_{3(i)}$	$S_{\text{Fe}_2\text{O}_3\text{C}} = M_{\text{Fe}_2\text{O}_3\text{C}} \sum R$
$\text{H}_2\text{S}_{(g)}$	$S_{\text{H}_2\text{S}} = M_{\text{H}_2\text{S}} \sum R$
$\text{S}_{(i)}$	$S_{\text{S}_{(i)}} = M_{\text{S}_{(i)}} \sum R$
$\text{SO}_{(g)}$	$S_{\text{SO}} = M_{\text{SO}} \sum R$
$\text{FeS}_{(i)}$	$S_{\text{FeS}_{(i)}} = M_{\text{FeS}_{(i)}} \sum R$
$\text{H}_2\text{O}_{(i)}$	$S_{\text{H}_2\text{O}_\text{C}} = -M_{\text{H}_2\text{O}_\text{C}} \sum R$
$\text{C}_{(i)}$	$S_{\text{C}_\text{C}} = M_{\text{C}_{(i)}} \sum R$
$\text{VM}_{(i)}$	$S_{\text{VM}_\text{C}} = M_{\text{VM}_{(i)}} \sum R$
$\text{C}_{12}\text{H}_{22}\text{O}_{11(i)}$	$S_{\text{C}_{12}\text{H}_{22}\text{O}_{11}\text{C}} = M_{\text{C}_{12}\text{H}_{22}\text{O}_{11}\text{C}} \sum R$
( i = briquetes, booster ; (g) = gás exterior, gás interior)	

A seguir são descritos os modelos e mecanismos das principais reações que envolvem a tecnologia da auto-redução. As cinéticas das diversas reações de redução, combustão-gaseificação do carvão, combustão do CO, combustão dos voláteis, combustão-gaseificação do enxofre proveniente do carvão, formação do FeS e combustão do polissacarídeo foram modeladas segundo adaptações de modelos obtidos na literatura (Castro, 2000; Matos, 2006; Castro et. al., (a, b) 2005; Noldin, 2002; D'Abreu et. al., 2002, Noldin et. al., 2004; Takano et. al., 2003).

Como o presente trabalho foi baseado no modelo realizado por Castro (2000) desenvolvido para um alto forno, várias modificações foram realizadas.

Sendo que, na tecnologia da auto-redução, uma das características principais é o contato íntimo entre os reagentes, os valores da taxa de reação foram drasticamente influenciados principalmente pela área superficial dos sólidos, área de contato entre as fases, diâmetro de partículas das fases, e pelo fator de tortuosidade de poros.

O modelo considera várias reações, entre elas está a redução da carga metálica. Como é consenso de que a reação global da auto-redução é uma reação sólido-sólido via intermediários gasosos. Estes intermediários gasosos seriam produtos formados principalmente pelas reações de redução indireta com monóxido de carbono ocorrendo em paralelo. Estas reações heterogêneas se realizam em três possíveis estágios e sua modelagem obedece a modelos obtidos na literatura (Hara et. al., 1974; Yagi et. al., 2000). A Tabela 4 e 5 mostram a redução pelo CO e pelo H<sub>2</sub>, respectivamente.

**Tabela 4: Redução pelo CO**

1	$\text{Fe}_2\text{O}_3 (i) + \text{CO}(g) \rightarrow \text{Fe}_3\text{O}_4 (i) + \text{CO}_2 (g)$	$i = \text{briquete}$ $g = \text{gás exterior, gás interior}$
2	$\frac{w}{4w-3} \text{Fe}_3\text{O}_4 (i) + \text{CO}(g) \rightarrow \frac{3}{4w-3} \text{Fe}_w\text{O} (i) + \text{CO}_2 (g)$	$i = \text{briquete}$ $g = \text{gás exterior, gás interior}$
3	$\text{Fe}_w\text{O} (i) + \text{CO}(g) \rightarrow w\text{Fe}(i) + \text{CO}_2 (g)$	$i = \text{briquete}$ $g = \text{gás exterior, gás interior}$
$R_{n_i} = A_i \frac{\rho_g}{W} \sum_{m=1,3} \alpha_{n_i,m} \left( K_m \frac{\omega_{\text{CO}}}{M_{\text{CO}}} - \frac{\omega_{\text{CO}_2}}{M_{\text{CO}_2}} \right)$		

$$\alpha_{1,1} = a_3 \left( a_2 + b_2 + \dot{b}_3 \right) + \dot{b}_3 \left( a_2 + b_2 \right); \quad \alpha_{1,2} = \alpha_{2,1} = -a_3 \left( b_2 + \dot{b}_3 \right) - b_2 \dot{b}_3$$

$$\alpha_{2,2} = \left( a_1 + b_1 + b_2 \right) \left( a_3 + \dot{b}_3 \right) + a_3 \dot{b}_3; \quad \alpha_{2,3} = \alpha_{3,2} = - \left( a_1 + b_1 \right) \dot{b}_3$$

$$\alpha_{3,3} = \left( a_1 + b_1 \right) \left( a_2 + b_2 + \dot{b}_3 \right) + a_2 \left( b_2 + \dot{b}_3 \right); \quad \alpha_{3,1} = \alpha_{1,3} = -a_2 \dot{b}_3$$

$$W = \alpha_{1,1} \left( a_1 + b_1 \right) + \alpha_{1,2} a_2; \quad A_i = \frac{6\varepsilon_i}{d_i \phi_i}$$

$$a_1 = \frac{1}{x_1^2} \frac{1}{k_1 \left( 1 + 1/k_1 \right)}; \quad a_2 = \frac{1}{x_2^2} \frac{1}{k_2 \left( 1 + 1/k_2 \right)}; \quad a_3 = \frac{1}{x_3^2} \frac{1}{k_3 \left( 1 + 1/k_3 \right)}$$



$$b_1 = \frac{(x_2 - x_1) d_i}{x_2 x_1 2D_1}; b_2 = \frac{(x_3 - x_2) d_i}{x_3 x_2 2D_2}; b_3 = \frac{(x_4 - x_3) d_i}{x_4 x_3 2D_3}$$

$$\dot{b}_3 = b_3 + \frac{1}{k_{\text{film,CO}_2}}$$

$$x_1 = \frac{d_{\text{Fe}_2\text{O}_3(i)}}{d_i}; x_2 = \frac{d_{\text{Fe}_3\text{O}_4(i)}}{d_i}; x_3 = \frac{d_{\text{Fe}_w\text{O}(i)}}{d_i}; x_4 = 1$$

$$K_1 = \exp\left(7,255 + \frac{3720}{T_i}\right); k_1 = 10^{-2} \exp\left(3,16 - \frac{50,2}{8,3146 \times 10^{-3} T_i}\right);$$

$$D_1 = 10^{-4} \exp\left(8,76 - \frac{14100}{T_i}\right)$$

$$K_2 = \exp\left(5,289 - \frac{4711}{T_i}\right); k_2 = 10^{-2} \exp\left(2,09 - \frac{40}{8,3146 \times 10^{-3} T_i}\right);$$

$$D_2 = 10^{-4} \exp\left(2,77 - \frac{7200}{T_i}\right)$$

$$K_3 = \exp\left(-3,127 + \frac{2879}{T_i}\right); k_3 = 10^{-2} \exp\left(5,42 - \frac{61,4}{8,3146 \times 10^{-3} T_i}\right);$$

$$D_3 = 10^{-4} \exp\left(5,09 - \frac{8800}{T_i}\right)$$

$$k_{\text{film,CO}_2} = D_{\text{CO}_2, \text{N}_2}^{T_{\text{ave}}} \frac{\text{Sh}_i}{d_i}; \text{Sh}_i = 2 + 0,39 \text{Re}_i^{0,5} \left( \frac{\mu_g}{\rho_g D_{\text{CO}_2, \text{N}_2}^{T_{\text{ave}}}} \right)^{1/3}; T_{\text{ave}} = \frac{T_g + T_i}{2}$$

$$\frac{d_{\text{Fe}_2\text{O}_3 \llcorner}}{d_i} = \frac{1}{\sigma} \left( \frac{2\omega_{\text{Fe}_2\text{O}_3 \llcorner}}{M_{\text{Fe}_2\text{O}_3}} \right)^{1/3}; \frac{d_{\text{Fe}_3\text{O}_4 \llcorner}}{d_i} = \frac{1}{\sigma} \left( \frac{2\omega_{\text{Fe}_2\text{O}_3 \llcorner}}{M_{\text{Fe}_2\text{O}_3}} + \frac{3\omega_{\text{Fe}_3\text{O}_4 \llcorner}}{M_{\text{Fe}_3\text{O}_4}} \right)^{1/3}$$

$$\frac{d_{\text{Fe}_w\text{O} \llcorner}}{d_i} = \frac{1}{\sigma} \left( \frac{2\omega_{\text{Fe}_2\text{O}_3 \llcorner}}{M_{\text{Fe}_2\text{O}_3}} + \frac{3\omega_{\text{Fe}_3\text{O}_4 \llcorner}}{M_{\text{Fe}_3\text{O}_4}} + \frac{w\omega_{\text{Fe}_w\text{O} \llcorner}}{M_{\text{Fe}_w\text{O}}} \right)^{1/3}$$

$$\sigma^3 = \frac{2\omega_{\text{Fe}_2\text{O}_3 \llcorner}}{M_{\text{Fe}_2\text{O}_3}} + \frac{3\omega_{\text{Fe}_3\text{O}_4 \llcorner}}{M_{\text{Fe}_3\text{O}_4}} + \frac{w\omega_{\text{Fe}_w\text{O} \llcorner}}{M_{\text{Fe}_w\text{O}}}$$

Tabela 5: Taxa para redução pelo H<sub>2</sub>

4	$\text{Fe}_2\text{O}_3 (i) + \text{H}_2(\text{g}) \rightarrow \text{Fe}_3\text{O}_4 (i) + \text{H}_2\text{O}(\text{g})$	$i = \text{briquete}$ $g = \text{gás exterior, gás interior}$
5	$\frac{w}{4w-3} \text{Fe}_3\text{O}_4 (i) + \text{H}_2(\text{g}) \rightarrow \frac{3}{4w-3} \text{Fe}_w\text{O} (i) + \text{H}_2\text{O}(\text{g})$	$i = \text{briquete}$ $g = \text{gás exterior, gás interior}$
6	$\text{Fe}_w\text{O} (i) + \text{H}_2(\text{g}) \rightarrow w\text{Fe}(i) + \text{H}_2\text{O}(\text{g})$	$i = \text{briquete}$ $g = \text{gás exterior, gás interior}$
$R_{n_i} = A_i \frac{\rho_g}{W} \sum_{m=1,3} \alpha_{n_i,m} \left( K_m \frac{\omega_{\text{H}_2}}{M_{\text{H}_2}} - \frac{\omega_{\text{H}_2\text{O}}}{M_{\text{H}_2\text{O}}} \right)$		

Os coeficientes do modelo das três interfaces para a redução pelo hidrogênio são calculados da mesma forma que para o monóxido de carbono colocando a respectiva constante de equilíbrio e constante da taxa como segue:

$$K_4 = \exp\left(10,32 + \frac{362}{T_i}\right); \quad k_4 = 10^{-2} \exp\left(4,49 - \frac{33,4}{8,3146 \times 10^{-3} T_i}\right);$$

$$D_4 = 10^{-4} \exp\left(3,43 - \frac{4200}{T_i}\right)$$

$$K_5 = \exp\left(8,98 - \frac{8580}{T_i}\right); \quad k_5 = 10^{-2} \exp\left(6,70 - \frac{58,2}{8,3146 \times 10^{-3} T_i}\right);$$

$$D_5 = 10^{-4} \exp\left(5,64 - \frac{6800}{T_i}\right)$$

$$K_6 = \exp\left(1,30 - \frac{2070}{T_i}\right); \quad k_6 = 10^{-2} \exp\left(6,97 - \frac{57,1}{8,3146 \times 10^{-3} T_i}\right);$$

$$D_6 = 10^{-4} \exp\left(4,77 - \frac{5900}{T_i}\right)$$

$$k_{\text{filim,H}_2\text{O}} = D_{\text{H}_2\text{O,N}_2}^{T_{\text{ave}}} \frac{\text{Sh}_i}{d_i}; \quad \text{Sh}_i = 2 + 0,39 \text{Re}_i^{0,5} \left( \frac{\mu_g}{\rho_g D_{\text{H}_2\text{O,N}_2}^{T_{\text{ave}}}} \right)^{1/3}; \quad T_{\text{ave}} = \frac{T_g + T_i}{2}$$

O programa levou em consideração modelos das reações do carbono. Dentre as principais, ocorrem as reações de Boudouard, combustão e gás d'água devido à presença do carbono em contato com atmosfera rica em CO<sub>2</sub> e

H<sub>2</sub>O ambos os resultados da redução, calcinação ou liberação de umidade no interior do briquete. Por outro lado a reação “gás shift” desempenha um papel importante na homogeneização da fase gasosa.

Na Tabela 6 apresenta-se a equação da taxa para as reações de combustão completa e incompleta da combustão do booster. A granulometria do booster é diferente da granulometria do carvão do briquete. Esta característica foi considerada para calcular as taxas.

**Tabela 6: Taxa para a combustão do carbono**

7	$C(i) + 1/2O_2(g) \rightarrow CO(g)$ (parcial)	$i = \text{booster}$ $g = \text{gás exterior}$
8	$C(i) + O_2(g) \rightarrow CO_2(g)$ (total)	$i = \text{booster}$ $g = \text{gás exterior}$
$R_7 = \frac{a}{1+a} R_{ave} \text{ e } R_8 = \frac{1}{1+a} R_{ave}$ $R_{ave} = \left( \frac{\varepsilon_g \rho_g \omega_{O_2(g)}}{M_{O_2}} \right) \left\{ \frac{d_i \varphi_i}{A_i D_{O_2, N_2}^{T_{ave}} Sh_i} + \frac{1}{\eta k_{ave}} \right\}^{-1}$		

$$a = 2500 \exp\left(-\frac{12400}{1,987T_i}\right); \quad k_{ave} = 7260RT_g \exp\left(-\frac{17980}{T_{ave}}\right); \quad T_{ave} = \frac{T_g + T_i}{2};$$

$$A_i = \frac{6\varepsilon_i}{d_i \varphi_i}$$

$$\eta = \left[ \frac{d_i}{6} \sqrt{\frac{k_{ave} \delta_i}{\zeta_i D_{O_2, N_2}^{T_{ave}}}} \right]^{-1} \left\{ \left[ \tanh\left( \frac{d_i}{6} \sqrt{\frac{k_{ave} \delta_i}{\zeta_i D_{O_2, N_2}^{T_{ave}}}} \right) \right]^{-1} - \left[ \frac{d_i}{2} \sqrt{\frac{k_{ave} \delta_i}{\zeta_i D_{O_2, N_2}^{T_{ave}}}} \right]^{-1} \right\}$$

O carvão na fase sólida é também consumido pela reação Boudouard e gás d'água as quais procedem significativamente para temperaturas maiores a 900°C As taxas destas reações são descritas por um controle misto –químico e difusional (Nogami, et. al., 1992; Yagi et. al., 2000). A reação “*water gás shift reaction*” é uma reação homogênea e reversível, a qual mantém o equilíbrio entre o carbono e o hidrogênio, seu modelamento obedece a uma equação de taxa de segunda ordem. (Takahashi et. al. (b), 1984, Yagi et. al., 2000).

A reação de Boudouard se realiza principalmente dentro do briquete (carvão do aglomerado), e ela é muito importante já que dita reação produz o CO que é o principal redutor nos processos da auto-redução.

As Tabelas 7, 8 e 9 mostram o equacionamento dessas taxas.

**Tabela 7: Taxa da Reação de Boudouard**

9	$C(i) + CO_2(g) \rightarrow 2CO(g)$	$i =$ briquete, booster $g =$ gás exterior, gás interior
$R_9 = \frac{\rho_g \omega_{CO_2(g)}}{M_{CO_2}} \left( \frac{1}{A_i k_{film, CO_2}} + \frac{1}{\eta k_{g_i}} \right)^{-1}$		

$$k_9 = \frac{k_1}{1 + k_2 P_{CO} + k_3 P_{CO_2}} \rho_i \varepsilon_i \omega_i 82,056 \times 10^{-3} T_g; \quad k_1 = \frac{1}{60} \exp\left(19,875 - \frac{66350}{1.987 T_i}\right);$$

$$k_2 = \exp\left(-6,688 + \frac{21421}{1,987 T_i}\right); \quad k_3 = \exp\left(31,615 - \frac{88168}{1,987 T_i}\right)$$

$$P_{\omega_j} = \frac{82,056 \times 10^{-3} \rho_g T_g \omega_j}{M_{\omega_j}}; \quad (j=CO, CO_2); \quad k_{film, CO_2} = D_{CO_2, N_2}^{T_{ave}} \frac{Sh_i}{d_i \phi_i}; \quad A_i = \frac{6 \varepsilon_i}{d_i \phi_i}$$

$$\eta = \left[ \frac{d_i}{6} \sqrt{\frac{k_{g_i} \delta_i}{\zeta_i D_{O_2, N_2}^{T_{ave}}}} \right]^{-1} \left\{ \left[ \tanh\left( \frac{d_i}{6} \sqrt{\frac{k_{g_i} \delta_i}{\zeta_i D_{O_2, N_2}^{T_{ave}}}} \right) \right]^{-1} - \left[ \frac{d_i}{2} \sqrt{\frac{k_{g_i} \delta_i}{\zeta_i D_{O_2, N_2}^{T_{ave}}}} \right]^{-1} \right\};$$

$$T_{ave} = \frac{T_g + T_i}{2}$$

$$\delta_i = 1; \quad \zeta_i = 0.2$$

Tabela 8: Taxa da Reação “Water gás reaction”

10	$C(i) + H_2O(g) \rightarrow CO(g) + H_2(g)$	$i =$ briquete, booster $g =$ gás exterior, gás interior
$R_{10} = \frac{\rho_g \omega_{H_2O,g}}{M_{H_2O}} \left[ \frac{1}{A_i k_{film,H_2O}} + \frac{1}{\eta k_{10}} \right]$		

$$k_{10} = \frac{k_4}{1 + k_2 P_{CO} + k_3 P_{CO_2} + k_5 P_{H_2O}} \omega_{C,i} \rho_i \varepsilon_i 82,056 \times 10^{-3} T_g;$$

$$k_{film,H_2O} = D_{H_2O,N_2}^{T_{ave}} \frac{Sh_i}{d_i}$$

$$Sh_i = 1,5 Re_g^{0,55}; k_2 = 10,3 \frac{M_{H_2O}}{M_{CO}}; k_3 = \frac{M_{H_2O}}{M_{CO_2}} \exp\left(14,24 - \frac{18350}{T_i}\right); A_i = \frac{6\varepsilon_i}{d_i \varphi_i}$$

$$k_4 = \frac{1}{3600 M_C} \exp\left(22,35 - \frac{26320}{T_i}\right); k_5 = \exp\left(29,59 - \frac{36760}{T_i}\right)$$

$$\eta = \left[ \frac{d_i}{6} \sqrt{\frac{k_{10,i} \delta_i}{\zeta_i D_{H_2O,N_2}^{T_{ave}}}} \right]^{-1} \left\{ \left[ \tanh\left( \frac{d_i}{6} \sqrt{\frac{k_{10,i} \delta_i}{\zeta_i D_{H_2O,N_2}^{T_{ave}}}} \right) \right]^{-1} - \left[ \frac{d_i}{2} \sqrt{\frac{k_{10,i} \delta_i}{\zeta_i D_{H_2O,N_2}^{T_{ave}}}} \right]^{-1} \right\}$$

$$\delta_i = 1; \zeta_i = 0,2; P_{\omega_j} = \frac{82,056 \times 10^{-3} \rho_g T_g \omega_j}{M_{\omega_j}}$$

Tabela 9: Taxa da Reação “Water gás shift reaction”

11	$CO_2(g) + H_2(g) \leftrightarrow CO(g) + H_2O(g)$	$g =$ gás exterior, gás interior
$R_{11} = \frac{1000}{(0,1325)^2} \varepsilon_s \left( \overset{\text{briquete}}{\rightarrow} k_{11} \left( P_{CO} P_{H_2O} - \frac{P_{CO_2} P_{H_2}}{K_{11}} \right) \right)$		

$$P_{\omega_j} = \frac{82,056 \times 10^{-3} \rho_g T_g \omega_j}{M_{\omega_j}}; K_{11} = \exp\left(-3,5414 + \frac{3863,7}{T_i}\right)$$

$$k_{11} = \alpha k_1 + \left( -\alpha \overset{\text{briquete}}{\rightarrow} k_3 \right) \text{ para } \left( P_{CO} P_{H_2O} - \frac{P_{CO_2} P_{H_2}}{K_{11}} \right) \geq 0 \text{ e}$$

$$k_{11} = k_2 + \alpha_4 \bar{K}_{11} \text{ para } \left( P_{\text{CO}} P_{\text{H}_2\text{O}} - \frac{P_{\text{CO}_2} P_{\text{H}_2}}{K_{12}} \right) < 0$$

$$k_1 = 93.3 \exp\left(\frac{-7,32}{8,3146 \times 10^{-3} T_g}\right); \quad k_2 = 136 \exp\left(\frac{-7,75}{8,3146 \times 10^{-3} T_g}\right)$$

$$k_3 = 1,83 \times 10^{-5} \exp\left(\frac{7,84 \times 10^{-3}}{8,3146 \times 10^{-3} T_g}\right); \quad k_4 = 8,83 \times 10^{-2} \exp\left(\frac{4,56}{8,3146 \times 10^{-3} T_g}\right)$$

Quando partículas de carvão são aquecidas acima de 700K, produtos gasosos e líquidos são desprendidos. Os produtos gasosos contêm hidrocarbonetos de baixo peso molecular como monóxido de carbono, hidrogênio, etc. Este processo é chamado de desvolatilização. (Ishii, 2000)

Define-se como conteúdo de matéria volátil no carvão como a perda de peso até certa temperatura e determinado tempo – por exemplo, 900±20°C e 7 min. no Japanese Industrial Standard (Ishii, 2000).

Modelos de desvolatilização de carvões são amplamente divulgados na literatura (Castro et. al., 2004). Neste trabalho foi adaptado um modelo para representar a desvolatilização dos voláteis do booster, conforme mostrado na Tabela 10.

**Tabela 10: Taxa para Combustão de voláteis:**

12	$\text{voláteis}_{(C)} + \alpha_1 \text{O}_2 \rightarrow \alpha_2 \text{CO}_2(\text{g}) + \alpha_3 \text{H}_2\text{O}(\text{g}) + \alpha_4 \text{N}_2(\text{g})$	g=gás exterior
$R_{12} = 23,6 k_{\text{eff}} \left( \frac{\mu_g \varepsilon_t}{\rho_g k_t} \right)^{1/4} \left( \frac{\varepsilon_t}{k_t} \right) \min \left( \varepsilon_c \rho_c \omega_{\text{VM}_{\text{pc}}}, \varepsilon_g \rho_g \omega_{\text{O}_2} \frac{M_{\text{VM}}}{\alpha_1 M_{\text{O}_2}} \right)$		
13	$\text{voláteis}_{(C)} + \alpha_5 \text{CO}_2 \rightarrow \alpha_6 \text{CO}(\text{g}) + \alpha_7 \text{H}_2(\text{g}) + \alpha_8 \text{N}_2(\text{g})$	g= gás interior, gás exterior
$R_{13} = 23,6 k_{\text{eff}} \left( \frac{\mu_g \varepsilon_t}{\rho_g k_t} \right)^{1/4} \left( \frac{\varepsilon_t}{k_t} \right) \min \left( \varepsilon_c \rho_c \omega_{\text{VM}_c}, \varepsilon_g \rho_g \omega_{\text{CO}_2} \frac{M_{\text{VM}}}{\alpha_5 M_{\text{CO}_2}} \right)$		

$$k_t = 0,03 \left| \bar{U}_g \right|^{1/2}; \quad \varepsilon_t = \frac{k_t^{0.5}}{0,01}$$

A estequiometria das reações 12 e 13 são dadas por análise imediata do carvão (Castro, 2000):

$$\delta = \frac{\omega_{C_{VM}}}{M_C} + \frac{\omega_{H_{VM}}}{M_H} + \frac{\omega_{O_{VM}}}{M_O} + \frac{\omega_{N_{VM}}}{M_N}; \alpha_1 = \frac{\omega_{C_{VM}}}{\delta M_C} + \frac{\omega_{H_{VM}}}{4\delta M_H} - \frac{\omega_{O_{VM}}}{2\delta M_O}$$

$$\alpha_2 = \frac{\omega_{C_{VM}}}{\delta M_C}; \alpha_3 = \frac{\omega_{H_{VM}}}{4\delta M_H}; \alpha_4 = \frac{\omega_{O_{VM}}}{2\delta M_O}$$

$$\alpha_5 = \frac{\omega_{C_{VM}}}{\delta M_C} - \frac{\omega_{O_{VM}}}{2\delta M_O}; \alpha_6 = \frac{\omega_{C_{VM}}}{\delta M_C} + \alpha_5; \alpha_7 = \frac{\omega_{H_{VM}}}{\delta M_H}; \alpha_8 = \frac{\omega_{N_{VM}}}{2\delta M_N}$$

A redução do minério de ferro, na auto-redução, acontece sob a existência de enxofre gasoso proveniente principalmente do carvão (Hayashi & Iguchi, 1996). A combustão do carvão dá lugar à formação de SO e SO<sub>2</sub>.

Apresenta-se a continuação, na Tabela 11, a queima parcial (gerando SO) e total (fornecendo SO<sub>2</sub>) do enxofre.

**Tabela 11: Taxa da combustão do enxofre**

14	$S(i) + O_2(g) \leftrightarrow SO_2(g)$	<i>i</i> = booster <i>g</i> =gás exterior
15	$S(i) + 1/2O_2(g) \leftrightarrow SO(g)$	<i>i</i> = booster <i>g</i> =gás exterior
$R_{14} = \frac{a}{1+a} R_{ave}; R_{15} = \frac{1}{1+a} R_{ave};$ $R_{ave} = \left( \frac{\varepsilon_g \rho_g \omega_{O_2}}{M_{O_2}} \right) \left\{ \frac{d_i \phi_i}{A_i D_{O_2, \omega_2}^{T_{ave}} Sh_i} + \frac{1}{\eta k_{ave}} \right\}^{-1}$		
$a = 2500 \exp\left(-\frac{12400}{1.987T_i}\right); k_{ave} = 7260RT_g \exp\left(-\frac{17980}{T_{ave}}\right); T_{ave} = \frac{T_g + T_i}{2}; A_i = \frac{6\varepsilon_i}{d_i \phi_i};$ $\eta = \left[ \frac{d_i}{6} \sqrt{\frac{k_{ave} \delta_i}{\zeta_i D_{O_2, N_2}^{T_{ave}}}} \right]^{-1} \left\{ \left[ \tanh\left( \frac{d_i}{6} \sqrt{\frac{k_{ave} \delta_i}{\zeta_i D_{O_2, N_2}^{T_{ave}}}} \right) \right]^{-1} - \left[ \frac{d_i}{2} \sqrt{\frac{k_{ave} \delta_i}{\zeta_i D_{O_2, N_2}^{T_{ave}}}} \right]^{-1} \right\};$ $\delta_i = 1; \zeta_i = 0,4$		

Analogamente às reações de Boudouard e “Water gás shift reaction”, na Tabela 12 estão reportadas as ocorrentes reações de gaseificação e equilíbrio do enxofre.



Tabela 12: Taxa da gaseificação do enxofre

16	$S(i) + SO_2(g) \rightarrow 2SO(g)$	$i = \text{booster}$ $g = \text{gás exterior}$
$R_{16} = \frac{\rho_g \omega_{SO_2}}{M_{SO_2}} \left( \frac{1}{A_i k_{\text{film}, SO_2}} + \frac{1}{\eta k_{(16)}} \right)^{-1}$		
$k_{(16)i} = \frac{k_1}{1 + k_2 P_{SO} + k_3 P_{SO_2}} \rho_i \varepsilon_i \omega_i 82,056 \times 10^{-3} T_g ;$ $k_1 = \frac{1}{60} \exp\left(19,875 - \frac{66350}{1,987 T_i}\right); k_2 = \exp\left(-6,688 + \frac{21421}{1,987 T_i}\right);$ $k_3 = \exp\left(31,615 - \frac{88168}{1,987 T_i}\right); k_{\text{film}, SO_2} = D_{SO_2, N_2}^{T_{\text{ave}}} \frac{Sh_i}{d_i \varphi_i}$ $P_{\omega_j} = \frac{82,056 \times 10^{-3} \rho_g T_g \omega_j}{M_{\omega_j}} ; (j = SO, SO_2) ; ; A_i = \frac{6 \varepsilon_i}{d_i \varphi_i}$ $\eta = \left[ \frac{d_i}{6} \sqrt{\frac{k_{10i} \delta_i}{\zeta_i D_{O_2, N_2}^{T_{\text{ave}}}}} \right]^{-1} \left\{ \left[ \tanh\left( \frac{d_i}{6} \sqrt{\frac{k_{10i} \delta_i}{\zeta_i D_{O_2, N_2}^{T_{\text{ave}}}}} \right) \right]^{-1} - \left[ \frac{d_i}{2} \sqrt{\frac{k_{10i} \delta_i}{\zeta_i D_{O_2, N_2}^{T_{\text{ave}}}}} \right]^{-1} \right\} ; T_{\text{ave}} = \frac{T_g + T_i}{2} ;$ $\delta_c = 1 ; \zeta_c = 0,2$		

O mecanismo das reações  $SO_2-H_2$  apresentado por Matos (2006) segue o mesmo mecanismo da reação “Water gás shift reaction”, uma vez que se trata de uma reação homogênea que ocorre na mesma região de reação do dióxido de carbono. Por se tratar de uma reação homogênea e ocorrer em regiões de elevada temperatura a velocidade desta reação está diretamente relacionada com a pressão parcial dos componentes da fase gasosa influenciado pelo catalisador. (Matos, 2006).

O gás  $SO_2$  em presença de hidrogênio reage formando o  $H_2S$  como mostrado na Tabela 13.

Tabela 13: Taxa da reação do SO<sub>2</sub> com hidrogênio

17	SO <sub>2</sub> (g) + 3H <sub>2</sub> (g) → 2H <sub>2</sub> O(g) + H <sub>2</sub> S(g)	g=gás exterior
$R_{17} = \varepsilon_s \left( k_{17} \left( P_{H_2O} P_{H_2S} - \frac{P_{SO_2} P_{H_2}}{K_{17}} \right) \right)$		
$P_{\omega_j} = \frac{82,056 \times 10^{-3} \rho_g T_g \omega_j}{M_{\omega_j}}; K_{17} = \exp\left(-3,5414 + \frac{3863,7}{T_i}\right);$		
$k_{17} = \alpha k_1 + (1-\alpha) k_3, \text{ para } \left( P_{H_2O} P_{H_2S} - \frac{P_{SO_2} P_{H_2}}{K_{17}} \right) \geq 0 \text{ e}$		
$k_{17} = \beta k_2 + (1-\beta) k_4 \bar{K}_{17}, \text{ para } \left( P_{H_2O} P_{H_2S} - \frac{P_{SO_2} P_{H_2}}{K_{17}} \right) < 0;$		
$k_1 = 93,3 \exp\left(\frac{-7,32}{8,3146 \times 10^{-3} T_g}\right) \quad k_2 = 136 \exp\left(\frac{-7,75}{8,3146 \times 10^{-3} T_g}\right)$		
$k_3 = 1,83 \times 10^{-5} \exp\left(\frac{7,84 \times 10^{-3}}{8,3146 \times 10^{-3} T_g}\right); \quad k_4 = 8,83 \times 10^{-2} \exp\left(\frac{4,56}{8,146 \times 10^{-3} T_g}\right)$		

Dependendo do potencial de enxofre, o ferro metalizado pode ser sulfurizado. Testes realizados com altos potenciais de enxofre mostram que o ferro metalizado pode formar sulfetos ou oxissulfetos perto da superfície de reação e podem preencher os poros do ferro reduzido e retardando o processo de redução. (Hayashi & Iguchi, 1996).

Na reação da formação do FeS foram consideradas as velocidades indicadas na Tabela 14.

Tabela 14: Formação do FeS

18	$3\text{Fe}(i) + \text{SO}_2(g) \rightarrow \text{FeS}(i) + 2\text{FeO}(i)$	$i = \text{briquete}$ $g = \text{gás exterior}$
19	$2\text{FeO}(i) + 3\text{S}(i) \rightarrow 2\text{FeS}(i) + \text{SO}_2(g)$	$i = \text{briquete}$ $g = \text{gás interior}$
$R_{18} = k' \left( p\text{SO}_2 - \left( \frac{1}{K_{\text{eq}}} \right) \right)$ $R_{18} = k' \left( p\text{SO}_2 - \left( \frac{1}{e^{\left( \frac{76,792 - 0,0274T}{RT} \right)}} \right) \right)$ $R_{19} = k'_{19} A_i \quad \text{onde } A_i = \frac{6\varepsilon_i}{d_i \varphi_i}$ $k'_{19} = B \exp^{\frac{-\Delta G}{T}}$ $\Delta G = \frac{168406 - 143,93T}{8,314}$ $B = 0,1$		

A composição química do briquete auto-redutor contém uma percentagem de polissacarídeo, a qual em presença de  $\text{CO}_2$  reage e forma monóxido de carbono e hidrogênio. A presença do  $\text{C}_{12}\text{H}_{22}\text{O}_{11}$  dá lugar à reação mostrada na Tabela 15.

Tabela 15: Combustão do  $\text{C}_{12}\text{H}_{22}\text{O}_{11}$ 

20	$\text{C}_{12}\text{H}_{22}\text{O}_{11}(i) + \text{CO}_2(g) \rightarrow 13\text{CO}(g) + 11\text{H}_2(g)$	$i = \text{briquete}$ $g = \text{gás interior}$
$R_{20} = k_{20} p\text{CO}_2 [\text{C}_{12}\text{H}_{22}\text{O}_{11}]$ $k_{20} = 30 \times 10^6 \exp^{\frac{-13000}{RT}}$		

O monóxido de carbono do gás de baixo reage com o oxigênio proveniente da injeção de ar pelas ventaneiras. A reação de combustão de CO faz uma contribuição importante de calor no processo, indispensável para a ocorrência da reação de Boudouard. Tabela 16.

**Tabela 16: Combustão do CO**

21	$\text{CO(g)} + 1/2\text{O}_2\text{(g)} \rightarrow \text{CO}_2\text{(g)}$	$i = \text{briquete}$ $g = \text{gás exterior}$
$R_{21} = k_{21} p_{\text{CO}} p_{\text{CO}_2}$ $k_{21} = 56,5 \times 10^{-3} T^{1,25} \exp \frac{-25300}{RT}$		

Na auto-redução, as reações sólido-sólido entre os grãos de carbono e os óxidos de ferro, ocorrem de maneira limitada, devido às condições cinéticas desfavoráveis a partir de seu início. No presente modelo foram consideradas as reações no estado sólido na qual a taxa é proporcional a área de contato óxido de ferro-carvão e a difusão do carbono na matriz. Ditas reações têm como produto o  $\text{CO}_2$ , importante para o início da reação de Boudouard. As três reações são mostradas na Tabela 17.

**Tabela 17: Redução direta pelo C**

22	$6\text{Fe}_2\text{O}_3\text{(i)} + \text{C(i)} \rightarrow 4\text{Fe}_3\text{O}_4\text{(i)} + \text{CO}_2\text{(g)}$	$i = \text{briquete}$ $g = \text{gás interior}$
23	$2\text{Fe}_3\text{O}_4\text{(i)} + \text{C(i)} \rightarrow 6\text{FeO(i)} + \text{CO}_2\text{(g)}$	$i = \text{briquete}$ $g = \text{gás interior}$
24	$2\text{FeO(i)} + \text{C(i)} \rightarrow 2\text{Fe(i)} + \text{CO}_2\text{(g)}$	$i = \text{briquete}$ $g = \text{gás interior}$
$R_{22} = k'[\text{Fe}_2\text{O}_3] [\text{C}_i]$ $R_{23} = k'[\text{Fe}_3\text{O}_4] [\text{C}_i]$ $R_{24} = k'[\text{FeO}] [\text{C}_i]$ $k' = 7,86 T^{1,25} \exp \frac{-12400}{RT}$		

A presença de calcário na composição química do briquete dá condições para a ocorrência da reação de calcinação apresentada na Tabela 18. Esta reação gera o  $\text{CO}_2$  e aporta no desencadeamento da reação de Boudouard.

Tabela 18: Calcinação do  $\text{CaCO}_3$ 

25	$\text{CaCO}_3 \rightarrow \text{CaO} + \text{CO}_2$	$i = \text{briquete}$ $g = \text{gás exterior}$
$R_{25} = k'_{25} k_{\text{filmCO}_2} A_i \quad \text{onde} \quad A_i = \frac{6\varepsilon_i}{d_i \varphi_i}$ $k'_{25} = B \exp \frac{-\Delta G}{T}$ $\Delta G = \frac{168406 - 143,93T}{8,314}$ $B = 0,1$		

#### 4.4.2. Fonte das equações de momento

Os termos fonte de momento para as fases são apresentados na Tabela 19:

Tabela 19: Termos fonte de momento

Fase	Termo fonte
Gás(*)	$S_\phi = -\text{grad} \left[ \mathbf{p}_g - \vec{F}_g^s \right]$
Sólido	$S_\phi = -\text{grad} \left[ \mathbf{p}_s - \vec{F}_s^g \right]$

(\*) Fase gás exterior ou fase gás interior

A equação de Ergun foi utilizada para a interação entre as fases gás e sólido (briquete, booster). (Hatano & Kurita, 1980; Poirier, 1994)

$$F_m = 150\mu_g \frac{1}{|\mathbf{U}_g - \mathbf{U}_s|} \left( \frac{\varepsilon_m}{\left( \left\langle -\varepsilon_m \right\rangle d_m \varphi_m \right)} \right)^2 + 1,75\rho_g \left( \frac{\varepsilon_m}{\left( \left\langle -\varepsilon_m \right\rangle d_m \varphi_m \right)} \right) \quad (28)$$

Onde  $m$  representa os componentes da carga (briquete, booster).

#### 4.4.3. Fonte das equações de energia

A Tabela 20 apresenta os termos fonte de energia.

**Tabela 20: Termos fonte de Energia**

Fase	Termo fonte
Gás <sup>(*)</sup>	$S_{\phi} = -\dot{E}_g^s + \sum R_n \Delta H_n$
Sólido	$S_{\phi} = -\dot{E}_s^g + \sum R_n \Delta H_n$

(\*) Fase gás exterior ou fase gás interior

A fonte de energia devido à transferência de calor convectivo foi calculada pela equação:

$$\dot{E}_i^j = h_{i-j} A_{i-j} [T_i - T_j] \quad (29)$$

O coeficiente de transferência de calor convectivo sólido-gás foi calculado pela equação de Ranz-Marshall, modificada por Akiyama et. al. para utilização em leitos em movimento (Akiyama, 1993)

$$h_{g-s} = \frac{k_g}{d_s} \left[ 2,0 + 0,39 \left( Re_{g-s} \right)^{0,5} \left( Pr_g \right)^{1/3} \right] \quad (30)$$

#### 4.5. Propriedades das fases

Em seguida são apresentados os métodos de cálculo das propriedades termo-físicas das fases.

##### 4.5.1. Propriedades do gás

A densidade do gás foi calculada usando a lei dos gases ideais.

$$\rho_g = \frac{P_g}{RT_g} \sum \omega_{j,g} M_j \quad (31)$$

Onde, j são as espécies gasosas.

As viscosidades para componentes puros foram calculadas a partir de teorias estatísticas pelas seguintes equações:

$$\mu_g = 2,6693 \times 10^{-6} \frac{1}{\Omega_{\mu,j}} \sqrt{\frac{M_j T_g}{\sigma_j}} \quad (32)$$

$$\Omega_j = \frac{1,16145}{(T^*)^{0,14874}} + \frac{0,52487}{\exp(0,77320 T^*)} + \frac{2,16178}{\exp(2,4378 T^*)} \quad (33)$$

$$T^* = \frac{k_{\text{Boltzmann}} T_g}{\epsilon_j} \quad (34)$$

As condutividades térmicas das substâncias puras foram calculadas usando a aproximação gasosa poliatômica de Eucken.

$$k_j = M_j \left( C_{p,j} + \frac{5R}{4M_j} \right) \quad (35)$$

A viscosidade da fase gasosa e as condutividades térmicas foram calculadas a partir dos componentes puros usando o método de Wilke.

$$\lambda_g = \sum_{j \in g} \left[ \frac{\gamma_{j,g} \lambda_j}{\sum_{jj \in g} \chi_{j,jj}} \right] \quad (\mu = \mu, k)$$

$$\gamma_{j,g} = \frac{b_{j,g} / M_j}{\sum_{jj \in g} b_{jj,g} / M_j} \quad (36)$$

$$\chi_{j,jj} = \left[ 1 + \left( \frac{b_j}{\lambda_{jj}} \right) \left( \frac{M_{jj}}{M_j} \right)^{1/4} \right]^2$$

A difusividade binária das espécies gasosas foi calculada pela equação:

$$D_{j,k}^T = 0,0018583 \times 10^{-4} \frac{T^{3/2} \left( \frac{1}{M_j} + \frac{1}{M_k} \right)}{\rho_g^{1/101325} \sigma_{ave}^2 \Omega_{ave}} \quad (37)$$

$$\sigma_{ave} = 0,5 (\sigma_j + \sigma_k)$$

$$\Omega_{ave} = \frac{1,06036}{T^* 0,15610} + \frac{0,19300}{e^{0,47635T^*}} + \frac{1,03587}{e^{1,5299T^*}} + \frac{1,76474}{e^{3,8941T^*}} \quad (38)$$

$$T^* = \frac{k_{Boltzmann} T_g}{\epsilon_{ave}}; \epsilon_{ave} = \sqrt{\epsilon_j \epsilon_k} \quad (39)$$

A temperatura do gás é definida como uma função da entalpia do gás e sua respectiva composição:

$$H_g = \sum_{j \in g} \omega_{j,g} \left[ \Delta H_{j,g}^{298K} + \int_{298K}^{T_g} C_{p,j} dT \right] \quad (40)$$

$$C_{p,j} = a_j + b_j T + c_j T^{-2} \quad (41)$$

#### 4.5.2. Propriedades do sólido

As propriedades do sólido foram calculadas a partir da composição do sólido e das propriedades dos componentes puros. As capacidades caloríficas dos componentes puros foram modeladas por uma função polinomial da temperatura:

$$C_{P,k} = a_k + b_k T_s + \frac{c_k}{T_s^2}; C_{P,s} = \sum_{k \in s} C_{P,k} \omega_{k,s} \quad (42)$$



A temperatura do sólido foi calculada a partir da entalpia e composição do briquete e booster segundo a seguinte equação:

$$H_s = \sum_{k \in s} \omega_k \left[ \Delta H_k^{298K} + \int_{298K}^{T_s} C_{P,k} dT \right] \quad (43)$$

A condutividade do sólido foi modificada para considerar a radiação no interior do leito e a convecção na camada limite de acordo como modelado por Castro (2000).

$$k_{s,eff} = \left( -\varepsilon_s \right) k_g + a + \varepsilon_s \left[ \frac{2}{3k_s} + \left( \frac{k_g}{0,274} + b \right)^{-1} \right]^{-1} \quad (44)$$

$$a = \alpha \left[ 1 + \left( \frac{1 - \varepsilon_s}{\varepsilon_s} \right) \left( \frac{1 - e_s}{2e_s} \right) \right]^{-1} \quad (45)$$

$$b = \alpha \left( \frac{e_s}{2 - e_s} \right) \quad (46)$$

$$\alpha = 0,1952 d_s \left( \frac{T_s}{100} \right)^3 \left( \frac{4,184}{3600} \right) \quad (47)$$

#### 4.6. Premissas para a construção do modelo.

- Estado estacionário.
- O modelo considera a metade de um reator.
- Não considera degradação da fase sólida.
- A vazão do gás de baixo reduz o briquete só superficialmente (grau de redução menor a 0,1%), para o caso base.
- Os dados de entrada para o modelo estão baseados para uma produção de 5 t<sub>gusa</sub>/h, em torno de 6 t<sub>DR</sub>/h e 1,25 t<sub>escória</sub>/h.
- O cálculo do gás de baixo e da V2 foi calculado assumindo uma umidade relativa de 78%.

- Os dados de entrada do caso base para a V2 foram calculados considerando queima estequiométrica total do CO do gás de baixo.
- O modelo considera perda de calor através das paredes mediante transmissão de calor por convecção e radiação.

#### 4.7.

#### Esquema do modelo

Na Figura 12 se apresenta o esquema do modelo indicando os principais dados de entrada e saída e a geometria a ser modelada.

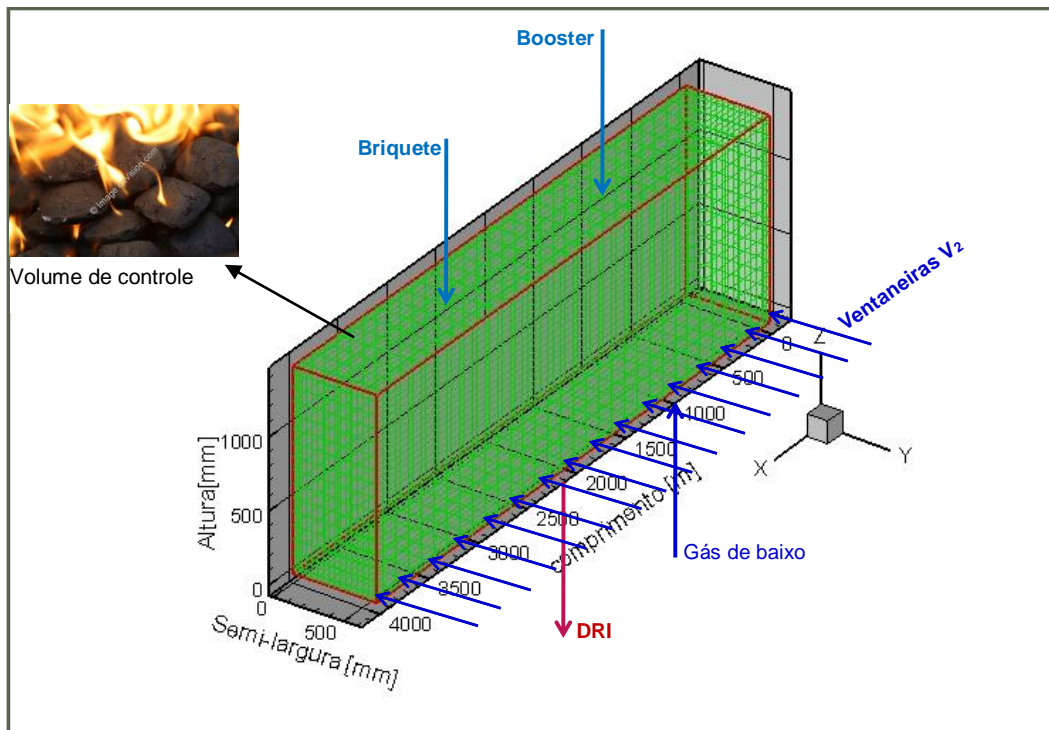


Figura 12 – Esquema do modelo