



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE
CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA
UNIDADE ACADÊMICA DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA**

TESE DE DOUTORADO

**MODELAGEM RIGOROSA E SIMULAÇÃO DA ETAPA DE
GRELHA MÓVEL NO PROCESSO DE ENDURECIMENTO DE
PELOTAS DE MINÉRIO DE FERRO**

CAMILA BARATA CAVALCANTI

Campina Grande – PB, novembro de 2024.

**MODELAGEM RIGOROSA DA ETAPA DE GRELHA MÓVEL NO
PROCESSO DE ENDURECIMENTO DE PELOTAS DE MINÉRIO DE FERRO**

CAMILA BARATA CAVALCANTI

Tese de doutorado apresentada à Universidade Federal de Campina Grande como parte dos requisitos para a obtenção do título de Doutora em Engenharia Química.

Orientadores:

Karoline Dantas Brito

Luis Gonzaga Sales Vasconcelos

Campina Grande – PB, novembro de 2024.

C376m

Cavalcanti, Camila Barata.

Modelagem rigorosa da etapa de grelha móvel no processo de endurecimento de pelotas de minério de ferro / Camila Barata Cavalcanti. – Campina Grande, 2024.

119 f. : il. color.

Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Universidade Federal de Campina Grande, Centro de Ciências e Tecnologia, 2024.

"Orientação: Prof. Dr. Luís Gonzaga Sales Vasconcelos, Profa.

Dra. Karoline Dantas Brito".

Referências.

1. Modelagem Matemática. 2. Grelha-Móvel. 3. Processo de Endurecimento. 4. Pelotas de Minério de Ferro. 5. Qualidade da Pelota. 6. *Grid Convergence Index* (GCI). I. Vasconcelos, Luís Gonzaga Sales. II. Brito, Karoline Dantas. III. Título.

CDU 66.011(043)



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE
UNIDADE ACADEMICA DE ENGENHARIA QUIMICA
Rua Aprígio Veloso, 882, - Bairro Universitario, Campina Grande/PB, CEP 58429-900
Telefone: (83) 2101-1100
Site: <http://cct.ufcg.edu.br>

REGISTRO DE PRESENÇA E ASSINATURAS

ATA DA DEFESA PARA CONCESSÃO DO **GRAU DE DOUTOR** EM ENGENHARIA QUÍMICA,
REALIZADA EM 12 DE NOVEMBRO DE 2024

(Nº 145)

CANDIDATO(A): **Camila Barata Cavalcanti**. COMISSÃO EXAMINADORA: Romildo Pereira Brito, Prof., Dr., UFCG/ **Presidente da Sessão** e Examinador Interno, Luís Gonzaga Sales Vasconcelos, Prof., Dr., UFCG/ **Orientador**, Karoline Dantas Brito, Prof^a., Dr^a., UFCG/ **Orientadora**, Arioston Araújo de Moraes Júnior, Prof., Dr., UFPB/ Examinador Externo, Gilvan Wanderley de Farias Neto, Pesq., Dr., UFCG/Examinador Interno, Gladson Euler Lima Júnior, Prof., Dr., Legasys/Examinador Externo. TÍTULO DA TESE: "MODELAGEM RIGOROSA DA ETAPA DE GRELHA MÓVEL NO PROCESSO DE ENDURECIMENTO DE PELOTAS DE MINÉRIO DE FERRO". ÁRECONCENTRAÇÃO: Desenvolvimento de Processos Químicos - HORA DE INÍCIO: **09:00 horas** – LOCAL: por videoconferência .Em sessão pública, após exposição de cerca de 50 minutos, o(a) candidato(a) **Camila Barata Cavalcanti** foi arguido(a) oralmente pelos membros da Comissão Examinadora, tendo demonstrado suficiência de conhecimento e capacidade de sistematização, no tema de sua tese, sendo **APROVADO**. Face à aprovação, declara o(a) Presidente da Comissão, achar-se a examinada, legalmente habilitado a receber o **Grau de Doutor**, no domínio da Engenharia Química, cabendo a Universidade Federal de Campina Grande, como direito, providenciar a expedição do Diploma, o que a mesma faz jus. Na forma regulamentar, foi lavrada a presente ata, que é assinada por mim, Maricé Pereira de Araújo - Secretária - do PPGEQ e os membros da Comissão Examinadora e o(a) candidato(a). Campina Grande, 12 de novembro de 2024.

MARICÉ PEREIRA DE ARAÚJO

Secretária

Romildo Pereira Brito, Prof., Dr., UFCG
Presidente da Comissão e Examinador Interno

Luís Gonzaga Sales Vasconcelos, Prof., Dr., UFCG
Orientador

Karoline Dantas Brito, Prof^a., Dr^a., UFGM
Orientadora

Gilvan Wanderley de Farias Neto, Pesq., Dr., UFGM
Examinador Interno

Arioston Araújo de Moraes Júnior, Prof., Dr., UFGM
Examinador Externo

Gladson Euler Lima Júnior, Prof., Dr., Legasys
Examinador Externo

Camila Barata Cavalcanti
Candidata



Documento assinado eletronicamente por **ROMILDO PEREIRA BRITO, PROFESSOR 3 GRAU**, em 12/11/2024, às 12:32, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 8º, caput, da [Portaria SEI nº 002, de 25 de outubro de 2018](#).



Documento assinado eletronicamente por **LUIS GONZAGA SALES VASCONCELOS, PROFESSOR 3 GRAU**, em 12/11/2024, às 12:47, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 8º, caput, da [Portaria SEI nº 002, de 25 de outubro de 2018](#).



Documento assinado eletronicamente por **KAROLINE DANTAS BRITO, PROFESSOR(A) DO MAGISTERIO SUPERIOR**, em 12/11/2024, às 17:19, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 8º, caput, da [Portaria SEI nº 002, de 25 de outubro de 2018](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site <https://sei.ufmg.edu.br/autenticidade>, informando o código verificador **4962439** e o código CRC **A8AE2CE8**.

Referência: Processo nº 23096.073944/2024-65

SEI nº 4962439

Documento assinado digitalmente
gov.br GILVAN WANDERLEY DE FARIAS NETO
Data: 12/11/2024 23:40:19-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Documento assinado digitalmente
gov.br GLADSON EULER LIMA JUNIOR
Data: 13/11/2024 07:59:18-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Documento assinado digitalmente
gov.br ARIOSTON ARAUJO DE MORAIS JUNIOR
Data: 13/11/2024 09:38:30-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

MODELAGEM RIGOROSA DA ETAPA DE GRELHA MÓVEL NO PROCESSO DE ENDURECIMENTO DE PELOTAS DE MINÉRIO DE FERRO

CAMILA BARATA CAVALCANTI

Tese apresentada em 12/11/2024

Banca Examinadora:

Documento assinado digitalmente
 **KAROLINE DANTAS BRITO**
Data: 05/12/2024 09:38:14-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Karoline Dantas Brito (Orientadora)

Documento assinado digitalmente
 **LUIS GONZAGA SALES VASCONCELOS**
Data: 06/12/2024 09:15:28-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Luis Gonzaga Sales Vasconcelos (Orientador)

ROMILDO PEREIRA
BRITO:41912675404

Digitally signed by ROMILDO PEREIRA BRITO:41912675404
Date: 2024.12.04 09:16:18 -03'00'

Romildo Pereira Brito (Examinador Interno)

Documento assinado digitalmente
 **GILVAN WANDERLEY DE FARIAS NETO**
Data: 05/12/2024 10:23:53-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Gilvan Wanderley de Farias Neto (Examinador Interno)

Documento assinado digitalmente
 **ARIOSTON ARAUJO DE MORAIS JUNIOR**
Data: 05/12/2024 10:42:13-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Arioston Araújo de Moraes Júnior (Examinador Externo)

Documento assinado digitalmente
 **GLADSON EULER LIMA JUNIOR**
Data: 06/12/2024 09:32:38-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Gladson Euler de Lima Júnior (Examinador Externo)

Campina Grande – PB, novembro de 2024.

DEDICATÓRIA

*Dedico este trabalho aos meus pais e minha irmã,
Jairo Coelho, Maria Auxiliadora Barata e Carina Barata,
e ao meu companheiro, Augusto.
Minha fonte eterna de força e admiração.*

AGRADECIMENTOS

Aos meus pais, Jairo Coelho e Maria Auxiliadora Barata, que são os meus maiores exemplos de dedicação e persistência. Por sempre me apoiarem nas decisões profissionais. Pelo amor e cuidado incondicional. Por toda confiança, compreensão, conselhos, motivação e orações nos momentos difíceis. E principalmente por terem me ensinado desde criança que a educação sempre deveria estar em primeiro lugar durante minha vida.

À minha irmã, Carina Barata, por todos os ensinamentos, conselhos e zelo. Minha base psicológica, a quem recorro nos momentos de crise. Sempre me ajudando a seguir em um caminho mais assertivo.

A Augusto, que foi fundamental ao longo de toda essa trajetória, por todo apoio, paciência, compreensão, motivação, conselhos e dedicação.

À professora Karoline Brito, por toda orientação e acolhimento. Toda minha admiração e agradecimentos pelos ensinamentos transmitidos. Principalmente por ter acreditado no meu potencial e por continuar apostando.

Aos meus amigos e parceiros do LARCA e da Legasys, por todo apoio e discussões agregadoras.

Ao corpo docente de Engenharia Química da UFCG, por serem os responsáveis em passar os principais fundamentos desta carreira desde a graduação.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), pelo financiamento da pesquisa.

A todos que contribuíram direta ou indiretamente para a conclusão desta etapa, o meu muito obrigada.

*“Neste mundo vocês terão aflições, mas
tenham coragem: eu venci o mundo.”
(Jo 16, 33)*

CAVALCANTI, CAMILA BARATA. **Modelagem rigorosa da etapa de Grelha Móvel no processo de endurecimento de pelotas de minério de ferro**. 2024. 119 p. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Universidade Federal de Campina Grande, Paraíba, 2024.

RESUMO

Este trabalho apresenta um modelo fenomenológico robusto para o sistema de Grelha-Móvel, em uma planta de endurecimento de pelotas de minério de ferro em escala industrial. O processo consiste em um leito de pelotas em movimento constante, aquecido por correntes de ar perpendiculares. O objetivo é integrar em um único modelo os detalhes dos fenômenos químicos e físicos que ocorrem no sistema, incluindo a transferência de energia gás/pelota, um mecanismo de secagem com três etapas, resistência à compressão, e modelos cinéticos para a combustão do coke, oxidação da magnetita, e calcinação de carbonatos. Na etapa de desenvolvimento do modelo, foram avaliados dois tipos de balanço de energia utilizados na literatura. Realizou-se a análise de convergência de malha através do método *Grid Convergence Index* (GCI), que definiu a malha para o sistema. O modelo demonstrou aderência aos dados de processo, com um RMSE normalizado de 6,30%. As simulações permitiram avaliar a influência de parâmetros chave sobre o perfil de temperatura e da resistência à compressão da pelota ao longo do leito. Observando-se uma relação inversamente proporcional do perfil e qualidade para com a velocidade da grelha, diâmetro da pelota e altura do leito. A fração de vazios do leito produziu impactos pouco expressivos nas variáveis avaliadas. A variação da composição da pelota apresentou forte influência sobre o leito, com efeitos semelhantes entre a magnetita e o *coke*. Destacando-se a influência significativa do *coke* sobre a resistência à compressão, limitada pelo fenômeno de vitrificação em altas temperaturas. Este modelo possibilita a identificação e análise crítica de fenômenos de difícil detecção durante a operação convencional, e auxilia na definição de faixas operacionais para otimizar a qualidade do produto e a eficiência energética do processo.

Palavras-Chaves: Modelagem matemática, Grelha-Móvel, Processo de Endurecimento, Pelotas de minério de ferro, Qualidade da pelota.

CAVALCANTI, CAMILA BARATA. **Rigorous modeling of the Traveling Grate stage in the iron ore pellet induration process.** 2024. 119 p. Thesis (Ph.D. in Chemical Engineering) – Federal University of Campina Grande, Paraíba, 2024.

ABSTRACT

This work presents a robust phenomenological model for the Traveling Grate system in an industrial-scale iron ore pellet induration plant. The process involves a continuously moving pellet bed heated by perpendicular air streams. The aim is to integrate into a single model the detailed chemical and physical phenomena occurring within the system, including gas/pellet energy transfer, a three-stage drying mechanism, compressive strength, and kinetic models for coke combustion, magnetite oxidation, and carbonate calcination. During the model's development, two types of energy balance from the literature were evaluated. A mesh convergence analysis was performed using the Grid Convergence Index (GCI) method, which defined the mesh for the system. The model showed good agreement with process data, with a normalized RMSE of 6.30%. The simulations allowed the evaluation of key parameter influences on the temperature profile and compressive strength of the pellet along the bed. An inverse relationship was observed between the profile and quality with respect to the grate speed, pellet diameter, and bed height. The bed void fraction produced negligible impacts on the evaluated variables. Variations in pellet composition had a strong influence on the bed, with similar effects observed between magnetite and coke. Notably, coke had a significant impact on compressive strength, constrained by the vitrification phenomenon at high temperatures. This model enables the identification and critical analysis of phenomena that are difficult to detect during conventional operation and assists in defining operational ranges to optimize product quality and energy efficiency of the process.

Keywords: Mathematical modeling, Traveling Grate, Induration process, Iron ore pellets, Pellet quality.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1. Ilustração esquemática do processo Grelha-Forno-Resfriador.	22
Figura 2. (a) Minério granulado, (b) Sínter e (c) Pelota.	30
Figura 3. Principais reservas de ferro mundiais em 2020.	32
Figura 4. Mecanismo de formação das pelotas.	38
Figura 5. (a) Tambor e (b) disco de pelotamento.	39
Figura 6. Diagrama esquemático do forno de cuba (<i>Shaft Furnace</i>).	42
Figura 7. Diagrama esquemático do forno de grelha reta (<i>Straight-Grate</i>).	42
Figura 8. Diagrama esquemático do sistema grelha-forno-resfriador (<i>Grate-Kiln-Cooler</i>).	44
Figura 9. Diagrama esquemático do processo Grelha Móvel (GM).	51
Figura 10. Fluxograma do modelo computacional para o sistema de GM.	64
Figura 11. Esquema computacional de resolução do método de diferenças finitas.	65
Figura 12. Perfis de temperatura da pelota para os casos 01 e 02 do balanço de energia comparados aos dados experimentais do datapac.	72
Figura 13. Perfis de temperatura média (a) da pelota e (b) do gás.	74
Figura 14. Perfis de temperatura da pelota para o sistema de GM comparados aos dados experimentais do datapac.	77
Figura 15. Perfis de temperatura (a) do gás e (b) da pelota em função do comprimento do leito.	80
Figura 16. Perfil (a) de umidade da pelota e (b) da taxa de secagem média em função do comprimento do leito.	81
Figura 17. Perfil da resistência à compressão da pelota em função do comprimento do leito.	82
Figura 18. Efeito da velocidade da grelha sobre o perfil de temperatura da pelota.	83
Figura 19. Efeito da velocidade da grelha sobre a resistência à compressão.	84
Figura 20. Efeito da altura do leito sobre o perfil de temperatura da pelota.	84
Figura 21. Efeito da altura do leito sobre a resistência à compressão.	85
Figura 22. Efeito do diâmetro médio da pelota sobre o perfil de temperatura da pelota.	86
Figura 23. Efeito do diâmetro médio da pelota sobre a resistência à compressão.	87
Figura 24. Efeito da fração de vazios do leito sobre o perfil de temperatura da pelota.	88
Figura 25. Efeito da fração de vazios do leito sobre a resistência à compressão.	89

Figura 26. Efeito da composição (a) do <i>coke</i> e (b) da magnetita sobre o perfil de temperatura da pelota.....	90
Figura 27. Efeito da composição (a) do <i>coke</i> e (b) da magnetita sobre a resistência à compressão.	91

LISTA DE TABELAS

Tabela 1. Comparativo entre trabalhos da literatura sobre o processo de endurecimento de pelotas de minério de ferro.	24
Tabela 2. Parâmetros do modelo de qualidade da pelota.	62
Tabela 3. Dados de entrada do modelo computacional do sistema de GM.	65
Tabela 4. Malhas utilizadas na análise de convergência GCI.	73
Tabela 5. Resultados para a análise de convergência de malha para o modelo de GM.	75
Tabela 6. Perfis de temperatura da pelota e erros quadráticos em função do comprimento do leito.	78
Tabela 7. Variação da velocidade da grelha sobre a temperatura e resistência à compressão final média da pelota.	83
Tabela 8. Variação da altura do leito sobre a temperatura e resistência à compressão final média da pelota.	85
Tabela 9. Variação do diâmetro médio da pelota sobre a temperatura e resistência à compressão final média da pelota.	87
Tabela 10. Variação da fração de vazios do leito sobre a temperatura e resistência à compressão final média da pelota.	89
Tabela 11. Variação da composição do <i>coke</i> e da magnetita sobre a temperatura e resistência à compressão final média da pelota.	92

LISTA DE QUADROS

Quadro 1. Exportação das pelotas de minério de ferro por trimestre no Brasil.	33
Quadro 2. Histórico das usinas de pelletização no Brasil.	35

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

<i>Siglas</i>	<i>Descrição</i>	
DR	Zona de secagem	
GCI	<i>Grid Convergence Index</i>	
GFR	Grelha-Forno-Resfriador	
GM	Grelha-Móvel	
GR	Grelha-Reta	
MDF	Método de diferenças finitas	
PH1	Zonas de pré-queima 1	
PH2	Zonas de pré-queima 2	
RUM	<i>Run of Mine</i>	
SLSQP	<i>Sequential Least Squares Programming</i>	
<i>Variáveis</i>	<i>Descrição</i>	<i>Unidades</i>
A	Área de contato aparente gás/pelota	m^{-1}
A_0	Constante de Arrhenius para o modelo de qualidade da pelota	s^{-1}
C_g	Calor específico do gás	$kJ.kg^{-1}.K^{-1}$
C_{O_2}	Concentração de oxigênio no gás	$kmol.m^{-3}$
$C_{O_2}^e$	Concentração de equilíbrio de oxigênio no gás	$kmol.m^{-3}$
C_p	Calor específico da pelota	$kJ.kg^{-1}.K^{-1}$
$D_{O_2}^c$	Difusividade do oxigênio através do <i>coke</i>	$m^2.s^{-1}$
$D_{O_2}^m$	Difusividade do oxigênio através da magnetita	$m^2.s^{-1}$
$D_{O_2}^e$	Difusividade efetiva do oxigênio	$m^2.s^{-1}$
D_{H_2O}	Difusividade da água	$m^2.s^{-1}$
$D_{H_2O}^e$	Difusividade efetiva da água	$m^2.s^{-1}$
d_p	Diâmetro da pelota	m
e_{12}	Erro relativo entre a malha fina e a média	-
e_{23}	Erro relativo entre a malha média e a grossa	-
$e_{ext\ 12}$	Erro em relação a solução assintótica das malhas fina e média	-
$e_{ext\ 23}$	Erro em relação a solução assintótica das malhas média e grossa	-
E	Energia de ativação para o modelo de qualidade da pelota	J/mol
$f_{1,2,3}$	Resultado da variável de interesse do modelo para a malha fina, média e grossa	$^{\circ}C$
$f_{ext\ 12}$	Extrapolação assintótica da solução entre a malha fina e a média	-
$f_{ext\ 23}$	Extrapolação assintótica da solução entre a malha média e a grossa	-
F_s	Fator de segurança do método GCI	-
G	Fluxo mássico de ar	$kg.m^{-2}.s^{-1}$
GCI_{12}	Índice de convergência entre as malhas fina e média	-
GCI_{23}	Índice de convergência entre as malhas média e grossa	-
h	Coeficiente de transferência de calor por convecção	$kJ.m^{-2}.s^{-1}.K^{-1}$
H	Refinamento da malha	-
i	Índice do i -ésimo componente no gás	-

j	Índice do j-ésimo componente na pelota	-
k	Índice da k-ésima reação	-
k_c	Taxa de primeira ordem da combustão do <i>coke</i>	m.s^{-1}
k_d	Taxa de primeira ordem da calcinação da <i>dolomite</i>	m.s^{-1}
k_g	Condutividade térmica do gás	$\text{kJ.m}^{-1}.\text{s}^{-1}.\text{K}^{-1}$
k_l	Taxa de primeira ordem da calcinação da <i>limestone</i>	m.s^{-1}
k_m	Taxa de primeira ordem da oxidação da magnetita	m.s^{-1}
\bar{k}_{O_2}	Coefficiente de transferência de massa do oxigênio no gás	m.s^{-1}
\bar{k}_w	Coefficiente de transferência de massa de vapor de água no gás	m.s^{-1}
m_d	Concentração da <i>dolomite</i>	kg.m^{-3}
m_l	Concentração da <i>limestone</i>	kg.m^{-3}
N	Número de elementos da malha	-
p	Ordem aparente do método GCI	-
P	Pressão do gás	Pa
P'	Pressão absoluta do gás	Pa
Pr	Número de Prandtl	-
Q	Qualidade da pelota	kg.K.pellet^{-1}
Q_f	Qualidade final da pelota	kg.pellet^{-1}
Q_C	Quantidade de calor associada à convecção	$\text{kJ.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$
$Q_{E/C}$	Quantidade de calor associada à evaporação/condensação da água	$\text{kJ.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$
Q_R	Quantidade de calor associada às reações químicas	$\text{kJ.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$
r	Fator de refinamento	-
R	Constante dos gases ideais	$\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$
r_c	Raio do núcleo de <i>coke</i> não regido	m
R_c	Taxa de reação da combustão do <i>coke</i>	$\text{kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$
R_d	Taxa de reação da calcinação da <i>dolomite</i>	$\text{kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$
R_k	Taxa da k-ésima reação	$\text{kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$
R_l	Taxa de reação da calcinação da <i>limestone</i>	$\text{kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$
r_m	Raio do núcleo de magnetita não regido	m
R_m	Taxa de reação da oxidação da magnetita	$\text{kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$
r_w	Raio do núcleo úmido na pelota	m
R_w	Taxa de reação da evaporação/condensação da água	$\text{kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$
r_p	Raio da pelota	m
Re_p	Número de Reynolds da pelota	-
RMSE	Raiz do erro médio quadrático	-
$S_{i/j}$	Coefficiente estequiométrico do componente i ou j	-
Sc	Número de Schmidt	-
t	Tempo	s
T_C	Temperatura crítica de vitrificação	K
T_g	Temperatura do gás	K
T_L	Temperatura de aparição da fase líquida no fluxo de pelotas	K
T_p	Temperatura da pelota	K
T_w	Temperatura de bulbo úmido	K
v_g	Velocidade do gás	m.s^{-1}
w_i^g	Fração mássica do i-ésimo componente do gás	-
w_j^p	Fração mássica do j-ésimo componente da pelota	-

w_g	Conteúdo de umidade no gás	kg.m^{-3}
w_g^e	Conteúdo de umidade no gás no equilíbrio	kg.m^{-3}
w_p	Conteúdo de umidade na pelota	kg.m^{-3}
w_{pc}	Conteúdo de umidade crítico na pelota	kg.m^{-3}
z	Profundidade do leito	m
<i>Letras gregas</i>	<i>Descrição</i>	<i>Unidades</i>
α	Fator do balanço de energia para o gás	-
β	Coefficientes do modelo de qualidade das pelotas	$\text{kg.pellet}^{-1}.\text{K}^{-1}$
γ	Coefficiente do modelo de qualidade das pelotas	J.mol^{-1}
ΔA_i	Área dos elementos da malha	m^2
ΔH_c	Entalpia da reação de combustão do <i>coke</i>	kJ.kg^{-1}
ΔH_d	Entalpia da reação de calcinação da <i>dolomite</i>	kJ.kg^{-1}
ΔH_l	Entalpia da reação de calcinação da <i>limestone</i>	kJ.kg^{-1}
ΔH_m	Entalpia da reação de oxidação da magnetita	kJ.kg^{-1}
ΔH_w	Entalpia da reação de evaporação/condensação da água	kJ.kg^{-1}
ε_b	Fração de vazios do leito de pelotas	-
ε_p	Porosidade da pelota	-
κ	Coefficiente do modelo de qualidade das pelotas	K.s^{-1}
μ_g	Viscosidade do gás	$\text{kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$
\mathcal{P}_g	Propriedades do gás	-
\mathcal{P}_p	Propriedades da pelota	-
ρ_b	Densidade do seio do leito de pelotas	kg.m^{-3}
ρ_g	Densidade do gás	kg.m^{-3}
τ	Coefficiente do modelo de qualidade das pelotas	-
v	Esfericidade da pelota	kg.pellet^{-1}
Φ	Coefficiente do modelo de qualidade das pelotas	-
χ	Convergência da solução para a faixa assintótica	-
ψ	Coefficientes do modelo de qualidade das pelotas	K
ω	Fator do balanço de energia para a pelota	-

SUMÁRIO

CAPÍTULO 1	21
INTRODUÇÃO	21
1.1. CONTEXTUALIZAÇÃO	22
1.2. OBJETIVOS	25
1.2.1. OBJETIVO GERAL	25
1.2.2. OBJETIVOS ESPECÍFICOS	25
1.3. CONTRIBUIÇÕES DA TESE	25
1.4. ORGANIZAÇÃO DA TESE	26
CAPÍTULO 2	28
REVISÃO DE LITERATURA	28
2.1 MINÉRIO DE FERRO	29
2.2 MERCADO DO MINÉRIO DE FERRO	31
2.3 HISTÓRICO DO PROCESSO DE PELOTIZAÇÃO	33
2.4 PROCESSO DE PELOTIZAÇÃO	35
2.4.1. PREPARAÇÃO DAS MATÉRIAS-PRIMAS	35
2.4.2. FORMAÇÃO DAS PELOTAS CRUAS	37
2.4.3. PROCESSO DE ENDURECIMENTO	40
2.5 MODELAGEM FENOMENOLÓGICA DO PROCESSO DE ENDURECIMENTO DE PELOTAS DE MINÉRIO DE FERRO	46
2.6 ESTUDO DE CASO: FORNO DE GRELHA MÓVEL	51
CAPÍTULO 3	50
MODELAGEM E SIMULAÇÃO	50
3.1 INTRODUÇÃO	51
3.2 HIPÓTESES	51
3.3 BALANÇO DE ENERGIA	53
3.3.1 CASO 01	55
3.3.2 CASO 02	55
3.4 EVAPORAÇÃO E CONDENSAÇÃO DA UMIDADE	55
3.5 REAÇÕES QUÍMICAS	58
3.5.1 OXIDAÇÃO DA MAGNETITA E COMBUSTÃO DO <i>COKE</i>	58
3.5.2 CALCINAÇÃO DOS CARBONATOS	60

3.6	TRANSFERÊNCIA E BALANÇO DE MASSA	61
3.7	QUALIDADE DA PELOTA	61
3.8	SOLUÇÃO NUMÉRICA	63
3.9	GRID CONVERGENCE INDEX (GCI)	66
<u>CAPÍTULO 4</u>		<u>70</u>
RESULTADOS E DISCUSSÕES		70
4.1.	INTRODUÇÃO	71
4.2.	AVALIAÇÃO DOS BALANÇOS DE ENERGIA	71
4.3.	ANÁLISE DE CONVERGÊNCIA DE MALHA	72
4.4.	VALIDAÇÃO DO MODELO	76
4.5.	PERFIS DE TEMPERATURA	79
4.6.	PERFIL DE UMIDADE DA PELOTA	80
4.7.	QUALIDADE DA PELOTA	81
4.8.	ANÁLISE DE PARÂMETROS CHAVE DO PROCESSO	82
4.8.1.	VARIAÇÃO DA VELOCIDADE DA GRELHA	82
4.8.2.	VARIAÇÃO DA ALTURA DO LEITO DE PELOTAS	84
4.8.3.	VARIAÇÃO DO DIÂMETRO MÉDIO DA PELOTA	86
4.8.4.	VARIAÇÃO DA FRAÇÃO DE VAZIOS DO LEITO	88
4.8.5.	VARIAÇÃO DA COMPOSIÇÃO DA PELOTA	89
<u>CAPÍTULO 5</u>		<u>93</u>
CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS		93
5.1.	CONCLUSÕES	94
5.2.	TRABALHOS FUTUROS	95
<u>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS</u>		<u>96</u>
<u>APÊNDICE 1</u>		<u>104</u>
ARTIGO PUBLICADO NA REVISTA “<i>JOURNAL OF MATERIALS RESEARCH AND TECHNOLOGY</i>”		104

Capítulo 1

Introdução

1.1.Contextualização

Um dos principais insumos da indústria siderúrgica e essenciais na manufatura do aço são as pelotas de minério de ferro, que são aglomerados esféricos, com elevada resistência à abrasão e mecânica, advindas do reaproveitamento de finos gerados nas operações de beneficiamento (Iljana *et al.*, 2022). Uma planta de pelotização (*Pelletizing plant*) é composta pelas etapas de preparação das matérias-primas, formação das pelotas cruas (*balling*) e endurecimento (*induration*) (Ahrens, 2008; Mourão, 2022b). Os principais tipos de processo de endurecimento (*induration*) são o Grelha-Reta (GR) e o Grelha-Forno-Resfriador (GFR) (Sadrnezhad; Ferdowsi; Payab, 2008). O GFR é amplamente utilizado na indústria de mineração, em virtude de sua elevada capacidade produtiva, adaptabilidade a diferentes tipos de materiais e combustíveis; e a produção de pelotas com qualidade superior, devido a uma melhor homogeneização térmica, quando comparadas ao GR (Stjernberg; Isaksson; Ion, 2015a; Wendling; Nascimento; Wendling, 2017; Yang *et al.*, 2016).

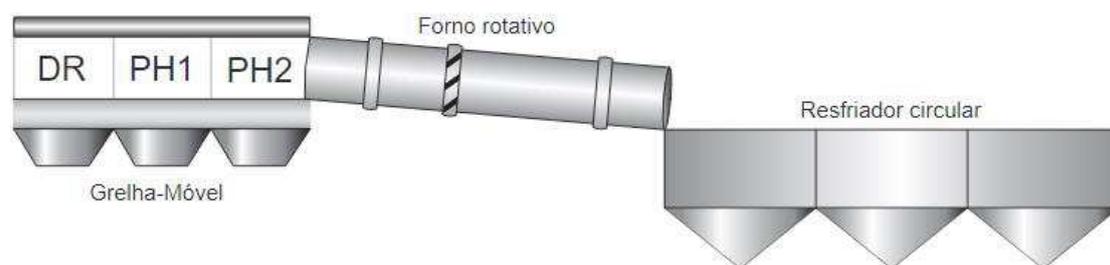


Figura 1. Ilustração esquemática do processo Grelha-Forno-Resfriador.

O GFR é composto por três processos (Figura 1): (i) o forno de Grelha-Móvel (*Traveling-Grate*) que é responsável pelo aquecimento inicial das pelotas verdes; (ii) no forno rotativo (*Rotary Kiln*) é onde ocorre o endurecimento das pelotas, ou seja, a principal etapa de aquisição das propriedades mecânicas; (iii) o resfriador circular (*Circular-Cooler*), cujo objetivo é reduzir a temperatura das pelotas para facilitar o manuseio e transporte nas etapas subsequentes, bem como, reaproveitar a energia do sistema, através de correntes de recirculação de ar (Fan *et al.*, 2015). O forno de Grelha-Móvel (GM), objeto de estudo deste trabalho, consiste em uma grelha preenchida por um leito de pelotas que se move ao longo de três zonas. Na zona de secagem (DR) é efetuada a evaporação do conteúdo de umidade das pelotas; e nas zonas de pré-queima 1 (PH1) e

pré-queima 2 (PH2) é onde se sucedem as reações químicas responsáveis por conferir à pelota a resistência suficiente para suportar a entrada no forno rotativo (Copeland; Claremboux; Kawatra, 2019).

O sistema de GM é um processo complexo, no qual a modelagem fenomenológica envolve transferências de calor e massa de forma simultânea, e reações químicas. Na literatura é considerado um reator não catalítico gás-sólido de leito compactado e de corrente cruzada (Majumder; Natekar; Runkana, 2009). Neste sistema, as correntes de ar de aquecimento atravessam perpendicularmente o leito de pelotas, que se move com velocidade constante. O processo apresenta um alto grau de integração térmica entre as diferentes zonas, devido às diversas correntes de recirculação de ar de aquecimento. Por este motivo, é necessário o emprego de métodos de resolução simultânea para os sistemas de equações diferenciais parciais (Fan *et al.*, 2015; Majumder; Natekar; Runkana, 2009).

Sob este contexto desafiador, em 1975, Hasenack; Lebelle; Kooy, (1975) e Voskamp; Brasz, (1975) propuseram os primeiros *insights* para a modelagem teórica do processo de *induration*. Young; Cross; Gibson, (1979) e Thurlby (1988a, 1988c, 1988b) desenvolveram os modelos pioneiros para o sistema GFR. Posteriormente, importantes contribuições foram realizadas (Barati, 2008; Fan *et al.*, 2015; Hamidi; Payab, 2003; Küçükada *et al.*, 1994; Majumder; Natekar; Runkana, 2009; Sadrnezhaad; Ferdowsi; Payab, 2008; Tan; Peng; Shi, 2016; Thorat *et al.*, 2022; Tsukerman; Duchesne; Hodouin, 2007; Wang *et al.*, 2012; Wendling; Nascimento; Wendling, 2017; Yang *et al.*, 2016; Zhou *et al.*, 2021), com a finalidade de aumentar a acurácia dos modelos e predizer variáveis determinantes para o processo.

Entre os principais trabalhos recentes sobre o processo de endurecimento de pelotas de minério de ferro, destacam-se alguns estudos relevantes, sumarizados na Tabela 1. No sistema GFR, Wang *et al.*, (2012) estão entre os primeiros autores a propor um modelo fenomenológico para o GFR moderno. Este modelo leva em consideração os múltiplos estágios de aquecimento e resfriamento, além de algumas reações chave no processo. Além disso, Fan *et al.*, (2015) contribuíram com um modelo que aborda o acoplamento entre os equipamentos do sistema GFR, incluindo também uma avaliação da qualidade da pelota. Em relação ao sistema de GM, o trabalho de Barati, (2008) é um exemplo importante. O autor apresenta um modelo detalhado, validado com dados de uma planta piloto, e faz uma análise abrangente das principais variáveis envolvidas no processo. Outro estudo pertinente nesse sistema é o de Majumder; Natekar; Runkana,

(2009), que desenvolveram uma ferramenta de simulação *user-friendly* para um modelo mais simplificado.

No que diz respeito aos estudos relacionados ao sistema de GM, observou-se a presença de algumas hipóteses simplificadoras. Por exemplo, o trabalho de Feng et al., (2010) foca somente na evaporação da umidade das pelotas, adotando um mecanismo de duas etapas para tal. Já Thorat et al., (2022) desenvolveram um modelo que se concentra exclusivamente nos efeitos da troca térmica entre as pelotas e o gás, sem considerar as reações envolvidas no processo. Dentre os estudos analisados, apenas Barati, (2008) e Zhou et al., (2021) implementaram um mecanismo mais completo de evaporação da umidade, que abrange três etapas, ou seja, considerando a resistência à transferência de massa para o gás, à difusão através da camada seca (*'dry-shell'*) e à transferência de calor.

É importante ressaltar que entre os estudos listados na Tabela 1, Zhou et al., (2021) e Feng et al., (2010) não levam em conta outras reações que ocorrem no processo. Entre estas, a calcinação da dolomita é a que mais frequentemente fica ausente nos modelos.

Tabela 1. Comparativo entre trabalhos da literatura sobre o processo de endurecimento de pelotas de minério de ferro.

	Barati (2008) ^a	Majumder (2009) ^b	Feng (2010) ^c	Wang (2012) ^d	Fan (2015) ^e	Zhou (2021) ^f	Thorat (2022) ^g	Este trabalho (2024)
Processo:								
Grelha-Reta	X	X					X	
Grelha-Forno-Resfriador				X	X			
Grelha-Móvel			X			X		X
Evaporação da umidade:								
Duas etapas		X	X	X	X			
Três etapas	X					X		X
Reações:								
Oxidação da magnetita	X			X	X			X
Calcinação do limestone	X	X		X				X
Calcinação da dolomita	X							X
Combustão do carbono	X	X		X				X
Análises do modelo:								
Predição da qualidade da pelota					X			X

^aBarati, (2008); ^bMajumder; Natekar; Runkana, (2009); ^cFeng et al., (2010); ^dWang et al., (2012); ^eFan et al., (2015); ^fZhou et al., (2021); ^gThorat et al., (2022).

Destaca-se que não foram encontrados trabalhos na literatura que executassem alguma análise de convergência de malha para o leito de pelota. Essa é uma prática padrão para o desenvolvimento de modelos na área de fluidodinâmica computacional, no entanto, é comumente relativizada nas demais aplicações.

1.2. Objetivos

1.2.1. Objetivo Geral

Construir um modelo fenomenológico rigoroso, em regime pseudo-estacionário, para o sistema de Grelha-Móvel aplicado às pelotas de minério de ferro, em linguagem Python.

1.2.2. Objetivos Específicos

- Implementar um modelo fenomenológico, em linguagem Python, com i) mecanismo de evaporação da umidade com três etapas; ii) reações de combustão do carbono, oxidação da magnetita, e a calcinação da dolomita e do limestone; e iii) integração térmica entre as zonas de pré-queima 2 (PH2) e secagem (DR);
- Comparar os balanços de energia disponíveis na literatura em relação aos dados de validação do modelo;
- Aplicar a análise de convergência de malha através do método *Grid Convergence Index* (GCI);
- Validar o modelo com dados reais de uma planta industrial situada na América do Sul;
- Realizar uma análise detalhada das principais variáveis do processo, para o caso base e em diferentes cenários, com relação ao perfil de temperatura e da qualidade da pelota em diferentes profundidades do leito.

1.3. Contribuições da Tese

Na busca por processos mais eficientes energeticamente, os modelos fenomenológicos aplicados a processos industriais correspondem a importantes ferramentas para a compreensão das dinâmicas envolvidas e a otimização dos sistemas. Considerando as lacunas e o cenário atual na literatura, discutidos na Tabela 1, o diferencial desse trabalho é o desenvolvimento de um modelo fenomenológico rigoroso para o sistema de Grelha-Móvel.

Os trabalhos de Feng et al., (2010) e de Zhou et al., (2021), apresentado na Tabela 1, são os mais recentes voltados para o sistema de GM na literatura. Esses modelos se limitam a consideração do fenômeno de secagem da pelota, utilizando mecanismos com duas e três etapas, respectivamente. Nesse contexto, o presente trabalho se distingue por incorporar uma abordagem integrada que engloba todos os fenômenos físicos e químicos relevantes para o mesmo tipo de sistema, o que inclui a implementação das reações de combustão do carbono, oxidação da magnetita e a calcinação dos carbonatos, dolomita e limestone.

Em uma análise global dos modelos de GR, GFR e GM listados na Tabela 1, este trabalho pode ser considerado equivalente ao de Barati, (2008), aplicado ao sistema de GR, em termos de abrangência da modelagem, pois ambos consideram todas as etapas do mecanismo de secagem e as reações que ocorrem no leito. No entanto, o modelo desenvolvido se destaca por ser o único a realizar a predição da qualidade da pelota ao longo do leito em uma metodologia robusta. Além disso, o modelo realiza a análise de convergência de malha, com o objetivo de aumentar a acurácia dos resultados e otimizar o esforço computacional.

De forma geral, o modelo desenvolvido em linguagem Python, configura-se como uma ferramenta que pode ser aplicada às rotinas operacionais, auxiliando no monitoramento de variáveis não medidas diretamente, no suporte à tomada de decisões e na determinação de novos pontos de operação para o sistema.

1.4. Organização da Tese

No Capítulo 2 é apresentada uma revisão bibliográfica aprofundada para a fundamentação dos principais temas que norteiam o estudo desenvolvido. Contextualizando-se o papel e a importância do minério de ferro para o mercado mundial, incluindo o histórico de desenvolvimento do processo de endurecimento de pelotas. Os tipos, etapas e possíveis configurações desse processo também são abordados. Na sequência, realiza-se uma discussão sobre os principais trabalhos desenvolvidos na literatura, convergindo para o estudo de caso do processo analisado no presente trabalho.

A modelagem fenomenológica aplicada para o sistema implementado encontra-se no Capítulo 3. Todas as premissas e o equacionamento base para o modelo foram descritos de forma detalhada, incluindo os balanços de energia e massa, mecanismo de evaporação/condensação, reações químicas e qualidade da pelota. Além disso, é

apresentada a estratégia de solução e validação numérica do modelo – aplicada à linguagem Python – e a análise de convergência de malha.

O Capítulo 4 compreende todas as análises executadas no modelo desenvolvido, sendo avaliados inicialmente duas configurações para o balanço de energia, comparadas aos dados de uma planta em escala industrial. Em seguida, foram conduzidas a análise de malha para o balanço que apresentou maior acurácia e a validação do modelo. Com base no melhor modelo, foram avaliados diferentes cenários em função do perfil de temperatura e da qualidade da pelota no leito.

O Capítulo 5, por fim, apresenta as principais conclusões deste trabalho e as sugestões para pesquisas futuras na área.

Capítulo 2

Revisão de Literatura

2.1 Minério de Ferro

O minério de ferro é uma das principais matérias-primas da indústria siderúrgica, desempenhando um papel fundamental no abastecimento dos reatores redutores, como o alto forno (*blast furnace*) e os módulos de redução direta. Nesses processos, o minério de ferro é transformado em ferro primário, na forma de ferro-gusa, ferro de redução direta (*direct reduced iron* – DRI) ou ferro briquetado a quente (*hot briquetted iron* – HBI). Posteriormente, esses produtos são convertidos em aço nas aciarias (CGEE, 2010).

Naturalmente disponível na crosta terrestre, o minério de ferro é composto por rochas associadas a diversos elementos. A classificação pode ser realizada com base no principal constituinte mineral, como a hematita (Fe_2O_3) ou a magnetita (Fe_3O_4), resultando na categorização em minério de ferro hematítico ou magnetítico, respectivamente (Mourão, 2022a).

Na etapa de lavra, realiza-se a exploração do minério da jazida, obtendo-se o produto bruto, conhecido como *run of mine* (RUM). Esse minério, em sua maioria, não apresenta as propriedades ideais para o uso industrial. Portanto, é realizada a etapa de beneficiamento, cuja finalidade é modificar a granulometria, a forma e a concentração de determinados componentes do minério, visando adequá-lo química, física e metalurgicamente, para atender as exigências dos processos siderúrgicos subsequentes (LUZ; LINS, 2004).

O beneficiamento do minério envolve uma série de processos, tais como fragmentação, peneiramento, lavagem, classificação, concentração, entre outros. Durante essas etapas, são gerados os finos, que são minérios inadequados para uso direto nos reatores de redução. Estes materiais, anteriormente considerados rejeitos, são atualmente submetidos aos processos de aglomeração, a sinterização ou pelotização.

Os processos de concentração e aglomeração de minérios de ferro apresentam elevados custos operacionais, demandam investimentos substanciais e exercem um impacto ambiental significativo. No entanto, a principal vantagem da aglomeração reside na capacidade de agregar valor considerável aos produtos resultantes, por meio de ajustes e adaptações de suas propriedades químicas, físicas e metalúrgicas (LUZ; LINS, 2004).

O processamento dos produtos resultantes do beneficiamento é determinado com base na classificação dos materiais de acordo com a granulometria, diferenciando-se entre os minérios granulados e finos (CALDAS, 2019). O minério granulado (*lamp ore*), apresentado na Figura 2a, com distribuição granulométrica entre 6,3mm e 31,7mm, é alimentado diretamente nos fornos de redução. Os finos com granulometria entre 0,15 e

6,3 mm são destinados à sinterização (*sínter feed*), enquanto os finos com granulometria inferior a 0,15 mm são direcionados para a pelotização (*pellet feed*) (AUGUSTO, 2012). Os produtos provenientes desses processos são denominados de sínter e pelota, conforme indicado na Figura 2b e Figura 2c, respectivamente.

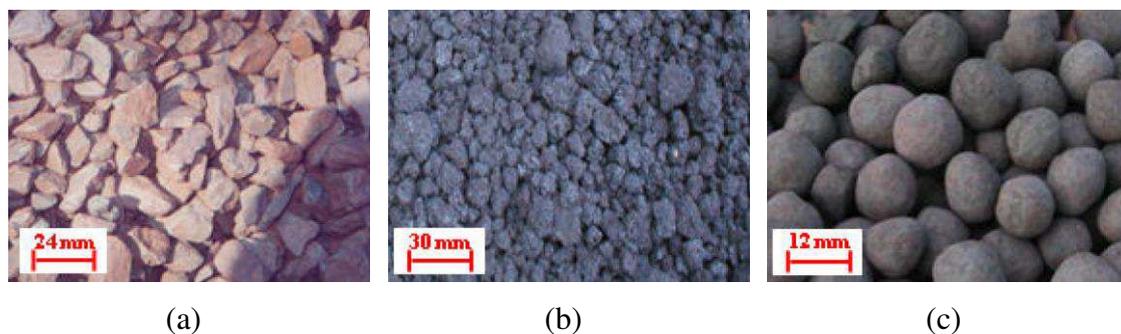


Figura 2. (a) Minério granulado, (b) Sínter e (c) Pelota.

Fonte: AUGUSTO, (2012).

O sínter caracteriza-se por sua estrutura porosa e irregular, o que o torna suscetível à fragmentação, apresentando baixa resistência durante o manuseio e o transporte. Esses processos podem ocasionar sua degradação, resultando na formação de partículas finas indesejadas para o uso no alto-forno. Em função dessas limitações, as plantas de sinterização são majoritariamente instaladas no interior das usinas siderúrgicas. Por outro lado, as pelotas são aproximadamente esféricas e apresentam uma elevada resistência mecânica em comparação ao minério granulado e ao sínter. Por esta razão, é mais comum que as plantas de pelotização estejam localizadas fora do ambiente das siderúrgicas (CGEE, 2010).

Através de ajustes no processo, é possível obter pelotas com uma ampla variedade de composições químicas, permitindo variações nos teores de sílica e alumina, na ganga básica (composta por óxidos de cálcio e magnésio), e nos elementos deletérios, como fósforo, enxofre, vanádio, titânio, chumbo e cloro. Embora possam ser utilizadas em altos-fornos, as pelotas são a matéria-prima preferencial dos processos de redução direta, gerando os produtos pré-reduzidos (DRI e/ou HBI), que são posteriormente transformados em aço nos fornos elétricos a arco.

De um modo geral, o processo de pelotização apresenta vantagens significativas, destacando-se pelo (AUGUSTO, 2012; CGEE, 2010):

- i. Alto padrão de qualidade em termos químico-físico-metalúrgicos;

- ii. Composição mineralógica uniforme;
- iii. Elevada concentração de ferro (superior a 63%);
- iv. Baixa sensibilidade à abrasão;
- v. Resistência mecânica adequada;
- vi. Baixa susceptibilidade ao inchamento; e
- vii. Manutenção das características mecânicas mesmo em atmosferas fortemente redutoras.

Além disso, o processo de pelotização apresenta um consumo de energia cerca de 50% inferior quando comparado à sinterização. A utilização das pelotas nos reatores redutores também contribui para o aumento da produção, melhoria dos indicadores econômicos e redução dos custos. Assim, o processo de pelotização oferece não apenas vantagens econômicas, mas também ambientais, uma vez que a eficiência desse processo resulta na obtenção de produtos com elevada qualidade e na redução da geração de poluentes (CGEE, 2010).

2.2 Mercado do Minério de Ferro

Austrália, Brasil e China produziram juntos 68,1% do total de ferro beneficiado mundialmente em 2020, com percentuais de 36,6%, 15,7% e 14,6%, respectivamente. Nesse ano, a produção brasileira alcançou 388,6 milhões de toneladas, que esteve concentrada nos estados de Minas Gerais, com 49,3% e Pará, com 49,5% (ANM, 2021).

As reservas mundiais lavráveis de ferro totalizaram 180,7 bilhões de toneladas, em 2020, de acordo com o Serviço Geológico dos Estados Unidos (USGS) (ANM, 2021). Conforme indicado no gráfico da Figura 3, os quantitativos são distribuídos entre: Austrália, Brasil, Rússia, China, Ucrânia, Canadá e demais países. Os três países com as maiores reservas apresentam um alto teor de ferro. Por outro lado, a China possui uma reserva expressivas, entretanto, com um baixo teor de ferro contido (Matheus; Silva, 2021).

O saldo comercial do Brasil no exterior em 2020 foi de USD 28,6 bilhões. As exportações somaram USD 33,0 bilhões, representando um aumento de 4,1% em comparação ao ano anterior. Os principais destinos desses produtos foram a China, com USD 19,7 bilhões (59,8%); Estados Unidos, com USD 2,8 bilhões (8,5%); e Malásia, com USD 1,7 bilhão (5,2%). As importações do setor mineral, referentes a produtos de ferro no mesmo ano, totalizaram USD 4,3 bilhões, o que representa uma queda de 9,1%

em relação ao ano anterior. Os países de origem com maior relevância foram a China, com USD 1,2 bilhão (26,6%); Reino Unido, com USD 419,8 milhões (9,6%); e Dinamarca, com USD 351,5 milhões (8,1%) (ANM, 2021).

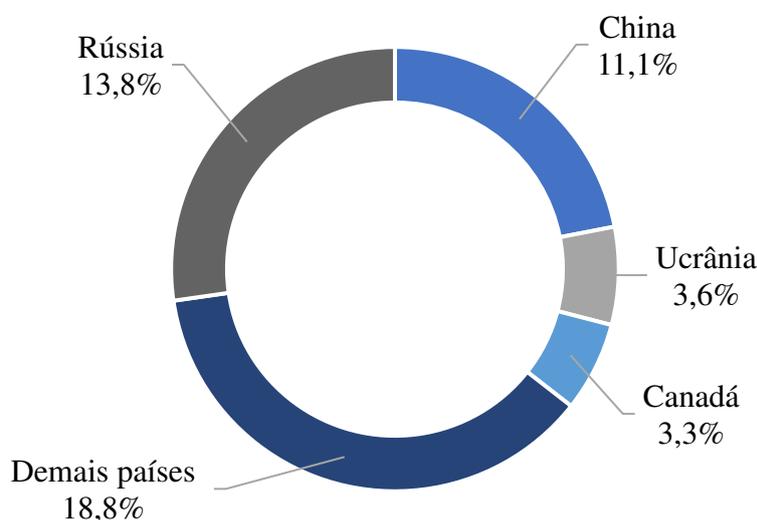


Figura 3. Principais reservas de ferro mundiais em 2020.

Fonte: ANM, (2021) adaptado.

No Brasil, a Compensação Financeira pela Exploração de Recursos Minerais (CFEM) se refere a uma contraprestação pela utilização econômica dos recursos minerais em seus respectivos territórios, isto é, ela é uma contrapartida das empresas exploradoras aos municípios, estados e União pela exploração mineral (Confederação Nacional de Municípios, 2012). Em 2020, foram arrecadados R\$ 4,8 bilhões referente às atividades associadas ao minério de ferro. Em comparação ao ano anterior, ocorreu um aumento de 37,1%, como um reflexo do aumento dos preços do mineral. Os estados com as maiores contribuições foram o Pará, com 55,3%; Minas Gerais, com 45,2%; e Mato Grosso do Sul, com 0,5%. As companhias que efetuaram os maiores recolhimentos do tributo foram a Vale S.A. (67,6%), Minerações Brasileiras Reunidas (8,3%), Anglo American Minério de Ferro Brasil S.A (7,4%) e CSN Mineração S.A. (6,5%) (ANM, 2021).

O desempenho das exportações de pelotas de minério de ferro no Brasil, conforme os relatórios do Informe Mineral Trimestral do último ano até o presente, é detalhado no Quadro 1. Os resultados demonstram um aumento do total e dos preços médios de exportação, evidenciando uma tendência de crescimento do mercado nacional. Além

disso, observa-se uma diversificação dos principais destinos, refletindo a ampliação da base de clientes em diversas regiões do mundo.

Quadro 1. Exportação das pelotas de minério de ferro por trimestre no Brasil.

Trimestre	Exportação Total (USD FOB)	Preço Médio (USD FOB)	Principal Destino		
			País	Total Exportado (USD FOB)	% Exportado
01TRI2023	783,2 milhões	134,53/t	Argentina	111,13 milhões	14,2
02TRI2023	784,7 milhões	134,97/t	USA	139,1 milhões	17,7
03TRI2023	763,7 milhões	126,00/t	Egito	153,5 milhões	20,1
04TRI2023	957,4 milhões	131,30/t	Coréia do Sul	125,0 milhões	13,1
01TRI2024	879,5 milhões	144,29/t	Egito	179,81 milhões	20,5

Fonte: ANM, (2024).

Dessa forma, é evidente que a pelletização de minérios de ferro tem ganhado cada vez mais relevância. O Centro de Gestão e Estudos Estratégicos (CGEE, 2010) indicou quatro fatores principais que impulsionam essa tendência:

- i. a crescente degradação dos granulados, que tem promovido o aumento do uso de pelotas nas cargas dos altos-fornos;
- ii. as restrições ambientais à expansão do processo de sinterização, já implementadas em países desenvolvidos, que têm incentivado um consumo crescente de pelotas;
- iii. a disseminação mais ampla da tecnologia de redução direta, o que amplia a demanda por pelotas para essa aplicação específica;
- iv. a crescente produção de pellet feed, consolidando a pelletização como a solução tecnológica mais adequada para o aproveitamento desse minério ultrafino.

2.3 Histórico do Processo de Pelotização

Os finos gerados durante as etapas do beneficiamento do minério não eram utilizados no processo de redução devido às dificuldades associadas à permeabilidade dos gases redutores no interior dos fornos, transporte e manuseio. Adicionalmente, a presença desses finos resultava no carregamento dessas partículas para a atmosfera, ocasionando significativa emissão de material particulado (Fonseca; Campos, 2018).

Durante muitos anos, os minérios eram britados e classificados diretamente nas minas ou nas usinas. Apenas a fração mais grosseira (*lump ore*) era direcionada para os

fornos de redução, enquanto os finos eram acumulados em pilhas e bacias, sem alternativas de reaproveitamento com viabilidade econômica. Esse passivo impulsionou o desenvolvimento de novas tecnologias, resultando no surgimento do processo de sinterização e briquetagem. Posteriormente, a pelletização surgiu como uma alternativa inovadora para o aproveitamento dos finos com granulometria inferior à das técnicas iniciais (CALDAS, 2019).

No início do século XX, foram registradas na Europa as primeiras patentes relacionadas ao processo de aglomeração de finos de minério de ferro por meio da pelletização. O primeiro registro datado de 1912, na Suécia, foi realizado pelo inventor A. G. Anderson; no entanto o trabalho não forneceu informações detalhadas sobre o processo. No ano seguinte, em 1913, na Alemanha, C.A. Brackelsberg deu continuidade aos estudos iniciados por Anderson e apresentou evidências de que os aglomerados esféricos produzidos poderiam ser reduzidos com maior rapidez em comparação ao minério granulado e aos aglomerados obtidos por sinterização a partir do mesmo minério de ferro (Fonseca; Campos, 2018).

Em 1926, após a primeira guerra mundial na Alemanha, foi construída a primeira planta em escala piloto de pelletização, com capacidade de produção de 120 toneladas por dia, sendo reconstruída em 1935 no mesmo local (MEYER, 1980). A primeira planta em escala industrial foi desenvolvida nos Estados Unidos da América, em 1952, na cidade de Babbitt, Minnesota (Stjernberg; Isaksson; Ion, 2015b).

O desenvolvimento tecnológico voltado a mineração do ferro a partir da década de 1950, conferiu uma maior importância ao processo de pelletização na rota de produção do aço. Tal fato se deve ao reconhecimento do potencial da técnica em agregar valor à cadeia produtiva, viabilizando a lavra e o beneficiamento de minérios menos compactos, friáveis e com menor teor de ferro (Fonseca; Campos, 2018).

Em 1969, a Vale iniciou as operações da primeira usina de pelletização do Brasil com capacidade de 2 milhões de toneladas por ano, localizada em Tubarão, no Espírito Santo. No mesmo complexo, em 1973, foi inaugurada a segunda planta dimensionada para produzir 3 milhões de toneladas anuais (VALE S.A, 2024).

O histórico das usinas de pelletização no Brasil é apresentado no Quadro 2 a seguir, organizada de acordo com as companhias e *joint-ventures* (JV) estabelecidas no segmento. Ao total, são 16 unidades de pelletização, concentradas principalmente entre as empresas Vale, Samarco e Vallourec. O estado do Espírito Santo abriga o maior número de plantas, 12 unidades, seguido por Minas Gerais, que possui 3 unidades.

Quadro 2. Histórico das usinas de pelotização no Brasil.

Usina	Estado	Empresa	Início da Operação
Usina I	Tubarão (ES)	Vale	1969
Usina II	Tubarão (ES)	Vale	1973
Itabasco I (Usina III)	Tubarão (ES)	JV Vale e ILVA	1977
Fábrica (ex- Ferteco)	Ouro Preto (MG)	Vale	1977
Usina P1	Ubu-Anchieta (ES)	Samarco	1977
Nibrasco I (Usina IV)	Tubarão (ES)	JV Vale e JSM (Japão)	1978
Nibrasco II (Usina V)	Tubarão (ES)	JV Vale e JSM (Japão)	1978
Hispanobras I (Usina VI)	Tubarão (ES)	JV Vale e ACS (Espanha)	1979
Usina P2	Ubu-Anchieta (ES)	Samarco	1994
Kobrasco (Usina VII)	Tubarão (ES)	JV Vale e Posco (Coreia)	1998
São Luiz	São Luiz (MA)	Vale	2002
Usina P3	Ubu-Anchieta (ES)	Samarco	2008
Vargem Grande	Vargem Grande (MG)	Vale	2009
VSM	Jeceaba (MG)	JV Vallourec e Sumitomo (Japão)	2013
Usina P4	Ubu-Anchieta (ES)	Samarco	2014
Usina VIII	Tubarão (ES)	Vale	2014

Fonte: VALE S.A, (2024), Samarco, (2024) e Vallourec Brasil, (2024).

2.4 Processo de Pelotização

O processo de pelotização consiste no reaproveitamento dos materiais finos e ultrafinos gerados no processo de beneficiamento do minério de ferro. Através desse processo, é efetuada a aglomeração dessas partículas em esferas com diâmetros médio de 12 mm, podendo variar entre 8 e 18 mm (Jesus, E. F., 2009; Mourão, 2022b).

Uma planta de pelotização pode ser dividida em três macroetapas (i) preparação das matérias-primas (*pelletizing feed preparation*), (ii) formação das pelotas cruas (*balling*), e (iii) processo de endurecimento (*induration*). A configuração dos equipamentos utilizados em cada uma dessas etapas é determinada por diversos fatores, como as características químicas e físicas do *pellet feed*, bem como as especificações de qualidade exigidas pelos clientes.

2.4.1. Preparação das matérias-primas

A matéria-prima, *pellet feed*, com baixo teor de ferro, é processada inicialmente nas etapas de concentração e separação, através de flotação, separação magnética ou

precipitação eletrostática, por exemplo. Essas etapas têm o objetivo aumentar o teor de e remover os elementos de ganga (indesejáveis), como a sílica e a alumina (BORIM, 2000). Espera-se que após esse tratamento, um enriquecimento de ferro da faixa de 50-53% para 63-69% (Jesus, E. F., 2009). Na sequência, o minério é encaminhado para a moagem, cuja finalidade é ajustar a granulometria e a superfícies específicas das partículas para a faixa requerida pelas etapas subsequentes. A etapa é conduzida, normalmente, em moinhos de bolas, podendo apresentar diferentes configurações: a úmido ou a seco, aberto ou fechado.

Na moagem a úmido, forma-se uma polpa com teor de sólidos entre 60 e 80% em massa, o que torna necessário a realização de operações subsequentes, como espessamento, homogeneização e filtração. A moagem a seco, por sua vez, requer a prévia secagem dos finos de minério, porém dispensa as etapas posteriores da rota úmida (Jesus, E. F., 2009).

Na moagem em circuito aberto, o material atravessa o moinho apenas uma vez. Em circuito fechado, o material é classificado na descarga, onde a fração mais grossa retorna para a entrada do moinho. Na via úmida, a classificação ocorre em hidrociclones, enquanto na via a seco são empregadas câmaras de poeira. Ao final dessa etapa, as partículas devem apresentar uma granulometria de 80 a 95% abaixo de 0,044 mm (325 *mesh*) e superfície específica na faixa de 1600 a 2000 cm²/g, tendo em vista que uma maior superfície específica facilita o processo de aglomeração (Jesus, E. F., 2009; Mourão, 2022a).

Os estágios de espessamento e homogeneização da polpa são requeridos apenas nos sistemas em circuito fechado e a úmido. Nesse caso, a polpa oriunda dos hidrociclone, com cerca de 20% de sólidos, é transferida para um espessador circular, onde ocorre o processo de decantação dos sólidos. O *underflow*, com uma concentração de aproximadamente 70% de sólidos, é bombeado para os tanques homogeneizadores, enquanto o *overflow* é recirculado para a área da moagem. Nesses tanques, pode-se adicionar combustíveis sólidos, como polpa de carvão moído, à polpa de minério (Jesus, E. F., 2009).

A filtração é empregada nos circuitos a úmido para remover umidade da polpa, reduzindo-a para valores na faixa de 8 a 11%, dependendo das características mineralógicas dos constituintes da mistura (Jesus, E. F., 2009; Mourão, 2022a). Neste processo são, normalmente, utilizados filtros rotativos a vácuo, de disco ou tambor.

Na etapa seguinte é realizada a adição de aglomerantes e fundentes ao material filtrado. Os aglomerantes têm o papel de proporcionar plasticidade ao material e conferir rigidez mecânica. Os fundentes estão relacionados às características de basicidade das pelotas, garantindo as propriedades necessárias para os diferentes tipos de produtos destinados aos reatores de redução direta.

Os aditivos e dosagens são definidos de forma independente por cada usina, mas os componentes mais utilizados na pelotização são a bentonita (dosagem de 0,5 a 1,0%), a cal hidratada (dosagem de 2 a 3%), o calcário (ou *limestone*) e a dolomita (AUGUSTO, 2012; Jesus, E. F., 2009). A bentonita e a cal hidratada promovem a aglomeração a frio das partículas de minério de ferro, facilitando o pelotamento e otimizando da resistência a seco e a úmido das pelotas cruas. O calcário e a dolomita são fundamentais para a aquisição de resistência mecânica e características metalúrgicas adequadas para os processos de redução subsequentes. Entre os aditivos para a correção da basicidade, destacam-se os finos de coque ou antracito, responsáveis por proporcionar uma distribuição homogênea do calor no interior da pelota, o favorecimento das reações do sistema e a redução do consumo de combustível do processo.

Antes do início da próxima etapa, pode-se ajustar da umidade do material, através da adição água, para atuar como agente de ligação entre as partículas.

2.4.2. Formação das pelotas cruas

O produto resultante da etapa de preparação, ajustado conforme as especificações técnicas necessárias, é direcionado para a formação dos aglomerados. Essa etapa é responsável por formar as pelotas verdes (ou cruas) com resistência mínima suficiente para resistir ao manuseio local. Os fatores mais importantes na formação e nas propriedades das pelotas cruas são (AUGUSTO, 2012):

- i. Forças físicas, como as forças de Van der Waals, magnéticas ou eletrostáticas;
- ii. Fatores dependentes das partículas, tais como área superficial, forma, estrutura cristalina e distribuição granulométrica; e
- iii. Forças capilares e tensões superficiais, que são geradas pela adição de água ao processo.

Diversas variáveis de processo são determinantes no controle de tais fatores, entre as quais destacam-se: o tamanho médio e a forma das partículas; distribuição granulométrica; estrutura de poros e molhabilidade das partículas; teor de umidade e

características químicas da mistura; natureza e quantidade do aglomerante utilizado; tipo de equipamento e condições operacionais adotadas.

O mecanismo de formação das pelotas é apresentado na Figura 4. No primeiro estágio, Figura 4a, as partículas são umedecidas, formando um filme líquido superficial. Através do contato entre duas partículas úmidas, ocorre a ligação entre os filmes, Figura 4b. Essas partículas unidas constituem um núcleo, a partir do qual é iniciado o crescimento da pelota. Por meio da rotação do sistema, mais partículas são aderidas ao núcleo, formando estruturas esféricas, Figura 4c. Nesse estágio, a água preenche os vazios intersticiais entre as partículas sólidas de forma gradativa, formando um sistema capilar com múltiplas ramificações. Nas situações em que as extremidades dos capilares atingem a superfície externa da pelota (constituindo poros externos), Figura 4d, a sucção capilar desenvolvida na interface ar/água provoca uma reação de igual intensidade sobre os grãos, mantendo as partículas unidas (MEYER, 1980).

A presença de ar no interior da partícula reduz a resistência mecânica dos aglomerados. Durante o processo, o ar é expelido gradualmente através dos choques das partículas entre si e com as paredes do equipamento, Figura 4e. A partir desse estágio a força de capilaridade do sistema são intensificadas, devido a tensão superficial, que é resultante da coesão entre as moléculas do líquido e a adesão entre o líquido e a superfície do material (SRB; RUZICKOVÁ, 1988).

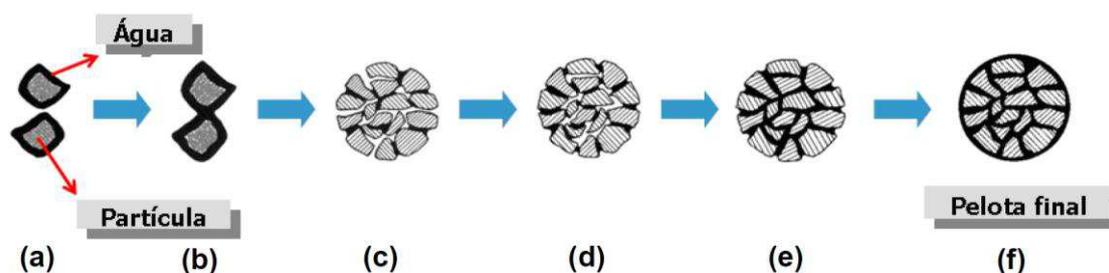


Figura 4. Mecanismo de formação das pelotas.

Fonte: AUGUSTO, (2012).

A formação das pelotas cruas ocorre em tambores (Figura 5a) ou discos (Figura 5b) de pelotamento. Os tambores são cilindros giratórios inclinados, onde o material alimentado é pulverizado com água para favorecer a aglomeração das partículas. Os jatos de água promovem a nucleação e o crescimento das sementes na zona de alimentação,

enquanto o processo de assimilação, responsável pelo crescimento das esferas, ocorre ao longo do comprimento do tambor (Ball D., 1973).

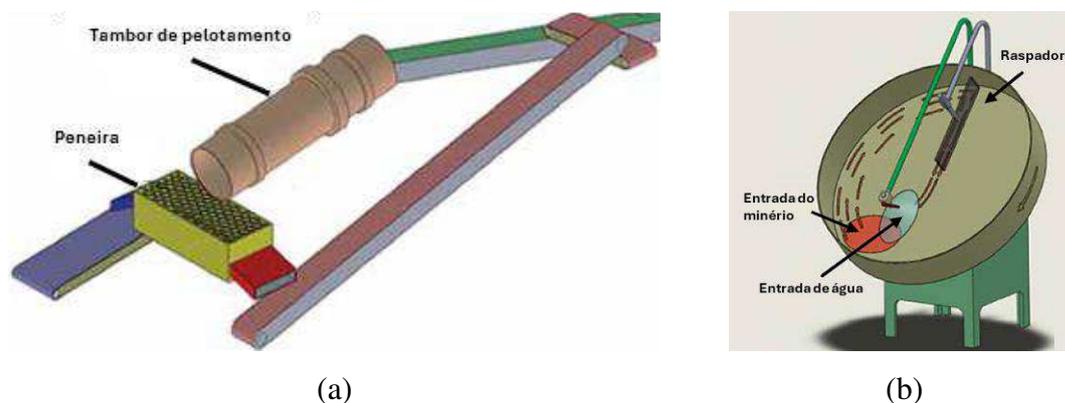


Figura 5. (a) Tambor e (b) disco de pelotamento.

Fonte: Shatokha, (2018).

Na saída do tambor, o produto é descarregado independentemente do tamanho da partícula. Por esse motivo, é necessária a classificação do produto, realizada por meio de peneira de rolos ou vibratória, sendo a última a mais utilizada atualmente (Shatokha, 2018). As pelotas que não atendem as especificações granulométricas são realimentadas ao processo. As pelotas menores são utilizadas como sementes para formar pelotas de tamanho adequado, enquanto as maiores são trituradas antes de retornar ao processo (MEYER, 1980).

Os tambores em sua maioria apresentam uma relação comprimento/diâmetro de 2,5 a 3,5 e ângulos de inclinação em relação ao eixo horizontal entre 6 e 10°. A velocidade de rotação ideal encontra-se entre 25 e 35% da velocidade crítica, ou seja, a velocidade de centrifugação que pode resultar na degradação das pelotas (Ball D., 1973).

Os discos de pelotamento são estruturas semelhantes a pratos com uma parede periférica, que giram com uma inclinação em relação à horizontal (Ball D., 1973). O material de alimentação, que contém menos umidade do que a necessária para a formação das pelotas, é introduzido na parte inferior do disco, onde entra em contato com a água dos pulverizadores, iniciando o estágio de nucleação. Nessa seção, à esquerda do disco e em direção ao topo, os núcleos são formados devido à ação de rolagem. À medida que o minério se agrega à superfície das pelotas, os núcleos aumentam de tamanho e o coeficiente de atrito diminui, permitindo que as pelotas adquiram força centrífuga que, por sua vez, as conduz para fora da zona de nucleação. Esse movimento leva os grânulos

para o topo do disco seguindo uma trajetória semicircular antes de retornar à base (Ball D., 1973). A altura e a largura da trajetória aumentam à medida que as pelotas crescem até alcançarem as lâminas do raspador.

O disco de aglomeração opera em circuito fechado com a etapa de peneiramento, onde as pelotas menores que 8 mm ou maiores que 16 mm são desagregadas e o material é recirculado. Em geral, o ângulo do prato pode ser ajustado entre 40 e 60° (Pietsch, 2002).

2.4.3. Processo de endurecimento

A etapa de endurecimento da pelota equivale ao estágio de tratamento térmico, cujo objetivo é conferir às pelotas cruas (ou verdes) as características adequadas para a aplicação nos reatores redutores. Entre essas propriedades, destaca-se a resistência mecânica, que precisa ser suficiente para permitir o transporte das pelotas por longas distâncias e suportar a carga nos fornos. Após o tratamento térmico, espera-se que as pelotas, agora queimadas, apresentem as seguintes principais propriedades físicas, químicas e mineralógicas (MEYER, 1980):

- i. Distribuição de tamanhos entre 9 e 15 mm de diâmetro;
- ii. Porosidade entre 25 e 30%;
- iii. Concentração de ferro maior que 63%;
- iv. Elevada resistência mecânica;
- v. Baixa tendência à abrasão.

O processo de endurecimento é constituído, basicamente por três etapas, a secagem, queima e resfriamento. Na secagem ocorre a remoção da umidade das pelotas verdes, onde os sólidos podem alcançar temperaturas de até 300°C. Na etapa de queima ocorrem as reações químicas do processo, com temperaturas que podem atingir até 1.350°C. Nessa etapa, o desenvolvimento da resistência das pelotas ocorre, principalmente, em temperaturas acima de 1.200°C, devido aos mecanismos de sinterização no estado sólido e à densificação das pelotas. Ao final do processo, as pelotas queimadas são resfriadas pelo contato com o fluxo de ar ambiente. O ar aquecido resultante desse sistema é recirculado para as etapas anteriores de queima e secagem (Wynnyckyj; Fahidy, 1974).

O processo de endurecimento foi inicialmente desenvolvido para minérios ricos em magnetita, em decorrências da oxidação natural deste mineral durante o aquecimento,

que resulta na formação de hematita e na liberação uma quantidade significativa de calor, aproximadamente $-482,4$ kJ/mol. No caso de pelotas compostas predominantemente por hematita, a liberação de calor é reduzida, uma vez que a hematita representa o estado oxidado final do minério. Para compensar essa diminuição na liberação térmica, a hematita é aglomerada com quantidades controladas de carbono, variando de 1 a 2% em peso. O carbono é queimado durante o processo de endurecimento, gerando o calor necessário para alcançar as temperaturas requeridas no sistema (Shatokha, 2018).

Em ambos os casos, o calor é induzido no interior da pelota por meio da difusão do ar quente através dos poros e da reação de combustão. As pelotas com elevados teores de magnetita apresentam uma distribuição de calor relativamente uniforme, enquanto nas que possuem a hematita como componente principal, o calor se concentra ao redor das partículas de carbono. Por essa razão, é necessário que o carbono seja distribuído uniformemente na pelota. Para isso, utilizam-se combustíveis sólidos de baixa granulometria, como antracito ou finos de coque, na mistura a ser aglomerada durante a formação das pelotas.

Existem três tipos de fornos utilizados no processamento térmico das pelotas, o forno de cuba (*Shaft Furnace*); o forno de grelha reta (*Straight-Grate*) e o grelha-forno-resfriador (*Grate-Kiln-Cooler*). A escolha do equipamento adequando varia de acordo com o minério a ser utilizado e a capacidade de produção desejada.

No forno de cuba (*Shaft Furnace*), as pelotas verdes são carregadas do topo do forno, conforme indicado na Figura 6, onde entram em contato com os gases quentes em contracorrente. O tempo de contato gás/sólido garantem uma alta eficiência térmica, característica dos fornos de eixo vertical. No entanto, a distribuição uniforme de temperatura nesses fornos é difícil, o que resulta na aderência das pelotas às paredes do forno, reduzindo a sua eficiência (YAMAGUCHI *et al.*, 2010a). Após o aquecimento as pelotas passam por uma zona de resfriamento antes de serem descarregadas para fora do forno. Esse sistema é considerado obsoleto, devido a capacidade limitada de produção, de cerca de 450 mil toneladas por ano, o que corresponde a 12 - 20 vezes menor comparada às demais tecnologias. Existem poucas plantas ainda em operação, a maioria localizada na China (Mourão, 2022b).

O sistema de grelha reta (GR), apresentado na Figura 7, surgiu na indústria logo após os fornos de cuba. O processo é composto por um único forno, subdividido nas etapas de secagem, pré-queima, queima, pós-queima e resfriamento. Uma linha contínua de carros de grelha percorre o forno ao longo de todo o seu comprimento. Os carros são

compostos por barras de grelha com paredes laterais, sobre as quais é disposta uma camada de pelotas endurecidas, com aproximadamente 100 mm de espessura, cuja função é proteger a estrutura contra o calor gerado durante o processo e promover uma distribuição mais uniforme da temperatura. Sobre essa camada são distribuídas uniformemente as pelotas verdes, em uma secção com 300 mm de espessura aproximadamente (YAMAGUCHI *et al.*, 2010a).

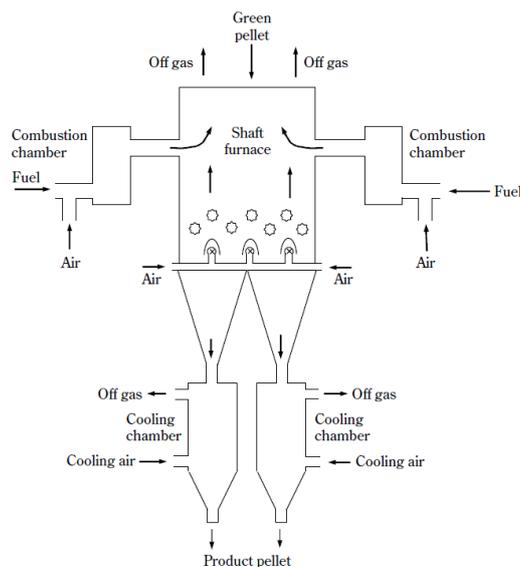


Figura 6. Diagrama esquemático do forno de cuba (*Shaft Furnace*).

Fonte: YAMAGUCHI *et al.*, (2010a).

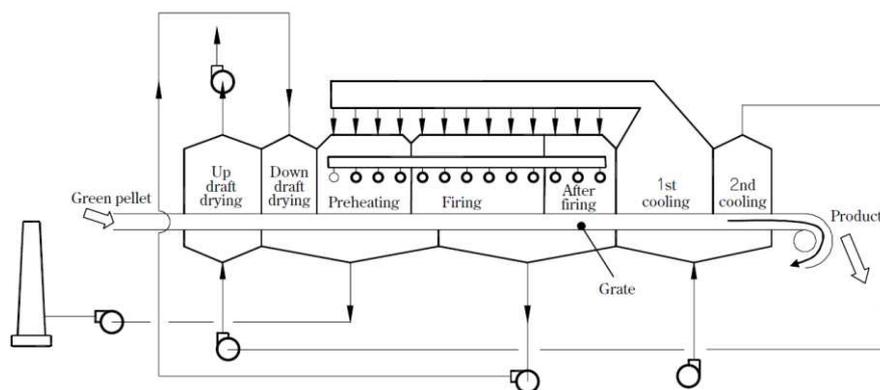


Figura 7. Diagrama esquemático do forno de grelha reta (*Straight-Grate*).

Fonte: YAMAGUCHI *et al.*, (2010a).

Comparado ao forno de cuba, o sistema de grelha reta oferece maior flexibilidade no controle da temperatura em cada uma das etapas do processo. No entanto, apresenta elevada sensibilidade a variações na velocidade da grelha, o que pode impactar de forma

imediate as etapas subsequentes, exigindo um controle mais rigoroso para garantir a estabilidade e eficiência do processo (YAMAGUCHI *et al.*, 2010a).

As trocas térmicas no sistema de grelha reta (GR) ocorrem por meio da interação entre as pelotas e os fluxos de ar ascendentes e descendentes. Esse processo foi desenvolvido com o objetivo de maximizar a eficiência energética, através da recuperação de calor proveniente de diferentes estágios do sistema. Nas zonas de resfriamento, utiliza-se o ar ambiente em contracorrente com o fluxo de pelotas para resfriar e recuperar o calor das pelotas queimadas. Esses gases aquecidos são então usados nos estágios de secagem e pré-aquecimento. Os gases de exaustão são normalmente tratados em precipitadores eletrostáticos ou filtros de manga e, em seguida, descarregados na atmosfera por meio de uma chaminé (Mourão, 2022b).

A secagem das pelotas verdes é comumente realizada em duas etapas. Na primeira, o ar quente proveniente da zona de resfriamento é alimentado no sentido ascendente através do leito de pelotas. Na segunda etapa, o ar aquecido da zona de queima é direcionado no sentido descendente. Essa configuração, com fluxos de ar em direções opostas, tem como objetivo assegurar um tratamento térmico mais uniforme das pelotas (Shatokha, 2018).

Nas etapas de pré-queima, queima e pós-queima, o ar pré-aquecido é alimentado nos queimadores para produzir gases de combustão, com sentido descende ao leito. Esse fluxo unidirecional ao das etapas de queima, resulta em uma distribuição não uniforme do calor entre as pelotas. No qual, as pelotas localizadas na parte superior do leito são tratadas em temperaturas mais altas por períodos mais longos, enquanto as pelotas na parte inferior atingem picos de temperatura mais baixos por tempos de residência mais curtos. Tais diferenças, somadas a uma camada espessa de pelotas (~300 mm), ocasionam um produto final com diferentes resistências mecânicas e propriedades metalúrgicas (Shatokha, 2018; YAMAGUCHI *et al.*, 2010a).

O sistema grelha-forno-resfriador (GFR) consiste em três processos de tratamento térmico conectados em série: a Grelha Móvel (*Traveling Grate*), o Forno Rotativo (*Rotary Kiln*) e o Resfriador Circular (*Annular Cooler*). Um diagrama esquemático típico deste sistema é apresentado na Figura 8.

As pelotas verdes são alimentadas no processo de grelha móvel (GM) por meio de grelhas ou esteiras metálicas. Nesse processo, os ventiladores têm o papel de definir a direção dos fluxos dos gases ao longo do processo, produzindo um fluxo no sentido ascendente ou descendente com relação ao leito de pelotas.

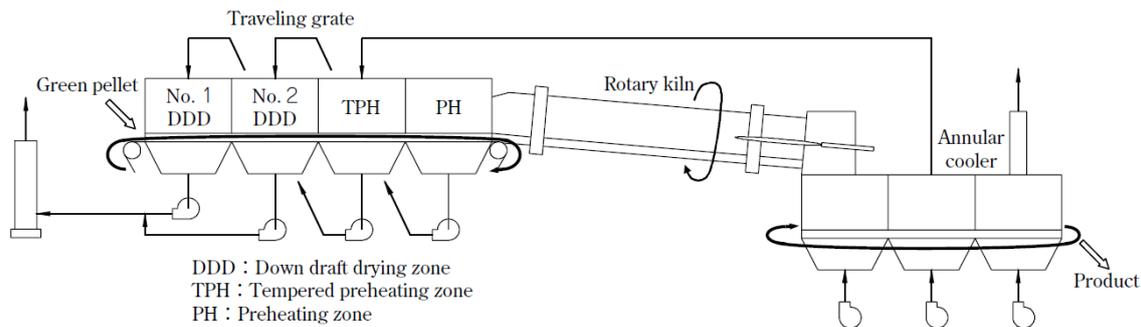


Figura 8. Diagrama esquemático do sistema grelha-forno-resfriador (*Grate-Kiln-Cooler*).

Fonte: YAMAGUCHI et al., (2010a).

Diferentemente do sistema de GR, a GM é composta pelas etapas de secagem e pré-queima, sendo a etapa de queima realizada apenas no forno rotativo. Contudo, o conceito geral de recuperação de calor permanece, no qual gases quentes provenientes das etapas finais do processo são recirculados para as zonas iniciais.

Durante as etapas de pré-queima, iniciam-se as reações químicas entre a pelota e o gás, que conferem à pelota a resistência mecânica necessária para suportar o tombamento no FR. Nessas etapas, é possível alcançar temperaturas máximas de até 1100°C (Mourão, 2022a).

Até que a resistência mecânica necessária para as pelotas seja alcançada, é fundamental evitar mudanças bruscas de temperatura no sistema, uma vez que essas variações podem induzir choque térmico nas pelotas. Tal fenômeno pode resultar em fissuras, trincas e desintegração das pelotas, o que, por sua vez, compromete o rendimento do processo (Jesus, Eduardo Frigini de, 2009).

As pelotas pré-aquecidas são descarregadas da grelha para o interior do forno rotativo, que é revestido de material refratário e opera em baixa rotação (YAMAGUCHI *et al.*, 2010b). O forno rotativo promove o tratamento térmico das pelotas, ou seja, são alcançadas a resistência mecânica e todas as propriedades metalúrgicas exigidas para o produto final.

A transferência de calor e massa no FR é um processo complexo. O forno possui uma ligeira inclinação para a descarga, onde as pelotas se movem tanto na direção radial quanto axial, enquanto calor é fornecido por meio de um queimador principal. A transferência de calor por radiação entre a chama, as pelotas e a parede do forno equivalem a mais de 90% do total de calor transferido para as pelotas (Haaf, 2014). Além

disso, também ocorrem as perdas por radiação na parede externa do forno com o ambiente e a transferência de calor via convecção entre o gás, as pelotas e a parede.

O comprimento da chama determina a distribuição de transferência de calor ao longo do forno. Um comprimento de chama prolongado contribui para um perfil de temperatura mais homogêneo (Haaf, 2014). O queimador principal de alta potência, é posicionado em contracorrente ao fluxo do leito de pelotas na direção axial do forno.

A queima é conduzida a elevada temperatura, na ordem de 1000 a 1380°C, a depender do tipo de minério utilizado (YAMAGUCHI *et al.*, 2010b). Parte deste calor é consumido nas reações químicas entre o gás e as pelotas. Os combustíveis que atualmente são utilizados na reação de combustão para o queimador são o carvão vegetal pulverizado e o gás natural.

As pelotas descarregadas do FR ainda incandescentes, são enviadas para a etapa de resfriamento. O resfriador circular (RC), tem o objetivo de reduzir a temperatura da pelota, facilitando o seu manuseio, estocagem e posterior transporte, além de possibilitar o reaproveitamento do calor. O resfriamento ocorre por meio de convecção forçada, através de intensos fluxos de ar no sentido ascendente (YAMAGUCHI *et al.*, 2010b). As pelotas na descarga do resfriador apresentam temperatura em torno de 100°C (Taets, 2014).

O RC é dividido em três zonas de resfriamento. Para aumentar a eficiência térmica do processo, o ar proveniente da primeira zona de resfriamento, conhecido como ar secundário, é utilizado para abastecer o forno rotativo com ar quente. O ar da segunda zona, é enviado para a etapa de pré-queima 01, enquanto o gás da terceira zona é liberado para a atmosfera. O elevado nível de integração térmica do sistema, destaca a importância do resfriador no rendimento térmico global do processo.

Uma das principais vantagens do processo GFR é a produção de pelotas homogêneas, aliada ao baixo consumo de combustível e energia (YAMAGUCHI *et al.*, 2010b). Além disso, cada zona do forno GM, FR e RC pode ser controlada de forma independente ou conjunta, conforme as necessidades operacionais. Essa característica confere ao processo uma elevada flexibilidade para compensar ou ajustar-se a variações na qualidade da matéria-prima ou mudanças na demanda do produto final.

A flexibilidade operacional viabiliza a produção de pelotas *self-fluxed*, que exigem um rigoroso controle de temperatura. Outro aspecto positivo é o fato de os equipamentos do sistema serem projetados e construídos de forma independente, em consonância com suas respectivas cargas térmicas. Isso resulta na diminuição da

frequência de substituição simultânea de componentes, como o material refratário e os módulos da grelha, além de proporcionar maior disponibilidade operacional da planta.

2.5 Revisão da literatura: Modelagem Fenomenológica do Processo de Endurecimento de Pelotas de Minério de Ferro

O processo de pelletização surgiu no início do século XX, com a primeira unidade em escala industrial desenvolvida em 1952, conforme discutido anteriormente. A primeira planta do tipo GFR para produção de pelotas de minério de ferro foi estabelecida na cidade de Humboldt Mine, Michigan, em 1960 (SGOURIS; OJA, 2008).

Nesse contexto, as primeiras publicações voltadas para o processo de endurecimento de pelotas de minério de ferro, concentraram-se na análise das cinéticas das reações envolvidas e da qualidade da pelota, por meio de estudos experimentais. Destacam-se os trabalhos de Papanastassiou; Bitsianes, (1973) e Wynnyckyj; Fahidy, (1974), que avaliaram a oxidação da magnetita e a resistência da pelota, respectivamente.

Os trabalhos percussores da modelagem fenomenológica do processo de endurecimento foram conduzidos por Voskamp; Brasz, (1975) e Hasenack; Lebelle; Kooy, (1975). Voskamp e Brasz assumiram que o efeito dos gradientes de temperatura e concentração no interior das pelotas eram desprezíveis, enquanto Hasenack; Lebelle e Kooy consideraram a transferência de calor por condução e a difusão de oxigênio no interior das pelotas.

Young; Cross; Gibson, (1979) avaliaram a etapa de GM e RC de um sistema GFR. No estudo foram avaliados o fenômeno de secagem, através da evaporação e condensação da umidade, e as reações de oxidação de magnetita e decomposição do limestone, utilizando o mecanismo de encolhimento de núcleo. O modelo se destaca por considerar a secagem em duas etapas: uma controlada pela transferência de massa na superfície da pelota e outra pela resistência a difusão no interior da pelota.

Thurlby; Batterham; Turner, (1979) desenvolveram um modelo para o sistema de Grelha Reta mais simplificado em comparação ao modelo anterior. Esse modelo considerou a remoção de umidade das pelotas através de dois fenômenos: o primeiro relacionado à secagem da água livre, ou seja, o filme líquido na superfície da pelota; e o segundo à remoção da água quimicamente combinada com a goetita. No entanto, outras reações químicas importantes para o processo não foram contempladas no modelo.

O primeiro modelo a incorporar três etapas para o mecanismo de secagem das pelotas foi desenvolvido por Seshadri; Pereira, (1985) para um sistema *pot-grate*. Nesse

modelo, a primeira etapa da secagem é controlada pela transferência de massa na superfície das pelotas, até que o teor de umidade caia abaixo de um valor crítico. A partir desse ponto, a taxa de secagem passa a ser controlada pela resistência à difusão no interior da pelota, caracterizando a segunda etapa; na terceira etapa, o sistema passa a ser controlado pela transferência de calor na superfície. Entretanto, o modelo não considerou o efeito da difusão radial do vapor de água na 'camada seca' (ou '*dry-shell*') da pelota, embora tenham considerado o efeito da resistência à difusão abaixo da umidade crítica.

O estudo conduzido por Wynnyclcyj; Batterham, (1985) expandiu os modelos fenomenológicos existentes, introduzindo a avaliação das reações químicas, como a combustão do *coke* e a oxidação da magnetita, além do fenômeno de secagem. Assim como nos demais estudos, foram negligenciados o efeito da temperatura radial e os gradientes de concentração dentro da pelota.

Em 1988, Thurlby publicou os primeiros estudos sobre o sistema GFR, incluindo a modelagem do forno rotativo (Thurlby, 1988a, 1988c, 1988b). O modelo proposto considerou um mecanismo de secagem em duas etapas, bem como as reações de combustão do *coke* e oxidação da magnetita, utilizado o mecanismo de encolhimento de núcleo. Além disso, foi incluída a reação de calcinação do limestone.

Cumming; Thurlby, (1990) desenvolveram um modelo matemático que leva consideração o efeito da fração de vazios do leito sobre um sistema em escala piloto. Na sequência, Küçükada et al., (1994) utilizaram o mecanismo de encolhimento de núcleo para descrever a segunda etapa de secagem em um sistema de *pot-grate*.

Uma relação semiempírica para correlacionar a fração de vazios do leito e a distribuição do tamanho das partículas foi proposta por Hoffmann; Finkers, (1995). As propriedades das pelotas proveniente de leitos compactados e fracamente compactados foram avaliadas através de quatro parâmetros: tamanho médio das partículas, dispersão da distribuição de tamanho densidade e formato das partículas. O estudo concluiu que a influência da altura do leito seria mais significativa para as partículas menores e mais leves.

A qualidade da pelota é um parâmetro com importância significativa para a avaliação de cenários operacionais em plantas industriais, podendo servir como parâmetro de referência para a otimização energética do sistema ou para o controle do processo. Nesse sentido, Pomerleau; Desbiens; Hodouin, (2003) e Pomerleau; Hodouin; Poulin, (2005) propuseram uma relação semiempírica para descrever a qualidade das

pelotas através da resistência à compressão. Essa relação foi desenvolvida a partir de dados obtidos em testes extensivos realizados em um sistema *pot-grate* em escala piloto.

Em continuidade ao aperfeiçoamento dos mecanismos de secagem, Tsukerman; Duchesne; Hodouin, (2007) propuseram um mecanismo cinético de secagem com 4 estágios, adicionando uma etapa ao modelo proposto por Seshadri; Pereira, (1985). A nova etapa consiste em um regime híbrido, no qual a evaporação do filme da superfície ocorre simultaneamente às frentes de evaporação que se movem em direção ao centro da pelota. No entanto, nas análises foram conduzidas em escala piloto e foram consideradas pelotas com diâmetro entre 30 e 35 mm, ou seja, dimensões cerca de três vezes maiores do que aquelas utilizadas na indústria. Por esse motivo, o modelo também levou em consideração mudanças na temperatura radial da pelota.

O trabalho desenvolvido por Barati, (2008), aplicado ao sistema GR (ou *Straight Grate*), é considerado um marco na literatura, pois consolidou os principais fenômenos explanados na literatura sobre o tema. O modelo fenomenológico reuniu a avaliação detalhada da secagem da pelota, através de um mecanismo com três estágios; e as principais reações que ocorrem no leito, a oxidação da magnetita e combustão do *coke*, utilizando o mecanismo de encolhimento de núcleo, e a calcinação do limestone e dolomita. Além disso, o trabalho realizou análises das principais variáveis envolvidas no processo, incluindo o efeito da redução da pelota e, conseqüentemente, da altura do leito, concluindo-se que a redução do diâmetro foi inferior a 10% e não produziu mudanças significativas no sistema.

Majumder; Natekar; Runkana, (2009) desenvolveram uma ferramenta user-friendly para a simulação de um sistema de GR. O modelo considerou apenas as reações de combustão do *coke* e calcinação do limestone através do mecanismo de encolhimento de núcleo. Similarmente, Wang et al., (2012) implementou as reações citadas, com a adição da avaliação da oxidação da magnetita para um sistema de GFR. Ambos os modelos utilizaram um mecanismo de secagem com 2 etapas.

Um aspecto relevante adicionado à modelagem dos sistemas de endurecimento de pelota, e até então negligenciado pelos estudos anteriores, é a integração térmica do processo. As correntes de recirculação de ar conferem um elevado grau de complexidade ao modelo, principalmente devido ao esforço computacional empregado. Neste contexto, Fan et al., (2015) consideraram a integração térmica entre a GM e o FR em um sistema GFR. Além disso, foi considerada apenas a reação de oxidação da magnetita e o mecanismo de secagem, com duas etapas, incluindo a avaliação da resistência à

compressão da pelota ao final do processo. Esse modelo serviu como base para o estudo conduzido por Yang et al., (2016), no qual foi proposto o monitoramento do processo a partir de cartas de controle estatísticas, utilizando a qualidade das pelotas e o perfil de temperatura do leito como as variáveis de referência.

Na sequência, Tan; Peng; Shi, (2016) avaliaram o empacotamento do leito de pelotas, através da análise dos efeitos da vibração do leito sobre a altura do empacotamento, distribuição de tamanho e tamanho médio da pelota. A análise foi realizada para um forno de GM de um sistema GFR, onde foram reproduzidos os mesmos mecanismos reacionais empregados por Wang et al., (2012). Os resultados demonstraram que a vibração aplicada ao sistema causou uma redução de apenas 6% na porosidade do leito quando comparado ao leito de esfera rígida.

Diante ao arcabouço de modelos fenomenológicos desenvolvidos e aplicados a diferentes tipos de processos de endurecimento de pelotas de minério de ferro, ainda existem publicações em anos recentes que realizam simplificações significativas. Feng et al., (2010) abordaram para um processo de GM apenas a evaporação da umidade das pelotas, adotando um mecanismo de duas etapas. Analogamente, Zhou et al., (2021) focaram apenas na avaliação da secagem, mas utilizando um mecanismo com três etapas. Thorat et al., (2022) avaliaram exclusivamente os fenômenos de transferência de calor, regida pela convecção forçada gás/sólido.

Capítulo 3

Modelagem Matemática

3.1 Introdução

No processo de endurecimento (*induration*) de pelotas de minério de ferro a etapa de Grelha Móvel (*Traveling Grate*) é onde ocorre a maior parte dos fenômenos físico-químicos do sistema (Fan *et al.*, 2015). Neste contexto, o modelo fenomenológico proposto no presente trabalho teve como objetivo agrupar o mais elevado nível de rigor e detalhamento matemático até então desenvolvido na literatura para o processo em questão. O foco principal da estratégia foi conferir ao modelo a capacidade de analisar efeitos de comportamentos fenomenológicos específicos, até então não avaliados em conjunto para o forno de GM.

3.2 Estudo de Caso: Forno de Grelha Móvel

O forno de Grelha Móvel (GM), ilustrado na Figura 9, é onde as pelotas verdes são inicialmente alimentadas no processo através de esteiras metálicas com temperatura entre 30 e 50°C (Thurlby, 1988c; Thurlby; Batterham; Turner, 1979; Voskamp; Brasz, 1975) e umidade entre 8 e 14% (Barati, 2008; Fan *et al.*, 2015; Feng *et al.*, 2010; Majumder; Natekar; Runkana, 2009; Sadrnezhaad; Ferdowsi; Payab, 2008; Tan; Peng; Shi, 2016; Wang *et al.*, 2012). O leito se movimenta com velocidade constante por toda extensão da grelha.

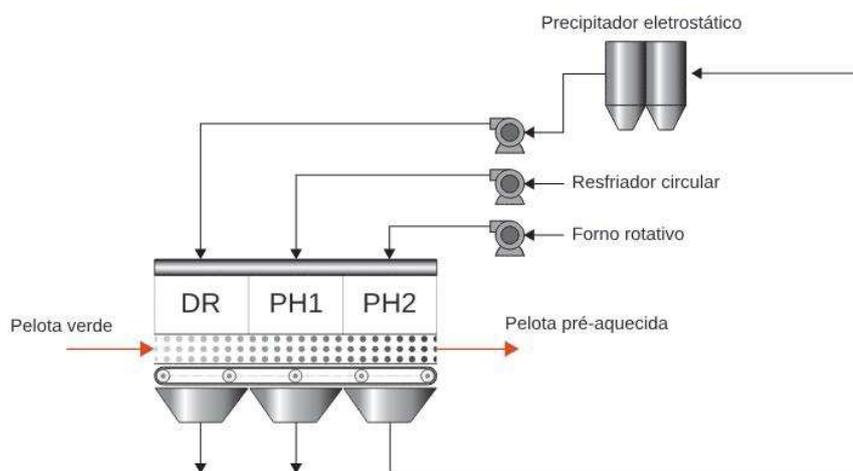


Figura 9. Diagrama esquemático do processo Grelha Móvel (GM).

O tratamento térmico das pelotas tem início na zona de secagem (DR), onde as pelotas verdes são expostas a um fluxo de ar descendente, proveniente da zona de pré-queima 02 (PH2). Nesta etapa todo o conteúdo de água livre das pelotas deve ser vaporizado. Além disso, as pelotas devem resistir as tensões internas geradas pela

evaporação da água contida no seu interior e resistir às pressões estáticas e dinâmicas dos gases quentes.

As pelotas ainda cruas, porém secas, seguem para a etapa de pré-queima 01 (PH1). Onde são pré-aquecidas, de modo a garantir um maior tempo de exposição à temperatura máxima de queima. O aquecimento dá-se via um fluxo de ar quente descendente oriundo da zona 02 do resfriador circular. A zona de pré-queima 02 (PH2) tem o papel de fornecer às pelotas resistência mecânica necessária para suportar a queda e a abrasão no interior do forno rotativo. Ao longo das zonas de pré-queima 01 e 02 ocorrem as reações químicas gás-sólido, como a combustão do *coke*, oxidação da magnetita, calcinação da dolomita e do limestone (Barati, 2008; Tan; Peng; Shi, 2016; Wang *et al.*, 2012).

As correntes gasosas de cada zona do GM são recirculadas de outras partes do processo ou do próprio sistema. A corrente de gás de saída da zona PH2, que é reutilizada na entrada da zona de secagem. Esse processo de reciclagem visa maximizar o aproveitamento da energia disponível, aumentando assim a eficiência energética do sistema. Na corrente de reciclagem, há um precipitador eletrostático, mostrado na Figura 9, que tem como função remover o material particulado presentes no gás.

3.3 Hipóteses

No desenvolvimento do modelo matemático rigoroso para o forno de GM, foram definidas, em congruência com a literatura especializada sobre o tema, como Küçükada *et al.*, (1994), Fan *et al.*, (2015), e Tan; Peng; Shi, (2016), as seguintes premissas:

- O processo ocorre em estado pseudo-estacionário;
- O gradiente de temperatura no interior da pelota é depressível;
- A altura do leito é constante ao longo do processo;
- As propriedades físicas das pelotas são constantes ao longo do leito (diâmetro, esfericidade e porosidade);
- As pelotas são uniformemente distribuídas ao longo do leito, i.e., o leito de pelotas é homogêneo;
- O fluxo de gás é uniforme e unidimensional em cada zona;
- A transferência de calor ocorre significativamente na direção vertical do leito de pelotas devido a velocidade do gás ser muito maior do que a velocidade da grelha, ou seja, a transferência de calor longitudinal é negligenciada; e
- Efeitos de perda de calor para as paredes laterais foram desprezados.

Baseando-se nessas hipóteses, o modelo é capaz de prever variáveis-chave do processo considerando diferentes alturas e comprimentos do leito de pelotas. Essa abordagem permite uma análise detalhada e abrangente, fornecendo *insights* valiosos para todas as posições ao longo do leito. A seguir, será demonstrado o formalismo matemático utilizado como base para a modelagem do sistema de GM, destacando os princípios teóricos e as equações que governam o processo.

3.4 Balanço de Energia

O balanço de energia para o forno de GM baseia-se nas trocas térmicas entre correntes de ar aquecido e o leito de pelotas que, por sua vez, desencadeiam reações químicas, que promovem o aumento da resistência dos sólidos. Para esse sistema, THURLBY et al., (1979) destacaram que a convecção forçada é o principal mecanismo de transferência de calor.

Com base nesses conceitos, o balanço de energia para o gás é definido como uma equação diferencial em função da altura do leito de pelotas. Os fluxos de calor envolvidos no sistema são oriundos da convecção forçada (Q_C), evaporação/condensação da água ($Q_{E/C}$) e das reações químicas (Q_R), conforme indicado na equação (1).

$$GC_g \frac{\partial T_g}{\partial Z} = -Q_C - 0,5Q_{E/C} + \alpha Q_R \quad (1)$$

De maneira similar, as trocas de calor associadas às pelotas são abordadas na equação (2) como uma função do tempo. Através da velocidade da grelha a variável independente é determinada, o que possibilita acompanhar as variações térmicas do sistema por meio das diferentes etapas do processo.

$$\rho_b C_p \frac{\partial T_p}{\partial t} = Q_C - 0,5Q_{E/C} + \omega Q_R \quad (2)$$

O primeiro termo dos balanços, o fluxo de calor referente à convecção forçada (Q_C), é definido de acordo com a equação (3).

$$Q_C = hA(T_g - T_p) \quad (3)$$

Onde o coeficiente de transferência de calor por convecção para leitos empacotados (h) foi definido com base na correlação Ranz–Marshall, indicada na equação (4) (Tsukerman; Duchesne; Hodouin, 2007). A área de transferência de calor gás/pelota é determinada pela equação (5), sendo a esfericidade da pelota (ϕ) considerada igual a 1.

$$h = \frac{k_g}{d_p} \left[2.0 + 0.6 \left(\frac{Re_p}{\varepsilon_b} \right)^{1/2} Pr^{1/3} \right] \quad (4)$$

$$A = \frac{6(1 - \varepsilon_b)}{\Phi d_p} \quad (5)$$

O segundo termo dos balanços, equações (1) e (2), diz respeito ao fluxo de calor oriundo da evaporação/condensação da umidade da pelota ($Q_{E/C}$), determinado pela equação (6). A multiplicação deste termo pelo fator de 0,5 nos balanços indica que a quantidade de energia resultante da evaporação/condensação da água é igualmente distribuída entre o gás e os sólidos.

$$Q_{E/C} = R_w \Delta H_w \quad (6)$$

Onde R_w corresponde à taxa, detalhada no item 3.5 Evaporação e condensação da umidade a seguir, e ΔH_w a entalpia de reação da evaporação/condensação da água.

O último termo dos balanços corresponde ao fluxo de calor associado às reações químicas que ocorrem no leito (Q_R), indicado na equação (6). Para o sistema em questão, foram consideradas as reações de combustão do *coke*, oxidação da magnetita e calcinação dos carbonatos, *dolomita* e *limestone*.

$$Q_R = R_c \Delta H_c + R_m \Delta H_m + R_d \Delta H_d + R_l \Delta H_l \quad (7)$$

A taxas de reação serão descritas no item 3.6 Reações químicas a seguir. As entalpias de reação foram determinadas com base na lei de Kirchhoff e os parâmetros utilizados para calcular a capacidade calorífica de cada componente foram obtidos através do NIST, (2024).

Nos balanços de energia para o gás e as pelotas, equações (1) e (2), o calor associado às reações químicas (Q_R) é multiplicado pelos fatores α e ω , respectivamente. Na literatura, estes fatores são representados de duas formas distintas. Com o objetivo de definir qual das abordagens é a mais adequada para o sistema em estudo, ambas foram avaliadas e serão detalhadas a seguir.

3.4.1 Caso 01

O caso 01, preconizado por Fan et al., (2015), indica que ambos os fatores são iguais a 0,5. Em outras palavras, assume-se que a energia resultante das reações químicas, tanto endotérmicas quanto exotérmicas, é distribuída igualmente entre o gás e os sólidos, do mesmo modo como é considerado para a evaporação/condensação da umidade.

Os balanços de energia resultantes para o gás e a pelota são indicados nas equações (8) e (9), respectivamente.

$$GC_g \frac{\partial T_g}{\partial z} = -hA(T_g - T_p) - 0.5(R_w \Delta H_w) + 0.5(R_c \Delta H_c + R_m \Delta H_m + R_d \Delta H_d + R_l \Delta H_l) \quad (8)$$

$$\rho_b C_p \frac{\partial T_p}{\partial t} = hA(T_g - T_p) - 0.5(R_w \Delta H_w) + 0.5(R_c \Delta H_c + R_m \Delta H_m + R_d \Delta H_d + R_l \Delta H_l) \quad (9)$$

3.4.2 Caso 02

No caso 02, adotado por Barati, (2008) e Tan; Peng; Shi, (2016), o fator α é igual a 0, enquanto ω é igual a 1. Nesse sistema, admite-se que o calor proveniente das reações é associado exclusivamente à fase sólida do sistema. Substituindo esses valores nas equações (1) e (2), os balanços de energia correspondentes para o gás e a pelota são apresentados a seguir.

$$GC_g \frac{\partial T_g}{\partial z} = -hA(T_g - T_p) - 0.5(R_w \Delta H_w) \quad (10)$$

$$\rho_b C_p \frac{\partial T_p}{\partial t} = hA(T_g - T_p) - 0.5(R_w \Delta H_w) + (R_c \Delta H_c + R_m \Delta H_m + R_d \Delta H_d + R_l \Delta H_l) \quad (11)$$

3.5 Evaporação e condensação da umidade

A secagem da pelota verde, foi representada pelo mecanismo de encolhimento de núcleo para partículas esféricas, composto por três estágios. O modelo matemático foi

proposto por Cumming; Thurlby, (1990), Seshadri; Pereira, (1985) e Tsukerman; Duchesne; Hodouin, (2007).

A primeira etapa consiste na evaporação da umidade livre, a qual é controlada pela transferência de massa da superfície da pelota para o seio do gás, definida pela equação (12).

$$R_w = \bar{k}_w A (w_g^e - w_g) \quad (12)$$

O coeficiente de transferência de massa (\bar{k}_w) e a difusividade do vapor de água para o gás (D_{H_2O}) são apresentados nas equações (13) e (14), respectivamente, conforme Barati, (2008). O conteúdo de umidade do gás nas condições de equilíbrio (w_g^e), indicado na equação (15), é determinado a partir da temperatura da pelota (Fan *et al.*, 2015).

$$\bar{k}_w = \frac{D_{H_2O}}{d_p} \left[2.0 + 0.6 \left(\frac{Re_p}{\varepsilon_p} \right)^{1/2} Sc^{1/3} \right] \quad (13)$$

$$D_{H_2O} = \frac{1.2 \times 10^{-9} T_g^{1.75}}{P'} \quad (14)$$

$$w_g^e = \begin{cases} \left[1.23 \times 10^{-6} \exp\left(\frac{T_p}{28.41}\right) \right] - 0.020 & T_p < 373.15 \text{ K} \\ \left[8.57 \times 10^{-4} \exp\left(\frac{T_p}{51.39}\right) \right] - 0.677 & 373.15 < T_p < 473.15 \text{ K} \\ \left[5.20 \times 10^{-3} \exp\left(\frac{T_p}{62.64}\right) \right] - 2.031 & T_p > 473.15 \text{ K} \end{cases} \quad (15)$$

Quando a pelota atinge um nível crítico de umidade, inicia-se a segunda etapa de secagem, conhecida como controle misto, descrita pela equação (16). Esta fase é caracterizada pela combinação da resistência à difusão através do que chamamos de 'camada seca' (ou '*dry-shell*') e pela transferência de massa para o gás (Küçükada *et al.*, 1994). Durante esta etapa, a difusão através dos poros da camada seca da pelota (o '*dry shell*') se torna o fenômeno limitante. Uma frente de evaporação se forma e, impulsionada por forças capilares, move-se em direção ao centro da pelota (Barati, 2008; Batterham, 1986).

$$R_w = \frac{A(w_g^e - w_g)}{\frac{1}{k_w} + \left(\frac{r_p(r_p - r_w)}{2r_w D_{H_2O}^e} \right)} \quad (16)$$

A difusividade efetiva do vapor através dos poros da pelota ($D_{H_2O}^e$) é definida pela equação (17), conforme Barati, (2008). Sendo a tortuosidade (τ) relacionadas à porosidade (ε_p) da pelota através da equação (18).

$$D_{H_2O}^e = D_{H_2O} \frac{\varepsilon_p}{\tau} \quad (17)$$

$$\tau = \varepsilon_p^{-0.41} \quad (18)$$

O volume do núcleo úmido diminui gradualmente e a relação entre o raio do núcleo úmido (r_w), raio da pelota (r_p), umidade da pelota (w_p) e a umidade crítica da pelota (w_{pc}), pode ser dada pela equação (19). O valor assumido para a umidade crítica da pelota (w_{pc}) foi de 120 kg/m³, para uma densidade da pelota de 2200 kg/m³, conforme Hasenack; Lebel; Kooy, (1975), Voskamp; Brasz, (1975) e Barati, (2008).

$$w_p = w_{pc} \left(\frac{r_w}{r_p} \right)^3 \quad (19)$$

O início do terceiro estágio ocorre quando a taxa de secagem, definida pela equação (20), ultrapassa a taxa estabelecida na fase anterior de controle misto. Este estágio é dominado pela transferência de calor do gás para a pelota, sendo influenciado pela temperatura de bulbo úmido da partícula (T_w), indicada por Barati, (2008) na equação (21), determinada por métodos iterativos. O calor latente de vaporização da água (ΔH_w) é definido por Tan; Peng; Shi, (2016) na equação (22).

$$R_w = \frac{hA(T_g - T_w) r_w}{\Delta H_w r_p} \quad (20)$$

$$T_w = \begin{cases} 173.4 - 4.166r_h + 2.57 \times 10^{-2}r_h^2 + T_g(0.3648 + 1.4585 \times 10^{-2}r_h - 8.688 \times 10^{-5}r_h^2) & T_p < 373 K \\ 197.7 + 125.753r_h - 11.64749r_h^2 + T_g(0.3964 - 0.697929r_h + 6.31750 \times 10^{-2}r_h^2) + T_g^2(-2.921 \times 10^{-4} + 9.86139 \times 10^{-4}r_h - 8.5769899 \times 10^{-5}r_h^2) & T_p \geq 373 K \end{cases} \quad (21)$$

$$\Delta H_w = \begin{cases} 3.16 \times 10^6 - 2495.45T_p + 0.29T_p^2 & T_p > 373 K \\ 2.722 \times 10^5(674 - T_p)^{0.375} & T_p \leq 373 K \end{cases} \quad (22)$$

A etapa de condensação da umidade no gás é representada pela relação descrita na equação (12). No entanto, ocorre especificamente em cenários onde a temperatura da pelota está abaixo da temperatura de saturação do gás.

3.6 Reações químicas

No sistema de GM, as reações químicas iniciam na zona de pré-queima 1, estendem até a pré-queima 2. Este processo pode ser visto como dois reatores de leito fluidizado móvel operando em série. As reações consideradas para este sistema incluem a combustão do *coke*, a oxidação da magnetita e a calcinação dos carbonatos de cálcio e magnésio.

3.6.1 Oxidação da magnetita e Combustão do *coke*

As reações de combustão do *coke* e oxidação da magnetita, equações (23) e (24), são representadas pelo modelo de núcleo não reagido, conforme descrito por Levenspiel, (1998). Esse mecanismo propõe que a reação é iniciada na superfície da pelota. Na sequência, uma frente reativa avança em direção ao núcleo, formando uma camada de produtos de reação na parte anterior.



O mecanismo dessas reações aplicadas ao processo de endurecimento de pelotas de minério de ferro utilizado no trabalho foi proposto por Barati, (2008) e Tan; Peng; Shi, (2016). De forma geral, o processo se divide em três etapas: (i) a difusão no filme, onde oxigênio do seio do gás se desloca para a superfície da pelota; (ii) a difusão nos poros, através dos poros da camada de reagente; e (iii) a reação superficial interfacial, que ocorre entre o gás difundido e a pelota.

A taxa de reação para a oxidação da magnetita, calculada pela equação (25), foi proposta por Young; Cross; Gibson, (1979) e consiste em um modelo cinético de controle misto. De maneira similar, a equação (26) descreve a taxa de reação para a combustão do *coke*.

$$\frac{dr_m}{dt} = \frac{-4(C_{O_2}^e - C_{O_2})}{\rho_b \left[\frac{1}{k_m} + \frac{r_m(r_p - r_m)}{r_p D_{O_2}^e} + \left(\frac{r_m}{r_p} \right)^2 \frac{1}{\bar{k}_{O_2}} \right]} \quad (25)$$

$$\frac{dr_c}{dt} = \frac{-(C_{O_2}^e - C_{O_2})}{\rho_b \left[\frac{1}{k_c} + \frac{r_c(r_p - r_c)}{r_p D_{O_2}^e} + \left(\frac{r_c}{r_p} \right)^2 \frac{1}{\bar{k}_{O_2}} \right]} \quad (26)$$

A taxa de reação e o coeficiente de difusão do oxigênio através da magnetita são representados pelas equações (29) e (30). Os mesmos parâmetros para a reação de combustão do *coke* são apresentados nas equações (27) e (28).

$$k_m = \begin{cases} 3,52 \cdot 10^8 T_p \exp\left(\frac{-20073}{T_p}\right) & T_p \leq 657 \text{ K} \\ 1,19 \cdot 10^{-4} T_p \exp\left(\frac{-1197}{T_p}\right) & T_p > 657 \text{ K} \end{cases} \quad (27)$$

$$D_{O_2}^m = 9,71 \cdot 10^{-6} T_g^{1,75} \frac{\varepsilon_p}{\tau} \quad (28)$$

$$k_c = 595,6 T_p \exp\left(\frac{-17970}{T_p}\right) \quad (29)$$

$$D_{O_2}^c = 1,5 \cdot 10^{-5} \left(\frac{T_g}{298,15} \right)^{1,5} \frac{\varepsilon_p}{\tau} \quad (30)$$

Os parâmetros associados ao oxigênio, difusividade no equilíbrio e coeficiente de transferência de massa, para ambas as reações são descritos nas equações (31) e (32),

respectivamente. O “*i*” indicado na difusividade ($D_{O_2}^i$), representa a magnetita ($D_{O_2}^m$) ou o *coke* ($D_{O_2}^c$).

$$D_{O_2}^e = D_{O_2}^i \frac{\varepsilon_p}{\tau} \quad (31)$$

$$\bar{k}_{O_2} = \frac{D_{O_2}^i}{d_p} \left[2.0 + 0.6 \left(\frac{Re_p}{\varepsilon_p} \right)^{1/2} Sc^{1/3} \right] \quad (32)$$

3.6.2 Calcinação dos carbonatos

As reações de calcinação da *dolomita* ($MgCO_3$) e da *limestone* ($CaCO_3$) são indicadas nas equações (33) e (34).



Para essas reações a transferência de calor é o único fenômeno limitante, conforme indicado por Barati, (2008). Portanto, são expressas pelo mesmo mecanismo de primeira ordem, indicado nas equações (35) e (36).

$$R_d = k_d m_d \quad (35)$$

$$R_l = k_l m_l \quad (36)$$

As respectivas taxas de reação constantes para a da *dolomita* ($MgCO_3$) e da *limestone* ($CaCO_3$) são apresentadas nas equações (37) e (38).

$$k_d = 2,5 \cdot 10^5 \exp\left(\frac{-11200}{T_p}\right) \quad (37)$$

$$k_l = 8,3 \cdot 10^6 \exp\left(\frac{-18300}{T_p}\right) \quad (38)$$

3.7 Transferência e balanço de massa

A equação de Ergun foi utilizada para descrever a queda de pressão ao longo do leito de pelotas, ou seja, entre o topo e a base do leito de pelotas de cada zona (Ergun, 1952). Essa expressão é uma função do fluxo de gás (G) que atravessa o leito de pelota, o qual é modulado pela velocidade dos ventiladores de cada zona.

$$\frac{\partial P}{\partial z} = \frac{150\mu_g G(1 - \varepsilon_b)^2}{(\Phi d_p)^2 \varepsilon_b^3} + \frac{1.75\rho_g G^2(1 - \varepsilon_b)}{\Phi d_p \varepsilon_b^3} \quad (39)$$

O fluxo mássico de gás do sistema é controlado por esta diferencial da pressão, entretanto os componentes gasosos são produzidos/consumidos pelas reações que ocorrem ao longo do leito de pelotas. Por este motivo, o fluxo de gás é representado pela equação (40), como uma relação entre as taxas de reação e a posição no leito.

$$\frac{\partial G}{\partial z} = \sum_{k=1}^n R_k \quad (40)$$

O balanço de massa para cada componente do gás é expresso pela equação (41), que caracteriza o sistema com base nas taxas de reação (R_k) e nos coeficientes estequiométricos (S_i) do componente i , em conjunto com a velocidade do gás (v_g). De forma análoga, o balanço de massa para os componentes j da pelota é detalhado na equação (42).

$$\frac{\partial w_i^g}{\partial z} = \frac{R_k}{v_g} S_i \quad (41)$$

$$\frac{\partial w_j^p}{\partial z} = R_k S_j \quad (42)$$

3.8 Qualidade da pelota

A estimação em tempo real das variáveis relacionadas à qualidade da pelota durante o processo oferece vantagens significativas. Primeiro, permite a otimização de etapas específicas do processo. Segundo, facilita a tomada de decisões antecipadas em

situações anômalas, como mudanças na composição da alimentação ou nas especificações do produto. Este recurso contribui para elevar a precisão e eficácia no controle do processo.

A qualidade da pelota é quantificada através da equação (43), conforme definido por Batterham, (1986). Essa equação leva em conta o perfil de temperatura e a relação tempo/comprimento do sistema, onde κ representa o parâmetro de taxa que depende da temperatura.

$$\frac{dQ}{dt} = \kappa(Q_f - Q) \quad \text{com} \quad \kappa = \frac{A_0}{T_p} \exp\left(\frac{-E}{RT_p}\right) \quad (43)$$

De acordo com o modelo de Pomerleau; Desbiens; Hodouin, (2003) e Pomerleau; Hodouin; Poulin, (2005), a qualidade final da pelota (Q_f) é calculada pela equação (44). Este modelo incorpora o impacto do aumento abrupto da qualidade quando a temperatura da pelota (T_p) ultrapassa um valor específico (T_L), que marca o início da fase líquida no fluxo de pelotas.

$$Q_f = \begin{cases} v + \frac{\beta}{1 + \exp\left(\frac{-(T_p - T_L)}{\gamma}\right)}, \text{ para } T_p \leq T_c \\ v + \frac{\beta}{1 + \exp\left(\frac{-(T_p - T_L)}{\gamma}\right)} - \frac{\delta}{1 + \exp\left(\frac{-(T_p - T_c - \psi)}{\varphi}\right)}, \text{ para } T_p > T_c \end{cases} \quad (44)$$

O modelo também considera que a qualidade da pelota decresce após atingir uma temperatura crítica (T_c) devido ao fenômeno de vitrificação. Os parâmetros de ajuste adotados são baseados no modelo de Pomerleau; Hodouin; Poulin, (2005), listados na Tabela 2, derivados da calibração do modelo de qualidade da pelota em relação ao indicador de qualidade escolhido pelo autor, a resistência à compressão.

Tabela 2. Parâmetros do modelo de qualidade da pelota.

Parâmetro	Valor	Unidade	Parâmetro	Valor	Unidade
A_0	330,0	s^{-1}	ψ	191,0	K
E	2.461,0	J/mol	δ	270,0	kg/pelota.K

v	53,2	kg/pelota	φ	35,2	J/mol
β	317,0	kg/pelota.K	T_L	1.462,0	K
γ	80,6	J/mol	T_C	1.535,0	K

Fonte: Pomerleau; Hodouin; Poulin, (2005).

3.9 Solução numérica

Um algoritmo em Python foi desenvolvido para resolver numericamente o modelo do sistema de GM. A construção do algoritmo pode ser subdividida em duas etapas: a solução do modelo fenomenológico e a validação do sistema através de dados reais de planta, como ilustrado na Figura 10.

O modelo tem início com a entrada dos dados e parâmetros sumarizados na Tabela 3, os quais incluem as condições iniciais do ar e das pelotas, a geometria do forno, a velocidade da grelha e as propriedades do leito. Para a resolução numérica do modelo foi utilizado o método de diferenças finitas explícitas, conforme adotado por Barati, (2008), Majumder; Natekar; Runkana, (2009) e Fan et al., (2015). Nesse sistema, o leito de pelotas foi dividido em elementos regulares dentro de um sistema de coordenadas ortogonal, onde as propriedades do gás (\mathcal{P}_g) e das pelotas (\mathcal{P}_p) variam em função da altura e do comprimento do leito, respectivamente. O passo seguinte no algoritmo envolve o cálculo do número e do tamanho dos elementos que compõem a malha do sistema. Inicialmente, foi adotado de forma arbitrária uma subdivisão da altura do leito em 200 partes e o comprimento de cada zona da GM em outras 200, resultando em uma malha composta por 120.000 elementos. Após a análise de convergência de malha, a configuração ideal para o sistema foi determinada.

O modelo começa a ser solucionado na zona de secagem, indicada como $u=1$ na Figura 10. De forma sequencial, são solucionadas as zonas PH1 e PH2, $u=2$ e $u=3$, respectivamente. Para a solução das zonas de pré-queima utiliza-se um algoritmo similar ao da zona DR. Em cada zona são calculadas as propriedades termodinâmicas e de transporte, bem como as taxas de reação. A transferência de calor na primeira zona é marcada pelo processo de evaporação/condensação. Nas zonas seguintes, de pré-queima 1 e 2, além desses fenômenos, ocorrem também as reações de oxidação da magnetita, a combustão do *coke* e a calcinação dos carbonatos de magnésio e cálcio.

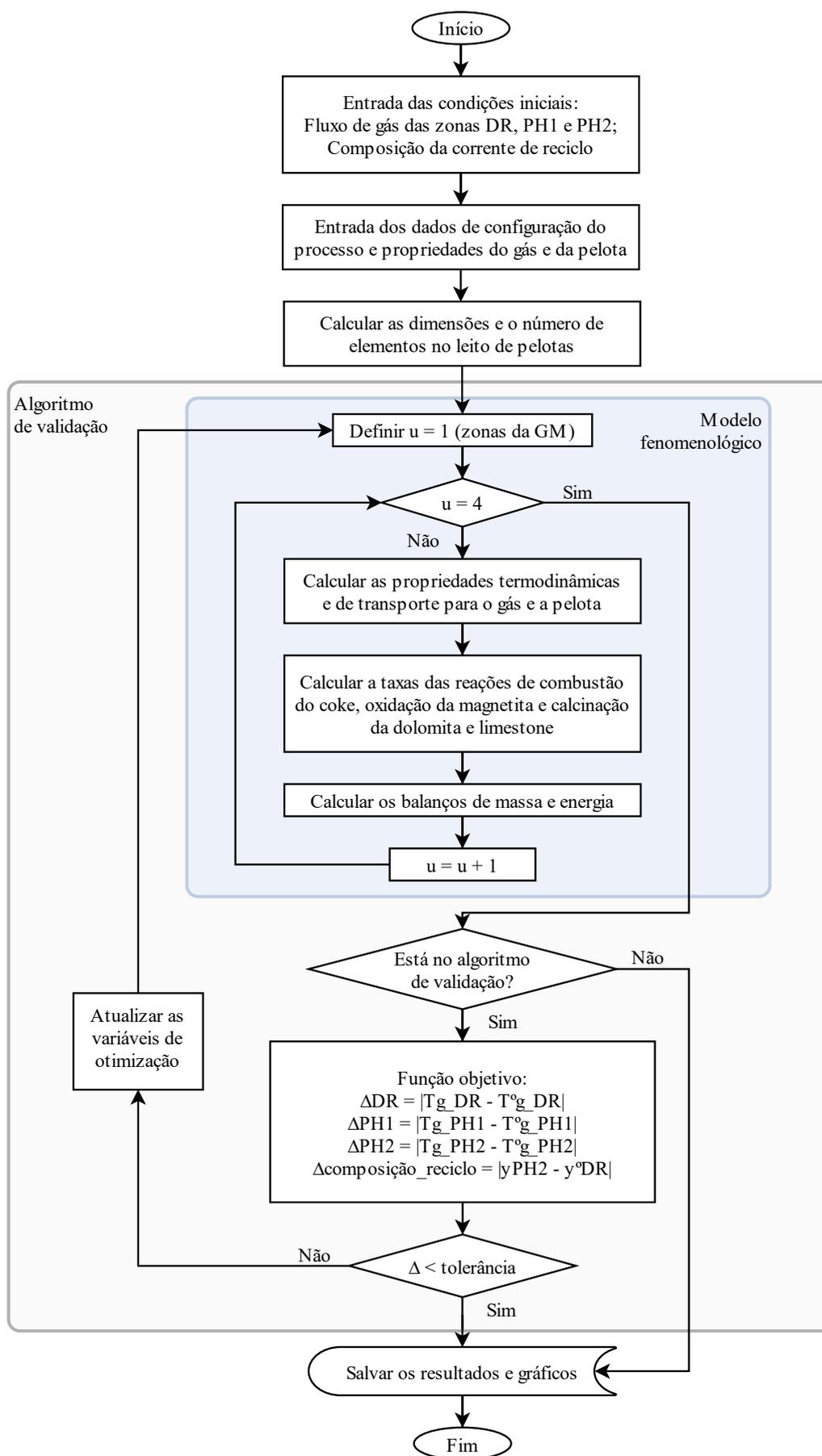
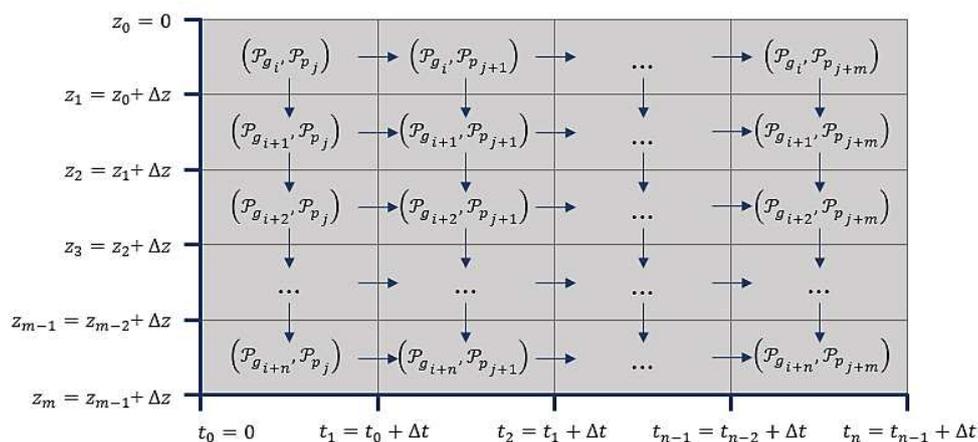


Figura 10. Fluxograma do modelo computacional para o sistema de GM.

Tabela 3. Dados de entrada do modelo computacional do sistema de GM.

Fração dos componentes da pelota	Valor	Características da pelota e do leito	Valor
Hematita (Fe_2O_3)	74,45 wt. %	Diâmetro da pelota	0,013 m
Magnetita (Fe_3O_4)	4,0 wt. %	Porosidade da pelota	0,32
Dióxido de Silício (SiO_2)	4,31 wt. %	Densidade aparente (<i>bulk</i>)	2200 kg/m ³
Carbonato de Cálcio (CaCO_3)	5,57 wt. %	Velocidade da grelha	0,047 m/s
Carbonato de Magnésio (MgCO_3)	1,11 wt. %	Profundidade do leito	0,18 m
Carbono (<i>Coke</i>)	0,56 wt. %	Fração de vazios do leito	0,39
Umidade (H_2O)	10,0 wt. %	Comprimento da zona de secagem	18 m
Temperaturas do processo		Comprimento da zona PH1	12 m
Temperatura do ar na entrada da DR	260 °C	Comprimento da zona PH2	18 m
Temperatura do ar na entrada da PH1	643 °C	Pressões do processo	
Temperatura do ar do FR	1040 °C	Pressão inicial da zona DR	101245,5 Pa
Temperatura do gás natural	40 °C	Pressão inicial da zona PH1	101177,9 Pa
Temperatura do ar dos queimadores	80 °C	Pressão inicial da zona PH2	101229,2 Pa

**Figura 11.** Esquema computacional de resolução do método de diferenças finitas.

Os balanços de massa e energia constituem um sistema de 21 equações diferenciais parciais. Neste sistema, o perfil de saída das pelotas na zona de secagem é utilizado como entrada para a zona PH1, e, similarmente, a saída da PH1 serve de entrada para a zona PH2.

A zona de pré-queima 2 do processo industrial em estudo conta com três pares de queimadores, que têm a função de manter a temperatura adequada da corrente gasosa proveniente do forno rotativo. Nos queimadores, utiliza-se o gás natural com uma vazão de 177,3 Nm³/h por queimador e uma proporção estequiométrica de excesso de ar de 10:1.

Na corrente de reciclo do sistema, indicada na Figura 9, que sai da zona de PH2 e alimenta a DR, existe um precipitador eletrostático. Para este equipamento, considerou-se que todo o particulado suspenso presente na corrente gasosa seria removido.

O modelo calcula diversas variáveis de saída ao longo de todo o forno de GM, incluindo a temperatura, densidade, vazão e composição tanto do gás quanto da pelota. Também são determinadas a pressão do gás, as taxas de progresso das reações no leito e a resistência à compressão das pelotas.

Durante a validação do modelo, conforme ilustrado na Figura 10, as vazões de entrada de ar em cada zona da GM e a composição do ar na alimentação da secagem foram ajustadas. A função objetivo é composta pelos desvios relativos entre as temperaturas de saída do gás de cada zona e suas temperaturas de referência, além dos desvios absolutos nas composições relacionadas ao reciclo da corrente gasosa (saída da PH2 e entrada da secagem). Para garantir que os resultados de cada equação apresentassem a mesma ordem de grandeza, foram utilizadas métricas diferentes para quantificação dos desvios para as temperaturas e para a composição. Essa função objetivo engloba 11 variáveis (uma para cada zona, mais 8 para a composição do reciclo), como mostrado na Figura 10.

A biblioteca `Scipy.Optimize.Minimize` foi utilizada para a minimização das funções objetivo, pois foi necessário a utilização de condições de contorno e restrições. Para esse tipo de problema a biblioteca utiliza como padrão o método SLSQP (*Sequential Least Squares Programming*), proposto por Schittkowski, (1982). Diferentemente dos métodos tradicionais, que resolvem um problema de programação quadrática a cada iteração principal, o SLSQP resolve um subproblema equivalente de mínimos quadrados para gerar a direção da pesquisa (Ma *et al.*, 2024). A versão desse método implementada na biblioteca foi proposta por Kraft, (1988), que utiliza o método de Powell modificado para flexibilizar subproblemas inconsistentes de programação quadrática (Powell, 1978). Este método é especialmente indicado para problemas de otimização mal condicionados (Ma *et al.*, 2024).

3.10 Grid Convergence Index (GCI)

A modelagem fenomenológica de processos engloba a etapa de verificação de erros associados aos resultados obtidos. De uma forma geral, o processo de verificação consiste na verificação do código e da solução (Roache, Patrick J., 1998). A primeira etapa consiste em analisar a exatidão da implementação do algoritmo em linguagem computacional, enquanto segundo determina a influência dos erros numéricos na solução (Rider *et al.*, 2016; Roy, 2005).

Os erros numéricos são divididos entre os erros de arredondamento, iteração e discretização (Roache, P. J., 1998). Dentre os quais, o erro de discretização espacial é o mais significativo para os problemas que realizam a discretização de uma superfície de controle, como no presente trabalho, por meio do método de diferenças finitas (Roy; Oberkampf, 2011). Este erro tem origem na mudança de domínio contínuo para o discreto, onde normalmente ocorrem simplificações que resultam na perda de informações (Satyadharm; Harinaldi, 2021).

O método mais utilizado para a estimação do erro de discretização é o *Grid Convergence Index* (GCI) (Roache, 1994). Esse método é recomendado por organizações como a *American Society of Mechanical Engineers* (ASME) (Celik *et al.*, 2008) e o *American Institute of Aeronautics and Astronautics* (AIAA), (2013).

O método do GCI corresponde a um estimador do erro de discretização para malhas com diferentes níveis de refinamentos. Neste estudo de refinamento da malha, espera-se que, à medida que a malha é refinada e a resolução melhora, a solução computacional não varie significativamente. Aproximando-se, assim, de um valor assintótico, ou seja, da solução numérica verdadeira.

O GCI é derivado da teoria da extrapolação generalizada de Richardson, e estima o percentual de desvio entre o valor calculado e o valor numérico assintótico. Na metodologia definida por Celik *et al.*, (2008) é recomendada a comparação entre três malhas, podendo também ser executado para duas.

Inicialmente, o grau de refinamento deve ser calculado segundo a equação (45), para malhas com duas dimensões. Onde H é o tamanho representativo da malha, N é o número de células da malha e ΔA_i é a área de cada célula i .

Para a comparação entre três malhas devem ser definidos graus de refinamento fino (1), médio (2) e grosso (3), isto é, $H_1 < H_2 < H_3$. As malhas escolhidas devem apresentar um fator de refinamento (r), indicado na equação (46), maior do que 1,3.

$$H = \left[\frac{1}{N} \sum_i^N \Delta A_i \right]^{1/2} \quad (45)$$

$$r = \frac{H_2}{H_1} = \frac{H_3}{H_2} \quad (46)$$

Na sequência, o modelo deve ser executado para cada uma das malhas, e o resultado para a variável de interesse definido como f_1 , f_2 e f_3 . Com base nas soluções numéricas, é calculada a ordem aparente do método (p) através da equação (47).

$$p = \frac{\ln\left(\left|\frac{f_2 - f_1}{f_3 - f_2}\right|\right)}{\ln(r)} \quad (47)$$

Os erros relativos entre uma malha mais refinada e outra menos refinada são descritos nas equações (48) e (49).

$$e_{12} = \left|\frac{f_1 - f_2}{f_1}\right| \quad (48)$$

$$e_{23} = \left|\frac{f_2 - f_3}{f_2}\right| \quad (49)$$

A extrapolação assintótica da solução (f_{ext}), ou seja, para uma malha com $H = 0$, é obtida por meio das equações (50), baseadas nas malhas mais refinadas, e (51), nas menos refinadas.

$$f_{ext\ 12} = \frac{r^p f_1 - f_2}{r^p - 1} \quad (50)$$

$$f_{ext\ 23} = \frac{r^p f_2 - f_3}{r^p - 1} \quad (51)$$

Os erros para esta solução assintótica, indicados nas equações (52) e (53), são definidos de forma análoga ao anterior, tendo como referências os resultados assintóticos.

$$e_{ext\ 12} = \left|\frac{f_{ext\ 12} - f_1}{f_{ext\ 12}}\right| \quad (52)$$

$$e_{ext\ 23} = \left|\frac{f_{ext\ 23} - f_2}{f_{ext\ 23}}\right| \quad (53)$$

Com base nas soluções assintóticas, o GCI é determinado através das equações (54) e (55). Onde F_s corresponde ao fator de segurança, igual a 1,25 para sistemas com três malhas.

$$GCI_{12} = F_s \frac{|e_{12}|}{r^p - 1} \quad (54)$$

$$GCI_{23} = F_s \frac{|e_{23}|}{r^p - 1} \quad (55)$$

O resultado deverá indicar o percentual relativo às incertezas numéricas encontradas em cada malha para cada variável de interesse. O procedimento estabelecido por Celik et al., (2008), não indica um valor aceitável para o GCI, pois o resultado depende de fatores como a natureza do problema estudado, precisão desejada e disponibilidade de recursos computacionais.

A convergência da solução para a faixa assintótica, é definida pela equação (56). É desejável que χ seja mais próximo de 1, para que a solução fique mais próxima da faixa assintótica de convergência. Contudo, conforme Celik et al., (2008), para $(f_1 - f_2)$ ou $(f_2 - f_3)$ próximos a zero o método pode não vir a funcionar.

$$\chi = \frac{GCI_{23}}{r^p GCI_{12}} \quad (56)$$

No modelo em estudo, desenvolvido na linguagem Python, a biblioteca pyGCS (Teschner, 2014) foi utilizada para o cálculo dos parâmetros que suportam a análise de malha segundo o GCI. A biblioteca foi lançada em julho de 2022 e encontra-se disponível para uso através de uma licença MIT. Esta licença permite que qualquer pessoa obtenha uma cópia desta biblioteca sem custos ou restrições, incluindo, sem limitação, os direitos de utilizar, copiar, modificar, fundir, publicar, distribuir, sublicenciar e/ou vender cópias. Devendo o usuário manter apenas o aviso de *copyright* e uma cópia da licença em todas as cópias da biblioteca.

Capítulo 4

Resultados e Discussões

4.1. Introdução

Neste capítulo, são apresentados os resultados referentes a avaliação dos balanços de energia, análise de convergência de malha através no método GCI, validação do modelo para o sistema de Grelha-Móvel em escala industrial e a avaliação dos efeitos da variação de parâmetros chave de controle operacional do processo, discutidos com base na influência sobre os perfis de temperatura e a qualidade da pelota.

4.2. Avaliação dos balanços de energia

A validação do modelo para o processo de GM foi realizada em duas etapas. No primeiro momento, utilizou-se uma malha arbitrária para a avaliação dos balanços de energia existentes na literatura, discutidos no item 3.4. Na sequência, a análise de malha através do método GCI foi aplicada ao modelo implementado com o balanço de energia que apresentou a melhor acurácia na avaliação anterior.

Na validação do modelo matemático, foram utilizados dados provenientes de uma planta de pelletização do tipo GFR, em escala industrial, localizada na América do Sul. A coleta dos dados ocorreu sob condições de operação estacionárias do processo. É importante destacar, que a medição precisa da temperatura da pelota de forma contínua ao longo da grelha, sem a interferência de fatores externos do leito ou perdas de calor, é pouco praticável em plantas industriais (Barati, 2008). Além disso, devido às particularidades do sistema base, não foram encontrados dados experimentais compatíveis na literatura, que possibilitassem a avaliação do modelo frente a dados externos.

Neste contexto, foram utilizados como referência os dados operacionais do perfil de temperatura da pelota. Para a coleta desses dados, utilizou-se um sensor datapac (tipo J), com cabo da mesma extensão da GM, que foi conduzido ao longo do comprimento da grelha conforme a velocidade do leito. Devido às complexidades relacionadas à precisão das medições em campo mencionadas, a partir com comprimento de 40 metros os dados apresentaram resultados inconsistentes e foram desconsiderados das avaliações.

Na avaliação dos balanços de energia, utilizou-se como referência uma malha com 200 subdivisões na altura do leito, enquanto cada zona foi dividida em outras 200 secções, ou seja, 120.000 elementos ao total. Para viabilizar a comparação entre os resultados experimentais e do modelo, devido ao diferente espaçamento dos dados, calculou-se a média por metro para cada um dos conjuntos de dados. Os 40 pontos ao longo do leito foram comparados individualmente através da métrica da raiz do erro médio quadrático

(RMSE). Na sequência, o RMSE médio foi normalizado com base na amplitude dos dados de temperatura experimentais.

Os resultados relativos aos perfis de temperatura da pelota para os casos 01 e 02 do balanço de energia são apresentados na Figura 12. A comparação entre o caso 01 e os dados experimentais resultou em um RMSE normalizado de 15,18%, enquanto para o caso 02 foi obtido um desvio de 11,97%. Com base nesses resultados o caso 02 do balanço de energia foi escolhido para a condução das demais análises.

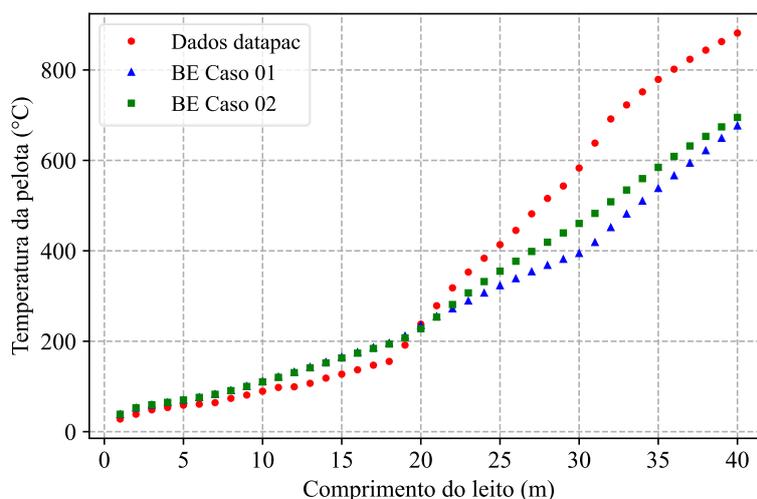


Figura 12. Perfis de temperatura da pelota para os casos 01 e 02 do balanço de energia comparados aos dados experimentais do datapac.

4.3. Análise de convergência de malha

A análise de malha foi conduzida para o modelo de GM desenvolvido com o objetivo de determinar a malha ideal para o sistema, levando em consideração a acurácia da solução como uma função do refinamento da malha. Desejando-se obter resultados precisos com o menor custo computacional possível.

O método *Grid Convergence Index* (GCI) foi escolhido para a realização da análise, conforme discutido no item 3.10. A biblioteca pyGCS foi utilizada para a determinação das principais métricas do método, o fator de refinamento, GCI_{12} e GCI_{23} (%), ordem aparente do método e a extrapolação assintótica da solução. Com base nesses resultados foi verificada a convergência da solução para a faixa assintótica, por meio da equação (56), e os erros relativos, equações (48) e (49), e para a solução extrapolada, equações (52) e (53).

O método GCI consiste na comparação entre três malhas com graus de refinamento fino, médio e grosso, contextualizados anteriormente. Neste contexto, foram escolhidas para a investigação nove malhas diferentes. A determinação dessas malhas seguiu um planejamento fatorial 3^2 , no qual foram avaliadas 3 condições diferentes para o refinamento da altura e do comprimento do leito.

Inicialmente, foram definidos os números de elementos para a altura (eixo y), com 100, 200 e 300 secções. O fator de refinamento foi estabelecido como 1,4 para todas as faixas, considerando o valor mínimo requerido para o GCI ($r \geq 1,3$), equação (46). Além disso, assumiu-se como premissa i) um espaçamento idêntico para os elementos ao longo de toda a grelha e ii) que cada zona do forno deveria apresentar um número inteiro de elementos, com o intuito de viabilizar a quantificação da temperatura da pelota na saída das zonas de secagem e PH1. Com base nessas definições, uma análise explanatória foi conduzida para a determinação do número de seções para o comprimento do leito (eixo x), nos três níveis avaliados.

As malhas escolhidas são indicadas na Tabela 4, juntamente aos respectivos resultados para o grau e fator de refinamento, equações (45) e (46). Para a aplicação do método GCI as malhas foram organizadas de acordo com o fator de variação (eixo y), em função do número de elementos no eixo x, conforme delimitado na tabela pelas linhas tracejadas.

Tabela 4. Malhas utilizadas na análise de convergência GCI.

ID	Nº de elementos no eixo y	Nº de elementos no eixo x	Nº total de elementos	Grau de refinamento	Fator de refinamento
1	300	2.400	720.000	0,003	1,414
2	300	1.200	360.000	0,005	1,414
3	300	600	180.000	0,007	-
4	200	2.400	480.000	0,004	1,414
5	200	1.200	240.000	0,006	1,414
6	200	600	120.000	0,008	-
7	100	2.400	240.000	0,006	1,414
8	100	1.200	120.000	0,008	1,414
9	100	600	60.000	0,012	-

A avaliação da malha teve como base as variáveis mais importantes para o sistema, a temperatura do gás e da pelota ao longo do leito. Além disso, no método GCI é necessário definir um ou vários pontos da malha para executar a comparação entre as configurações selecionadas. Para a temperatura da pelota foram escolhidas as temperaturas médias da zona de secagem no comprimento de 18 m, na pré-queima 1 em 30 m e na pré-queima 2 em 40 m. Avaliou-se para o gás as temperaturas médias de saída de cada zona.

Os resultados obtidos para a análise de convergência das malhas são apresentados na Tabela 5.

A análise dos resultados para todos os cenários, f_1 , f_2 e f_3 , revela que as malhas 100x2400 e 300x600 apresentaram os perfis de temperatura máximo e mínimo, respectivamente. Esses perfis delimitam o intervalo de variação dos resultados avaliados, ou seja, as curvas para os demais 7 cenários estão localizadas entre os perfis apresentados na Figura 13a e Figura 13b. Os gráficos demonstram que apenas a variação da malha pode causar desvios de até 17°C na temperatura da pelota e de 11°C para o gás, ou seja, variações de no máximo 5% quando comparadas às temperaturas médias do leito.

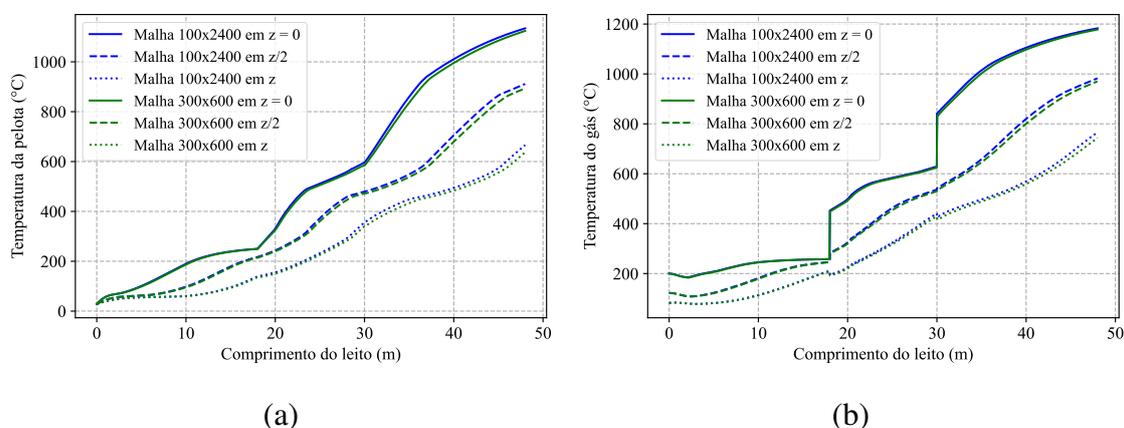


Figura 13. Perfis de temperatura média (a) da pelota e (b) do gás para as malhas 100x2400 e 300x600.

A análise GCI pode ser resumida nas seguintes etapas de avaliação: (i) da faixa assintótica de convergência; (ii) valores para o GCI_{12} e GCI_{23} e erro relativo; e (iii) resultados extrapolados (f_{ext}) e erro extrapolado (e_{ext}).

Tabela 5. Resultados para a análise de convergência de malha para o modelo de GM.

Variável	Local	N_y	f_1	f_2	f_3	e_{12}	e_{23}	GCI_{12}	GCI_{23}	p	f_{ext}	$e_{ext\ 12}$	$e_{ext\ 23}$	χ	
			$N_x = 2.400$	$N_x = 1.200$	$N_x = 600$	(%)	(%)	(%)	(%)						
Temperatura da pelota	Zona de secagem (18m)	300	195,000	194,900	195,100	0,051	0,103	0,010	0,020	4,41	195,0	0,000	0,051	0,454	
		200	195,400	195,400	195,500	0,000	0,051	0,000	0,020	4,59	195,0	0,205	0,205	-	
		100	196,600	196,600	196,700	0,000	0,051	0,000	0,020	4,76	197,0	0,203	0,203	-	
	Zona de pré-queima 1 (30m)	300	461,800	459,300	456,100	0,541	0,697	2,130	2,800	0,78	470,0	1,745	2,277	1,011	
		200	462,600	460,800	457,500	0,389	0,716	0,530	1,000	1,84	465,0	0,516	0,903	1,016	
		100	465,800	464,300	460,700	0,322	0,775	0,270	0,660	2,59	467,0	0,257	0,578	1,023	
	Zona de pré-queima 2 (40m)	300	717,400	713,600	708,500	0,530	0,715	2,220	2,910	0,77	730,0	1,726	2,247	1,012	
		200	719,000	715,700	710,700	0,459	0,699	1,110	1,700	1,20	725,0	0,828	1,283	1,023	
		100	723,000	719,900	714,800	0,429	0,708	0,900	1,450	1,37	728,0	0,687	1,113	1,016	
	Temperatura do gás	Zona de secagem	300	98,500	98,330	97,980	0,173	0,356	0,220	0,440	2,02	98,7	0,203	0,375	1,014
			200	98,620	98,440	98,090	0,183	0,356	0,220	0,440	2,03	98,8	0,182	0,364	1,010
			100	98,960	98,790	98,430	0,172	0,364	0,220	0,440	2,03	99,1	0,141	0,313	1,010
Zona de pré-queima 1		300	243,600	241,900	238,900	0,698	1,240	1,170	2,070	1,62	246,0	0,976	1,667	1,026	
		200	244,100	242,500	239,500	0,655	1,237	1,010	1,860	1,74	246,0	0,772	1,423	1,025	
		100	245,900	244,300	241,100	0,651	1,310	0,850	1,670	1,94	248,0	0,847	1,492	1,023	
Zona de pré-queima		300	489,800	485,200	478,700	0,939	1,340	2,630	3,830	1,06	500,0	2,040	2,960	1,019	
		200	490,300	486,500	479,100	0,775	1,521	1,060	2,050	1,88	494,0	0,749	1,518	1,027	
		100	491,100	487,500	480,000	0,733	1,538	0,840	1,770	2,12	494,0	0,587	1,316	1,033	

Inicialmente, a partir dos resultados apresentados na Tabela 5, constata-se que todos os cenários avaliados se encontram na faixa assintótica de convergência, caracterizada por $\chi \cong 1$. A única exceção é observada nos dados da pelota na zona de secagem, onde os resultados de temperatura para as malhas finas e médias, nos cenários com N_y igual a 100 e 200, foram idênticos, resultando em um GCI_{12} de 0,0%. Esse resultado significa que o refinamento da malha nessa secção produz pouca ou nenhuma influência sobre os resultados do modelo.

A avaliação por zona dos demais cenários revela que os menores valores para o GCI_{12} e GCI_{23} foram obtidos para as malhas com $N_y = 100$. Analisando especificamente esses cenários, observa-se um padrão em que o GCI_{12} é sempre inferior ao GCI_{23} . Esse comportamento também é evidenciado pelo erro relativo, e_{12} e e_{23} , indicando que as malhas fina e média, para $N_y = 100$, encontram-se mais próximas da convergência do modelo.

Ao comparar os dados de temperatura resultantes do modelo para os casos f_1 e f_2 com os valores extrapolados (f_{ext}), através do erro extrapolado (e_{ext}), verifica-se que a malha fina apresentou os resultados mais próximos da extrapolação em todas as zonas. Estas observações convergem para a conclusão de que a malha adequada, de acordo com o método GCI, para o modelo do forno de GM é a malha fina ($N_x = 2.400$) com N_y igual a 100, que totaliza 240.000 elementos.

4.4. Validação do modelo

Definida a malha ótima para o modelo do sistema de GM como sendo 100x240.000, uma nova otimização foi executada. A otimização do modelo foi conduzida em um computador pessoal com processador Intel Core i7-1165G7 de 11ª geração e 2.80GHz. A convergência do sistema foi alcançada após 13h11m22,41s, com um total de 49 iterações, e a função objetivo atingiu o resultado de $6,5 \times 10^{-7}$.

As temperaturas do leito obtidas pelo modelo desenvolvido foram comparadas aos dados experimentais provenientes de uma planta industrial, conforme descrito no item 4.2, através do RMSE. Os resultados são apresentados na Figura 14, onde a temperatura da pelota foi analisada sob duas referências. A primeira refere-se à média de todos os elementos que compõem a altura do leito, enquanto a segunda considera apenas a média da seção superior (54% dos elementos). Estas condições foram adotadas devido à

incerteza quanto à profundidade exata do datapac no leito e à possibilidade de o sensor não ter permanecido na mesma posição ao longo de toda a grelha.

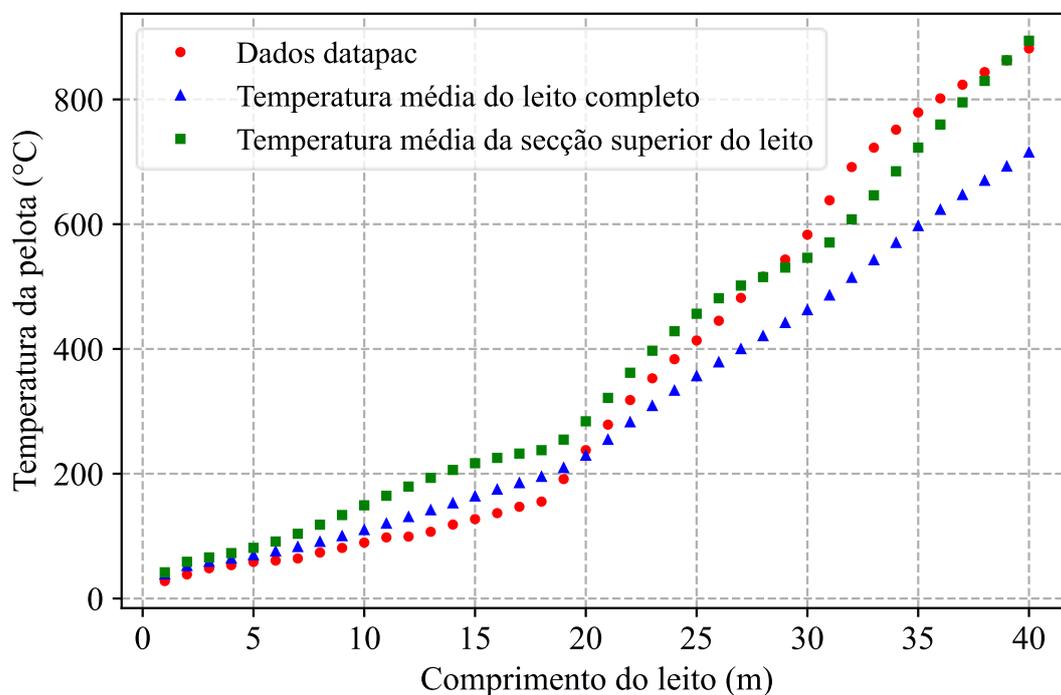


Figura 14. Perfis de temperatura da pelota para o sistema de GM obtidos pelo modelo comparados aos dados experimentais do datapac.

Observa-se, através do gráfico, que a partir do comprimento de 20 metros, os resultados da secção superior do leito acompanham perfeitamente os dados experimentais. Especialmente na zona de secagem, o perfil médio do leito completo apresentou uma maior proximidade aos dados do sensor. Esse comportamento pode ser atribuído a diversos fatores, como o deslocamento do sensor datapac para a superfície do leito durante a transição entre a zona de secagem e pré-queima 1, ou a aspectos fenomenológicos relacionado ao mecanismo de secagem com três etapas adotado.

Os perfis de temperatura avaliados em função do comprimento do leito da GM encontram-se na Tabela 6, juntamente ao erro quadrático utilizado para o cálculo do RMSE. Com base nesses resultados, calculou-se o RMSE normalizado em relação à amplitude dos dados experimentais de temperatura. Para a primeira referência do modelo, que considera a média de todos os elementos do leito, obteve-se um RMSE normalizado de 11,28%, enquanto para a secção superior o desvio foi de 6,30%.

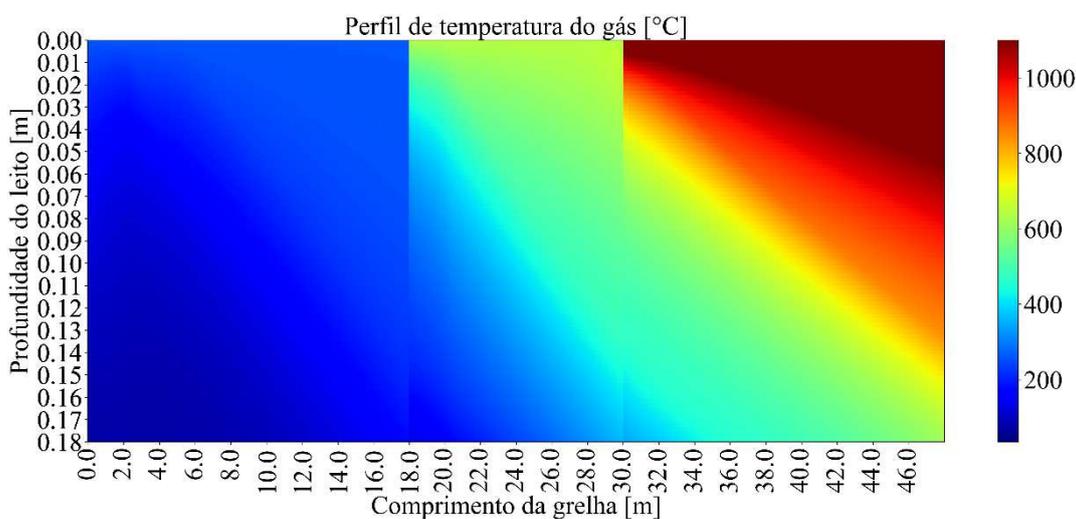
Tabela 6. Perfis de temperatura da pelota e erros quadráticos em função do comprimento do leito.

Comprimento do leito (m)	Perfis de temperatura da pelota (°C)			Erro quadrático (°C ²)	
	Datapac (experimental)	Média do leito completo	Média superior	Média do leito completo	Média superior
1	28,00	38,50	42,03	110,30	196,90
2	38,59	52,07	58,85	181,92	410,49
3	48,43	58,76	65,88	106,90	304,53
4	53,49	64,03	72,78	111,20	372,34
5	58,70	69,45	81,26	115,51	508,83
6	60,85	75,42	91,34	212,29	929,40
7	64,21	82,55	103,80	336,17	1567,20
8	73,67	90,82	118,34	293,84	1995,27
9	81,07	99,94	133,80	356,24	2780,69
10	89,61	109,72	149,37	404,46	3571,43
11	97,93	119,98	164,68	486,30	4456,00
12	99,24	130,59	179,43	982,88	6430,44
13	106,99	141,47	193,42	1188,98	7469,96
14	118,47	152,53	206,15	1159,91	7688,22
15	127,28	163,60	216,87	1318,86	8026,44
16	136,85	174,44	225,44	1413,03	7849,04
17	147,05	184,94	232,30	1435,82	7266,95
18	155,38	195,01	237,79	1570,12	6790,62
19	191,44	209,24	254,70	316,77	4000,99
20	237,82	228,96	284,05	78,51	2137,19
21	278,66	254,35	321,58	590,65	1842,76
22	318,14	282,46	361,89	1272,66	1914,79
23	352,98	308,56	397,19	1972,82	1954,51
24	383,62	333,11	428,48	2551,49	2012,80
25	413,69	356,36	456,43	3287,19	1826,84
26	445,21	378,52	481,32	4446,48	1304,21
27	481,85	399,78	501,63	6735,21	391,15
28	515,89	420,52	515,23	9094,49	0,43
29	543,35	441,64	530,46	10345,78	166,10
30	583,17	462,21	546,14	14630,31	1370,78
31	638,29	485,73	570,65	23273,68	4574,65
32	691,60	514,03	607,81	31531,30	7020,72
33	722,67	542,19	646,29	32571,94	5832,68
34	751,51	569,95	684,84	32964,69	4444,20
35	779,13	596,98	722,74	33178,38	3179,45
36	801,63	623,02	759,72	31904,32	1756,57
37	823,58	646,77	795,34	31260,50	797,46
38	843,80	669,60	829,68	30343,85	199,26
39	862,69	692,32	862,71	29024,87	0,00
40	881,60	714,74	894,10	27839,62	156,45

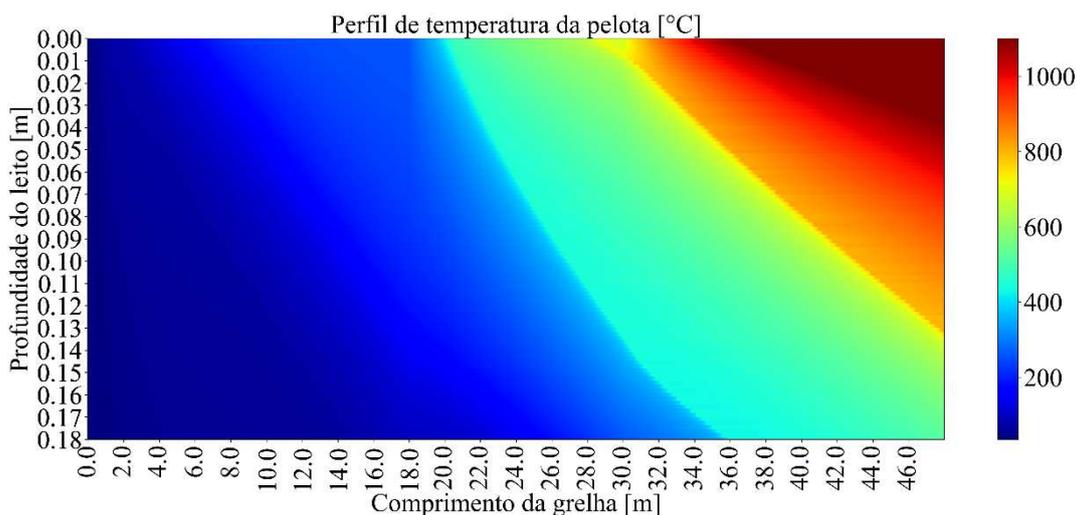
Os resultados obtidos demonstram acurácia do modelo em prever o perfil de temperatura do leito de pelotas para o sistema de GM. Além disso, é possível indicar que o datapact encontrava-se na secção superior do leito. Contudo, é importante ressaltar que a validação representou um grande desafio no desenvolvimento do modelo, uma vez que poucos parâmetros do sistema durante a execução do experimento eram conhecidos, sendo eles a velocidade da grelha, profundidade do leito, vazão de gás natural, temperatura inicial da pelota e as temperaturas médias de entrada e saída do ar em cada zona. As demais informações requeridas pelo modelo foram obtidas através da literatura ou de dados médios do processo, como a composição da pelota e do gás, e as pressões de cada estágio do sistema. No entanto, devido às incertezas associadas à definição dessas variáveis, elas não foram avaliadas no presente trabalho.

4.5. Perfis de temperatura

A Figura 15 exibe os perfis de temperatura do gás e da pelota ao longo do leito no cenário de validação. Observa-se a variação das temperaturas do ar em cada zona, na secagem de 260 para 97,92°C, na PH1 de 643 para 240,31°C e na PH2 de 1249,3 para 479,97°C. Da mesma forma, observa-se o aumento gradativo da temperatura da pelota ao longo da grelha, partindo de 28,6°C e atingindo médias de 195,01°C, 462,21°C e 881,05°C na saída de cada zona, respectivamente. A temperatura máxima da pelota no modelo foi de 1.235,76°C. Conforme previsto, devido ao fluxo de ar descendente e à intensa troca térmica entre o gás e o sólido, as pelotas nas camadas mais profundas do leito apresentaram as temperaturas mais baixas do sistema.



(a)



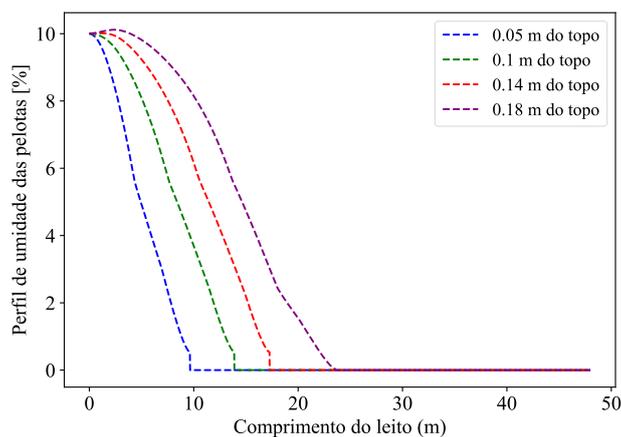
(b)

Figura 15. Perfis de temperatura (a) do gás e (b) da pelota em função do comprimento do leito.

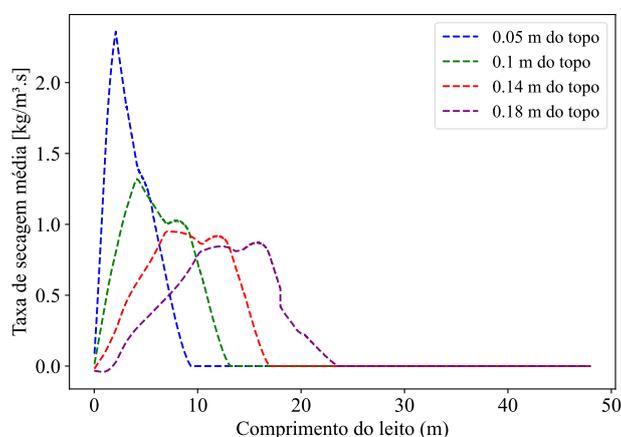
4.6. Perfil de umidade da pelota

A Figura 16a apresenta o perfil de umidade da pelota em quatro diferentes níveis de profundidade do leito, onde as pelotas verdes são introduzidas no processo com um conteúdo de umidade de 10 wt.%. Os resultados indicam que a frente de evaporação segue o mesmo sentido do fluxo de gás, ou seja, descendente. O aumento sutil da umidade nas camadas mais profundas do leito, também foi observado por Küçükada et al., (1994) e Barati, (2008), sugere a ocorrência do fenômeno de recondensação. Neste fenômeno, o gás atinge a saturação, resultando na condensação de parte do vapor d'água. Este fenômeno é evidenciado na Figura 16b, na área onde a taxa de secagem apresenta valores negativos. A recondensação diminui conforme as pelotas das secções mais profundas secam.

O comportamento da taxa de secagem reflete a ação das três etapas do mecanismo de secagem envolvidas. Inicialmente, ocorre a evaporação da umidade superficial da pelota com uma velocidade crescente, até que se atinja o conteúdo de umidade crítico. Após isso, há uma diminuição na taxa de secagem, que passa a ser controlada pela transferência de massa, seguindo o modelo de encolhimento de núcleo. Por fim, a transferência de calor se torna o fator limitante, resultando em um decréscimo mais lento da taxa. As pelotas são completamente secas somente na zona de pré-queima 01, após aproximadamente 25 metros ou 9 minutos do processo.



(a)



(b)

Figura 16. Perfil (a) de umidade da pelota e (b) da taxa de secagem média em função do comprimento do leito.

4.7. Qualidade da pelota

A qualidade da pelota foi avaliada com base na resistência à compressão da pelota como uma função da posição no leito, conforme indicado na Figura 17. Observa-se que na seção mais profunda do leito, a resistência à compressão manteve-se no valor inicial, em consonância com o modelo proposto por Pomerleau; Desbiens; Hodouin, (2003) e Pomerleau; Hodouin; Poulin, (2005).

Os resultados demonstram que a etapa de queima, essencial para o desenvolvimento das principais características de resistência, ocorre apenas no forno rotativo. Assim, o processo de GM tem como objetivo apenas conferir à pelota a resistência necessária para suportar a queda e a abrasão dentro do forno rotativo (Copeland; Claremboux; Kawatra, 2019). Recomenda-se que a resistência seja superior a

1,5 kg/pelota para as pelotas cruas úmidas e superior a 5 kg/pelota para a pelota crua seca (Campos; Fonseca, 2010).



Figura 17. Perfil da resistência à compressão da pelota em função do comprimento do leito.

4.8. Análise de parâmetros chave do processo

A temperatura da pelota está diretamente relacionada à resistência à compressão, por este motivo, foram gerados cenários a partir da variação da velocidade da grelha, altura do leito, diâmetro médio da pelota, fração de vazios do leito e composição da pelota. Para uma análise mais acurada, o perfil de temperatura e a qualidade média da pelota foram avaliados para o leito completo e em quatro secções igualmente espaçadas, sendo a secção 1 entre 0,0 e 0,045 m do topo do leito, a secção 2 entre 0,045 e 0,09 m; a secção 3 para 0,09 a 0,135 m; e a secção 4 com 0,135 a 0,180 m.

4.8.1. Variação da velocidade da grelha

O efeito da variação da velocidade da grelha foi avaliado em quatro condições, de 0,03 a 0,07 m/s, como uma função do perfil de temperatura da pelota e da resistência à compressão. A análise dos perfis de temperatura, mostrada na Figura 18, em diferentes profundidades sugere uma relação aproximadamente linear entre as variáveis, especialmente nas zonas de pré-queima, a partir de 20 metros do comprimento do leito. Comparando a temperatura final média da pelota no caso base (0,047 m/s) com os demais cenários, apresentados na Tabela 7, observa-se um aumento de 16,09% quando a velocidade é reduzida para 0,03 m/s e um decréscimo na temperatura de 11,80% e 21,49%

para as velocidades de 0,06 m/s e 0,07 m/s, respectivamente, o que demonstra uma relação quase proporcional entre os cenários.

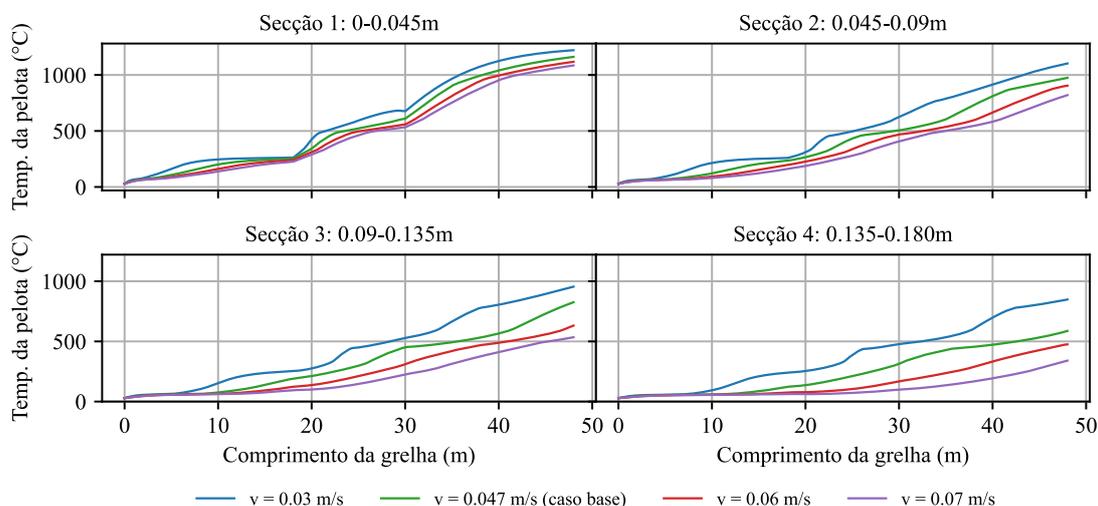


Figura 18. Efeito da velocidade da grelha sobre o perfil de temperatura da pelota.

Os resultados para a resistência à compressão final média da pelota em função da velocidade da grelha são apresentados na Figura 19. Na comparação com o caso base, constata-se que a redução da velocidade da grelha em 0,017 m/s promove um aumento significativo, de 25,31%, na qualidade da pelota. Por outro lado, os cenários com a grelha mais veloz obtiveram pelotas com resistências inferiores ao caso base, com redução de 6,34% e 8,94%, respectivamente.

Tabela 7. Variação da velocidade da grelha sobre a temperatura e resistência à compressão final média da pelota.

Velocidade da grelha (m/s)	0,03	0,047 (caso base)	0,06	0,07
Temperatura final média (°C)	1.033,60	890,33	785,26	698,97
Resistência à compressão final média (kg/pelota)	31,83	25,40	23,79	23,13

A forte influência da velocidade pode ser explicada pelo tempo de residência das pelotas no forno GM. Quanto menor a velocidade, maior será o tempo de residência, que resultará em um maior período de interação térmica entre o gás e o sólido em cada zona

do forno que, por sua vez, ocasionará em um aumento do perfil de temperatura (Figura 18) e, conseqüentemente, da resistência à compressão da pelota (Figura 19).

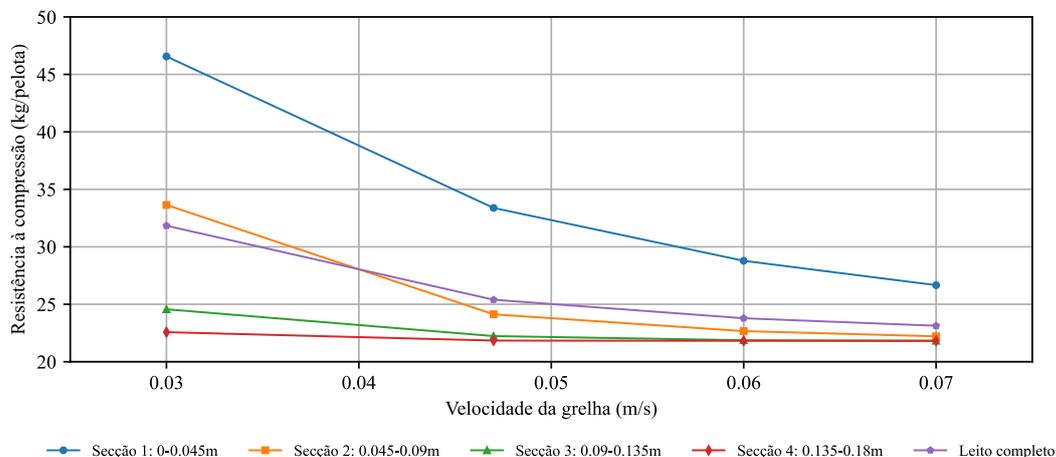


Figura 19. Efeito da velocidade da grelha sobre a resistência à compressão.

4.8.2. Variação da altura do leito de pelotas

A análise do impacto da altura do leito de pelotas foi realizada para profundidades de 0,16 m, 0,18 m (caso base), 0,20 m e 0,24 m, como ilustrado na Figura 20.

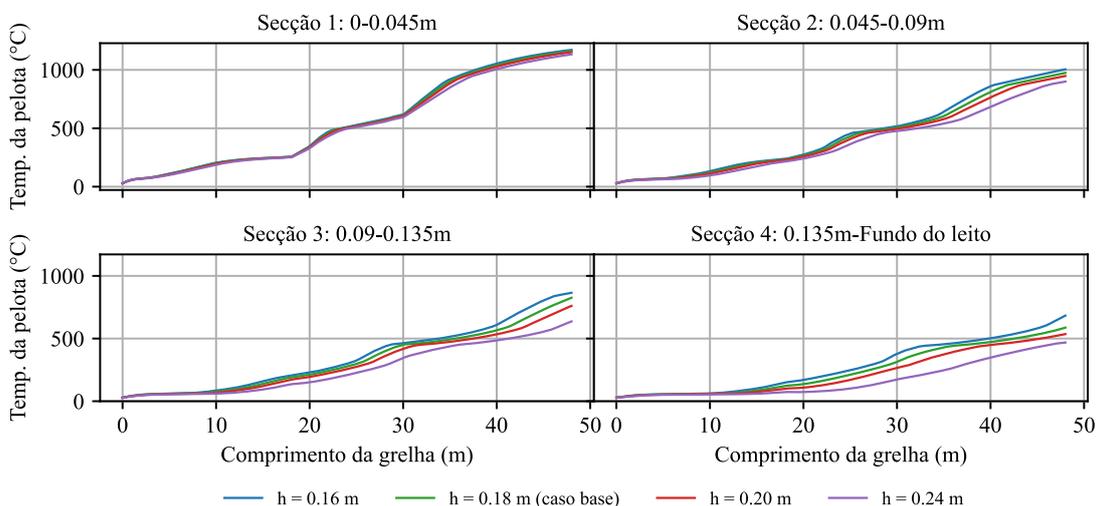


Figura 20. Efeito da altura do leito sobre o perfil de temperatura da pelota.

A diminuição de 2 cm na altura do leito, conforme indicado na Tabela 8, resultou em um aumento de 4,81% na temperatura final média da pelota. Por outro lado, incrementos de 2 cm e 6 cm na altura do leito levaram a reduções de 4,26% e 11,52%,

respectivamente. Esses resultados indicam que mudanças na altura do leito, nas magnitudes avaliadas, promovem um efeito moderado sobre o perfil de temperatura da pelota.

Tabela 8. Variação da altura do leito sobre a temperatura e resistência à compressão final média da pelota.

Altura do leito de pelotas (m)	0,16	0,18 (caso base)	0,20	0,24
Temperatura final média (°C)	933,16	890,33	852,39	787,78
Resistência à compressão final média (kg/pelota)	25,83	25,40	25,07	24,59

Os cenários avaliados para a resistência à compressão final média da pelota são apresentados na Figura 21 e resumidos na Tabela 8. Através do gráfico, observa-se que os efeitos da altura do leito apresentaram efeitos ainda menos expressivos em comparação aos da temperatura, sobretudo nas camadas mais profundas do leito, onde foram registradas poucas ou nenhuma alteração. Em relação ao caso base, constatou-se uma variação positiva de 1,69% para a altura de 0,16 m, e variações negativas de 1,30% e 3,19% para as alturas de 0,20 e 0,24 m, respectivamente.

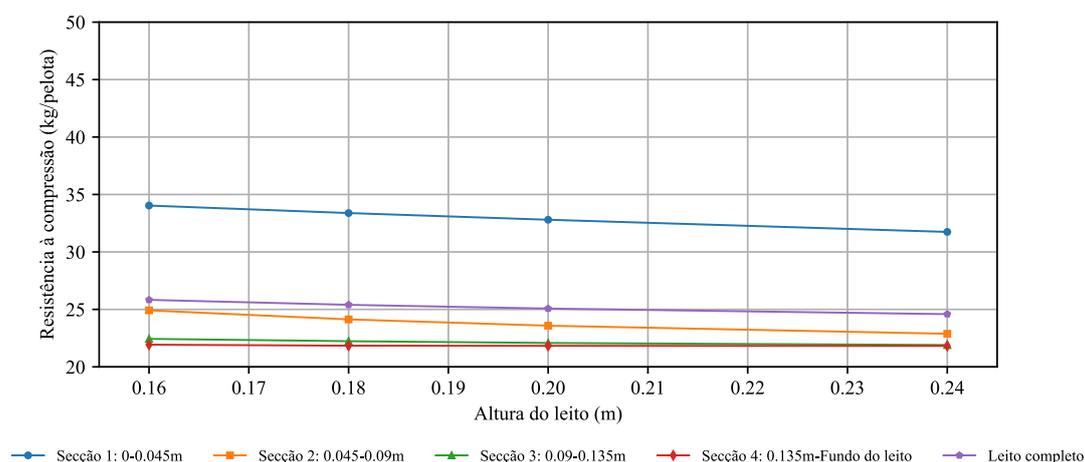


Figura 21. Efeito da altura do leito sobre a resistência à compressão.

Os resultados indicam que um leito mais alto corresponde a uma maior quantidade de material, o que reduz a quantidade de energia por massa disponível para a troca térmica, resultando em pelotas com temperaturas mais baixas. No entanto, alterações de

2 e 6 cm na altura do leito não foram suficientes para provocar alterações significativas nas variáveis analisadas. Isso sugere que o leito pode ser aumentado em pelo menos 6 cm – o que corresponde a um aumento de 33,3% na produção – sem comprometer a qualidade da pelota.

4.8.3. Variação do diâmetro médio da pelota

O diâmetro médio da pelota foi avaliado em quatro condições, sendo 0,06 m, 0,013 m (caso base), 0,020 m e 0,027 m. A avaliação do perfil de temperatura do leito é apresentada na Figura 22 e os resultados médios finais são listados na Tabela 9. A redução da pelota em 7,0 mm promoveu um aumento na temperatura de 6,54%; o aumento do diâmetro na mesma proporção resultou em uma redução de 8,25%, enquanto um acréscimo de 14 mm proporcionou uma queda de 18,41% na temperatura final média.

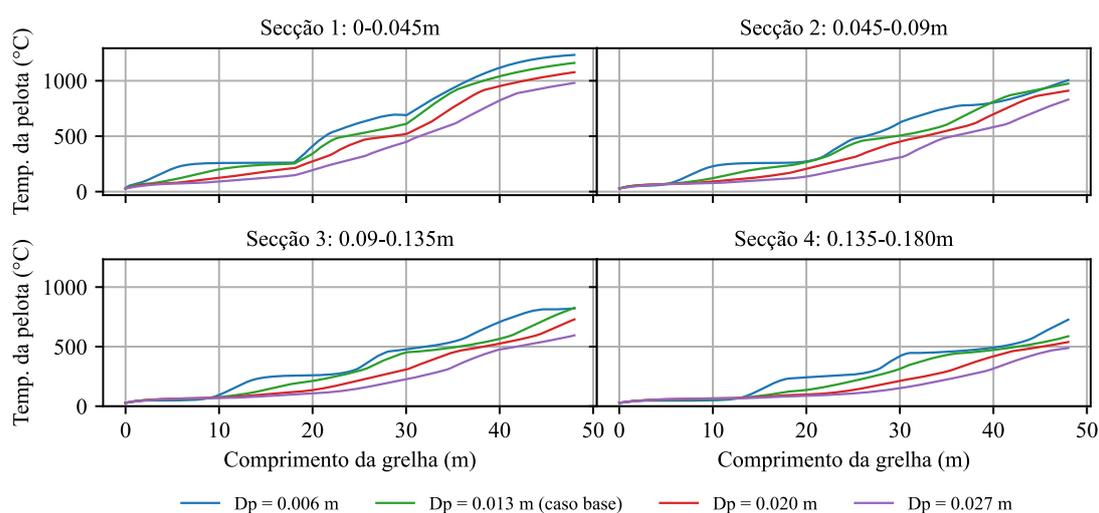


Figura 22. Efeito do diâmetro médio da pelota sobre o perfil de temperatura da pelota.

A análise conduzida para a resistência à compressão média da pelota, indicada na Figura 23, indica que tanto a redução quanto o aumento de 53,8% (7 mm) no diâmetro resultaram em variações semelhantes: um aumento de 7,01% e uma redução de 6,65%, respectivamente. Além disso, ao dobrar essa diferença no diâmetro da pelota (14 mm), observou-se uma diminuição de 11,26% na mesma variável.

Os resultados sugerem que o aumento do diâmetro da pelota afeta significativamente a transferência de calor no sistema, uma vez que o diâmetro está diretamente ligado às taxas de reação no leito. Especificamente, a redução do diâmetro da pelota melhora a eficiência das reações, resultando em uma menor temperatura na zona

de secagem, onde predominam reações endotérmicas, e um aumento de temperatura nas zonas PH1 e PH2, onde ocorrem reações exotérmicas. Esse fenômeno é particularmente evidente nas camadas mais profundas do leito, como mostrado na Figura 22. Em termos gerais, a redução do diâmetro médio das pelotas contribui para o aumento da temperatura final do perfil do leito e, conseqüentemente, para o incremento da resistência à compressão das pelotas.

Tabela 9. Variação do diâmetro médio da pelota sobre a temperatura e resistência à compressão final média da pelota.

Diâmetro médio da pelota (m)	0,006	0,013 (caso base)	0,020	0,027
Temperatura final média (°C)	948,57	890,33	816,82	726,41
Resistência à compressão final média (kg/pelota)	27,18	25,40	23,71	22,54

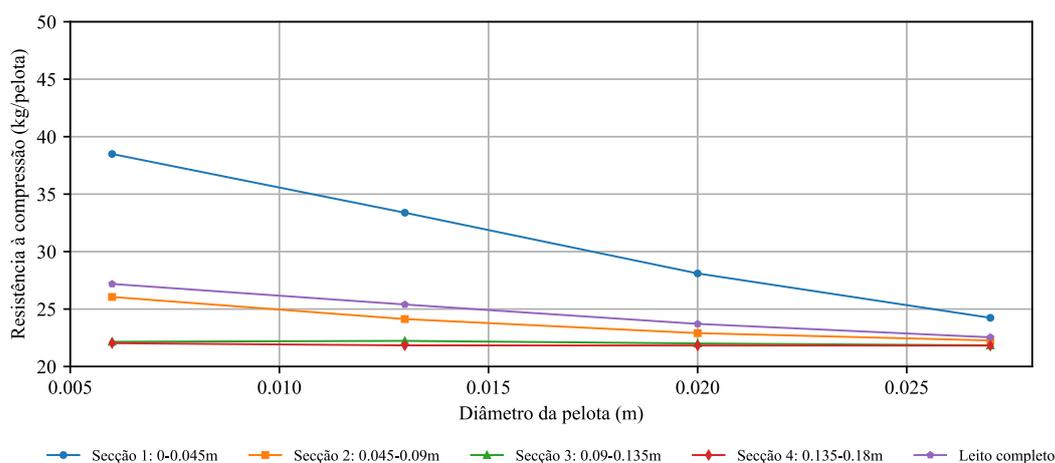


Figura 23. Efeito do diâmetro médio da pelota sobre a resistência à compressão.

A redução do diâmetro da pelota também resulta em reações mais rápidas, permitindo que o calor seja absorvido ou liberado mais rapidamente no leito. Esse comportamento pode ser observado no gráfico da seção 2 na Figura 22, onde a redução do diâmetro da pelota para 6 mm resultou no término das reações exotérmicas em aproximadamente 39 metros do comprimento do leito. A partir desse ponto, a transferência de calor ocorreu predominantemente por convecção forçada, o que resultou em uma diminuição do perfil de temperatura nessa seção. Esse fenômeno não foi observado nas camadas mais profundas, onde as reações exotérmicas se prolongaram ao

longo de todo o leito. Por outro lado, na camada superior, embora as reações exotérmicas tenham sido finalizadas no início da zona de pré-queima 2, a temperatura mais alta do gás nessa região compensou a queda de temperatura nessa faixa.

4.8.4. Variação da fração de vazios do leito

A fração de vazios do leito foi avaliada no intervalo entre 0,37 e 0,42, como ilustrado na Figura 24 para o perfil de temperatura da pelota. Verificou-se que as variações foram mínimas em todas as secções do leito. Em relação à resistência à compressão média final, apresentada na Figura 25, observou-se um comportamento semelhante, com pequenas variações, perceptíveis apenas nas camadas superiores.

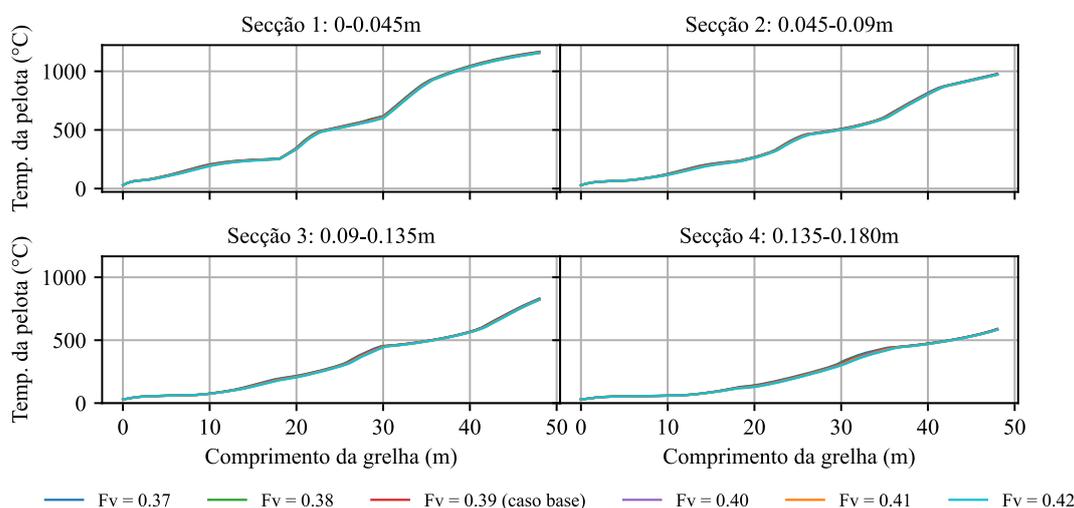


Figura 24. Efeito da fração de vazios do leito sobre o perfil de temperatura da pelota.

Os valores referentes à temperatura e à resistência à compressão final média das pelotas foram quantificados na Tabela 10. Comparando-se com o caso base, as variações para ambas as variáveis analisadas foram inferiores a 1,0% em todos os cenários, oscilando entre 0,5% positivo e negativo.

Os resultados sugerem que a diminuição da fração de vazios está associada a uma menor permeabilidade do meio, o que resulta em uma troca térmica mais eficiente entre o gás e as pelotas. Consequentemente, o leito de pelotas atinge temperaturas mais elevadas, melhorando a qualidade, especialmente na parte superior do leito, onde as temperaturas são mais altas.

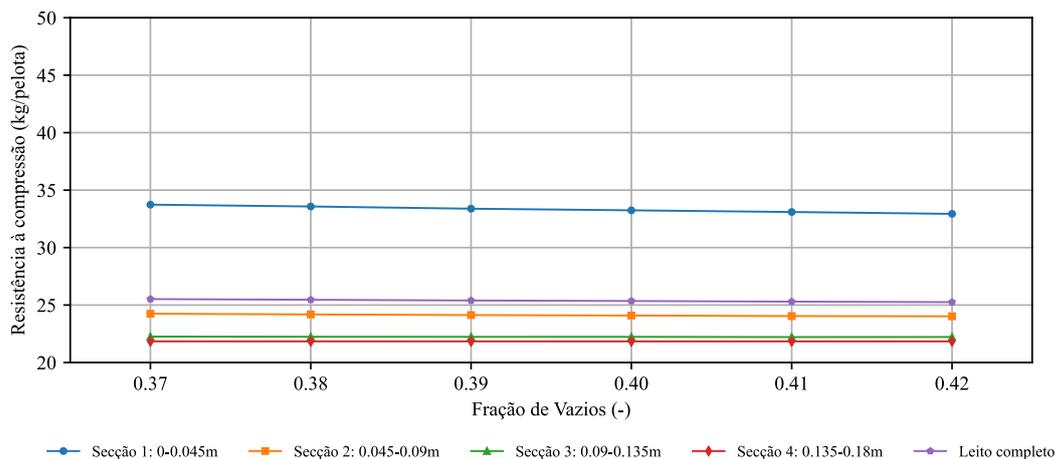


Figura 25. Efeito da fração de vazios do leito sobre a resistência à compressão.

Tabela 10. Variação da fração de vazios do leito sobre a temperatura e resistência à compressão final média da pelota.

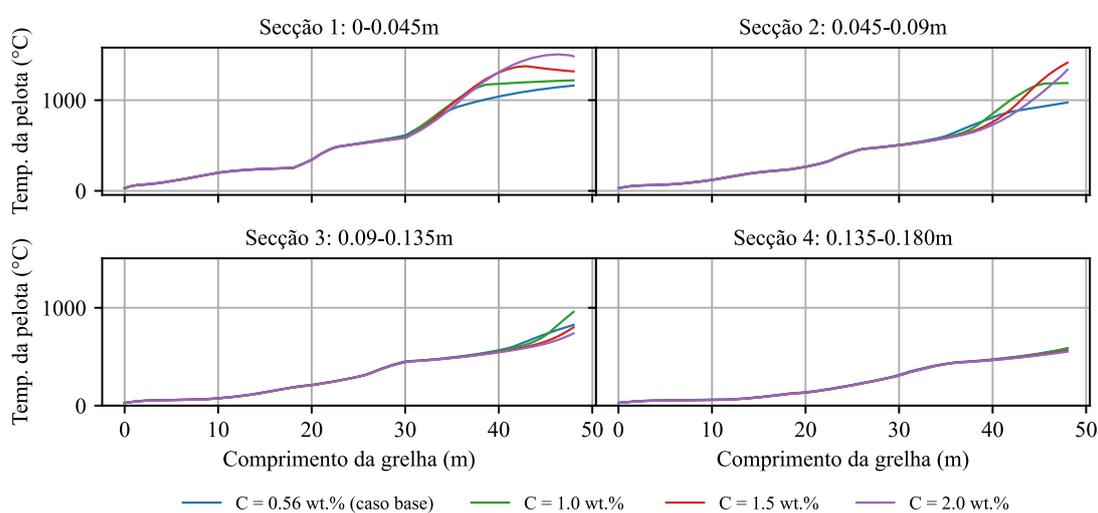
Fração de vazios do leito	0,37	0,38	0,39 (caso base)	0,40	0,41	0,42
Temperatura final média (°C)	894,84	892,27	890,33	888,75	886,22	885,37
Resistência à compressão final média (kg/pelota)	25,52	25,46	25,40	25,35	25,30	25,26

4.8.5. Variação da composição da pelota

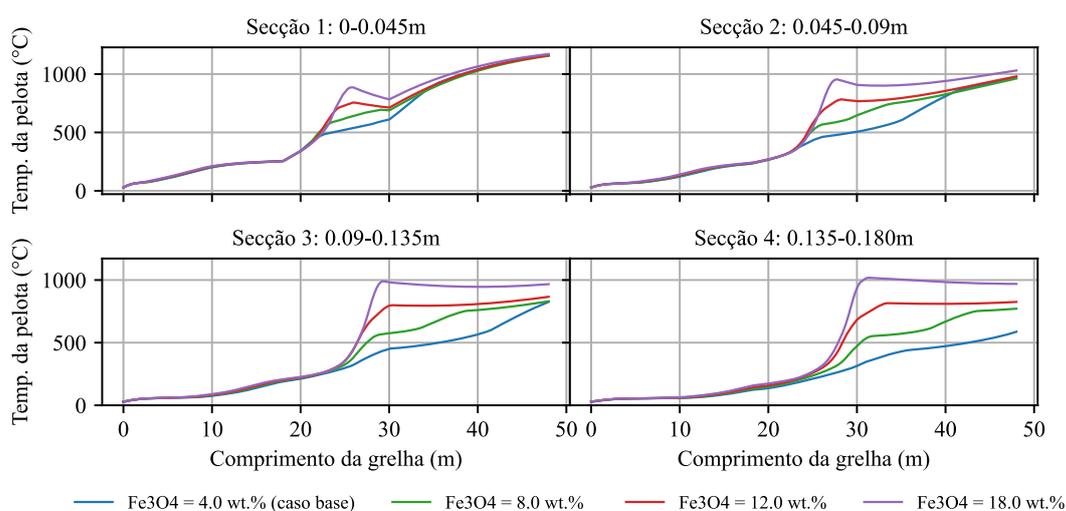
Na avaliação da composição das pelotas, foram analisados cenários a variação de coke entre 0,56% (caso base) e 2,0%, e de magnetita entre 4,0% (caso base) e 18,0%. Os perfis de temperatura são apresentados na Figura 26, enquanto os resultados para a resistência à compressão encontram-se na Figura 27. Com base nesses gráficos da Figura 26, é possível identificar o ponto de início dessas reações no leito, no qual a oxidação da magnetita inicia em temperaturas mais baixas e ocorre principalmente na zona PH1 (comprimento da grelha entre 18 e 30m), enquanto a combustão do *coke* acontece quase exclusivamente na zona PH2 (comprimento >30m).

De acordo com os gráficos da Figura 26, verifica-se que o aumento da temperatura na zona de PH1 (Figura 26b), causado pela reação de oxidação da magnetita, produz um impacto limitado na temperatura de saída da pelota, especialmente nas secções 1 e 2. O oposto é observado na PH2 (Figura 26a), onde a combustão do *coke* provoca um aumento

considerável da temperatura. Esse comportamento também foi descrito por Feng et al., (2010), contudo, é importante ressaltar que essas variações são atenuadas em relação à temperatura média final do leito.



(a)

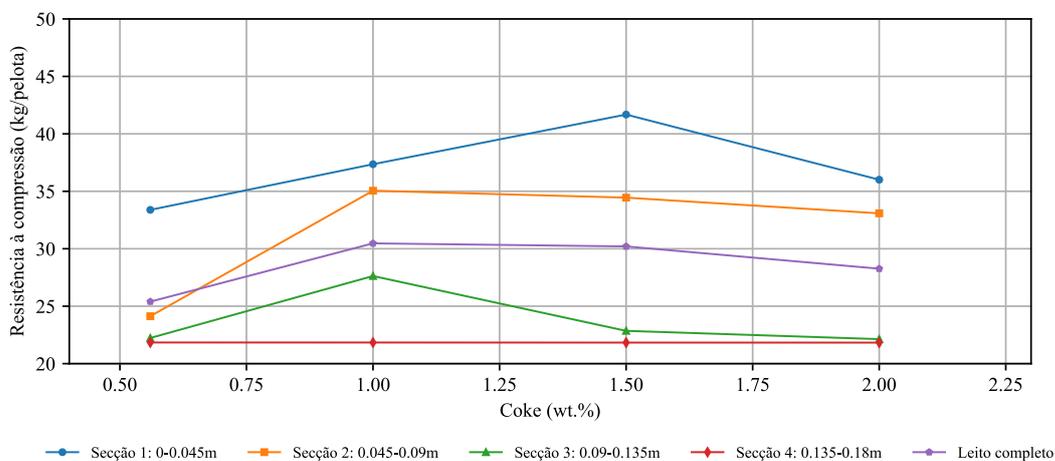


(b)

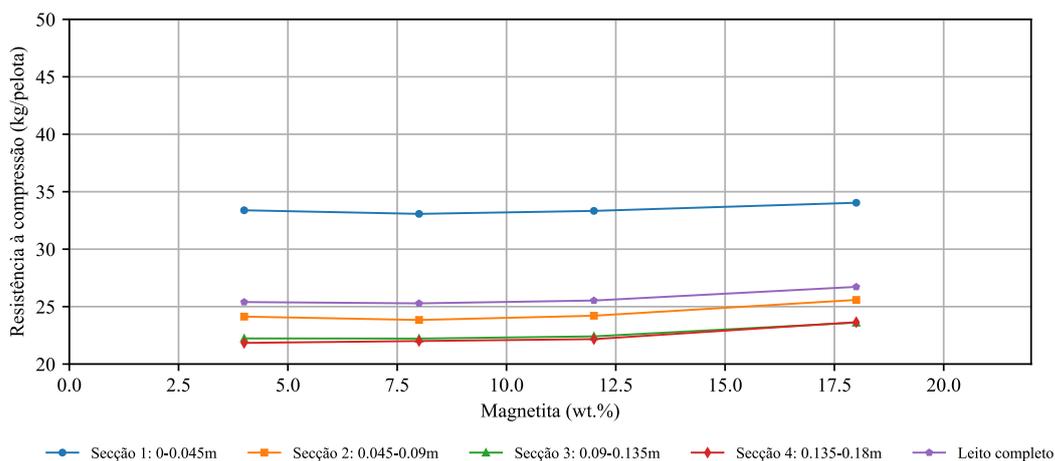
Figura 26. Efeito da composição (a) do *coke* e (b) da magnetita sobre o perfil de temperatura da pelota.

Através dos dados da Tabela 11, ao dobrar a composição do *coke*, de 1,0% para 2,0%, obtém-se um aumento de 3,83% na temperatura final média das pelotas e uma redução de 7,25% na resistência à compressão. A elevação da concentração de magnetita na mesma proporção, de 4,0% para 8,0%, resulta em variações de 4,69% e 0,47% para as mesmas variáveis, respectivamente. Embora a variação percentual da temperatura média seja maior para a magnetita, as magnitudes dos resultados são diferentes. A temperatura

para a magnetita variou de 890,32°C para 932,05°C, enquanto para o *coke* a mudança foi de 990,54°C para 1.028,50°C.



(a)



(b)

Figura 27. Efeito da composição (a) do *coke* e (b) da magnetita sobre a resistência à compressão.

Nesse sentido, as elevadas temperaturas observadas nos cenários do *coke* podem levar as pelotas a atingirem ou até ultrapassar a temperatura crítica de vitrificação, de 1.261,85°C (Pomerleau; Hodouin; Poulin, 2005), o que pode resultar na estagnação ou até na diminuição da qualidade da pelota, conforme apontado por Seshadri; Pereira, (1985) e Batterham, (1986). Esse fenômeno é evidenciado na Figura 27a, onde a resistência à compressão máxima é atingida com 1,0% de *coke*. A partir desse ponto, o aumento da concentração de *coke* para 1,5% e 2,0%, resultou em um aumento da temperatura de 3,7% e 3,8%, porém o efeito contrário foi observado para a qualidade da pelota, que diminuiu em 0,87% e 7,25%, respectivamente.

Tabela 11. Variação da composição do *coke* e da magnetita sobre a temperatura e resistência à compressão final média da pelota.

Composição do coke (%)	0,56 (caso base)	1,0	1,5	2,0
Temperatura final média (°C)	890,33	990,54	1.027,21	1.028,50
Resistência à compressão final média (kg/pelota)	25,40	30,47	30,20	28,26
Composição da magnetita (%)	4,0 (caso base)	8,0	12,0	18,0
Temperatura final média (°C)	890,33	932,05	960,04	1.035,95
Resistência à compressão final média (kg/pelota)	25,40	25,28	25,53	26,72

Com base nos cenários avaliados, sugere-se que o teor de *coke* nas pelotas seja fixado em 1,0%, visto que concentrações superiores tendem a reduzir a qualidade do produto final. Portanto, destaca-se a relevância de monitorar a qualidade das pelotas de forma preditiva durante o processo. Essa abordagem permite avaliar a viabilidade de diferentes cenários operacionais e identificar fenômenos que, geralmente, não são perceptíveis na operação convencional de uma planta em escala industrial.

Capítulo 5

Conclusões e Trabalhos futuros

5.1. Conclusões

O modelo fenomenológico detalhado para o sistema de Grelha-Móvel foi implementado em uma planta industrial na América do Sul. Este modelo levou em conta a integração térmica do sistema, abrangendo todos os fenômenos de transporte e reações envolvidas. As análises preliminares desse modelo foram publicadas no *Journal of Materials Research and Technology*, em 2024, através do artigo intitulado como “*Rigorous modeling of the Traveling Grate stage in the iron ore pellet induration process*”, disponível no Apêndice 1.

A comparação entre os balanços de energia disponíveis na literatura indicou que o equacionamento proposto por Barati, (2008) e Tan; Peng; Shi, (2016) obteve uma maior acurácia em relação aos dados operacionais da GM. Além disso, a análise de convergência de malha, conduzida por meio do método *Grid Convergence Index* (GCI), definiu como malha ótima a de 100x2400, com um total de 240.000 elementos.

Os resultados do modelo referentes ao perfil de temperatura da pelota ao longo do leito, quando comparados às condições operacionais típicas de uma planta industrial, demonstraram elevada precisão, resultando em um RMSE normalizado de 6,30%. Os perfis de temperatura e umidade, tanto do gás quanto da pelota, se alinharam com o que é relatado na literatura.

Foram analisados os efeitos da variação de parâmetros-chave do sistema sobre o perfil de temperatura das pelotas e a resistência à compressão em diferentes seções do leito. Observou-se que mudanças na velocidade da grelha, altura do leito de pelotas e no diâmetro médio da pelota, variáveis associadas à taxa de produtividade, influenciam diretamente no perfil de temperatura e na qualidade das pelotas. Essa variação ocorre de forma inversamente proporcional, onde a redução dessas variáveis de sensibilidade produz um aumento da temperatura e da resistência das pelotas. Especificamente: i) o aumento da velocidade da grelha em 30,0%, aproximadamente, provocou uma queda do perfil de 11,8% e de 6,3% na qualidade, enquanto a redução da velocidade na mesma proporção produziu uma elevação de 16,1% e 25,3% nessas variáveis, respectivamente; ii) mudanças de 2 cm, para mais e para menos, na altura do leito resultaram em impactos semelhantes, da ordem de 4,0-5,0% para a temperatura e de 1,0-2,0% na resistência; iii) alterações de 53,8% no diâmetro das pelotas, tanto positivas quanto negativas, resultam na diminuição de 8,3% e 6,7%, e no crescimento de 6,5% e 7,0% no perfil de temperatura e na resistência à compressão da pelota, respectivamente.

Com base nestas análises, é possível estabelecer faixas operacionais específicas para otimizar a qualidade do produto e reduzir o consumo de energia da planta. Alterações na fração de vazios do leito de pelotas apresentaram impactos pouco expressivos nas variáveis avaliadas, com mudanças na ordem de 0,5%. Em relação a composição das pelotas, verificou-se que o aumento da magnetita eleva o perfil de temperatura na PH1, enquanto o aumento do *coke* afeta a PH2. No entanto, esses crescimentos são atenuados na temperatura final média das pelotas, fazendo com que as variações percentuais apresentem resultados semelhantes. A avaliação da composição do *coke*, proporcionou a constatação do fenômeno de vitrificação, no qual as elevadas composições levaram as pelotas a ultrapassarem a temperatura crítica de vitrificação, resultando em uma diminuição da qualidade da pelota.

Os resultados obtidos destacam a relevância da utilização de modelos robustos para aprimorar a compreensão dos fenômenos envolvidos no processo, especialmente aqueles que não são facilmente perceptíveis durante a operação convencional da planta. Além disso, o modelo se mostra uma ferramenta valiosa para a otimização do sistema, permitindo definir faixas operacionais viáveis que atendam às especificações de qualidade do produto, ao mesmo tempo em que minimizam o consumo energético da planta.

5.2. Trabalhos Futuros

Com base na avaliação dos resultados obtidos, novas linhas de pesquisa podem ser exploradas em projetos futuros. Estudos promissores, listados a seguir, podem utilizar esse trabalho como ponto de partida:

- Avaliação do modelo com a implementação do mecanismo de secagem com duas e três etapas frente aos dados operacionais de planta;
- Análise dos efeitos da variação da vazão, pressão e temperatura de entrada do gás e da distribuição da velocidade da grelha;
- Avaliação do *trade-off* entre velocidade da grelha e altura do leito;
- Generalização do código para diferentes formas de configuração da GM;
- Desenvolvimento de uma interface *user-friendly* para o modelo;
- Implementação e acoplamento das demais etapas do sistema GFR, o forno rotativo e o resfriador circular; e
- Avaliação dos impactos ambientais das emissões atmosféricas geradas no processo.

Referências Bibliográficas

- AHRENS, M. EXPANSION AND MODERNIZATION OF AN IRON ORE PELLETIZING PLANT IN NORTHERN SWEDEN. **SME Annual Meeting**, [s. l.], p. 1–8, 2008.
- AMERICAN INSTITUTE OF AERONAUTICS AND ASTRONAUTICS (AIAA). Editorial Policy Statement on Numerical and Experimental Accuracy. **AIAA Journal**, [s. l.], v. 51, n. 1, 2013.
- ANM. **Informe Mineral Trimestral - 1º Trimestre 2024**. Brasília,DF: [s. n.], 2024.
- ANM. **Sumário Mineral Brasileiro - Ferro**. Brasília, DF: [s. n.], 2021.
- AUGUSTO, K.S. **Identificação Automática do Grau de Maturação de Pelotas de Minério de Ferro**. 2012. 1–183 f. Pós-Graduação em Engenharia de Materiais e de Processos Químicos e Metalúrgicos - Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ, 2012.
- BALL D. Agglomeration of Iron Ores. **American Elsevier Pub. Co.**, [s. l.], 1973.
- BARATI, Mansoor. Dynamic simulation of pellet induration process in straight-grate system. **International Journal of Mineral Processing**, [s. l.], v. 89, n. 1–4, p. 30–39, 2008.
- BATTERHAM, R J. Modeling the Development of Strength in Pellets. **Metallurgical Transactions B**, [s. l.], v. 17B, p. 479–485, 1986.
- BORIM, J. C. **Modelagem e Controle de um Processo de Endurecimento de Pelotas de Minério de Ferro**. 2000. - Universidade Federal de Minas Gerais, Minas Gerais, MG, 2000.
- CALDAS, T. D. P. **Análise de Trincas e Coating em Pelotas de Minério de Ferro por Processamento Digital de Imagens**. 2019. 1–77 f. Pós-Graduação em Engenharia de Materiais e de Processos Químicos e Metalúrgicos - Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ, 2019.
- CAMPOS, Antonio Rodrigues de; FONSECA, Vinícius Oliveira. Aglomeração, Parte II: Pelotização. In: LUZ, Adão B. da; SAMPAIO, João Alves; FRANÇA, Silvia Cristina A. (org.). **Tratamento de Minérios**. 5ª ed.ed. Rio de Janeiro - Brasil: [s. n.], 2010. p. 681–750.
- CELIK, I.B. *et al.* Procedure for Estimation and Reporting of Uncertainty Due to Discretization in CFD Applications. **Journal of Fluids Engineering**, [s. l.], v. 130, n. 7, 2008. Disponível em: <https://doi.org/10.1115/1.2960953>.

- CGEE. **Siderurgia no Brasil 2010-2025; subsídios para tomada de decisão**. Brasília, Brasil: Centro de Gestão e Estudos Estratégicos, 2010.
- CONFEDERAÇÃO NACIONAL DE MUNICÍPIOS. Entenda a CFEM (Compensação Financeira pela Exploração de Recursos Minerais). *In: ESTUDOS TÉCNICOS CNM*. [S. l.: s. n.], 2012. v. 5, p. 179–188.
- COPELAND, C. R.; CLAREMBOUX, V.; KAWATRA, S. K. A Comparison of Pellet Quality from Straight-grate and Grate-kiln Furnaces. **Mineral Processing and Extractive Metallurgy Review**, [s. l.], v. 40, n. 3, p. 218–223, 2019.
- CUMMING, M.J.; THURLBY, J.A. Developments in modelling and simulation of iron ore sintering. **Ironmaking and Steelmaking**, [s. l.], v. 17, n. 4, p. 245–254, 1990. Disponível em: Acesso em: 1 set. 2023.
- ERGUN, S. Fluid flow through packed columns. **Chemical Engineering Progress**, [s. l.], v. 48, p. 89–94, 1952.
- FAN, Xiao hui *et al.* Predictive models and operation guidance system for iron ore pellet induration in traveling grate-rotary kiln process. **Computers and Chemical Engineering**, [s. l.], v. 79, p. 80–90, 2015.
- FENG, Jun Xiao *et al.* Drying and preheating processes of iron ore pellets in a traveling grate. **International Journal of Minerals, Metallurgy and Materials**, [s. l.], v. 17, n. 5, p. 535–540, 2010.
- FONSECA, V.O.; CAMPOS, A. R. Aglomeração. *In: TRATAMENTO DE MINÉRIOS*. 6ªED.ed. Rio de Janeiro, RJ: CETEM, 2018. p. 677–724.
- HAAF, Martin. **Thermodynamic process evaluation of a rotary kiln unit at LKAB Kiruna**. 2014. 66 f. - Chalmers University of Technology, Gotemburgo - Suécia, [s. l.], 2014.
- HAMIDI, A A; PAYAB, H. MATHEMATICAL MODEL FOR ENERGY SAVING IN INDURATION OF IRON ORE PELLETS CONTAINING SOLID FUEL. **IJE Transactions B: Applications**, [s. l.], v. 16, n. 3, p. 265–278, 2003. Disponível em: www.SID.ir.
- HASENACK, N.A.; LEBELLE, P.A.M.; KOOY, J.J. Induration process for pellets on a moving stand. **Congress Proceedings Mathematical Process Models in Iron and Steelmaking, Metal Society**, [s. l.], p. 6–16, 1975.
- HOFFMANN, A C; FINKERS, H J. A relation for the void fraction of randomly packed particle beds. **Powder Technology**, [s. l.], v. 82, p. 197–203, 1995.

- ILJANA, Mikko *et al.* Effect of Iron Ore Pellet Size on Metallurgical Properties. **Metals**, [s. l.], v. 12, n. 2, 2022.
- JESUS, E. F. **MODELAGEM E CONTROLE DE UM PROCESSO DE DOSAGEM DE CARVÃO MINERAL E DE UM PROCESSO DE ENDURECIMENTO DE PELOTAS DE MINÉRIO DE FERRO**. 2009. Dissertação de mestrado - Universidade Federal do Espírito Santo (UFES), [s. l.], 2009.
- JESUS, Eduardo Frigini de. **Modelagem e Controle de um Processo de endurecimento de Pelotas de Minério de Ferro**. 2009. 125 f. - Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória - Brasil, [s. l.], 2009.
- KRAFT, D. **A software package for sequential quadratic programming**. Koln, Germany: [s. n.], 1988.
- KÜÇÜKADA, Kurtul *et al.* MODELLING OF A PILOT SCALE IRON ORE PELLET INDURATION FURNACE. **Canadian Metallurgical Quarterly**, [s. l.], v. 33, n. 1, p. 1–12, 1994.
- LUZ, A. B.; LINS, F. A. F. Introdução ao Tratamento de Minérios. *In*: LIVRO DE TRATAMENTO DE MINÉRIOS. 4ª ed.ed. [S. l.: s. n.], 2004. p. 3–16.
- MA, Yingjie *et al.* Improved SQP and SLSQP algorithms for feasible path-based process optimisation. **Computers and Chemical Engineering**, [s. l.], v. 188, 2024.
- MAJUMDER, Sushanta; NATEKAR, Pradeepkumar Vasant; RUNKANA, Venkataramana. Virtual indurator: A tool for simulation of induration of wet iron ore pellets on a moving grate. **Computers and Chemical Engineering**, [s. l.], v. 33, n. 6, p. 1141–1152, 2009.
- MATHEUS, Lucas; SILVA, Magalhães. **INFLUÊNCIA DA QUALIDADE E PROPORÇÃO DE DIFERENTES TIPOS DE BENTONITA NAS PROPRIEDADES DAS PELOTAS CRUAS E QUEIMADAS DE MINÉRIO DE FERRO: ESTADO DA ARTE**. 2021. 1–109 f. Monografia de graduação - Universidade Federal de Ouro Preto (UFOP), Ouro Preto, MG, 2021.
- MEYER, K. **Pelletizing of Iron Ore**. 1ª ed.ed. Düsseldorf, Alemanha: Springer-Verlag Berlin, 1980.
- MOURÃO, J. M. **ASPECTOS CONCEITUAIS RELATIVOS À PELOTIZAÇÃO DE MINÉRIOS DE FERRO**. 2ª ed.ed. [S. l.: s. n.], 2022a.
- MOURÃO, J. M. EVOLUTION AND GROWTH OF IRON ORE PELLETIZING. **4th EMECR - International Conference on Energy and Material Efficiency and CO2 Reduction in the Steel Industry**, [s. l.], p. 274–287, 2022b.

- NIST. **National Institute of Standards and Technology**. [S. l.], 2024.
- PAPANASTASSIOU, D; BITSIANES, G. Mechanisms and Kinetics Underlying the Oxidation of Magnetite in the Induration of Iron Ore Pellets. **Metallurgical Transactions**, [s. l.], v. 4, p. 487–496, 1973.
- PIETSCH, W. **Agglomeration Process: Phenomena, Technologies, Equipment**. [S. l.: s. n.], 2002.
- POMERLEAU, D.; DESBIENS, A.; HODOUIN, D. Optimization of a simulated iron-oxide pellets induration furnace. **11th Mediterranean Conference on Control and Automation**, [s. l.], 2003.
- POMERLEAU, D; HODOUIN, D; POULIN, É. A FIRST PRINCIPLE SIMULATOR OF AN IRON OXIDE PELLET INDURATION FURNACE - AN APPLICATION TO OPTIMAL TUNING. **CANADIAN METALLURGICAL QUARTERLY**, [s. l.], v. 44, n. 4, p. 571–582, 2005.
- POWELL, M.J.D. A Fast Algorithm For Nonlinearly Constrained Optimization Calculations. **Lecture Notes in Mathematics**, [s. l.], v. 630, p. 144–157, 1978.
- RIDER, William *et al.* Robust verification analysis. **Journal of Computational Physics**, [s. l.], v. 307, p. 146–163, 2016.
- ROACHE, P. J. Perspective: A Method for Uniform Reporting of Grid Refinement Studies. **Journal of Fluids Engineering**, [s. l.], v. 116, n. 3, p. 405–413, 1994.
- ROACHE, P.J. **Verification and Validation in Computational Science and Engineering**. 1st ed.ed. Albuquerque, NM, USA: Hermosa Publishers, 1998.
- ROACHE, Patrick J. Verification of Codes and Calculations. **AIAA Journal**, [s. l.], v. 36, n. 5, p. 696–702, 1998.
- ROY, Christopher J. Review of code and solution verification procedures for computational simulation. **Journal of Computational Physics**, [s. l.], v. 205, n. 1, p. 131–156, 2005.
- ROY, Christopher J.; OBERKAMPF, William L. A comprehensive framework for verification, validation, and uncertainty quantification in scientific computing. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, [s. l.], v. 200, n. 25–28, p. 2131–2144, 2011.
- SADRNEZHAAD, S. K.; FERDOWSI, A.; PAYAB, H. Mathematical model for a straight grate iron ore pellet induration process of industrial scale. **Computational Materials Science**, [s. l.], v. 44, n. 2, p. 296–302, 2008.

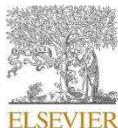
- SAMARCO. **Quem somos.** [S. l.], 2024. Disponível em: <https://www.samarco.com/quem-somos/>. Acesso em: 28 set. 2024.
- SATYADHARMA, Adhika; HARINALDI. The Performance of a Gradient-Based Method to Estimate the Discretization Error in Computational Fluid Dynamics. **Computation**, [s. l.], v. 9, n. 2, p. 10, 2021.
- SCHITTKOWSKI, K. The nonlinear programming method of Wilson, Han, and Powell with an augmented Lagrangian type line search function. **Numerische Mathematik**, [s. l.], v. 38, p. 115–127, 1982.
- SESHADRI, V.; PEREIRA, R. O. D. S. Mathematical simulation of induration of iron ore pellets in pot grate. **4 th International Symposium on Agglomeration**, [s. l.], p. 729–744, 1985.
- SGOURIS, E. E.; OJA, K. G. Pelletizing and pellet quality at Cleveland - Cliffs operation. **Iron and Steel Technology**, [s. l.], v. 5, n. 3, p. 58–66, 2008.
- SHATOKHA, Volodymyr. **Iron Ores and Iron Oxide Materials**. Rijeka: IntechOpen, 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.5772/intechopen.69715>.
- SRB, J.; RUZICKOVÁ, Z. **Pelletization of Fines**. Tchecoslováquia: [s. n.], 1988.
- STJERNBERG, J.; ISAKSSON, O.; ION, J. C. The grate-kiln induration machine - history, advantages, and drawbacks, and outline for the future. **The Journal of The Southern African Institute of Mining and Metallurgy**, [s. l.], v. 115, p. 137–144, 2015a.
- STJERNBERG, J.; ISAKSSON, O.; ION, J. C. The grate-kiln induration machine — history, advantages, and drawbacks, and outline for the future. **The Journal of The Southern African Institute of Mining and Metallurgy**, [s. l.], n. 115, p. 1–8, 2015b.
- TAETS, Leandro Alexandre Ribeiro. **ANÁLISE DA PARTICIPAÇÃO DO GÁS NATURAL NA MATRIZ ENERGÉTICA E A APLICAÇÃO DESSE COMBUSTÍVEL NO PROCESSO DE PELOTIZAÇÃO DE MINÉRIO DE FERRO**. 2014. 164 f. - Universidade Federal de Itajubá, Itajubá - Brasil, [s. l.], 2014.
- TAN, Shuai; PENG, Jun; SHI, Hongbo. Modeling and simulation of iron ore pellet drying and induration process with accurate bed void fraction calculation. **Drying Technology**, [s. l.], v. 34, n. 6, p. 651–664, 2016.
- TESCHNER, T.R. **PyCGS 1.1.1**. [S. l.], 2014.
- THORAT, Tushar *et al.* Modelling of heat transfer in a straight grate pellet induration reactor complemented with plant scale experiments. **Mineral Processing and**

- Extractive Metallurgy: Transactions of the Institute of Mining and Metallurgy**, [s. l.], v. 131, n. 3, p. 283–289, 2022.
- THURLBY, J A. A Dynamic Mathematical Model of the Complete Grate/Kiln Iron-Ore Pellet Induration Process. **Metallurgical Transactions B**, [s. l.], v. 19B, p. 103–112, 1988a.
- THURLBY, J A. Energy Cost Minimization in Grate/Kiln Induration. **Metallurgical Transactions B**, [s. l.], v. 19B, p. 123–132, 1988b.
- THURLBY, J A. Gas Flow and Pressure Balancing in Modeling Grate/Kiln Induration. **Metallurgical Transactions B**, [s. l.], v. 19B, p. 113–121, 1988c.
- THURLBY, J A; BATTERHAM, R J; TURNER, R E. DEVELOPMENT AND VALIDATION OF A MATHEMATICAL MODEL FOR THE MOVING GRATE INDURATION OF IRON ORE PELLETS. **International Journal of Mineral Processing**, [s. l.], v. 6, p. 43–64, 1979.
- TSUKERMAN, T.; DUCHESNE, C.; HODOUIN, D. On the drying rates of individual iron oxide pellets. **International Journal of Mineral Processing**, [s. l.], v. 83, n. 3–4, p. 99–115, 2007.
- VALE S.A. **Espaço Memória**. [s. l.], 2024. Disponível em: <https://vale.com/pt/espaco-memoria>. Acesso em: 28 set. 2024.
- VALLOUREC BRASIL. **Sobre nós**. [s. l.], 2024. Disponível em: <https://brazil.vallourec.com/>. Acesso em: 28 set. 2024.
- VOSKAMP, J H; BRASZ, J. Digital simulation of the steady state behaviour of moving bed processes. **Measurement and Control**, [s. l.], v. 8, p. 23–32, 1975.
- WANG, J. *et al.* Modeling and Simulation of Iron Ore Pellet Drying and Induration Process. **24th Chinese Control and Decision Conference (CCDC)**, [s. l.], p. 183–187, 2012.
- WENDLING, S. S.; NASCIMENTO, R. C.; WENDLING, F. Comparative study of pellets fired in pot grate and grate kiln pilot furnaces. **Minerals and Metallurgical Processing**, [s. l.], v. 34, n. 2, p. 84–90, 2017.
- WYNNYCKYJ, J R; FAHIDY, T Z. Solid State Sintering in the Induration of Iron Ore Pellets. **Metallurgical Transactions**, [s. l.], v. 5, p. 991–1000, 1974.
- WYNNYCLCYJ, J.R.; BATTERHAM, R.J. Iron Ore Sintering and Pellet Induration Process. **4th Int. Symp. on Agglomeration, ISS-AIME**, [s. l.], p. 957–994, 1985.
- YAMAGUCHI, Shinichi *et al.* KOBELCO Pelletizing Process. **KOBELCO TECHNOLOGY REVIEW**, [s. l.], v. 29, p. 58–68, 2010a.

- YAMAGUCHI, Shinichi *et al.* KOBELCO Pelletizing Process. **KOBELCO TECHNOLOGY REVIEW**, [s. l.], v. 29, p. 58–68, 2010b.
- YANG, Gui-ming *et al.* Performance Monitoring for Grate-kiln-cooler Process Based on Quality Prediction and Statistical Analysis. **7th International Symposium on High-Temperature Metallurgical Processing**, [s. l.], p. 377–384, 2016.
- YOUNG, R. W.; CROSS, M.; GIBSON, R, D,. Mathematical model of grate-kiln-cooler process used for induration of iron ore pellets. **Ironmaking and Steelmaking**, [s. l.], v. 1, p. 1–13, 1979.
- ZHOU, Feng *et al.* The Coupling Effect in Drying Section in Traveling Grate: a CFD and Experimental Study. **Mining, Metallurgy and Exploration**, [s. l.], v. 38, n. 2, p. 1239–1246, 2021.

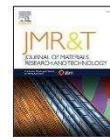
APÊNDICE 1

Artigo publicado na revista “*Journal of
Materials Research and Technology*”



Contents lists available at ScienceDirect

Journal of Materials Research and Technology

journal homepage: www.elsevier.com/locate/jmrt

Rigorous modeling of the Traveling Grate stage in the iron ore pellet induration process

C.B. Cavalcanti^a, G.F.N. Wanderley^a, D. Braga^b, R.P. Brito^a, L.G.S. Vasconcelos^a, K.D. Brito^{a,*}^a Federal University of Campina Grande, Brazil^b Vallourec Smart Tubular Solutions, Brazil

ARTICLE INFO

Keywords:
Mathematical modeling
Traveling grate
Induration process
Iron ore pellets
Pellet quality

ABSTRACT

This work presents a robust phenomenological model for the Traveling Grate system in an iron ore pellet induration plant on an industrial scale. The system consists of a bed of pellets in constant movement, heated by perpendicular air currents. The aim is to integrate into a single model the details of the chemical and physical phenomena that occur in the system, including gas/pellet energy transfer, a three-stage drying mechanism, compressive strength, and kinetic models for coke combustion, magnetite oxidation, and carbonate calcination. The model demonstrated adherence to process data, with a maximum relative deviation of 2.35%. Simulations enabled the assessment of the influence of key parameters on the bed temperature, observing an inversely proportional relationship of the profile for grate velocity, pellet diameter, and bed height. Pellet quality was analyzed under different composition conditions and void fractions, highlighting the significant influence of the coke on compressive strength, limited by the vitrification phenomenon at high temperatures. This model enables critical analysis of phenomena that are difficult to detect in conventional operations and helps in defining operational ranges to optimize product quality and process energy efficiency.

Nomenclature

Acronyms	Description	Unit
DR	Drying Zone	
GKC	Grate-Kiln-Cooler	
TG	Traveling Grate	
SG	Straight Grate	
FDM	Finites Difference Method	
PH1	Pre-heating zone 1	
PH2	Pre-heating zone 2	
Variables		
A	Apparent gas/pellet contact area	m^{-1}
A_0	Arrhenius constant for the pellet quality model	s^{-1}
C_g	Specific gas heat	$kJ.kg^{-1}.K^{-1}$
C_{O_2}	Oxygen concentration in the gas	$kmol.m^{-3}$
$C_{O_2}^e$	Equilibrium oxygen concentration in the gas	$kmol.m^{-3}$
C_p	Specific pellet heat	$kJ.kg^{-1}.K^{-1}$
$D_{O_2}^c$	Oxygen diffusivity through coke	$m^2.s^{-1}$
$D_{O_2}^m$	Oxygen diffusivity through magnetite	$m^2.s^{-1}$
$D_{H_2O}^e$	Effective water diffusivity	$m^2.s^{-1}$
d_p	Pellet diameter	m
E	Activation energy for the pellet quality model	J/mol
G	Mass air flow	$kg.m^{-2}.s^{-1}$

(continued on next column)

(continued)

Acronyms	Description	Unit
h	Convection heat transfer coefficient	$kJ.m^{-2}.s^{-1}.K^{-1}$
i	Index of the i th component in the gas	-
j	Index of the j th component in the pellet	-
k	Index of the k th reaction	-
k_c	First order coke combustion rate	$m.s^{-1}$
k_d	First order dolomite calcination rate	$m.s^{-1}$
k_g	Thermal gas conductivity	$kJ.m^{-1}.s^{-1}.K^{-1}$
k_l	First order limestone calcination rate	$m.s^{-1}$
k_m	First order magnetite oxidation rate	$m.s^{-1}$
k_{O_2}	Oxygen mass transfer coefficient in the gas	$m.s^{-1}$
k_w	Water vapor mass transfer coefficient in the gas	$m.s^{-1}$
m_d	Dolomite concentration	$kg.m^{-3}$
m_l	Limestone concentration	$kg.m^{-3}$
P	Gas pressure	Pa
Pr	Prandtl Number	-
Q	Pellet quality	$kg.k.pellet^{-1}$
Q_f	Final pellet quality	$kg.pellet^{-1}$
R	Ideal gas constant	$J.mol^{-1}.K^{-1}$
r_c	Radius of the unreacted coke core	m

(continued on next page)

* Corresponding author.

E-mail address: karoline.dantas@ufcg.edu.br (K.D. Brito).<https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2024.07.078>

Received 3 April 2024; Received in revised form 18 June 2024; Accepted 14 July 2024

Available online 15 July 2024

2238-7854/© 2024 The Authors. Published by Elsevier B.V. This is an open access article under the CC BY license (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

(continued)

Acronyms	Description	
R_c	Coke combustion reaction rate	$\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{s}^{-1}$
R_d	Dolomite calcination reaction rate	$\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{s}^{-1}$
R_k	Rate of the k th reaction	$\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{s}^{-1}$
R_l	Limestone calcination reaction rate	$\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{s}^{-1}$
r_m	Radius of the unreacted magnetite core	m
R_m	Magnetite oxidation reaction rate	$\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{s}^{-1}$
r_w	Wet core radius in the pellet	m
R_w	Water evaporation/condensation reaction rate	$\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{s}^{-1}$
r_p	Pellet radius	m
Re_p	Pellet Reynolds number	–
$S_{i,j}$	Stoichiometric coefficient of component i or j	–
t	Time	s
T_C	Critical vitrification temperature	K
T_g	Gas temperature	K
T_L	Temperature of appearance of the liquid phase in the pellet flow	K
T_p	Pellet temperature	K
T_w	Wet bulb temperature	K
v_g	Gas velocity	$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
w_i^g	Mass fraction of the i th gas component	–
w_j^p	Mass fraction of the j th pellet component	–
w_g	Moisture content in the gas	$\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$
w_g^e	Moisture content in the gas at equilibrium	$\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$
w_p	Moisture content in the pellet	$\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$
w_{pc}	Critical moisture content in the pellet	$\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$
z	Bed depth	m
ζ	Greek Letters	Unit
β	Pellet quality model coefficients	$\text{kg}\cdot\text{pellet}^{-1}$, K^{-1}
γ	Pellet quality model coefficient	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}$
ΔH_c	Coke combustion reaction enthalpy	$\text{kJ}\cdot\text{kg}^{-1}$
ΔH_d	Dolomite calcination reaction enthalpy	$\text{kJ}\cdot\text{kg}^{-1}$
ΔH_l	Limestone calcination reaction enthalpy	$\text{kJ}\cdot\text{kg}^{-1}$
ΔH_m	Magnetite oxidation reaction enthalpy	$\text{kJ}\cdot\text{kg}^{-1}$
ΔH_w	Water evaporation/condensation reaction enthalpy	$\text{kJ}\cdot\text{kg}^{-1}$
ϵ_b	Pellet bed void fraction	–
κ	Pellet quality model coefficient	$\text{K}\cdot\text{s}^{-1}$
μ_g	Gas viscosity	$\text{kg}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$
\mathcal{P}_g	Gas properties	–
\mathcal{P}_p	Pellet properties	–
ρ_b	Pellet bed sinus density	$\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$
ρ_g	Gas density	$\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$
τ	Tortuosity	–
ν	Pellet quality model coefficient	$\text{kg}\cdot\text{pellet}^{-1}$
Φ	Pellet sphericity	–
ψ	Pellet quality model coefficient	K

1. Introduction

One of the main inputs of the steel industry and essential in steel production are iron ore pellets, which are spherical agglomerates, with high abrasion and mechanical resistance, resulting from the reuse of fines generated in processing operations [1]. A pelletizing plant consists of feed preparation, mixing, balling formation and induration stages [2, 3]. The main types of induration processes are Straight Grate (SG) and Grate-Kiln-Cooler (GKC) [4]. GKC is widely used in the mining industry due to its high production capacity, adaptability to different types of materials and fuels, and production of pellets with higher quality, due to better thermal homogenization, when compared to SG [5–7].

GKC is composed of three processes (Fig. 1): (i) the Traveling Grate, which is responsible for the initial heating of green pellets; (ii) the Rotary Kiln, where pellet induration occurs, that is, the main stage in acquiring mechanical properties; (iii) the Circular Cooler, whose objective is to reduce the pellet temperature to facilitate handling and transport in subsequent stages and reuse the system's energy through air recirculation currents [8]. The Traveling Grate (TG), the object of study in this work (from an industrial plant located in South America), consists of a grate filled with a bed of pellets that moves along three zones. In the drying zone (DR), the pellet moisture content is evaporated; and in the

pre-heating 1 (PH1) and pre-heating 2 (PH2) zones, chemical reactions responsible for giving the pellet sufficient resistance to withstand entry into the Rotary Kiln take place [9].

The TG system is a complex process, in which phenomenological modeling involves simultaneous heat and mass transfers and chemical reactions. In literature, it is considered a non-catalytic gas-solid reactor with a packed and cross-current bed [10]. In this system, heating air currents cross the pellet bed perpendicularly, which moves at constant velocity. The process presents a high degree of thermal integration between the different zones, due to the different heating air recirculation currents. For this reason, it is necessary to use simultaneous resolution methods for systems of partial differential equations [8,10].

Under this challenging context, in 1975, Hasenack et al. [11], Voskamp and Brasz [12] proposed the first insights for the theoretical modeling of the induration process. Young et al. [13] and Thuriy [14–16] developed the pioneering models for the GKC system. Subsequently, important contributions were made [4,5,7,8,10,17–24], with the aim of increasing the accuracy of models and predicting determining variables for the process.

Among the main recent works on the induration process of iron ore pellets, some relevant studies stand out, summarized in Table 1. In the GKC system, Wang et al. [21] were pioneers in developing one of the first models for modern GKC. This model considers the multiple heating and cooling stages, as well as some key reactions in the process. Furthermore, Fan et al. [8] developed a model that addresses the connection between GKC system equipment, also including pellet quality assessment. Regarding the TG system, the work of Barati [20] is an important example. The author presents a detailed phenomenological model, validated with data from a pilot plant, and provides a comprehensive analysis of the main variables involved in the process. Another important study on this system is that of Majunder et al. [10], who developed a user-friendly simulation tool for a more simplified model.

Regarding studies related to the TG system, the presence of some simplifying hypotheses was observed. For example, the work of Feng et al. [25] focuses only on the evaporation of moisture from pellets, adopting a two-step mechanism for this. Thorat et al. [24] developed a model that focuses exclusively on the effects of thermal exchange between pellets and the gas, without considering the reactions involved in the process. Among the studies analyzed, only Barati [20] and Zhou et al. [23] implemented a more complete moisture evaporation mechanism, which has three steps, considering the resistance to mass transfer to the gas, to diffusion through the dry-shell, and to heat transfer.

It is important to highlight that among studies shown in Table 1, Zhou et al. [23] and Feng et al. [25] did not consider other reactions that occur in the process. Among the reactions, dolomite calcination is the one that is most frequently absent in models.

The effects of carbon combustion and carbonate decomposition are indeed crucial to understanding the thermal dynamics of the TG. In the case of carbon-containing pellets, the combustion of added coke releases significant amounts of energy, which allows for an increased height of the pellet bed while still maintaining an optimal thermal profile [20]. This means the system can handle a thicker layer of pellets without compromising the necessary temperature distribution for efficient processing. Additionally, the decomposition of carbonates (such as limestone and dolomite) through calcination reactions impacts the temperature profile by absorbing heat, which can mitigate some of the effects of the combustion and help balance the thermal dynamics of the system.

Considering the gaps and the current scenario in the literature, the main aim of this work was to develop a rigorous phenomenological model for the Traveling Grate system. This model, operating in a pseudo-stationary regime, is distinguished by incorporating an integrated approach that encompasses all relevant physical and chemical phenomena of the system. This includes a three-step moisture evaporation mechanism, that is not typically described in the literature. The model's differential consists of implementing all the reactions that take place in

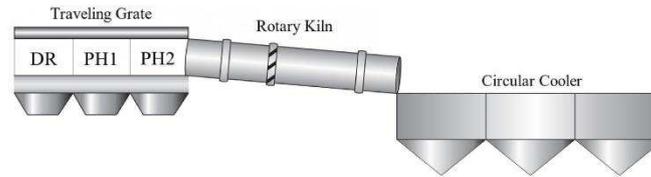


Fig. 1. Schematic illustration of the Grate-Kiln-Cooler process.

Table 1

Comparison between literature works on the induration process of iron ore pellets.

	Barati (2008) ^a	Majumder (2009) ^b	Feng (2010) ^c	Wang (2012) ^d	Fan (2015) ^e	Zhou (2021) ^f	Thorat (2022) ^g	This work (2024)
Process:								
Straight Grate	X	X					X	
Grate-Kiln-Cooler				X	X			
Traveling Grate			X			X		X
Moisture evaporation:								
Two steps		X	X	X	X			
Three steps	X					X		X
Reactions:								
Magnetite oxidation	X			X	X			X
Limestone calcination	X	X		X				X
Dolomite calcination	X							X
Carbon combustion	X	X		X				X
Model analysis:								
Pellet quality prediction					X			X

^a Barati [20].

^b Majumder et al. [10].

^c Feng et al. [25].

^d Wang et al. [21].

^e Fan et al. [8].

^f Zhou et al. [23].

^g Thorat et al. [24].

the pellet bed for a TG process, which are combustion of the coke present in the pellet, oxidation of the magnetite, and calcination of the dolomite and limestone. Furthermore, to fill in the gaps, the model performs a detailed analysis of the quality of the pellets throughout the bed. The exclusive model also addresses the integration of thermal processes between the various phases of the process. The model was validated with data from an industrial-scale plant, configuring itself as a tool that can be applied to operating routines, such as the monitoring of variables not directly measured, supporting decision-making, and determining new points of operation.

2. Process description in the traveling grate kiln

The Traveling Grate (TG), as shown in Fig. 2, is initially fed with green (or raw) pellets, which are distributed on grate carts or metal conveyors with temperatures between 30 and 50 °C [12,15,26] and humidity between 8 and 14% [4,8,10,20–22,25]. The bed moves continuously across the entire grate length. The heat treatment of pellets begins in the drying zone (DR), where the green pellets are exposed to a downward air flow, coming from the pre-heating zone 2 (PH2). At this stage, all free water content of pellets must be vaporized. Furthermore, pellets must resist internal tensions generated by the evaporation of water contained inside and resist the static and dynamic pressures of hot gases.

The still raw but dry pellets are then transferred to the pre-heating stage 1 (PH1), where they are preheated, to ensure longer exposure time to the maximum burning temperature. Heating takes place through a downward hot air flow coming from zone 2 of the Circular Cooler. Pre-heating zone 2 (PH2) plays the role of providing the pellets with the mechanical resistance necessary to withstand falls and abrasion inside the Rotary Kiln. Gas-solid chemical reactions occur along pre-heating

zones 1 and 2, such as coke combustion, magnetite oxidation, and dolomite and limestone calcination [20–22].

Gaseous currents from each TG zone are recirculated from other parts of the process or the system itself. An example is the gas current leaving the PH2 zone, which is recycled at the entrance of the drying zone. This recycling process aims to maximize the use of available energy, thereby improving the energy efficiency of the system. In the recycling current, there is a dust filter process, shown in Fig. 2, whose function is to remove particles present in the gas.

3. Mathematical modeling

According to Fan et al. [8], the Traveling Grate (TG) is where most of the physicochemical phenomena of the induration process occur. In this context, the phenomenological model proposed in the present work

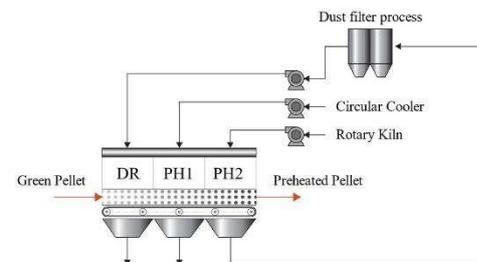


Fig. 2. Schematic illustration of the Traveling Grate process.

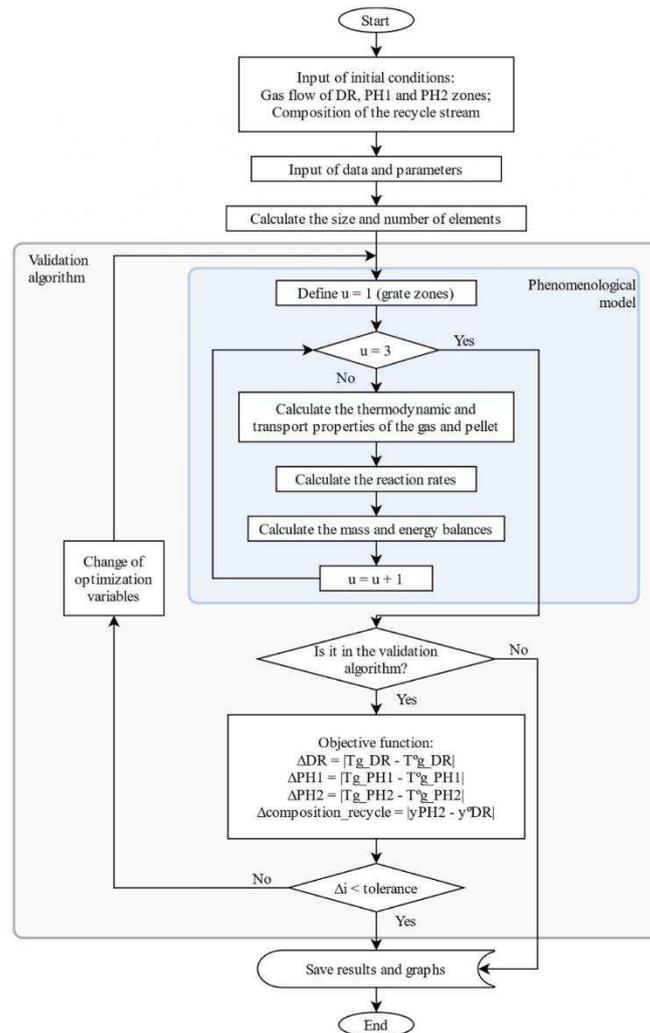


Fig. 3. Flowchart of the computational model for the Traveling Gate system.

aimed to bring together the highest level of robustness and mathematical detail that has so far developed in the literature for this process.

The following premises were established for the development of the rigorous TG mathematical model:

- The process occurs in a pseudo-steady state;
- The temperature gradient inside the pellet is negligible;
- The gas flow is uniform and one-dimensional in each zone;
- Heat transfer occurs significantly in the vertical direction of the pellet bed due to the gas velocity being much greater than the grate velocity. That is, longitudinal heat transfer is neglected;

- Heat loss effects on the side walls are neglected.

Based on these premises, a model for the TG was developed. This model is able to provide, as a result, the key variables of the process considering different pellet bed heights and lengths. This means that the model offers valuable insights for all positions along the bed. Subsequently, the mathematical formalism used to model the TG system will be presented.

Table 2

Input data for the computational model of the Traveling Grate system.

Mas fraction of the pellets	Value	Pellet and bed characteristics	Value
Hematite (Fe ₂ O ₃)	74.45 wt %	Pellet diameter	0.013 m
Magnetite (Fe ₃ O ₄)	4.0 wt%	Pellet porosity	0.32
Silicon Dioxide (SiO ₂)	4.31 wt%	Bulk density	2200 kg/m ³
Calcium Carbonate (CaCO ₃)	5.57 wt%	Grate velocity	0.0197 m/s
Magnesium Carbonate (MgCO ₃)	1.11 wt%	Bed depth	0.17 m
Carbon (Coke)	0.56 wt%	Bed void fraction	0.39
Moisture (H ₂ O)	10.0 wt%	Drying zone length	18 m
Process temperatures	Value	PH1 zone length	12 m
Drying zone air inlet temperature	533.15 K	PH2 zone length	18 m
PH1 zone air inlet temperature	916.15 K	Process pressures	Value
Air temperature from Rotary Kiln	1313.15 K	Drying zone pressure	101245.5 Pa
Natural gas temperature	313.15 K	PH1 zone pressure	101177.9 Pa
Burners air temperature	353.15 K	PH2 zone pressure	101229.2 Pa

3.1. Energy balance

Thurlby et al. [26] highlight that, in TG, forced convection is the main heat transfer mechanism. Taking this into consideration, the energy balance for the gas inside the TG is described using a differential equation. equation (1) represents this phenomenon and is defined as a function of the pellet bed height and reflects the direction of the air flow inside the equipment.

$$GC_g \frac{\partial T_g}{\partial z} = -hA(T_g - T_p) - 0.5(R_w \Delta H_w) + 0.5(R_c \Delta H_c + R_m \Delta H_m + R_d \Delta H_d + R_i \Delta H_i) \quad (1)$$

In a similar way, heat exchanges related to pellets are addressed in equation (2). This equation models thermal exchanges as a function of time, which is indirectly determined by the grate velocity. This allows following the progress of pellets through the different stages of the process.

$$\rho_b C_p \frac{\partial T_p}{\partial t} = hA(T_g - T_p) - 0.5(R_w \Delta H_w) + 0.5(R_c \Delta H_c + R_m \Delta H_m + R_d \Delta H_d + R_i \Delta H_i) \quad (2)$$

The coefficient 0.5 for both equations indicates that the heat generated or removed by chemical reactions is homogeneously

distributed between the gas and the pellet, according to Fan et al. [8]. The convection heat transfer coefficient for packed beds came from the Ranz–Marshall correlation, calculated using equation (3) [19]. The gas/pellet heat transfer area is determined by equation (4), with pellet sphericity (Φ) considered equal to 1.

$$h = \frac{k_g}{d_p} \left[2.0 + 0.6 \left(\frac{Re_p}{\epsilon_b} \right)^{1/2} Pr^{1/3} \right] \quad (3)$$

$$A = \frac{6(1 - \epsilon_b)}{\Phi d_p} \quad (4)$$

3.2. Moisture evaporation and condensation

The green pellet drying was represented by the core shrinkage mechanism for spherical particles, consisting of three stages. The mathematical model was proposed by Cumming and Thurlby [27], Seshadri and Pereira [28], and Tsukerman et al. [19].

The first stage consists of the evaporation of free moisture, which is controlled by the mass transfer from the pellet surface to the gas, defined by equation (5):

$$R_w = \bar{k}_w A (w_g^e - w_g) \quad (5)$$

When the pellet reaches a critical moisture level, the second drying stage begins, known as mixed control, described by equation (6). This phase is characterized by the combination of resistance to diffusion through the dry shell and mass transfer to the gas [17]. During this stage, diffusion through the pores of the pellet dry shell becomes the limiting phenomenon. An evaporation front forms and, driven by capillary forces, moves towards the center of the pellet [20,29].

$$R_w = \frac{A(w_g^e - w_g)}{\frac{1}{k_w} + \left(\frac{r_p(r_p - r_w)}{2r_w D_{g,p}} \right)} \quad (6)$$

The wet core volume gradually decreases and the relationship between the wet core radius (r_w), pellet radius (r_p), pellet moisture (w_p), and critical pellet moisture (w_{pc}), can be given by equation (7). The value assumed for the critical pellet moisture (w_{pc}) was 120 kg/m³, for a pellet density of 2200 kg/m³, according to Hasenacketal et al. [11], Voskamp and Brasz [12] and Barati [20].

$$w_p = w_{pc} \left(\frac{r_w}{r_p} \right)^3 \quad (7)$$

The beginning of the third stage occurs when the drying rate, defined by equation (8), exceeds the rate established in the previous mixed control phase. This stage is dominated by heat transfer from the gas to

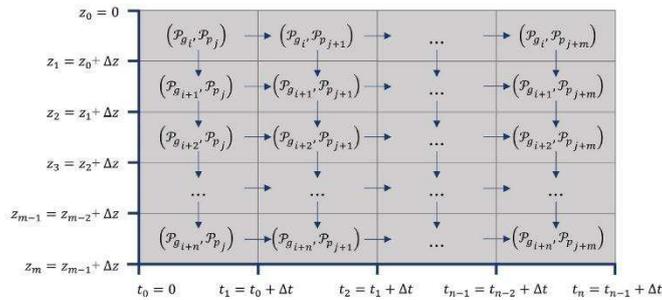


Fig. 4. Computational scheme for solving the finites difference method.

Table 3
Validation results of the Traveling Grate mathematical model.

Parameters	Reference value (K)	Model result (K)	Relative deviation (%)
Drying zone gas outlet temperature	371.150	371.154	0.001
PH1 gas outlet temperature	513.150	513.139	0.002
PH2 gas outlet temperature	753.150	753.143	0.001
Pellet temperature (40-m length)	1164.000	1184.955	1.800

the pellet, being influenced by the particle wet bulb temperature (T_w), determined by iterative methods.

$$R_w = \frac{hA(T_g - T_w) r_w}{\Delta H_w r_p} \quad (8)$$

The moisture condensation stage in the gas is represented by the relationship described in equation (5). However, it specifically occurs in scenarios where the pellet temperature is below the gas saturation temperature.

3.3. Chemical reactions

In the TG system, chemical reactions begin in pre-heating zone 1 and extend to pre-heating zone 2, which can be viewed as two moving fluidized bed reactors operating in series. The primary reactions in these zones include the combustion of coke, the oxidation of magnetite to hematite, and the calcination of calcium and magnesium carbonates. According to the literature, coke combustion starts at temperatures around 500 °C, which are achieved in PH1 and PH2. Therefore, the energy for these reactions is provided by both the circulating high-temperature flue gas and the coke contained within the pellets. The process modeling considered the presence of carbon-containing pellets, ensuring that all relevant reactions were considered.

Coke combustion and magnetite oxidation reactions follow the unreacted core mechanism, as described by Levenspiel [30]. This mechanism proposes that the reaction begins at the pellet surface, with a reactive front advancing towards the core and forming a layer of reaction products in the anterior part of it. In general, the process is divided into three stages: (i) diffusion in the film, where oxygen moves from the surrounding gas to the pellet surface; (ii) diffusion in the pores, through the pores of the reactant layer; and (iii) the interfacial surface reaction, which occurs between the diffused gas and the pellet, as indicated by Barati [20], Wang et al. [21] and Tan et al. [22].

Equation (9) defines the reaction rate for magnetite oxidation, a

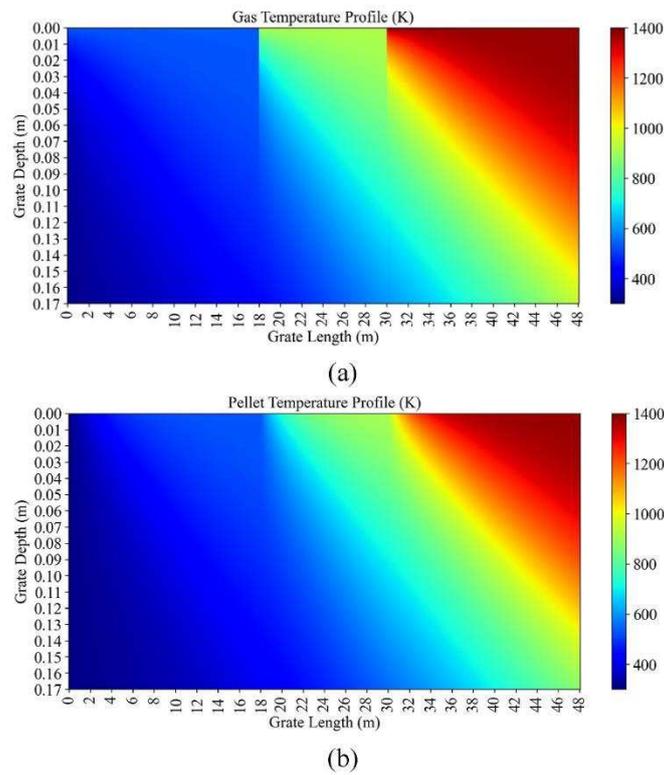


Fig. 5. Gas (a) and pellet (b) temperature profiles as a function of grate length.

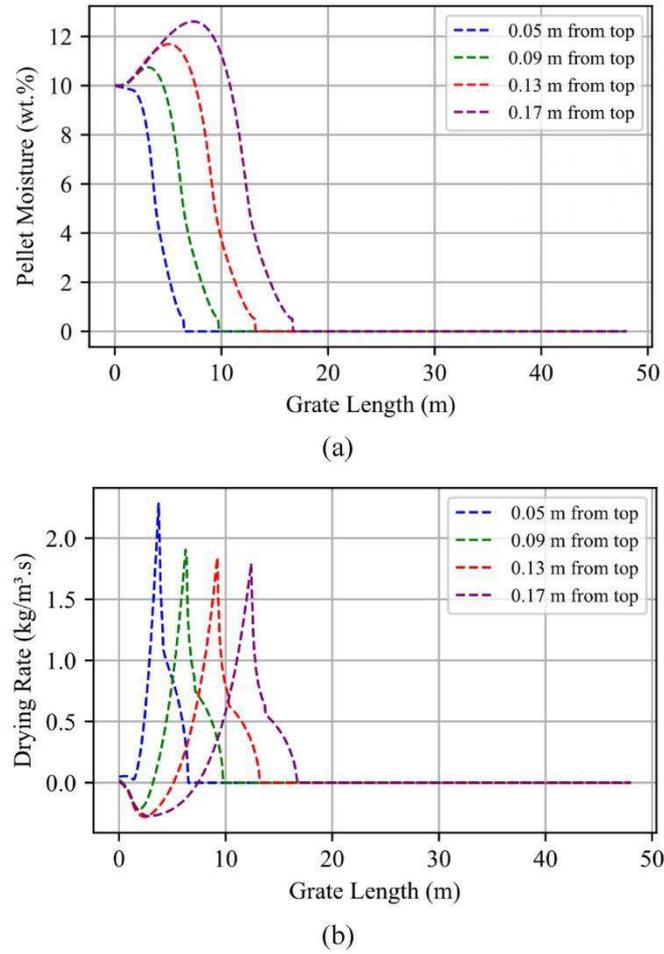


Fig. 6. Pellet moisture (a) and drying rate (b) profile as a function of grate length.

mixed control kinetic model proposed by Young et al. [13]. Similarly, equation (10) describes the reaction rate for coke combustion.

$$\frac{dr_m}{dt} = \frac{-4(C_{O_2}^* - C_{O_2})}{\rho_b \left[\frac{1}{k_m} + \frac{r_m(r_p - r_m)}{r_p D_{O_2}} + \left(\frac{r_m}{r_p} \right)^2 \frac{1}{k_{O_2}} \right]} \quad (9)$$

$$\frac{dr_c}{dt} = \frac{-(C_{O_2}^* - C_{O_2})}{\rho_b \left[\frac{1}{k_c} + \frac{r_c(r_p - r_c)}{r_p D_{O_2}} + \left(\frac{r_c}{r_p} \right)^2 \frac{1}{k_{O_2}} \right]} \quad (10)$$

For dolomite (CaCO_3) and limestone (MgCO_3) calcination reactions, heat transfer is the only limiting phenomenon; therefore, they are expressed by the same mechanism indicated in equation (11).

$$\bar{R}_{d,i} = k_{d,i} m_{d,i} \quad (11)$$

3.4. Mass transfer (mass balance)

The Ergun's equation was used to describe the pressure drop along the pellet bed, i.e., between the top and bottom of the pellet bed in each zone [31].

$$\frac{\partial P}{\partial z} = \frac{150 \mu_g G (1 - \epsilon_b)^2}{(\Phi d_p)^2 \epsilon_b^3} + \frac{1.75 \rho_g G^2 (1 - \epsilon_b)}{\Phi d_p \epsilon_b^3} \quad (12)$$

The system's gas mass flow is controlled by this pressure differential; however, the gaseous components are produced or consumed by reactions occurring along the pellet bed. Therefore, the gas flowrate, representing the overall mass balance for the gas phase, is represented

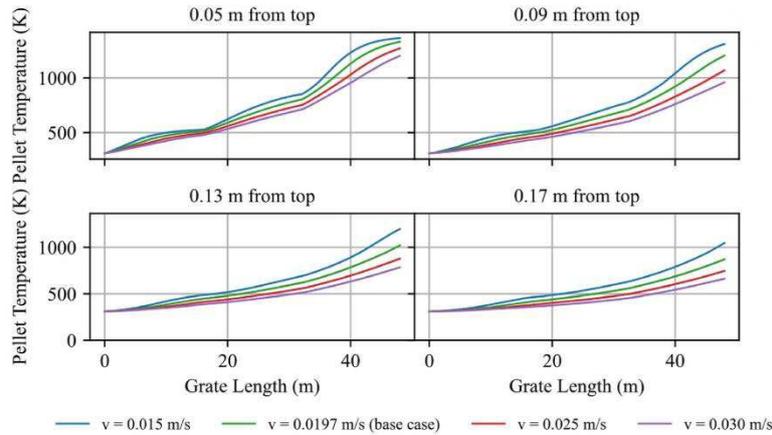


Fig. 7. Effect of the grate velocity on the pellet temperature profile.

Table 4
Effect of grate velocity variation on the average final pellet temperature.

Grate velocity	v = 0.015 m/s	v = 0.0197 m/s (base case)	v = 0.025 m/s	v = 0.030 m/s
Average final pellet temperature (°C)	1007.21	911.81	816.46	741.18

Table 5
Effect of bed height variation on the average final pellet temperature.

Pellet bed height	h = 0.15 m	h = 0.17 m (base case)	h = 0.19 m	h = 0.21 m
Average final pellet temperature (°C)	948.98	911.81	875.78	841.38

by equation (13), which relates reaction rates to the position within the bed.

$$\frac{\partial G}{\partial z} = \sum_{k=1}^n R_k \tag{13}$$

The mass balance for each specific gas component is expressed by equation (14), which characterizes the system based on reaction rates (R_k) and stoichiometric coefficients (S_i) of component i , along with the gas velocity (v_g). Similarly, the mass balance for component j of the pellet is detailed in equation (15).

$$\frac{\partial w_i^g}{\partial z} = \frac{R_k S_i}{v_g} \tag{14}$$

$$\frac{\partial w_j^p}{\partial z} = R_k S_j \tag{15}$$

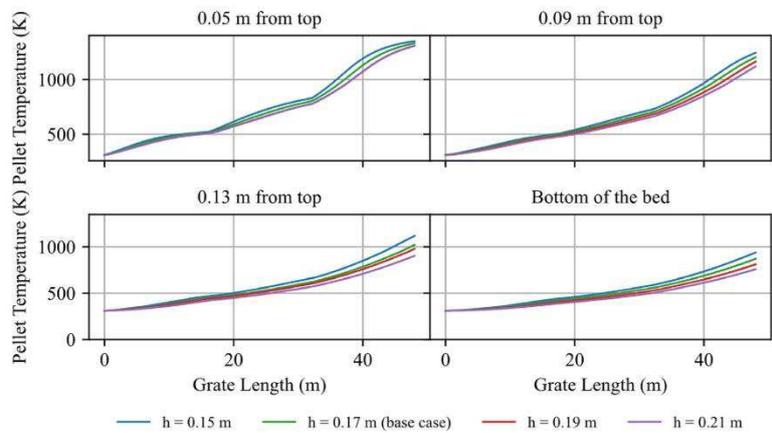


Fig. 8. Effect of bed height on the pellet temperature profile.

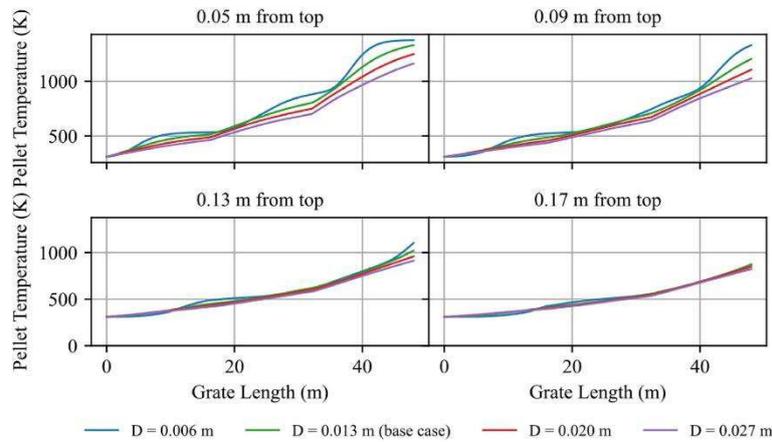


Fig. 9. Effect of pellet diameter on the pellet temperature profile.

Table 6
Effect of average pellet diameter variation on the average final pellet temperature.

Average pellet diameter	d = 0.006 m	d = 0.013 m (base case)	d = 0.020 m	d = 0.027 m
Average final pellet temperature (°C)	972.41	911.81	847.30	783.46

3.5. Pellet quality

The real-time estimation of variables related to pellet quality during the process offers significant advantages. First, it allows the optimization of specific process steps. Second, it facilitates advanced decision-making in anomalous situations, such as changes in feed composition or product specifications. This contributes to increasing the precision and effectiveness of the process control.

Pellet quality is measured by equation (16), as defined by Batterham [29]. This equation considers the temperature profile and the system

time/length relationship, where κ represents the rate parameter that depends on temperature.

$$\frac{dQ}{dt} = \kappa(Q_f - Q) \quad \text{com} \quad \kappa = \frac{A_0}{T_p} \exp\left(\frac{-E}{RT_p}\right) \quad (16)$$

According to the model by Pomerleau et al. [32,33], the final pellet quality (Q_f) is calculated by equation (17). This model incorporates the impact of the abrupt increase in quality when temperature (T) exceeds a specific value (T_l), which indicates the beginning of the liquid phase in the pellet flow. Additionally, it is considered that the pellet quality decreases after reaching a critical temperature (T_c) due to the vitrification phenomenon. The adjustment parameters adopted are based on the model by Pomerleau et al. derived from the calibration of the pellet quality model in relation to the quality indicator chosen by the author, the compressive strength.

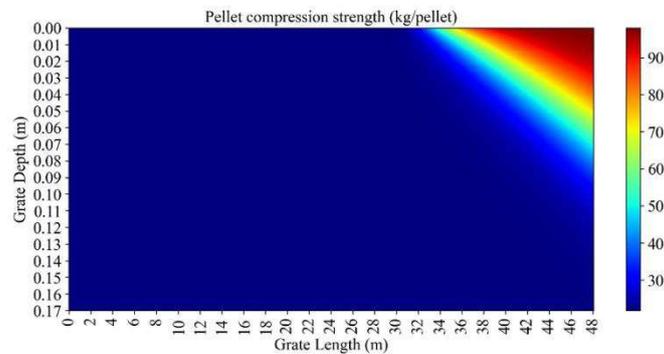


Fig. 10. Pellet compressive strength profile as a function of bed length.

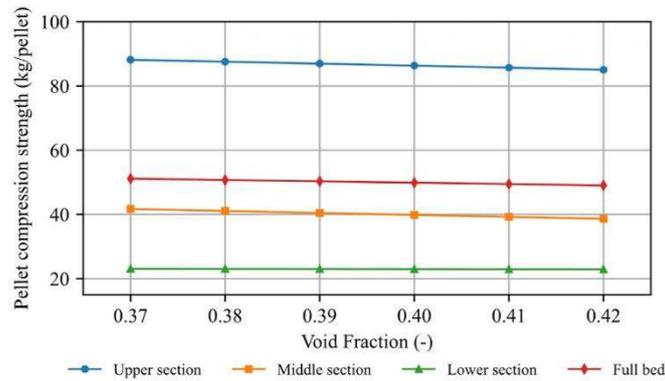


Fig. 11. Effect of bed void fraction on compressive strength.

$$Q_f = \begin{cases} v + \frac{\beta}{1 + \exp\left(\frac{-(T_p - T_i)}{\gamma}\right)} & \text{for } T_p \leq T_c \\ v + \frac{\beta}{1 + \exp\left(\frac{-(T_p - T_i)}{\gamma}\right)} - \frac{\delta}{1 + \exp\left(\frac{-(T_p - T_c - w)}{\gamma}\right)} & \text{for } T_p > T_c \end{cases} \quad (17)$$

3.6. Numerical solution

A Python algorithm was developed to numerically solve the TG system model. This algorithm is divided into two parts: the solution of the phenomenological model itself and the model validation, as illustrated in Fig. 3. To solve the phenomenological model, the explicit finite difference method was adopted, similar to that used by Barati [20], Majumder et al. [10], and Fan et al. [8]. The model begins with the input of data and parameters, which include initial air and pellet conditions, kiln geometry, grate velocity and bed properties, all detailed in Table 2.

The chemical composition of the pellets represents the mass fraction of the green pellets after the feed preparation, mixing, and balling formation stages, but before entering the traveling grate. The iron concentrate used to prepare the pellets primarily consists of hematite and magnetite, with the predominant gangue components being SiO_2 , CaCO_3 , and MgCO_3 . These pellets are carbon-containing, with carbon added in the form of coke. Other minerals may be present in minor quantities but were not considered in this analysis, such as aluminum oxide (Al_2O_3), titanium dioxide (TiO_2), sodium oxide (Na_2O), potassium oxide (K_2O), among others. Incorporating these components would increase the complexity and computational effort of the model, while having a minimal impact on the results due to their low concentration.

Following the finite difference method, the pellet bed was divided into regular elements within an orthogonal coordinate system, as shown in Fig. 4. In this system, the gas (\mathcal{P}_g) and pellet (\mathcal{P}_p) properties vary with bed height and length, respectively. The next step in the algorithm involves calculating the number and size of elements that form the system mesh. To construct the mesh, the bed height was subdivided into 200 parts and the length of each TG zone into another 200, resulting in a mesh composed of 120,000 elements.

The model begins to be solved in the drying zone, indicated as $u = 1$ in Fig. 3. In a sequential manner, PH1 and PH2 are solved, $u = 2$ and $u = 3$, respectively. To solve the pre-heating zones, an algorithm similar to that for the DR is used. Here, thermodynamic and transport properties as well as reaction rates are calculated. The first zone is mainly marked by

the evaporation/condensation process. In the following zones, pre-heating zones 1 and 2, in addition to these phenomena, magnetite oxidation, coke combustion, and calcination of calcium magnesium and carbonates reactions also occur.

The mass and energy balances constitute a system of 21 partial differential equations. In this system, the output profile of pellets in the drying zone is used as input to PH1, and, similarly, the output from PH1 serves as input to PH2.

Pre-heating zone 2 of the industrial process under study also has a pair of burners, which have the function of maintaining the appropriate temperature of the gas current coming from the rotary kiln. They work with natural gas, with a flow rate of $120 \text{ Nm}^3/\text{h}$ per burner and a stoichiometric excess air ratio of 10:1.

In the recycle current, indicated in Fig. 2, which leaves PH2 and feeds the DR, there is a dust filter process. For this equipment, it was considered that all suspended particulates present in the gas current would be removed.

The model calculates several output variables throughout the TG, including temperature, density, flow rate, and composition of both gas and pellet. The gas pressure, the rates of progress of reactions in the bed, and the compressive strength of pellets are also determined.

During the validation algorithm, as illustrated in Fig. 3, the air intake flow rates in each TG zone and the air composition in the drying feed were adjusted. The objective function focused on the absolute deviations between the gas exit temperatures of each zone and their reference temperatures, in addition to deviations in compositions related to the gas current recycle (exit from PH2 and entry in the drying zone). The objective function includes 11 variables (one for each zone, plus 8 for the recycle composition), as shown in Fig. 3. To optimize the system, the Scipy. Optimize library was used, which employs patterns from the hybrid and hybrid algorithms from MINPACK. These are based on Powell's hybrid method, with the first calculating the Jacobian matrix and the second requiring the Jacobian matrix. The first algorithm, hybrid, was used in the developed model.

The model was run on a personal computer with a 1.80 GHz i7-8550U Intel Core processor. For the simple execution of the model, it took 22min34.55s, while for validation, it took 6h12min1.66s.

4. Results and discussions

In this topic, the results related to the model validation for the Traveling Grate system on an industrial scale, the effects of varying process operational control parameters, and the discussion regarding the influence of certain variables on the pellet quality, are presented.

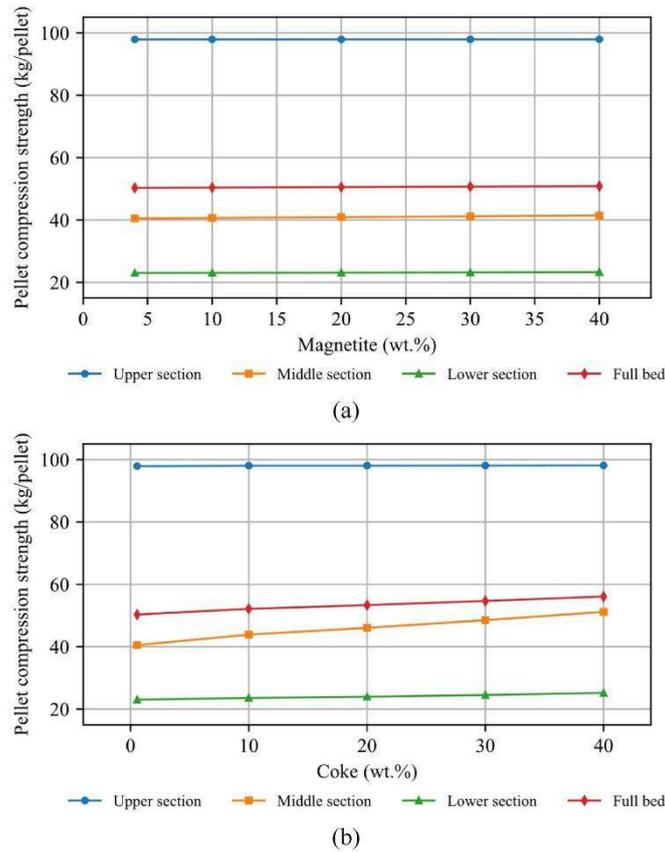


Fig. 12. Effect of the magnetite (a) and coke (b) composition on pellet quality.

4.1. Model validation

The TG system, the basis for this study, is a GKC pelletizing plant located in South America. Data for validating the mathematical model were collected under stationary operating conditions of the process. It is important to highlight that the precise measurement of the pellet temperature continuously along the grate, without the interference of factors external to the bed or heat losses, is impractical in industrial plants [20]. Furthermore, due to the particularities of the base system, no compatible experimental data were found in the literature, which would enable the evaluation of the model compared to external data.

In this context, operating data for the average gas outlet temperatures in each zone and the pellet temperature over the 40-m bed length (obtained through sampling) were used as references. These data, together with the model results, are summarized in Table 3. It appears that the model managed to satisfactorily represent the real process, with a maximum observed relative deviation of 2.35%. The variables manipulated during model optimization resulted in gas flows of 0.334 kg/m²s, 0.289 kg/m²s, and 0.235 kg/m²s for the DR, PH1, and PH2 zones, respectively.

4.2. Temperature profiles

The gas and pellet temperature profiles along the bed in the validation scenario are shown in Fig. 5.

Each zone of the TG is fed by a gas flow with a specific temperature, being 260 °C for the drying zone, 643 °C for PH1, and 1040 °C for PH2. Significant variations in gas temperature are observed at the boundary length between each zone. These differences are more pronounced in the upper layers of the bed due to the high velocity of the gas, which results in a shorter thermal exchange time between the different flows. As the gas reaches the deeper layers of the bed, there is greater homogeneity between the temperatures of the zones.

Likewise, a gradual increase in pellet temperature is observed throughout the grate, starting from 37 °C and reaching averages up to 209.8 °C, 450 °C and 911.8 °C after each zone, respectively. The maximum pellet temperature in the model was 1103.6 °C. As expected, due to the downward air flow and the intense thermal exchange between the gas and the solid, pellets in the deepest bed layers presented the lowest temperatures.

4.3. Drying step

The pellet moisture profile at four positions in different bed heights (0.05 m, 0.09 m, 0.13 m, and 0.17 m from the top) is shown in Fig. 6a. The green pellets are introduced into the process with a moisture content of 10 wt%.

The results indicate that the evaporation front follows the same direction as the gas flow, that is, downward. The increase in humidity in the deepest bed layers, also observed by Kuçukada et al. [17] and Barati [20], suggests the occurrence of the recondensation phenomenon. In this phenomenon, the gas at these depths reaches saturation, resulting in the condensation of part of the water vapor. This phenomenon is evident in Fig. 6b, in the area where the drying rate presents negative values. Recondensation decreases as the pellets at the deepest sections dry.

The behavior of the drying rate reflects the action of the three stages of the drying mechanism involved. Initially, the pellet surface moisture evaporates at an increasing rate, until the critical moisture content is reached. After this, there is a decrease in the drying rate, which is controlled by mass transfer, following the core shrinkage model. Ultimately, heat transfer becomes the limiting factor. Pellets are completely dry in approximately 15 min at the end of the drying zone.

4.4. Analysis of the key process parameters

One of the principal benefits of the GKC process is the production of pellets with a high quality. However, GKC has a lower production rate when compared to SG. In this context, the analysis of key parameters for the TG process is crucial for evaluating scenarios that can maximize GKC production overall. Based on the validated model, the main system variables were adjusted to create different operational scenarios. This allowed the evaluation of the effects on the pellet temperature profile as a function of the position in different bed heights (0.05 m, 0.09 m, 0.13 m, and 0.17 m from the top).

4.4.1. Grate velocity variation

The effect of varying the grate velocity was evaluated under four different conditions, from 0.015 m/s to 0.03 m/s, as shown in Fig. 7.

Comparing the average final pellet temperature in the base case (0.0197 m/s) with the other scenarios, presented in Table 4, an increase of 10.46% is observed for the velocity of 0.015 m/s and a reduction of 10.46% and 18.71% for velocities of 0.025 m/s and 0.030 m/s, respectively. This suggests an almost proportional relationship between scenarios. It was found that increasing the grate velocity results in lower pellet temperatures, which can be attributed to the decrease in the thermal interaction time between the gas and the solid in each TG zone (see Table 5).

4.4.2. Pellet bed height variation

Analysis of the impact of pellet bed height was carried out for depths of 0.15 m, 0.17 m (base case), 0.19 m, and 0.21 m, as illustrated in Fig. 8.

The results indicate that a higher bed corresponds to a greater amount of material, which results in a lower energy proportion per mass available for thermal exchange, resulting in pellets with lower temperatures. Consequently, it was observed in graphs that the deepest bed layers exhibit more distinct temperature profiles compared to the upper layers.

4.4.3. Average pellet diameter variation

The average pellet diameter was evaluated in four scenarios, as indicated in Fig. 9. The results presented in Table 6 indicate that both increase and reduction of 53.8% in pellet diameter resulted in similar variations in the average final pellet temperature, with increases of 6.65% and reductions of 7.07%, respectively. Furthermore, when doubling the pellet diameter, a decrease of approximately 14.08% in the same variable was observed.

The results show that increasing the pellet diameter significantly

affects heat transfer in the system since the diameter is directly linked to reaction rates in the bed. More specifically, decreasing the pellet diameter improves the efficiency of reactions, reducing the temperature in the drying zone (where endothermic reactions predominate) and increasing the temperature in the PH1 and PH2 zones (where exothermic reactions occur). This phenomenon is particularly evident in the deepest bed layers, as shown in Fig. 9. In general, a reduction in the average pellet diameter leads to an increase in the final bed profile temperature.

4.5. Pellet quality

Pellet quality was evaluated based on the pellet compressive strength as a function of position in the bed, as indicated in Fig. 10. It was observed that in the deepest bed layers, the compressive strength remained at the initial value. These results are in line with the model proposed by Pomerleau et al. [32,33], which suggests that the burning stage, essential to develop the main resistance characteristics, occurs only in the Rotary Kiln. Thus, the TG process aims only to give the pellet the necessary resistance to withstand fall and abrasion inside the Rotary Kiln [9].

The pellet temperature is directly related to the compressive strength, and for this reason, scenarios were generated based on the variation in the bed void fraction and the mass magnetite and coke fractions in the pellet. For a more accurate analysis, the average pellet quality was evaluated for the entire bed and in three equally spaced sections (upper, middle, and lower sections).

4.5.1. Variation in the bed void fraction

Changing the bed void fraction from 0.37 to 0.42, as illustrated in Fig. 11, a decrease of 4.13% in the average final bed compressive strength is observed, which is more pronounced in the upper layers. The decrease in the void fraction is linked to a lower permeability in the medium, resulting in more efficient thermal exchange between the gas and pellets. This causes the pellet bed to reach higher temperatures, improving quality, especially at the top of the bed, where temperatures are higher.

4.5.2. Variation in pellet composition

Fig. 12 presents a comparison of the effects of varying the fraction of magnetite and coke on pellet quality. For this purpose, identical variations were evaluated for both components. For coke, hypothetical scenarios from an operational point of view were simulated.

Fig. 12a shows that an increase of 36% in the magnetite composition results in a slight increase of 1.06% in the final average pellet compressive strength. Increasing the amount of coke by the same percentage, as shown in Fig. 12b, leads to a significant increase of 11.5% in pellet quality. This difference is due to the fact that magnetite oxidation begins at lower temperatures and occurs mainly in the PH1 zone, while coke combustion occurs almost exclusively in the PH2 zone.

As observed by Feng et al. [25], an increase in temperature at PH1 has a limited impact on the pellet output temperature, unlike what occurs at PH2, where a considerable increase in temperature is observed. These temperature gradients directly influence the final pellet quality, explaining the observed results.

It is important to highlight that high coke levels can cause the pellet to reach or even exceed the critical vitrification temperature of 1261.85 °C [33], which can result in stagnation or even in decrease in pellet quality, as indicated by Batterham et al. [29] and Pomerleau et al. [33]. This phenomenon is visible in Fig. 12b, where pellets in the upper layer reach temperatures close to the critical limit, maintaining compressive strength almost unchanged.

In this scenario, the relevance of measuring pellet quality predictively during the process stands out. This allows evaluation of the viability of different operational scenarios and identifying phenomena that are generally not noticeable in the conventional operation of an

industrial-scale plant.

5. Conclusions

The detailed phenomenological model for the Traveling Grate system was implemented in an industrial plant, considering the thermal integration of the system, covering all transport phenomena and reactions involved. When compared with typical operational process conditions, the model showed satisfactory accuracy, with a maximum relative deviation of 2.35%. The temperature and humidity profiles of both the gas and the pellet are consistent with the literature.

The effects resulting from the variation of key parameters in the system demonstrate that changes in the grate velocity, bed height, or pellet diameter, all linked to productivity rate, directly influence the pellet temperature profile. It was observed that variations in diameter have less significant impacts on the average final pellet temperature compared to other variables. The predictive assessment of pellet quality in all bed revealed that the bed void fraction and the magnetite fraction in the pellet have little influence on the bed's compressive strength. However, the coke fraction demonstrated a significant impact on quality, although limited by the vitrification phenomenon.

The results obtained highlight the relevance of using robust models

to improve the understanding of the phenomena involved in the process, especially those that are not easily noticeable during conventional plant operation. Furthermore, the model proves to be a valuable tool for system optimization, defining viable operating ranges that aim to meet product quality specifications, while minimizing the plant's energy consumption.

Declaration of competing interest

The authors declare the following financial interests/personal relationships which may be considered as potential competing interests: Camila Cavalcanti reports financial support was provided by National Council for Scientific and Technological Development. If there are other authors, they declare that they have no known competing financial interests or personal relationships that could have appeared to influence the work reported in this paper.

Acknowledgements

The authors would like to thank the National Council for Scientific and Technological Development (CNPq) for the financial support for this study.

APPENDIX A. Evaporation/Condensation

Critical pellet radius (m) [8,21]:

$$r_c = r_p \left(\frac{W_p}{W_c} \right)^{1/3} \quad (18)$$

Water vaporization latent heat (kJ/kg) [22]:

$$\Delta H_v = \begin{cases} 3.16 \times 10^6 - 2495.45T_p + 0.29T_p^2 & T_p > 373 \text{ K} \\ 2.722 \times 10^6 (674 - T_p)^{0.375} & T_p \leq 373 \text{ K} \end{cases} \quad (19)$$

Gas moisture content at equilibrium concentration (kg/m³) [8]:

$$w_g^e = \begin{cases} \left[1.23 \times 10^{-6} \exp\left(\frac{T_p}{28.41}\right) - 0.020 \right] & T_p < 373.15 \text{ K} \\ \left[8.57 \times 10^{-4} \exp\left(\frac{T_p}{51.39}\right) - 0.677 \right] & 373.15 < T_p < 473.15 \text{ K} \\ \left[5.20 \times 10^{-3} \exp\left(\frac{T_p}{62.64}\right) - 2.031 \right] & T_p > 473.15 \text{ K} \end{cases} \quad (20)$$

Wet bulb temperature (K) [20]:

$$T_w = \begin{cases} 173.4 - 4.166r_h + 2.57 \times 10^{-2}r_h^2 + T_g(0.3648 + 1.4585 \times 10^{-2}r_h - 8.688 \times 10^{-5}r_h^2) & T_p < 373 \text{ K} \\ 197.7 + 125.753r_h - 11.64749r_h^2 + T_g(0.3964 - 0.697929r_h + 6.31750 \times 10^{-2}r_h^2) + \frac{T_g^2(-2.921 \times 10^{-4} + 9.86139 \times 10^{-4}r_h - 8.5769899 \times 10^{-5}r_h^2)}{T_g^2} & T_p \geq 373 \text{ K} \end{cases} \quad (21)$$

Water vapor diffusivity to the gas (m²/s) [20]:

$$D_{H_2O} = \frac{1.2 \times 10^{-9} T_g^{1.75}}{P} \quad (22)$$

Effective vapor diffusivity through the pellet pores (m²/s) [20]:

$$D_{H_2O}^e = D_{H_2O} \frac{\epsilon_p}{\tau} \quad (23)$$

Mass transfer coefficient (m/s) [20]:

$$k_w = \frac{D_{H_2O}^e}{d_p} \left[2.0 + 0.6 \left(\frac{Re_p}{\epsilon_p} \right)^{1/2} Sc^{1/3} \right] \quad (24)$$

APPENDIX B. CHEMICAL REACTIONS

Oxygen diffusivity at equilibrium (m²/s) [20]:

$$D_{O_2}^c = D_{O_2} \frac{\epsilon_p}{\tau} \quad (25)$$

Oxygen mass transfer coefficient (m/s) [10,14]:

$$k_{O_2} = \frac{D_{O_2}}{d_p} \left[2.0 + 0.6 \left(\frac{Re_p}{\epsilon_p} \right)^{1/2} Sc^{1/3} \right] \quad (26)$$

Coke combustion



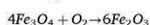
Coke constant reaction rate (m/s) [22]:

$$k_{car} = 595.6 T_p \exp\left(\frac{-17970}{T_p}\right) \quad (27)$$

Oxygen diffusion coefficient through the coke (m²/s) [17]:

$$D_{O_2, c} = 1.5 \cdot 10^{-5} \left(\frac{T_g}{298.15} \right)^{1.5} \frac{\epsilon_p}{\tau} \quad (28)$$

Magnetite oxidation



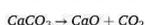
Magnetite constant reaction rate (m/s) [20]:

$$k_{mag} = \begin{cases} 3.52 \cdot 10^3 T_p \exp\left(\frac{-20073}{T_p}\right) & T_p \leq 657 \text{ K} \\ 1.19 \cdot 10^{-4} T_p \exp\left(\frac{-1197}{T_p}\right) & T_p > 657 \text{ K} \end{cases} \quad (29)$$

Oxygen diffusion coefficient through the magnetite (m²/s) [21,22]:

$$D_{O_2, M} = 9.71 \cdot 10^{-6} T_g^{1.75} \frac{\epsilon_p}{\tau} \quad (30)$$

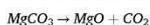
Limestone calcination



Limestone constant reaction rate (1/s) [20]:

$$k_{lim} = 8.3 \cdot 10^6 \exp\left(\frac{-18300}{T_p}\right) \quad (31)$$

Domolite calcination



Constant domolite reaction rate (1/s) [20]:

$$k_{dom} = 2.5 \cdot 10^5 \exp\left(\frac{-11200}{T_p}\right) \quad (32)$$

References

- [1] Iljana M, Pannanen T, Mattila O, Kondrakov M, Fabritius T. Effect of iron ore pellet size on Metallurgical properties. *Metals* Feb. 2022;12(2). <https://doi.org/10.3390/met12020302>.
- [2] Mourão JM. Evolution and growth of iron ore pelletizing. In: 4th EMECR - international conference on energy and material efficiency and CO2 reduction in the steel industry; Nov. 2022. p. 274–87. <https://doi.org/10.5151/5463-5463-35035>.
- [3] Ahrens M. Expansion and modernization of an iron ore pelletizing plant in northern Sweden. *SME Annual Meeting* 2008;1–8.
- [4] Sadrezaad SK, Ferdowsi A, Payab H. Mathematical model for a straight grate iron ore pellet induration process of industrial scale. *Comput Mater Sci Dec.* 2008; 44(2):296–302. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2008.03.024>.
- [5] Yang G, Fan X, Huang X, Chen X. Performance monitoring for grate kiln cooler process based on quality prediction and statistical analysis. In: 7th international symposium on high temperature metallurgical processing; 2016. p. 377–84. https://doi.org/10.1007/978-3-319-48093-0_47.
- [6] Sjöberg J, Isaksson O, Ion JC. The grate-kiln induration machine - history, advantages, and drawbacks, and outline for the future. *The Journal of The Southern African Institute of Mining and Metallurgy* 2015;115:137–44.
- [7] Wendling SS, Nascimento RC, Wendling F. Comparative study of pellets fired in pot grate and grate kiln pilot furnaces. *Miner Metall Process May* 2017;34(2):84–90. <https://doi.org/10.19150/mmp.7508>.
- [8] hui Fan X, ming Yang G, ling Chen X, Gao L, xian Huang X, Li X. Predictive models and operation guidance system for iron ore pellet induration in traveling grate-rotary kiln process. *Comput Chem Eng Aug.* 2015;79:80–90. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2015.04.035>.
- [9] Copeland CR, Clarenboux V, Kawatra SK. A comparison of pellet quality from straight-grate and grate-kiln furnaces. *Miner Process Extr Metall Rev May* 2019;40(3):218–23. <https://doi.org/10.1080/08827508.2018.1536050>.
- [10] Majumder S, Natekar PV, Runkana V. Virtual indurator: a tool for simulation of induration of wet iron ore pellets on a moving grate. *Comput Chem Eng Jun.* 2009; 33(6):1141–52. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2008.11.016>.
- [11] Hasenack NA, LeBelle PAM, Kosy JJ. Induration process for pellets on a moving stand. *Congress Proceedings Mathematical Process Models in Iron and Steelmaking*, Metal Society 1975:6–16.
- [12] Voskamp JH, Brasz J. Digital simulation of the steady state behaviour of moving bed processes. *Measurement and Control* 1975;8:23–32.
- [13] Young RW, Cross M, Gibson RD. Mathematical model of grate-kiln-cooler process used for induration of iron ore pellets. *Ironmak Steelmak* 1979;1:1–13.
- [14] Thurlby JA. A dynamic mathematical model of the complete grate/kiln iron-ore pellet induration process. *Metall Trans A B* 1988;19B:103–12.
- [15] Thurlby JA. Gas flow and pressure balancing in modeling grate/kiln induration. *Metall Trans A B* 1988;19B:113–21.

- [16] Thurlby JA. Energy cost minimization in grate/kiln induration. *Metall Trans A B* 1988;19B:123–32.
- [17] Kiiçükada K, Thibault J, Hodouin D, Paquet G, Caron S. Modelling of a pilot scale iron ore pellet induration furnace. *Can Metall Q* 1994;33(1):1–12.
- [18] Hamidi AA, Payab H. Mathematical model for energy saving in induration of iron ore pellets containing solid fuel. *IJE Transactions B: Applications* 2003;16(3): 265–78.
- [19] Tsukerman T, Duchesne C, Hodouin D. On the drying rates of individual iron oxide pellets. *Int J Miner Process Sep.* 2007;83(3–4):99–115. <https://doi.org/10.1016/j.minpro.2007.06.004>.
- [20] Barati M. Dynamic simulation of pellet induration process in straight-grate system. *Int J Miner Process* Dec. 2008;89(1–4):30–9. <https://doi.org/10.1016/j.minpro.2008.09.008>.
- [21] Wang J, Peng J, Balakrishnan V, Fang X. Modeling and simulation of iron ore pellet drying and induration process. In: 24th Chinese control and decision conference (CCDC); 2012. p. 183–7. <https://doi.org/10.1109/CCDC.2012.6244027>.
- [22] Tan S, Peng J, Shi H. Modeling and simulation of iron ore pellet drying and induration process with accurate bed void fraction calculation. *Dry Technol Apr.* 2016;34(6):651–64. <https://doi.org/10.1080/07373937.2015.1070357>.
- [23] Zhou F, et al. The coupling effect in drying section in traveling grate: a CFD and experimental study. *Min Metall Explor Apr.* 2021;38(2):1239–46. <https://doi.org/10.1007/s42461-021-00398-8>.
- [24] Thorat T, Nurni VN, Basavaraja M, Singhai M, Hazra S, Mogale A. Modelling of heat transfer in a straight grate pellet induration reactor complemented with plant scale experiments. *Miner Process Extr Metall (IMM Trans Sect C): Transactions of the Institute of Mining and Metallurgy* 2022;131(3):283–9. <https://doi.org/10.1080/25726641.2021.1984828>.
- [25] Feng JX, Zhang Y, Zheng HW, Xie XY, Zhang C. Drying and preheating processes of iron ore pellets in a traveling grate. *Int J Miner Metall Mater Oct.* 2010;17(5): 535–40. <https://doi.org/10.1007/s12613-010-0354-0>.
- [26] Thurlby JA, Batterham RJ, Turner RE. Development and validation of a mathematical model for the Moving Grate induration of iron ore pellets. *Int J Miner Process* 1979;6:43–64.
- [27] Cumming MJ, Thurlby JA. Developments in modelling and simulation of iron ore sintering. *Ironmak Steelmak* 1990;17(4):245–54.
- [28] Seshadri V, Pereira RODS. Mathematical simulation of induration of iron ore pellets in pot grate. In: 4 th international symposium on agglomeration; 1985. p. 729–44.
- [29] Batterham RJ. Modeling the development of strength in pellets. *Metall Trans A B* 1986;17B:479–85.
- [30] Levenspiel O. *Chemical reaction engineering*. third ed. 1998.
- [31] Ergun S. Fluid flow through packed columns. *Chem Eng Prog* 1952;48:89–94.
- [32] Fomerleau D, Desbiens A, Hodouin D. Optimization of a simulated iron oxide pellets induration furnace. In: 11th mediterranean conference on control and automation; 2003.
- [33] Fomerleau D, Hodouin D, Poulin É. A first principal simulator of an iron oxide pellet induration furnace - an application to optimal tuning. *Can Metall Q* 2005;44(4):571–82.