

# MODELAGEM MATEMÁTICA DA REDUÇÃO DIRETA\*

João Ricardo Filipini da Silveira<sup>1</sup> Tiago Ramos Ribeiro<sup>1</sup> Guilherme Bortolini<sup>2</sup> Victória Beatriz Rontal Moysés<sup>3</sup>

#### Resumo

O modelo do grão com interface tripla foi aplicado para o processo de redução direta de pelotas de hematita por monóxido de carbono (CO) em reator de leito fixo. Quatro experimentos foram realizados em laboratório a dois patamares de temperatura, com pelotas de dois raios médios. Por meio do método de Newton de duas variáveis, foi feito um ajuste do modelo às curvas experimentais de redução ao longo do tempo com o objetivo de determinar os parâmetros de cinética e de difusão no interior das pelotas. Observou-se um erro percentual máximo por volta de 2% para o grau de redução para três dos quatro ensaios. Criou-se a hipótese de que no ensaio com maior erro ocorreu deposição de carbono na alumina presente no reator. O grau de redução final em função do raio da pelota foi determinado por análise metalográfica para cada um dos experimentos e comparado com o cálculo do modelo. A inclinação das curvas é semelhante, indicando que o transporte de massa ao longo do raio da pelota está corretamente contabilizado pelo modelo.

Palavras-chave: Modelagem matemática; redução direta; cinética; difusão.

#### MATHEMATICAL MODELLING OF DIRECT REDUCTION

#### Abstract

The triple-interface grain model was applied to a direct reduction of hematite pellets by carbon monoxide gas (CO) in a fixed bed reactor. Four experiments were conducted in lab scale in two different temperatures using pellets with two different mean radii. Using Newton's method for two variables, the model was fitted to the degree of reduction as a function of time in order to determine parameters for kinetics and diffusion inside the pellets. A maximum percentage error of around 2% was observed for three among the four experiments. It is hypothesized that in the experiment with greatest error, carbon deposition took place in an alumina layer inside the reactor. The final degree of reduction as function of pellet radius was determined by metalographic analysis for each experiment and compared to what was calculated by the model. The slope of the curves matched, thus indicating that mas transport inside the pellets is correctly assessed by the model..

Keywords: Mathematical Modelling; direct reduction; kinetics; diffusion

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Pesquisador, Instituto de Pesquisas Tecnológicas do Estado de SP, Laboratório de Processos Metalúrgicos.joaorfs@ipt.br

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Engenheiro de Materiais, ex-estagiário, Instituto de Pesquisas Tecnológicas do Estado de SP, Laboratório de Processos Metalúrgicos.

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> Engenheira Metalúrgica, ex-estagiária, Instituto de Pesquisas Tecnológicas do Estado de SP, Laboratório de Processos Metalúrgicos.



## 1 INTRODUÇÃO

A redução direta de pelotas de minério de ferro é um dos principais processos para a produção de ferro metálico. A tecnologia MIDREX, na qual o reator principal é um forno em contracorrente, é responsável pela maior parte da produção mundial: 64.8% em 2016, equivalente a 73 milhões de toneladas [1].

A modelização e simulação matemática do processo de redução direta têm como objetivo prever o comportamento do reator e o grau de redução em função da carga de pelotas alimentada, a fim de conhecer melhor as condições de processo e o desempenho de diferentes pelotas.

Os artigos seminais de Szekely e Evans [2] [3] deram origem aos modelos do núcleo não reagido e modelo do grão, ao estudar as reações entre gás e sólido para pelotas considerando os efeitos das características do processo e do material como porosidade e tamanho de grão. No modelo do grão, é considerada uma fronteira que avança com a reação para cada grão dentro das pelotas.

Takenaka et al. [4] e Parisi e Laborde [5] desenvolveram modelos baseados no modelo do núcleo não reagido em reator em contracorrente considerando fluxo pistonado. Valipour[6] aprimorou o modelo do grão para considerar diferentes aspectos. Rahimi e Niksiar[7][8] compararam a validade dos modelos de núcleo não reagido e modelo de grão com resultados experimentais.

Em todos os modelos apresentados na literatura, sempre existe a etapa de ajuste dos modelos aos dados experimentais através de parâmetros que se referem a características das pelotas, do processo ou da geometria do reator que são difíceis de medir ou simular. No atual trabalho, propõe-se o uso de dois parâmetros, um para a cinética de reação da wustita com o CO, outro para a difusão dos gases no interior da pelota.

## 2 MATERIAIS E MÉTODOS

## 2.1 Descrição do aparato experimental

Foram realizados experimentos de redução de pelotas de minério de ferro por monóxido de carbono, CO. As pelotas foram produzidas industrialmente pela Vale para redução direta e eram constituídas de 66,8% de Fe total, 1,6% de sílica e basicidade binária (CaO/SiO<sub>2</sub>) de 1,17. Estas pelotas foram classificadas em duas faixas de diâmetro: entre 80 e 95 mm e entre 125 e 160 mm . Os dois grupos de pelotas foram reduzidos em dois patamares de temperatura, gerando quatro ensaios, conforme a Tabela 1.

Ensaio	Raio médio das pelotas (mm)	Temperatura (ºC)	Massa das pelotas (g)	Duração (min)
1	45	1100	234	100
2	66	1100	340	170
3	45	815	186	180
4	66	880	347	240

#### Tabela 1 - Parâmetros dos ensaios.

As pelotas foram distribuídas sobre um leito de alumina eletrofundida formando uma única camada no interior de um reator de leito fixo, conforme a Figura 1. Uma camada



de 20 mm de alumina foi colocada sobre as pelotas e o restante do volume do reator, cuja altura total é 980 mm, foi então completado com tijolos de alumina. O reator foi inserido em um forno de resistências do tipo poço para permitir o seu aquecimento.



Figura 1 – Montagem do reator de leito fixo

Durante os ensaios, o reator foi mantido a uma temperatura controlada devido ao aquecimento do forno. A parte superior metálica do reator garantiu a estanqueidade e foi refrigerada a água. Um fluxo de 2,6 sccm CO e 5,2 sccm N<sub>2</sub> passou por um misturador de gases foi inserido no reator e conduzido à parte inferior por um tubo de forma a percolar o leito de alumina, garantindo a distribuição e aquecimento do gás antes de atingir as pelotas.

Isso gerou a redução das pelotas e a mistura de CO,  $CO_2$  e  $N_2$  que saiu pelo topo foi direcionada para um analisador de gases por infravermelho. O medidor realiza medidas a cada vinte segundos e guarda os resultados na memoria do aparelho. Foi utilizado um analisador Madur GA-60 para medir tanto CO quanto  $CO_2$ . Ao final do ensaio, o fluxo de CO foi interrompido e o fluxo de  $N_2$  mantido até que as pelotas atingissem a temperatura ambiente. Depois de resfriado, o reator foi aberto, as pelotas foram retiradas e pesadas.

O motivo de utilizar uma camada única de pelotas foi para que o gás que entrasse em contato com as pelotas tivesse sempre a composição de entrada. Caso fosse utilizada mais de uma camada, as reações do gás com as camadas inferiores afetariam sua composição nas camadas superiores.

Além disso, o volume do reator foi completado com tijolos de alumina para que houvesse o a menor recirculação possível de gás dentro do reator, de forma que a composição medida na saída do reator fosse equivalente à resultante da reação com as pelotas naquele instante de tempo.

O grau de redução das pelotas em função do tempo, G<sub>t</sub>, foi calculado por balanço de massa do oxigênio, a partir da vazão de CO medida na saída do reator.





$$G_{t} = 1 - \frac{n_{O}^{t}}{n_{O}^{0}} = \frac{\Phi_{g\acute{a}s} \cdot 20s \cdot \sum_{i=0}^{t} (2x_{CO_{2}}^{i} + x_{CO}^{i} - x_{CO}^{e})}{\frac{M_{pel}}{M_{Fe_{2}O_{3}}} \cdot 3}$$
(1)

Na qual  $\Phi_{gas}$  corresponde a vazão total de gas atravessando o reator, em mol/s,  $x_{CO_2}^i$  corresponde à fração de CO<sub>2</sub> medida no instante i na saída do reator,  $x_{CO}^i$  corresponde à fração de CO medida no instante i na saída do reator,  $x_{CO}^e$  corresponde a fração de CO na entrada do reator, ou seja, 0,333,  $M_{pel}$  corresponde à massa de pelotas utilizada no ensaio,  $MM_{Fe2O_3}$  corresponde à massa molar da hematita, ou seja 159,6 g/mol, e 20s corresponde ao intervalo de tempo entre duas medidas consecutivas.

O grau de redução final foi calculado por perda de massa a partir do peso das pelotas após o termino do ensaio.

A microestrutura das pelotas reduzidas foi avaliada por microscopia óptica. Para tal, após cada ensaio, duas pelotas foram cortadas na metade, tiveram sua porosidade preenchida por resina de cura a frio para serem então embutidas em baquelite, lixadas com lixas de carbeto de silício e polidas com pasta de diamante.

Para cada pelota analisada, dezoito campos ao longo de diferentes pontos do diâmetro foram fotografados. A área total de cada fase foi medida em cada campo por análise de imagens, diferenciando as colorações do metal e da fase oxidada considerada como wustita, uma vez que o grau de redução final de todas as pelotas analisadas era maior que 70%. Para comparação com o modelo, foi utilizada a média dos quatro campos à mesma distância do centro de cada uma das duas pelotas analisadas. A distribuição destes campos ao longo da secção da pelota está mostrada na Figura 2.



**Figura 2** – Distribuição das áreas fotografadas nas pelotas para determinação da fração volumétrica das diferentes fases presentes ao longo do diâmetro.

#### 2.1 Descrição do modelo

Foi desenvolvido um modelo de grão esférico com interface tripla [3, 8] aplicado ao reator de leito fixo em escala laboratorial. Nesse modelo, as pelotas são consideradas esferas porosas formadas por grãos esféricos.

A difusão do gás redutor (monóxido de carbono) se dá ao longo do raio da pelota e, a cada camada *i* do raio da pelota, todos os grãos daquela camada estão em equilíbrio com a concentração de gás (CO e CO<sub>2</sub>) daquela camada, conforme a Figura 3.



Figura 3 - Representação de uma camada da pelota com grãos esféricos.

Ou seja, para cada camada *i*, existe uma fração mássica de cada uma das espécies sólidas, hematita (H), magnetita (M), wustita (W) e ferro (F) que é resultado do quanto de gás difundiu para aquela camada e quanto deste gás reagiu com cada espécie de acordo com a cinética das reações:

$$3Fe_{2}O_{3} + CO \xrightarrow{k_{H}^{CO}} 2Fe_{3}O_{4} + CO_{2}$$
$$Fe_{3}O_{4} + CO \xrightarrow{k_{W}^{CO}} 3FeO + CO_{2}$$
$$FeO + CO \xleftarrow{k_{W}^{CO}, k_{W}^{CO}} Fe + CO_{2}$$

As reações da hematita e magnetita com o CO foram consideradas irreversíveis pelo fato do equilíbrio químico tender muito fortemente para redução nas temperaturas utilizadas nos experimentos.

Os grãos de uma determinada camada *i* do raio da pelota possuem os mesmos raios das interfaces: ferro-wustita,  $r_W$ ; wustita-magnetita,  $r_M$ ; e magnetita-hematita,  $r_H$ . Todas as reações são tratadas como reações sólido-gás de primeira ordem.

As taxas de consumo de CO por cada fase,  $T_x$ , (x=H, M, W) são dadas pelas constantes cinéticas das reações de cada fase com CO,  $k_x^{CO}$  e, no caso da wustita, com CO<sub>2</sub>,  $k_W^{CO_2}$ , multiplicadas pelas concentrações dos gases.

Considerando que uma variação no raio das interfaces que cercam cada fase implica numa variação de volume da fase, é possível relacionar o número de moles reagidos de cada fase, tanto com a taxa de consumo de CO/CO<sub>2</sub> pela fase, T<sub>x</sub>, através da estequiometria da reação, quanto pela variação dos raios das interfaces, pela relação com a densidade molar da fase,  $\rho_x$ .

É utilizado o avanço de cada reação, f<sub>x</sub>, definido em função dos raios das interfaces e do raio do grão, r<sub>g</sub>.

$$f_X = 1 - \left(r_X/r_g\right)^3 \tag{2}$$



O equacionamento é feito para cada reação envolvida e para a variação da concentração dos gases CO e CO<sub>2</sub>, em cada camada *i* da pelota. O sistema de equações diferenciais ordinárias a ser resolvido é o seguinte:

$$\frac{df_{H_i}}{dt} = -\frac{3}{r_g} \cdot \frac{3}{\rho_H} \left(1 - f_{H_i}\right)^{2/3} T_H$$
(3)

$$\frac{df_{M_i}}{dt} = -\frac{3}{r_g} \cdot \left[ \frac{1}{\rho_M} \left( 1 - f_{M_i} \right)^{2/3} T_M + \left( \frac{3}{\rho_H} - \frac{2}{\rho_M} \right) \left( 1 - f_{H_i} \right)^{2/3} T_H \right]$$
(4)

$$\frac{df_{W_i}}{dt} = -\frac{3}{r_g} \cdot \left[ \frac{1}{\rho_W} \left( 1 - f_{W_i} \right)^{2/3} T_W + \left( \frac{1}{\rho_M} - \frac{3}{\rho_W} \right) \left( 1 - f_{M_i} \right)^{2/3} T_M \right]$$
(5)

$$\frac{d[CO]_i}{dt} = -\frac{D_{CO}}{R^2} \cdot \frac{d}{dR} \left( R^2 \frac{d[CO]_i}{dR} \right) + \frac{3}{r_g} \sum_{X=H,M,W} (1 - f_X)^{2/3} T_X$$
(6)

$$\frac{d[CO_2]_i}{dt} = -\frac{D_{CO_2}}{R^2} \cdot \frac{d}{dR} \left( R^2 \frac{d[CO_2]_i}{dR} \right) + \frac{3}{r_g} \sum_{X=H,M,W} (1 - f_X)^2 / {}_3T_X$$
(7)

Na qual  $[CO]_i$  corresponde com a concentração de CO na camada i,  $[CO_2]_i$  corresponde com a concentração de CO<sub>2</sub> na camada i, D<sub>CO</sub> corresponde com a difusividade do CO, D<sub>CO2</sub> corresponde com a difusividade do CO<sub>2</sub> e R o raio da pelota.

A resolução numérica é realizada no programa Matlab por um método Runge-Kutta para equações diferenciais ordinárias rígidas (*stiff*).

Os parâmetros necessários para o calculo das equações diferenciais acima mencionados são as constantes cinéticas das reações de cada fase sólida com os gases, bem como as difusividades de cada gás através da pelota. Estes parâmetros e suas respectivas fontes podem ser encontrados na Tabela 2.

Parâmetro	Valores adotados	Fonte
$k_{H}^{CO}$	$15 \cdot e^{-\frac{113859}{RT}}$	Negri et al. 1996 [9]
$k_M^{CO}$	$0,2 \cdot e^{-\frac{73674}{RT}}$	Negri et al. 1996 [9]
$k_W^{CO}$	$\mathbf{A} \cdot e^{-\frac{69488}{RT}}$	Negri et al. 1996 [9]
$k_W^{CO_2}$	$k_W^{CO}/e^{\left(\frac{2744.63}{T}-2.946\right)}$	Valipour[6]
<b>D</b> <sub>Knud</sub>	$0,433 \cdot \frac{5 \cdot 10^{-5} 0,15}{1,1(1-0,15)} \sqrt{\frac{RT}{\rho_H}}$	Szekely e Evans [3]
D <sub>CO</sub>	$\frac{D}{\frac{1}{1,276\cdot 10^{-11}T^{1,75}} + \frac{1}{D_{Knud}}}$	Laborde e Parisi[5]
D <sub>CO2</sub>	$\frac{D}{\frac{1}{3,8\cdot10^{-10}T^{1,75}}+\frac{1}{D_{Knud}}}$	Laborde e Parisi[5]

Tabela 2 – Parâmetros utilizados para a solução das equações diferenciais

A expressão para constante de equilíbrio da reação da wustita com CO/CO<sub>2</sub> bem como as energias de ativação e fatores pré-exponenciais das constantes de cinética foram retirados da literatura, exceto pelo fator pré-exponencial da reação da wustita com CO, A, o qual foi objeto de ajuste do modelo.



Este parâmetro tem efeito predominante na cinética das reações de redução, pelo fato das reações da hematita e magnetita com CO serem muito rápidas comparativamente com a wustita.

Por outro lado, as difusividades foram calculadas considerando resistências em paralelo como a difusividades dos gases nos poros e a difusividade de Knudsen, ambos retirados da literatura. Para determinar a difusividade dos gases ao longo do raio da pelota, esta associação de resistências foi multiplicada pelo coeficiente de difusividade efetiva, D.

Os parâmetros A e D não variam com a temperatura e nem com o diâmetro da pelota. São parâmetros intrínsecos de cinética e transporte de massa referentes ao minério e processo de produção das pelotas utilizado.

O ajuste foi realizado através de um método de Newton de duas variáveis, de modo a diminuir a distância entre as curvas modeladas e experimentais utilizando uma função que quantifica a diferença entre o grau de redução para cada instante de tempo, G<sub>t</sub>, calculado utilizando os dados experimentais, G<sub>t</sub><sup>exp</sup> e utilizando as concentrações de CO e CO<sub>2</sub> previstas pelo modelo, G<sub>t</sub><sup>mod</sup>, para todos os N instantes analisados.

$$Erro(A, D) = \frac{\sum_{t=0}^{N} (G_t^{exp} - G_t^{mod})^2}{N} (8)$$

## **3 RESULTADOS E DISCUSSÃO**

Graças ao ajuste pelo método do Newton de duas variáveis de forma a minimizar o erro do grau de redução, foram obtidos os seguintes valores para os parâmetros: A = 0,06; D = 20,2.

Esses valores foram obtidos a partir do ajuste com os dados dos ensaios realizados com temperatura 1100°C com pelotas de raios 4,5 mm e 6,6 mm além do ensaio realizado com temperatura 880°C e pelotas de raio 6,6 mm, excluindo-se, portanto, os dados do ensaio realizado com temperatura 815°C com pelotas de raio 4,5 mm.

A comparação gráfica entre os dados experimentais e cálculos do modelo para cada ensaio quanto ao grau de redução e teor de CO (normalizado dividindo-se pela concentração de CO na entrada do reator) pode ser encontrada na Figura 4. As escalas de tempo foram ajustadas para 100 minutos para permitir uma fácil comparação, embora cada ensaio tenha tido uma duração diferente, conforme a **Erro! Fonte de referência não encontrada.** 

O modelo proposto prevê satisfatoriamente os resultados de grau de redução para três dos quatro ensaios, com o erro máximo ao longo do tempo,  $E_{max}$ , sendo de 1,5% para o Ensaio 1, 1,8% para o Ensaio 2 e 2,1% para o Ensaio 4. O erro foi calculado através da medida da distância entre curvas no ponto mais distante em relação ao valor da curva experimental:

$$E_{max} = max \left[ \frac{(G_t^{exp} - G_t^{mod})}{G_t^{exp}} \right] \cdot 100 \quad (9)$$

Nota-se, na Figura 4, que o pior ajuste foi obtido com o ensaio de menor temperatura 815°C. Foi feita uma tentativa de ajuste dos parâmetros utilizando apenas os dados deste ensaio, porém com resultados insatisfatórios. Neste experimento, foi observado o escurecimento da alumina presente no leito abaixo das pelotas.

## 48º Redução 6º Aglomeração





Figura 4 – Comparação do grau de redução das pelotas em função do tempo.

Considerando a coloração da alumina antes dos ensaios de redução conforme a Figura 5 (a), notou-se um leve escurecimento após o ensaio realizado a 1100 °C com pelotas de raio médio 6,6 mm conforme a Figura 5 (b). Devido ao fato de que este escurecimento foi muito mais elevado ao fim do ensaio realizado a 815 °CFigura 5 (c) formulou-se a hipótese de que ocorreu deposição de carbono na alumina. No ensaio realizado a 880 °C não se observou um escurecimento significativo.

Considerando a reação de Boudouard, é possível determinar as frações molares de CO e CO<sub>2</sub> presentes no gás em equilíbrio conforme a temperatura, descritas na Tabela 3.

 $2CO = C + CO_2$  (reação de Boudouard)



#### (a) (b) (c)

**Figura 5**– Coloração do leito de alumina antes dos ensaios (a), após ensaio feito a 1100 °C com pelotas de raio médio 6,6 mm (b) e após ensaio feito a 815 °C (c).

Temperatura	Fração molar de CO	Fração molar de CO2
815 ⁰C	0,908	0,092
880 °C	0,964	0,036
1100 °C	0,998	0,002

A possível deposição de carbono na alumina implicaria num gás menos redutor do que o esperado entrando no reator e, portanto, numa menor redução das pelotas do que seria esperado utilizando os valores de entrada de CO. Isto está coerente com o observado na Figura 4, de forma que os dados experimentais obtidos a 815 °C não foram considerados para ajuste dos parâmetros A e D.

A Figura 6 mostra um conjunto de micrografias que percorrem uma faixa desde o centro até as bordas das pelotas reduzidas em menores temperaturas. Como se observa, a amostra de menor raio (45 mm) teve uma redução mais uniforme. Por outro lado, a pelota de maior raio (66 mm) tem uma estrutura mais metálica com cores mais claras na superfície, e a porosidade é maior em regiões mais próximas ao centro onde a metalização também é menor. Para os ensaios em maior temperatura (1100 °C) a distribuição de fases é similar à mostrada na Figura 6b, com maior grau de redução próximo a superfície e maior porosidade e maior presença de wustita no centro. As regiões marcadas com os quadrados vermelhos na estão mostradas na Figura 7.



(b) Ensaio 4

Figura 6 – Fotos de microscópio óptico do raio das pelotas de raio de (a) 45 mm e (b) 66 mm reduzidas a 815 °C e 880 °C respectivamente.

## 48º Redução 6º Aglomeração



A Figura 7 mostra as micrografias das pelotas reduzidas. A superfície das pelotas reduzidas em maior temperatura (Figura 7a,b) mostram uma estrutura bastante reduzida com a presença de fases oxidadas no interior de grãos de ferro não reduzidos marcados pelos círculos brancos ou pretos. A superfície da pelota de menor diâmetro ensaiada a menor temperatura mostra a presença de várias partículas de fases oxidadas, indicadas pelas flechas na Figura 7c. A região próxima do meio raio da pelota de maior diâmetro ensaiada a 880 °C está mostrada na Figura 7d. Há a presença de regiões reduzidas, indicadas pelas flechas, e partículas não reduzidas de coloração acinzentada. Esta é uma região de menor grau de redução. As regiões pretas em todas as micrografias são os poros da amostra.



(c)  $T = 815 \text{ }^{\circ}\text{C}$ , raio = 4,5 mm (d)  $T = 880 \text{ }^{\circ}\text{C}$ , raio = 6,6 mm **Figura 7 -** Micrografias das pelotas reduzidas nas diferentes condições. (a) ensaio 1 - borda da pelota e (b) ensaio 2 - borda da pelota; (c) Ensaio 3 - borda da pelota; (d) ensaio 4 - meio raio.

A diferenciação das cores branco para o metal, cinza para a fase oxidada e preto para os poros permitiu a quantificação de cada uma. A fase oxidada foi considerada como wustita, uma vez que todas as amostras possuíam grau de redução final acima de 70%. As curvas de grau de redução ao longo do raio calculadas pelo modelo e pelas medidas de fração das diferentes fases por metalografia estão apresentadas na Figura 8.

A importância dos resultados de metalografia está no fato de que revela uma evidencia de como ocorreu o transporte de massa ao longo do raio da pelota. Relembrando que os parâmetros de cinética A e difusão D foram ajustados considerando apenas as concentrações do gás de saída medidas por infravermelho, nota-se que as curvas de redução ao longo do raio da pelota calculadas pelo modelo apresentam inclinações próximas dos resultados experimentais.

Isto demonstra que o equacionamento do modelo permitiu estimativa relativamente independente dos parâmetros A e D, de forma que as situações em que a cinética ou a difusão foram etapas limitantes foram automaticamente reconhecidas. Um modelo de núcleo não reagido, por exemplo, poderia se ajustar bem aos dados dos experimentos feitos em alta temperatura, mas não em baixa temperatura.

# 48º Redução 6º Aglomeração



Figura 8 – Comparação do grau de redução ao final do ensaio em função do raio da pelota.

Outro aspecto é que as curvas de redução ao longo do raio calculadas pelo modelo estão superestimando a redução próximo à superfície da pelota, na camada 5, em todos os casos. Uma hipótese para isto, se deve ao fato de que o modelo não considera de forma alguma a possibilidade da diminuição na taxa de redução devido à sinterização do ferro formado na superfície da pelota nem à presença de pequenos grãos não-reagidos de wustita cercados por ferro, o que levaria ao surgimento de uma outra barreira de difusão para o avanço da reação. Neste caso, o gás teria que difundir não apenas até o centro da pelota, mas também através do ferro formado. Esta estrutura de wustita cercada por ferro reduzido está mostrada na Figura 7.

O grau de redução total final determinado por metalografia e pelo modelo se encontra na Tabela 4. Observa-se maior proximidade entre os resultados para os ensaios 1 e 3, de menor diâmetro de pelota.

Ensaio	Redução por metalografia (%)	Redução do modelo (%)
1	80	78
2	69	77
3	77	79
4	76	83

**Tabela 4 -** Grau final redução por metalografia e pelo modelo.

Em particular nota-se que o resultado para o grau de redução por metalografia para o ensaio 3, feito a 815 °C com pelotas de raio 4,5mm, está próximo do estimado pelo



modelo, bem como na Figura 8. Isto apoia a hipótese de que os dados de conversão do CO no ensaio 3 não podem ser considerados como um resultado apenas da redução das pelotas, mas sim uma soma entre redução e deposição de carbono na alumina.

## 4 CONCLUSÃO

Um modelo para o processo redução de pelotas de minério de ferro em reator de leito fixo foi proposto, e aplicou-se o método de Newton de duas variáveis para se determinar parâmetros desconhecidos da cinética, A, e difusividade, D, nas pelotas. O modelo prevê de maneira satisfatória as curvas de redução ao longo do tempo para três dos quatro ensaios experimentais realizados para comparação. Há indícios de que no ensaio feito em menor temperatura, no qual houve maior desvio dos resultados, ocorreu deposição de carbono na alumina competindo pelo consumo do CO.

Por outro lado, foi realizada análise metalográfica do grau de redução das pelotas ao longo do raio. As curvas levantadas pelo modelo possuem a mesma inclinação que os resultados experimentais, indicando que o parâmetro D, que diz respeito à difusão dos gases ao longo da pelota, foi avaliado de forma independente do que o parâmetro A, que diz respeito à reação de redução. Isso mostra que o modelo reflete, de fato, a velocidade de transporte de massa ao longo do raio da pelota.

## REFERÊNCIAS

[1] "MIDREX 2016 World directreductionstatistics," [Online]. Disponível em: http://www.midrex.com/assets/user/news/MidrexStatsBook2016.pdf. [Acesso em 22 11 2017].

[2] J. Szekely e J. W. Evans, "A structuralmodel for gas-solidreactionswith a movingboundary," ChemicalEngineering Science, vol. 25, pp. 1091-1107, 1970.

[3] J. Szekely e J. W. Evans, "A structuralmodel for gas-solidreactionswith a movingboundary II: The effectofgrainsize, porosityandtemperatureonthereactionofporous pellets," ChemicalEngineering Science, vol. 26, pp. 1901-1913, 1971.

[4] Y. Takenaka, Y. Kimura, K. Narita e D. Kaneko, "Mathematicalmodelofdirectreductionshaftfurnaceand its applicationtoactualoperationsof a modelplant," ComputersandChemicalEngineering,

vol. 10, n. 1, pp. 67-75, 1986.

[5] D. R. Parisi e M. A. Laborde, "Modelingofcountercurrentmovingbedgassolidreactorused in directreductionofiron ore," ChemicalEngineeringJournal, vol. 104, pp. 35-43, 2004.

[6] M. S. Valipour, "Mathematicalmodelingof a non-catalyticgas-solidreaction: hematite pellet reductionwithSyngas," ScientialranicaTransaction C: ChemistryandChemicalEngineering, vol. 16, n. 2, pp. 108-124, 2009.

[7] A. Rahimi e A. Niksiar, "A general model for movingbedreactorswithmultiplechemicalreactionspart I: modelformulation," International Journal of Mineral Processing, vol. 124, pp. 58-66, 2013.

"A Rahimi Niksiar. model [8] Α. е Α. general for movingbedreactorswithmultiplechemicalreactions, 11: effectofkineticmodel," part International Journal of Mineral Processing, vol. 124, pp. 67-74, 2013.



[9] E. D. Negri, O. M. Alfano e M. G. Chiovetta, "Moving-bedreactormodel for the direct reduction of hematite. Parametric study," Industrial & Engineering Chemistry Research, vol. 34, pp. 4266-4276, 1995.