INTERNATIONAL 2nd WORKSHOP
ADVANCES IN CLEANER PRODUCTION
"KEY ELEMENTS FOR A SUSTAINABLE WORLD: ENERGY, WATER AND CLIMATE CHANGE"

Modelização de um Forno de Redução Direta do Mineral de Ferro Operado por H_2 Puro

A. R. Costa [a], D. Wagner [b], F. Patisson [c]

a. Institut Jean Lamour, Nancy, andrea.ranzani@mines.inpl-nancy.fr

b. Atualmente em Arcelor Mittal, Metz, damien.wagner@arcelormittal.com

c. Institut Jean Lamour, Nancy, fabrice.patissoni@mines.inpl-nancy.fr

Resumo

Com o objetivo de identificar e desenvolver novas tecnologias que permitam uma diminuição drástica nas emissões de CO_2 da indústria siderúrgica (projeto europeu ULCOS), o processo de Redução Direta do mineral de ferro por H_2 puro foi investigado, já que o único produto eliminado nessa reação é o vapor d'água. Um modelo matemático bidimensional, em estado estacionário (REDUCTOR) foi desenvolvido, a partir de estudos experimentais e de modelização, para simular um reator em contra-corrente, no qual pellets de hematita são reduzidos por H_2 puro. Esse modelo é baseado na solução, pelo método numérico dos volumes finitos, dos balanços locais de massa, energia e momento das espécies gasosas e sólidas. Um modelo de um único pellet foi incluído no modelo global do reator para calcular as velocidades das reações envolvidas no processo ($Fe_2O_3 \rightarrow Fe_3O_4 \rightarrow FeO \rightarrow Fe$), utilizando o conceito de tempos de reação aditivos (ou law of additive reaction times, em inglês). As diferentes etapas elementares do transporte de massa e a possibilidade de ocorrência de uma sinterização na escala do grão também foram consideradas. Os parâmetros cinéticos foram obtidos a partir de testes de termogravimetria, a diferentes condições experimentais, com pequenos cubos de hematita, fabricados a partir de pellets industriais de tamanho maior. Os resultados foram extrapolados levando-se em conta os diferentes efeitos de tamanho e forma de pellets e cubos. Caracterizações dos sólidos por SEM, difração de raios-X e espectroscopia de Mössbauer também foram realizadas para ajudar a entender a evolução da morfologia do sólido durante a redução. Os primeiros resultados mostraram que o uso do H_2 acelera a redução se comparado com o monóxido de carbono, tornando possível projetar um reator de redução direta, operado por H_2 puro, menor do que os atuais fornos industriais (MIDREX, HYL).

Palavras-Chave: Redução Direta, hidrogênio, mineral de ferro, cinética, modelo matemático.

1 Introdução

O efeito dos gases efeito estufa, dentre os quais se destaca o dióxido de carbono (CO_2), é cada vez mais evidente e pode gerar mudanças climáticas irreversíveis e catástrofes naturais de grande magnitude em um espaço de tempo relativamente curto. Atualmente, cerca de 19% das emissões industriais mundiais desses gases são provenientes da siderurgia **(GIEC, 2001)**. Por isso, os principais grupos siderurgistas europeus uniram esforços de pesquisa e desenvolvimento e criaram, em setembro de 2004, o projeto europeu **ULCOS** ("**U**ltra **L**ow **CO**$_2$ **S**teelmaking"). O principal objetivo desse projeto é identificar e investigar novas tecnologias de produção do aço que possibilitem uma redução de pelo menos 50% das emissões de

CO_2 na indústria siderúrgica, com relação aos níveis atuais (**1850 kg de CO_2/t de aço**). Para atingir essa meta, é necessário investigar novos processos de fabricação do aço, como por exemplo, a utilização de hidrogênio como agente redutor do mineral de ferro, processo ao qual se interessa nosso grupo.

Numa primeira fase do projeto, o processo de redução direta do mineral de ferro por H_2 puro mostrou índices compatíveis com o objetivo do ULCOS: menos de **300 kg de CO_2/t de aço** são emitidos nesse processo, considerando-se uma produção de H_2 por eletrólise da água, com energia proveniente de centrais nucleares ou hidroelétricas. No processo convencional de redução direta, o gás redutor é o composto por H_2 e monóxido de carbono (CO). Enquanto a redução do mineral de ferro pelo CO elimina CO_2, a reação com H_2 somente produz vapor d'água (H_2O). No entanto, a viabilidade dessa rota de produção está estreitamente ligada ao estabelecimento de uma economia baseada no H_2. Isso requer um aumento significativo da demanda desse gás no setor industrial, o que reduziria o preço do H_2 a valores competitivos. Entretanto, as pressões externas contra as emissões industriais de CO_2 aumentam rapidamente graças a acordos internacionais (p.e., Protocolo de Kyoto, 1992) e ao crescimento da conscientização ambiental da sociedade científica e industrial. Como conseqüência, em um período de tempo relativamente curto, as emissões de CO_2 poderão representar um custo insustentável para diversos grupos industriais. Além disso, os setores de transporte e energia mostram um interesse cada vez maior na utilização do H_2 como gás vetor, o que aumentaria sua demanda e contribuiria para a diminuição do preço do gás.

Assim, devido ao seu forte potencial ecológico a médio prazo, foi decidido, na primeira fase do projeto ULCOS, antecipar os estudos de viabilidade técnica da utilização do H_2 puro como agente redutor no processo de redução direta para a fabricação de ferro esponja (**DRI** – **D**irect **R**educed **I**ron).

Os processos mais importantes de Redução Direta do mineral de ferro são o **MIDREX** (65% da produção mundial) e o **HYL III** (20% da produção mundial). Nesses processos, o óxido de ferro é convertido em ferro pelo gás redutor composto de H_2 e CO (Syngas), obtido a partir da reforma do gás natural. Uma diferença importante entre a redução direta e o processo convencional no alto-forno é que, no primeiro caso, se produz ferro sólido, enquanto que, no alto-forno, se produz ferro no estado fundido. Por isso, as temperaturas no alto-forno são consideravelmente mais altas.

As reações envolvidas no processo de redução do mineral são:

$$3\ Fe_2O_3 + H_2\ (CO) \leftrightarrow 2\ Fe_3O_4 + H_2O\ (CO_2)$$

$$x\ Fe_3O_4 + (4x-3)\ H_2\ (CO) \leftrightarrow 3\ Fe_xO + (4x-3)\ H_2O\ (CO_2)$$

$$Fe_xO + H_2\ (CO) \leftrightarrow x\ Fe + H_2O\ (CO_2)$$

onde, $x = 0,95$. O DRI que sai da zona de resfriamento do reator possui um teor típico em ferro metálico de cerca de 92%. Além disso, ele possui um aspecto bastante poroso. Por isso é denominado *ferro pré-reduzido* ou *ferro esponja*. Após sair da zona de resfriamento, o DRI é utilizado nos fornos elétricos a arco, misturados à sucata reciclada para produzir o aço. Ele também pode ser usado no alto-forno ou no convertidor.

Atualmente, não existe nenhum processo industrial de redução direta que utilize 100% de H_2 como gás redutor. Por isso, o trabalho visa construir um modelo matemático que permita simular e identificar as melhores condições operatórias de um processo de redução direta do mineral de ferro num forno a cuba tipo MIDREX, uti-

lizando H_2 puro. Os modelos disponíveis na literatura não descrevem, de maneira completa e detalhada, todos os fenômenos físico-químicos envolvidos (**Hara et al., 1976; Negri et al., 1995; Parisi e Laborde, 2004**). A maior parte utiliza leis cinéticas muito simplificadas. Além disso, muitos modelos descritos são unidimensionais, o que não é uma boa aproximação para o caso do forno a cuba, onde a alimentação do gás redutor se faz, principalmente, pela parede lateral do reator.

Assim, nosso grupo desenvolveu um modelo matemático bidimensional, chamado REDUCTOR, visando modelizar detalhadamente, todos os fenômenos físico-químicos que ocorrem no interior da zona de redução do reator. Com o objetivo de estudar os mecanismos de redução do mineral e ter dados cinéticos mais precisos para o modelo matemático, uma série de experimentos de redução do mineral foram realizados em uma termobalança e complementados por caracterizações das amostras por SEM (Scanning electron microscopy), difração de raios X, espectrometria Mössbauer e porosimetria ao mercúrio.

2 Metodologia experimental

Para os experimentos de termogravimetria, uma termobalança SETARAM, modelo TAG24 foi utilizada. Essa balança possui dois fornos simétricos: um para a amostra e outro para um corpo inerte, ambos varridos pelo mesmo fluxo de gás. A variação da massa da amostra, ao longo do tempo, é medida pela diferença de massa entre os dois corpos. Assim, os efeitos provocados pela força do escoamento e do empuxo do gás (Princípio de Arquimedes) são eliminados, já que os dois corpos estão submetidos a essas forças. Isso aumenta a precisão dos testes. Um umidificador foi instalado no circuito, possibilitando a adição de até 4% em volume de água no gás de entrada. Devido ao limite máximo de variação de massa da termobalança (400mg), os pellets industriais de mineral de ferro (de aproximadamente 4g) foram polidos e transformados em pequenos cubos (5mm de aresta e cerca de 550mg), assegurando amostras de forma e massa semelhantes. Os pellets utilizados foram fornecidos pela CVRD (Brasil) e são compostos de cerca de 96% de Fe_2O_3 e 4% de outros óxidos (CaO, MgO, SiO_2, Al_2O_3, MnO), segundo dados do fornecedor. Um suporte de fio de Pt 5mm foi utilizado para manter a amostra suspensa no interior da termobalança. Antes da injeção do gás redutor, os fornos da termobalança foram submetidos a um vácuo secundário e depois varridos por um gás inerte (He), durante alguns minutos, para evacuar o oxigênio e o vapor de água presentes nos fornos e/ou adsorbidos na amostra. Uma vez atingida e estabilizada a temperatura de redução desejada no forno, é feita a injeção de H_2 (tempo zero), e se inicia a redução em condições isotérmicas. Os testes foram feitos a diferentes temperaturas (entre 500°C e 990°C) e a diferentes composições do gás de entrada ($H_2/H_2O/He$). Uma série de experências interrompidas foram realizadas, interrompendo-se o fluxo de gás redutor antes do final da redução. Amostras completamente e parcialmente reduzidas foram observadas no SEM e analisadas por espectrometria Mössbauer e difração de raios X, para verificar a evolução da microstructura ao longo da reação e facilitar a compreensão dos seus mecanismos.

3 Resultados experimentais e discussão

3.1 Influência da temperatura sobre a cinética de redução

As curvas de redução obtidas nos experimentos de termogravimetria, a diferentes temperaturas, estão representadas na **Fig.1**. Elas representam a redução completa da hematita (Fe_2O_3) a ferro métalico.

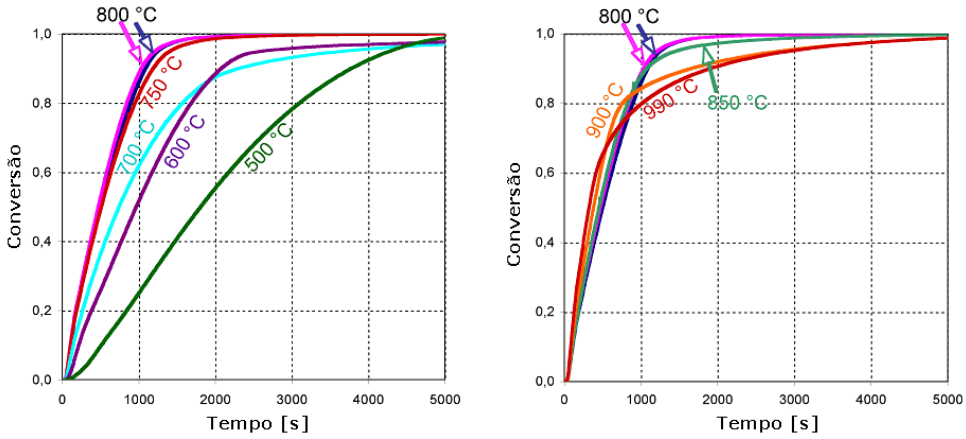

Fig.1. Influência da temperatura sobre a curva de redução de cubos de hematita por H_2: 200 mL/min de fluxo gasoso composto de H_2/He 60/40 %vol.

Com respeito ao tempo total para completar a redução da amostra, a **Fig.1** indica que 800°C parece ser a temperatura ótima. O gráfico representado na **Fig.1 (esquerda)** mostra que, para temperaturas inferiores a 800°C, quanto mais alta a temperatura, mais rápida a reação, sobretudo nos primeiros 80% de conversão. Entretanto, quando o mineral é reduzido a 700°C, uma desaceleração é observada a partir de 85% de conversão, aumentando o tempo total da reação. Acima de 800°C (**Fig.1 direita**), o início da reação é mais rápido quanto maior a temperatura. No entanto, uma desaceleração significativa é observada a altas temperaturas (850°C, 900°C e 950°C) e aparece mais cedo, quanto mais alta a temperatura da reação. Para tentar entender esse efeito da temperatura sobre a cinética da reação, amostras completamente reduzidas a diferentes temperaturas foram observadas no SEM

A **Fig.2** mostra que um aumento na temperatura provoca um crescimento dos poros e dos grãos do ferro final formado. A altas temperaturas, os poros, embora maiores, são menos numerosos e o ferro formado possui uma estrutura mais densa e lisa. Uma hipótese que explica a densificação da fase ferro é a sinterização, que ocorre com o objetivo de reduzir a área superficial da amostra. Como conseqüência, a temperaturas superiores a 800°C e a altas conversões (depois da aparição da fase ferro), os poros se fundem e muitos desparecem, formando poros maiores e isolados no interior de uma fase ferro densa. Nesse ponto, a difusão através dos poros torna-se impossível e é substituída pela difusão em fase sólida, que é um processo mais difícil e lento. Isso poderia ser uma das explicações da desaceleração da velocidade de reação observada a altas temperaturas e altas conversões.

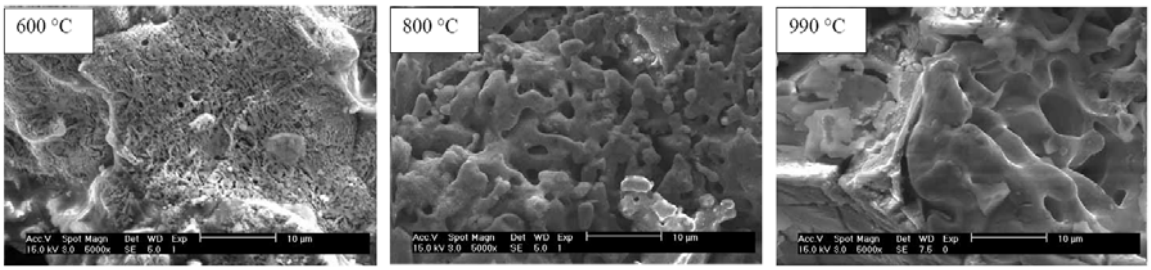

Fig.2. Efeito da temperatura sobre a morfologia do ferro final formado. (200 mL/min de fluxo gasoso composto de H_2/He 60/40 %vol.).

3.2 *Evolução da miscrostructura durante a redução: Experiências interrompidas*

A sucessão de imagens de microscopia mostrada na **Fig.3** foi obtida a partir de amostras parcialmente reduzidas a 800°C e ilustra bem a evolução da morfologia do cubo de mineral de ferro ao longo da redução por H_2. A hematita inicial (**Fig.3-a**) é constituída de grãos relativamente grandes, densos e com ângulos bem definidos. Após alguns segundos (**Fig.3-b**), a superfície da amostra é coberta por numerosos poros minúsculos, mas a estrutura granular do início se mantém. Em seguida (**Fig.3-c**), observa-se um crescimento dos poros, mas a estrutura granular do princípio é mantida. A uma conversão de cerca de 50% (**Fig.3-d**), o ferro começa a aparecer e a estrutura inicial se degrada completamente, dando lugar a uma morfologia "esponjosa", com aspecto fundido, que é observada também na amostra completamente reduzida (**Fig.3 -e**). A redução da wustita em ferro parece ocorrer sobre "ilhas" densas formadas da desagregação dos grãos iniciais.

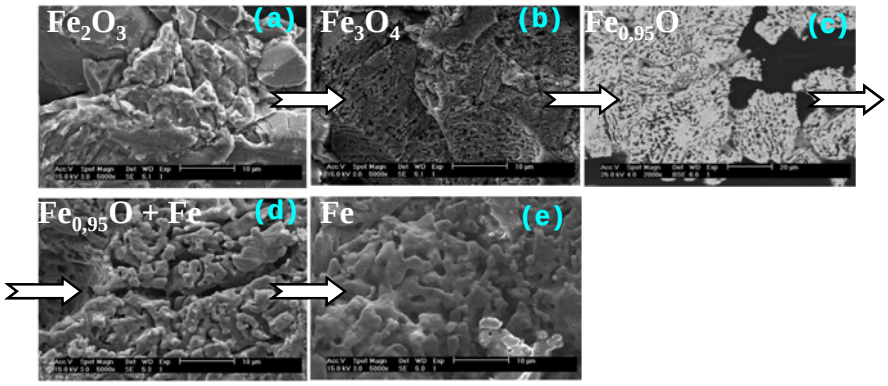

Fig.3. Evolução da morfologia ao longo da redução: 800°C, 200 mL/min de fluxo gasoso composto de H_2/He 60/40 %vol. **Amostra (a)**: hematita de partida; **amostra (b)**: 89s; **amostra (c)**: 206s; **amostra (d)**: 400s; **amostra (e)**: ferro final formado.

4 Formulação do modelo matemático (REDUCTOR)

4.1 Princípio do modelo matemático

Através do modelo REDUCTOR, é possível ter acesso a variáveis importantes do processo como as temperaturas, composições e velocidades locais do sólido e do gás em todos os pontos do reator, velocidades das reações, conversão, etc. Trata-se de um modelo numérico bidimensional, em estado estacionário, escrito em Fortran 90 e baseado na resolução numérica dos balanços locais de massa, energia e momento pelo método dos volumes finitos (**Patankar, 1980**). O reator considerado no modelo é análogo à zona de redução do forno do processo MIDREX (**Fig.4**): cilíndrico, com 9 m de altura e 3,3 m de raio. O mineral de ferro é introduzido no reator na parte superior do forno, na forma de pellets de 1,2 cm de diâmetro, de mesma composição dos cubos utilizados nos experimentos de termogravimetria. Os sólidos descem por gravidade, em contra-corrente com o gás, que é introduzido lateralmente, através de uma coroa circular de 30 cm de altura, situada a 20 cm da parte baixa do forno. A composição do gás reativo é, basicamente, H_2, H_2O e uma pequena porcentagem de gás inerte (N_2). No modelo, os pellets são tratados como constituídos de grãos, como observado nas imagens SEM das amostras parcialmete reduzidas (**Fig.3**). No caso da wustita, os grãos foram considerados como um agrupamento de cristalitos, também suscetíveis a apresentar uma certa porosidade (**Fig.3-c**). Um "sub-modelo matemático" foi construído para representar a redução de um único pellet, dentro do reator, baseado nos testes de termogravimetria, e foi utilizado no modelo do forno para o cálculo das velocidades das três reações químicas.

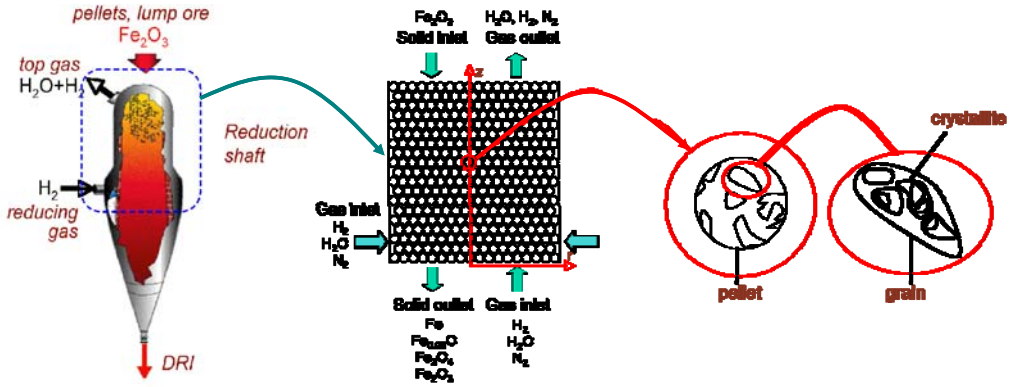

Fig.4. Princípio do modelo matemático REDUCTOR

4.2 Modelo cinétido de redução de um único pellet

Para calcular a velocidade de redução dos pellets, o conceito de *tempos de reação aditivos* (ou *law of additive reaction times*, em inglês) (**Sohn, 1978**) foi utilizado. Dessa maneira, o tempo de reação para obter-se uma determinada conversão X pode ser calculado analiticamente e de forma aproximativa através dos tempos característicos (τ_i) correspondentes a cada etapa elementar do transporte de massa. τ_i é o tempo necessário para uma conversão completa no caso de um regime controlado puramente pela etapa elementar *i*. Trata-se de uma boa aproximação para os sistemas gás-sólido, onde os diferentes tipos de transporte de massa são considerados como resistências dispostas em série (**Patisson et al., 2006**).

No caso da transformção de hematita em ferro, existem três reações envolvidas no processo. Por isso, é necessário calcular o τ_{chim} para cada reação. Além disso, devido aos diferentes níveis de porosidade do pellet, deve-se considerar a difusão do gás reativo (H_2) e do gás produto (H_2O) através de poros intergranulares (ε_{pellet}**=0,10**), intragranulares (ε_{grao}**=0,18**) e intracristalitos (ε_{crist}**=0,53**), sendo os dois últimos considerados somente na reação FeO → Fe, quando os grãos de wustita parecem desintegrar-se, formando os cristalitos. Na difusão intragranular e intracristalitos, intervem a difusão do tipo Knudsen. O transporte de massa do H_2 e da H_2O através da camada limite ao redor do pellet é considerada no cálculo de τ_{ext}. A difusão em fase sólida também é considerada a altas temperaturas e conversões, quando o ferro se densifica devido ao fenômeno de sinterização. O cálculo de um tempo característico de sinterização (τ_{fritt}) permite levar-se em conta esse fenômeno. As equações para determinar os tempos característicos e as velocidades de reação estão detalhadas no trabalho de **Wagner, 2008**.

A **Fig.5** mostra os resultados obtidos com o modelo cinético para uma redução a 900°C. O gráfico da esquerda mostra uma boa adequação do modelo cinético com relação à curva experimental, o que confirma a validade de se utilizar o conceito de tempos de reação aditivos. A **Fig.5 (direita)** ilustra a sucessão das três reações, sendo o consumo de hematita bastante rápido e a conversão da wustita em ferro a etapa mais lenta. Também é possível observar o efeito da sinterização da fase ferro acima de 80% de conversão, onde ocorre uma desaceleração na velocidade da reação de redução da wustita (Fe_xO).

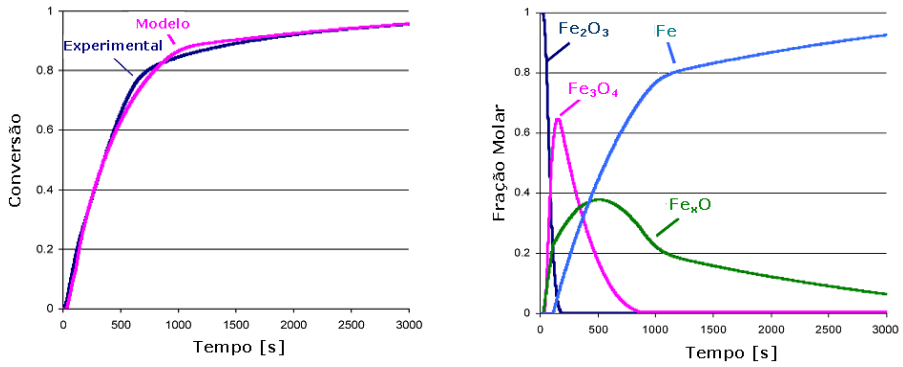

Fig.5. Resultados do modelo cinético de redução dos pellet: 900°C, 200 mL/min de fluxo gasoso composto de H_2/He 60/40 %vol.

4.3 Principais equações do modelo matemático REDUCTOR:

As principais equações do modelo estão descritas na **Tabela 1**. A nomenclatura utilizada é: i=H_2 ou H_2O; j=Fe_2O_3, Fe_3O_4, FeO ou Fe; r=raio; z=altura; c_t=concentração molar do gás; x_i=fração molar de i no gás; u_{gr}, u_{gz} = velocidades radial e axial do gás; D_a,D_r = coeficientes de dispersão axial e radial; r_1, r_2, r_3= velocidades das 3 reações de redução; w_j = fração mássica de j no sólido; M_i, M_j = massa molar de i ou j;S_i, S_j=termo de criação; ρ_g=densidade do gás, ρ_s=densidade aparente do leito; c_{pg}=calor específico molar do gás; c_{ps}=calor específico mássico do sólido; c_{pi} =calor específico de i, λ_g=condutividade térmica do gás;T_g,T_s=temperaturas do gás e do sólido; a_g=area específica da superfície de troca gás-sólido;h=coeficiente de transferência de calor; $\lambda_{eff,a}$,$\lambda_{eff,r}$ =condutividades efetivas axial e radial do leito sólido; $\Delta_r H_n$=calor da reação n; p=pressão do gás; ε=porosidade do leito; d_p=diâmetro do pellet; μ_g=viscosidade do gás.

4.4 Principais resultados da simulação: estudo paramétrico

Primeiramente, um caso de referência foi simulado. Como dito anteriormente (*seção 4.1*), a geometria do problema é a mesma da zona de redução de um forno MIDREX convencional. As dimensões do reator, assim como os valores das temperaturas, vazões e composições das correntes de entrada do sólido e do gás são supostamente conhecidos e indicados na **Fig.6-a**. A vazão de sólidos na entrada corresponde a uma produção de 1Mton de ferro por ano e o fluxo de gás injetado, a 3,8 vezes o valor estequiométrico. As **Fig.6 b** a **e** mostram a fração mássica calculada para cada espécie sólida ao longo do reator. Como previsto, as duas primeiras reações são muito mais rápidas que a transformação wustita-ferro. É importante ressaltar que, no caso simulado, a uma altura (z) de cerca de 2 m, o mineral foi praticamente todo convertido em ferro. Assim, nessas condições, um reator de cerca de 4 m é suficiente para completar a redução do mineral, enquanto que, no processo MIDREX clássico, uma zona de redução de 9 m de altura é necessária para uma conversão de apenas 92%, usando-se o Syngás (CO+H_2).

Tabela 1: Principais equações do modelo matemático REDUCTOR

Balanços de massa do gás (em *mols m^{-3} s^{-1}*):	
$\frac{1}{r}\frac{\partial\left(rc_t x_i u_{gr}\right)}{\partial r}+\frac{\partial\left(c_t x_i u_{gz}\right)}{\partial z}=\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(rc_t D_r\frac{\partial x_i}{\partial r}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(c_t D_a\frac{\partial x_i}{\partial z}\right)+S_i$	$-S_{H_2}=S_{H_2O}=r_1+\frac{16}{19}r_2+r_3$
Balanços de massa do sólido (em *kg m^{-3} s^{-1}*):	
$-\frac{\partial\left(\rho_s u_s \varpi_j\right)}{\partial z}=S_j$	$S_{Fe_2O_3}=-3M_{Fe_2O_3}\cdot r_1$ $\quad S_{Fe_3O_4}=M_{Fe_3O_4}\cdot\left(2r_1-r_2\right)$ $S_{Fe_xO}=M_{Fe_xO}\left(\frac{60}{19}r_2-r_3\right)$ $\quad S_{Fe}=0{,}95M_{Fe}\cdot r_3$
Balanço térmico do gás (em W^{-1} *m^{-3}*):	
$\rho_g c_{pg}\left(u_{gr}\frac{\partial T_g}{\partial r}+u_{gz}\frac{\partial T_g}{\partial z}\right)=\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\lambda_g\frac{\partial T_g}{\partial r}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(\lambda_g\frac{\partial T_g}{\partial z}\right)+a_g h\left(T_s-T_g\right)+\left(r_1+\frac{16}{19}r_2+r_3\right)\int_{T_R}^{T_g}\left(c_p^{H_2O}-c_p^{H_2}\right)dT$	
Balanço térmico do sólido (em *W^{-1} m^{-3}*):	
$-\rho_s u_s c_{ps}\frac{\partial T_s}{\partial z}=\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\lambda_{eff,r}\frac{\partial T_s}{\partial r}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(\lambda_{eff,a}\frac{\partial T_s}{\partial z}\right)+a_g h\left(T_g-T_s\right)+r_1\left(-\Delta_r H_1\right)+r_2\left(-\Delta_r H_2\right)+r_3\left(-\Delta_r H_3\right)$	
Equação do momento combinada com a Equação de Continuidade:	
$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{c_t}{K}\frac{\partial p}{\partial r}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{c_t}{K}\frac{\partial p}{\partial z}\right)=0$ (mols m^{-3} s^{-1})	$K=150\frac{(1-\varepsilon)^2}{\varepsilon^3 d_p^2}\mu_g+1{,}75\frac{(1-\varepsilon)}{\varepsilon^3 d_p}\rho_g u_g$ (kg m^{-3} s^{-1})

Outras simulações foram realizadas para estudar a influência de certas condições operatórias e parâmetros físico-químicos. A **Fig.7-a** e a **7-b** mostram as frações mássicas locais do ferro quando o gás reativo entra no forno a 600°C e 1000°C, respectivamente. Quando o gás entra a 600°C, o sólido sai com um baixo teor de ferro. A reação ocorre somente na zona de alimentação do gás e importantes gradientes radiais aparecem. Para um gás entrando a 1000°C, o efeito da sinterização é notável, sobretudo quando se compara com o caso do gás entrando a 800°C (**Fig.6-e**). Quando a T_g de entrada é 1000°C, o sólido não sai do reator completamente reduzido. Do contrário, para um gás alimentado a 800°C, o sólido já está completamente reduzido a uma altura de 2m, antes mesmo de sair do reator. O estudo paramétrico da temperatura, com a cinética deduzida a partir de experimentos com pequenos cubos de hematita, mostra, assim, que 800°C é a temperatura ótima para o processo.

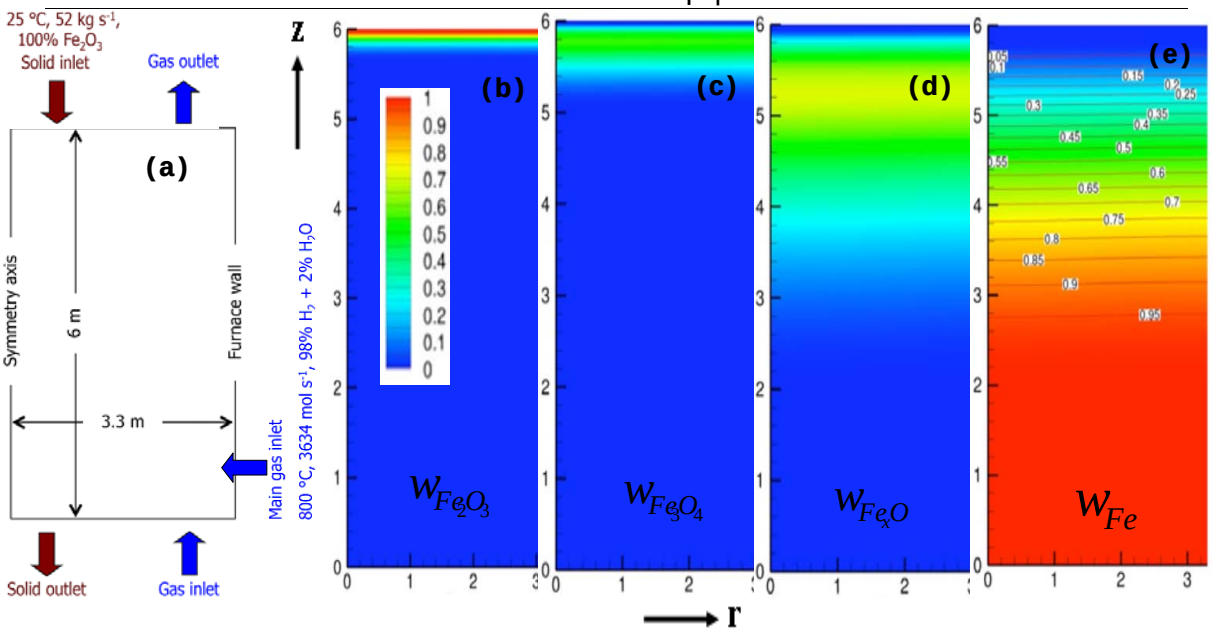

Fig.6. (a) Dados do problema simulado.(b), (c), (d): Frações mássicas das espécies sólidas calculadas pelo modelo

Já a **Fig.7-c** e **7-d** mostram a influência do tamanho do pellet na redução do mineral. Para pellets com diâmetro de 6 mm (**Fig.7-c**), a redução completa do mineral se faz nos dois primeiros metros do reator, contra 4 m para pellets de 12 mm de diâmetro (**Fig.6-e**). Para pellets ainda maiores (**Fig.7-d**, d_p = 24 mm), um reator de mais de 6m de altura é necessário, já que o sólido possui apenas cerca de 75% de fração mássica de ferro na saída do forno. Isso mostra que a etapa de difusão no interior dos pellets é um dos mecanismos controladores da transformação hematita-ferro por H_2 e que a diminuição do tamanho dos pellets representa uma opção industrial atrativa.

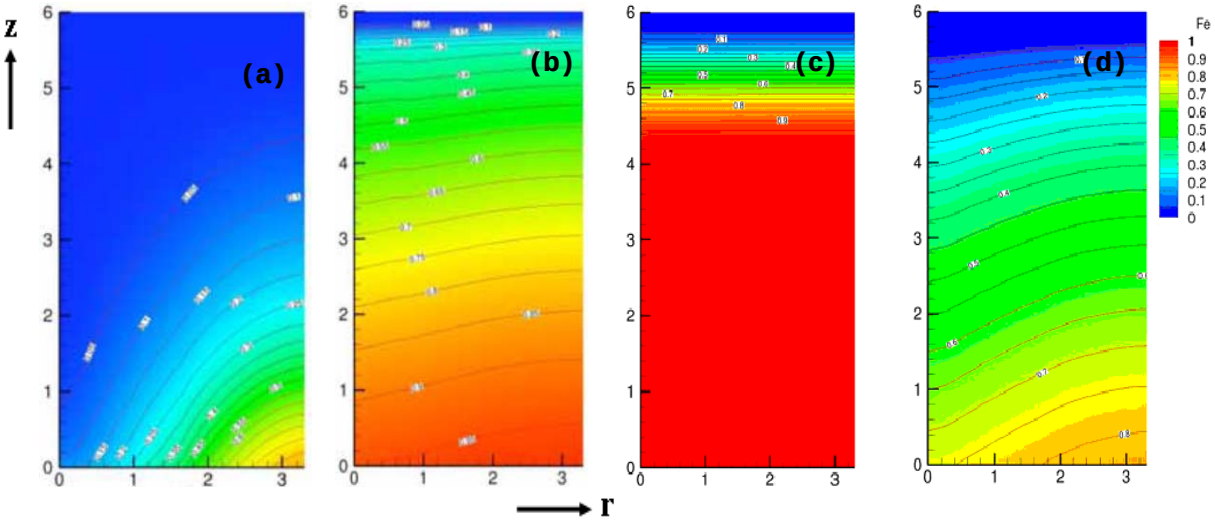

Fig.7. Fração mássica do Fe calculada ao longo do reator: (a)T_g=600°C; (b)T_g= 1000°C; (c) d_p=6mm e (d) d_p=24mm

5 Conclusões

Um modelo matemático bidimensional, em estado estacionário, chamado REDUCTOR, foi desenvolvido ab initio, em linguagem FORTRAN 90 para simular o processo

de redução direta do mineral de ferro por H_2 puro e ajudar na sua concepção. Trata-se de um novo processo que apresenta um grande potencial de redução das emissões de CO_2 na siderurgia. Ele descreve praticamente todos os fenômenos físico-químicos que ocorrem, seja na escala de um pellet, seja na escala do reator. Os parâmetros cinéticos foram obtidos a partir de dados experimentais de termogravimetria, utilizando o conceito de tempos reativos aditivos. Os primeiros resultados mostraram que uma conversão completa do mineral pode ser obtida com reatores mais compactos que os fornos existentes (HYL, MIDREX), que operam com o Syngás ($CO+H_2$) como gás redutor. Isso porque a redução com H_2 é significativamente mais rápida que a redução com CO. Parâmetros como tamanho dos pellets e temperatura têm grande influência na conversão do sólido produzido. Quanto menor o tamanho dos pellets, mais rápida a reação e mais compacto o reator. A altas temperaturas, a redução é mais lenta, provavelmente devido ao fenômeno de sinterização, que densifica o ferro formado, dificultando os mecanismos de difusão. Um próximo passo desse trabalho é considerar uma possível presença do CO no gás reativo e introduzir as reações e cinéticas correspondentes. Assim, o modelo poderá ser validado com dados experimetais de instalações industriais existentes.

6 Referências

GIEC, "Changements climatiques 2001", relatório de síntese do GIEC (IPCC), Genebra, 2001

Hara, Y., Sakawa, M., and Kondo, S., 1976, Mathematical model of a shaft furnace for reduction of iron-ore pellets, Tetsu to Hagane, , 62, 3, 315-23

Negri, E.D., Alfano, O.M. and Chiovetta, M.G., 1995, Moving-Bed Reactor Model for the Direct Reduction of Hematite. Parametric Study, Industrial & Engineering Chemistry Research, 34, 12, 4266-76

Parisi, D. R. and Laborde, M. A., 2004, Modeling of counter current moving bed gas-solid reactor used in direct reduction of iron ore, Chemical Engineering Journal, 104, 1-3, 35-43

Patankar, S.V., 1980., Numerical heat transfer and fluid flow. New York, Hemisphere Publishing Corp.

Patisson F., Dussoubs B., Ablitzer D., 27-31 Aug. 06, Using Sohn's law of additive reaction times for modeling a multiparticle reactor. The case of the moving bed furnace converting uranium trioxide into tetrafluoride" Sohn International Symposium "Advanced processing of metals and materials, San Diego. Proceedings edited by F. Kongoli and R.G. Reddy, TMS, vol. 1 "Thermo and physicochemical principles: non-ferrous high-temperature processing", pp. 141-153.
http://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00265646/fr/

Sohn, H. Y., 1978, The law of additive reaction times in fluid-solid reactions, Metallurgical Transactions B: Process Metallurgy, 9B, 1, 89-96

Wagner, D., 2008, Étude expérimentale et modélisation de la réduction du minerai de fer par l'hydrogène. Tese de doutorado, Nancy-Université
http://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00280689/fr/