

CONVERSÃO ELEMENTO-MINERAL VISANDO A MODELAGEM GEOMETALÚRGICA DE DEPÓSITOS DE BAUXITA LATERÍTICA DA MINERAÇÃO RIO DO NORTE (MRN)

RESUMO

Bauxitas lateríticas são bauxitas formadas pela lateritização de diversos minerais silicosos. A presença alta de sílica é um empecilho no processamento mineral de qualquer mina. A conversão mineralógica é uma metodologia que busca converter teores em minerais para uma melhor compreensão das características do depósito. No presente trabalho, buscou-se realizar uma conversão mineralógica (elemento-mineral) utilizando dados de furos de sondagens e caracterizações mineralógicas e petrográficas. A conversão realizada foi bem-sucedida e será utilizada para o desenvolvimento de modelos geometalúrgicos mais robustos.

PALAVRAS-CHAVE: conversão; mineralogia; bauxita; geometalurgia.

ABSTRACT

Lateritic bauxites are formed by the laterization of several siliceous minerals. High quantities of silica are undesirable and need to be removed in mineral processing operations. Mineralogical conversion is a methodology that aims to convert chemical composition into mineralogical composition in order to better understand the characteristics of the deposits. In this work, a mineralogical conversion was made using drillhole data alongside mineralogical and petrographical characterization using DRX/Rietveld as well as industry standard chemical analysis. The conversion was successful, and its applicability will be implemented by the geometalurgy team.

KEYWORDS: conversion; mineralogy; bauxite; geometalurgy.

1. INTRODUÇÃO

A conversão elemento-mineral ou conversão mineralógica pode suportar a modelagem geometalúrgica (PARIAN, 2015). A depender do depósito estudado as variáveis geometalúrgicas podem não apresentar relações fortes com os teores somente. Dessa forma, a inclusão da mineralogia nos modelos geometalúrgicos pode melhorar a precisão. Variáveis geometalúrgicas como a recuperação dos processos de concentração podem ser melhor modeladas utilizando a mineralogia (DHAR, 2019). A geometalurgia pode ser definida como a abrangência de diversas áreas do conhecimento que, combinadas, podem ser aplicadas para otimizar o planejamento de lavra com o objetivo de maximizar o lucro, reduzir os riscos envolvidos em projetos de mineração e melhorar o aproveitamento dos recursos minerais de uma jazida (SCHNEIDER, 2014). Alguns pesquisadores desenvolveram ferramentas para executar a conversão elemento-mineral e apresentam e discutem os procedimentos adotados (COHEN & WARD, 1991; PAKTUNC, 2001; HERRMANN & BERRY, 2002).

Ao falarmos da relação entre química e mineralogia, estamos, formalmente, falando de distribuições. Ao medirmos analitos, seja por fluorescência de raio x, absorção atômica ou qualquer outro método, uma distribuição de concentrações é medida. Esta é uma distribuição de probabilidades, visto que a soma de todos os componentes químicos de qualquer substância deve ser necessariamente 100%. Por outro lado, quase nunca todos os componentes são medidos, sendo normalmente medidos apenas os componentes principais. No caso de uma bauxita laterítica, os componentes principais são o alumínio, o silício, o ferro e a água. Um componente menor considerado nas análises químicas do trabalho é o titânio.

Vamos assumir que estes componentes, para o nosso objetivo, representam 100% da composição do minério. Assim, tem-se que $p(Q_i)$ é igual à fração em massa do componente químico i , medido por algum método de análise química. A condição de contorno para que a análise química e, conseqüentemente, a conversão mineralógica sejam válidas é dada pela Equação 1.

$$\sum_i p(Q_i) = 1 \quad (1)$$

Quando a condição não é observada, a validade da conversão é posta em xeque. Entretanto, para que a condição seja alcançada, todos os elementos menores devem ser medidos. Visto a não praticidade dessa situação, é padrão na indústria considerar apenas a composição dos minerais mais abundantes.

A distribuição dos componentes químicos resulta da composição química dos diversos minerais que estão presentes no minério. No caso das bauxitas lateríticas, os minerais mais abundantes são a gibbsita, a caulinita e os minerais ferrosos hematita e goetita. O quartzo e os óxidos de titânio, rutilo e anatásio, são minerais menores, porém comuns.

O padrão da indústria para resultados de análises químicas de bauxitas lateríticas inclui os óxidos de alumínio, ferro, silício e titânio e perda ao fogo (que em geral é interpretada como água estrutural da gibbsita, da caulinita e da goetita). Em termos de óxidos, as composições teóricas são dadas pela Tabela 1.

Tabela 1 – Composição química teórica dos minerais de interesse

Mineral	Composição Química	Al ₂ O ₃ *	SiO ₂ *	Fe ₂ O ₃ *	TiO ₂ *	Perda ao Fogo
Gibbsita	Al(OH) ₃	65.36%	0%	0%	0%	34.64%
Caulinita	Al ₂ Si ₂ O ₅ (OH) ₄	39.50%	46.55%	0%	0%	13.96%
Hematita	Fe ₂ O ₃	0%	0%	100%	0%	0
Goetita	FeO(OH)	0%	0%	89.90%	0%	10.14%
Quartzo	SiO ₂	0%	100%	0%	0%	0%
Anatásio/Rutilo	TiO ₂	0%	0%	0%	100%	0%

*óxidos totais

Também padrão da indústria, são reportados os valores de alumínio aproveitável e de sílica reativa, que são determinados em função de uma dada temperatura e pressão do processo Bayer. Estes valores não são estequiométricos, porém a condição de contorno ainda deve ser observada. Não há informação estequiométrica sobre as quantidades relativas de sílica reativa e alumina aproveitável. Apesar de tais quantidades não estarem presentes na Tabela 1, elas são essenciais para a avaliação da qualidade dos produtos de bauxita laterítica. Além disso, minerais podem conter contaminantes na sua estrutura, e, conseqüentemente, sua composição química real difere da composição química que é calculada somente a partir da estrutura cristalina.

A composição aproximada dos minerais pode ser calculada quando existem dados de análise química em amostras de composição mineralógica conhecida. A composição mineralógica de amostras pode ser determinada por DRX e Rietveld com acurácia suficiente para componentes maiores. Por outro lado, a composição química pode ser determinada com acurácia comparativamente maior, por FRX e/ou espectrometria. Quando as composições mineralógicas e químicas de diversas amostras estão disponíveis, pode-se estimar a composição química assumindo-se que essa não varie no espaço amostral. A composição mineralógica nada mais é do que a contribuição relativa, em massa, de cada mineral na amostra onde é obrigatório que o somatório dessas contribuições seja igual a 1.

A composição mineralógica nada mais é do que a contribuição relativa, em massa, de cada mineral na amostra, $p(M_i)$, onde a condição de contorno abaixo deve ser sempre observada, como mostrada na Equação 2.

$$\sum_i p(M_i) = 1 \quad (2)$$

2. MATERIAL E MÉTODOS

O problema a ser resolvido é a determinação da função de transformação, $p(Q_i|M_j)$ que representa a composição química de cada mineral. A função de transformação pode ser determinada a partir de amostras com composição mineralógica distintas e as análises químicas correspondentes. Estes dados foram gerados a partir de 22 amostras de bauxita. A porcentagem de minerais e os teores de elementos determinados por DRX/Rietveld e FRX no LCT se encontram na Tabela 2 e na Tabela 3, respectivamente. A partir deles, elaborou-se a matriz de conversão mineralógica e comparou-se os erros entre os resultados medidos e os obtidos empiricamente.

Cada mineral tem uma composição química associada e a relação entre a composição química e a composição mineralógica pode ser equacionada:

$$p(Q_i) = \sum_j p(M_j)p(Q_i|M_j) \quad (3)$$

onde i é um índice para todos os analitos, como por exemplo Al_2O_3 e SiO_2 , e j é um índice para todos os minerais presentes, como por exemplo o quartzo e a gibbsita. A Equação (3) relaciona a composição química da amostra à composição mineralógica e $p(Q_i|M_j)$ é a função de transformação, ou, mais diretamente, a composição química de cada mineral individual. O cálculo da composição química $p(Q_i)$ a partir de uma composição mineralógica medida, é direto, simplesmente a multiplicação de um vetor por uma matriz. Para calcular a composição mineralógica a partir de uma composição química conhecida, o problema passa ser um problema de inversão, já que a composição mineralógica $p(M_j)$ está dentro da soma na Equação (3).

Tabela 2 – Mineralogia, em %, determinado por Rietveld/DRX

Grupo Amostral	Gibbsita/ Boehmita	Caulinita	Hematita	Goetita	Quartzo	Anatásio/ Rutilo	Total
1	51	15	26	6	2	1	101
2	68	10	16	4	1	1	100
3	54	8	31	5	1	0	99
4	63	27	3	2	2	2	99
5	31	29	29	8	1	1	99
6	71	20	5	1	1	1	99
7	41	9	46	3	1	0	100
8	31	54	6	3	5	2	101
9	53	35	4	4	1	3	100
10	64	18	13	3	1	1	100
11	70	23	4	1	1	1	100
12	22	66	1	2	7	3	101
13	26	19	48	5	0	1	99
14	57	34	4	1	1	3	100
15	45	43	5	4	1	3	101
16	46	19	24	8	1	1	99
17	77	14	6	1	1	1	100
18	18	71	4	1	4	2	100
19	56	32	6	3	1	3	101
20	16	30	43	7	0	3	99
21	15	10	10	63	0	1	99
22	78	19	1	1	1	1	101

A matriz $p(Q_i|M_j)$ foi calculada usando o Solver™ do Excel, e a função objetivo indicada na Equação 4.

$$\phi = |p(\widehat{Q_i}) - p(Q_i)|/p(Q_i) \quad (4)$$

onde $p(\widehat{Q_i})$ representa as análises químicas calculadas pela Equação 3. Todos os valores contidos na matriz $p(Q_i|M_j)$ foram estimados simultaneamente para as 22 amostras disponíveis.

Tabela 3 – Teores de elementos, em %, determinados por FRX

Grupo Amostral	Al ₂ O ₃	SiO ₂	Fe ₂ O ₃	TiO ₂	PF	Al ₂ O ₃ (ap)	SiO ₂ (re)	Total
1	36.9	11.4	30.3	1.52	19.9	27.9	9.09	100.0
2	46.1	7.55	19.2	1.48	24.9	40.0	6.02	99.2
3	37.1	7.26	33.7	1.38	20.6	31.0	5.21	100.0
4	48.5	17.8	6.74	1.92	24.4	35.9	14.5	99.4
5	32.4	16.1	33.0	1.52	17.1	18.8	12.6	100.1
6	51.4	11.6	7.70	2.01	26.6	42.5	9.58	99.3
7	30.2	6.92	44.7	1.20	17.1	25.8	4.59	100.1
8	39.3	32.9	8.18	1.48	19.0	15.5	27.3	100.9
9	46.2	20.5	7.96	2.22	23.1	28.3	17.4	100.0
10	48.8	9.54	13.9	1.75	25.7	40.4	7.86	99.7
11	51.4	13.2	6.52	1.76	25.9	41.9	10.6	98.8
12	36.8	43.4	3.03	1.74	15.3	8.26	36.3	100.3
13	26.4	12.1	45.9	1.43	14.7	17.3	9.03	100.6
14	48.0	20.5	5.23	2.19	23.5	32.0	17.3	99.4
15	43.9	25.3	7.19	2.62	20.8	20.8	21.3	99.8
16	36.1	12.9	30.3	1.57	19.3	24.8	10.3	100.2
17	52.3	9.43	8.89	1.60	27.2	45.1	8.06	99.4
18	38.4	37.3	5.90	1.70	16.8	10.5	31.5	100.1
19	46.4	18.9	9.33	1.95	22.9	29.2	16.1	99.5
20	26.9	14.3	42.3	1.93	14.5	12.9	10.6	99.9
21	19.7	10.7	53.4	1.07	15.2	8.02	7.30	100.1
22	53.5	12.8	3.37	1.84	26.3	41.9	11.0	97.8

A conversão mineralógica foi feita utilizando a linguagem de programação Julia. Julia é uma linguagem de código aberto, gratuita, de alto nível e de idade e dificuldade relativamente baixas, possuindo um conjunto de bibliotecas diversificadas e integradas para trabalhar com álgebra linear e outros tipos de cálculos (GITHUB, 2021).

A conversão mineralógica utilizou como interface o *notebook* Pluto (Pluto.jl); *notebooks* são ambientes de programação desenvolvidos para funcionamento em navegadores web, de maior praticidade e baixa dificuldade de utilização se comparados a APIs, interfaces para desenvolvimento que necessitam de instalação na máquina. Em específico, o Pluto *notebook* gira em torno da reatividade, leveza e modernidade: foi desenvolvido utilizando a própria linguagem Julia, possui interface amigável e intuitiva e, principalmente, é recursivo. A principal ideia da recursividade é a inserção de células que podem ser colocadas em qualquer ordem e a retroalimentação das mesmas, não sendo necessária atualização dos valores e reexecução da interface (JULIAHUB, 2020). Ao longo do trabalho, foram utilizadas bibliotecas de carregamento e leitura de planilhas (CSV.jl, DataFrames.jl) e de modelamento matemático e otimização não-linear (JuMP.jl, Ipopt.jl).

3. RESULTADOS

A Tabela 4 ilustra os resultados da composição química calculados pela Equação 3 para a matriz de transformação determinada. Já a Tabela 5 mostra a diferença entre os resultados obtidos em laboratório e os calculados. A soma de todas estas diferenças é o valor da função objetivo na Equação 4.

Ao analisar a Tabela 5 nota-se que os grupos amostrais 7, 12, 20 e 21 possuem características que as diferem das demais. Os grupos 7, 20 e 21, devido ao seu alto teor de ferro, não são tecnicamente bauxitas. Contudo, visto que caracterizam o depósito mineral, foram mantidas na conversão mineralógica. Além disso, nota-se que o alto valor de erro nessas amostras tem como origem a porcentagem de óxido de titânio. Pode-se atribuir essa diferença aos baixos teores dos minerais de titânio, que estão perto ou abaixo do limite de detecção do método de DRX/Rietvelt. Devido aos baixos teores de rutilo/anatásio na bauxita laterítica, a composição química destes minerais foi fixada em 100% de TiO_2 para a conversão mineralógica. Em função do baixo limite de detecção, pode-se antever erros significativos nas estimativas de rutilo/anatásio.

Tabela 4 – Teores de elementos, em %, calculados empiricamente

Grupo Amostral	Al_2O_3	SiO_2	Fe_2O_3	TiO_2	PF	Al_2O_3 (ap)	SiO_2 (re)	Total
1	38.61	11.40	28.04	1.52	20.43	28.67	8.69	100.0
2	47.08	7.78	18.92	1.63	24.60	38.35	6.13	100.0
3	39.02	7.25	32.06	0.58	21.08	31.00	5.08	100.0
4	49.57	16.88	6.35	2.55	24.65	35.72	14.50	100.0
5	32.14	17.65	32.12	1.41	16.69	17.99	14.30	100.0
6	52.16	12.46	7.46	1.61	26.32	40.26	10.78	100.0
7	31.69	7.99	42.10	0.52	17.70	23.56	5.29	100.0
8	38.58	32.69	8.45	2.26	18.03	17.31	27.70	100.0
9	45.87	19.71	8.44	3.46	22.52	29.80	17.18	100.0
10	47.18	11.60	15.46	1.58	24.18	36.06	9.68	100.0
11	52.01	13.79	6.52	1.58	26.09	39.29	12.01	100.0
12	36.88	40.30	3.21	3.16	16.45	12.24	34.19	100.0
13	26.40	12.09	45.38	1.43	14.70	15.35	9.03	100.0
14	47.82	19.15	6.08	3.48	23.47	32.00	16.78	100.0
15	43.35	23.43	8.91	3.36	20.94	25.07	20.46	100.0
16	37.68	12.58	28.43	1.51	19.79	26.42	9.97	100.0
17	53.31	9.43	8.42	1.65	27.20	43.24	8.06	100.0
18	36.65	40.24	4.77	2.16	16.17	10.15	34.81	100.0
19	46.27	18.10	9.28	3.45	22.90	31.18	15.71	100.0
20	23.86	17.43	42.52	3.36	12.83	9.66	13.89	100.0
21	17.49	8.12	61.79	1.42	11.18	9.37	4.77	100.0
22	54.85	11.66	4.25	1.62	27.62	43.30	10.22	100.0

Já o grupo 12 é composto predominantemente por caulinita. Outras amostras do tipo não produziram resíduos altos, porém essa amostra em particular apresenta quartzo e rutilo/anatásio mais altos que a norma e o maior valor de sílica reativa do lote. Questões pontuais ou mesmo um erro de análise podem ser justificativas para os valores encontrados. De modo a não diminuir o universo amostral a ser utilizado na conversão, esse agrupamento de amostras foi mantido. Futuros testes serão refeitos em novos testemunhos de sondagem para revisão desses valores.

Tabela 5 – Diferença entre os valores medidos e calculados

Grupo Amostral	Al ₂ O ₃	SiO ₂	Fe ₂ O ₃	TiO ₂	PF	Al ₂ O ₃ (ap)	SiO ₂ (re)	Total
1	0.046	0.000	0.075	0.000	0.027	0.028	0.044	0.220
2	0.021	0.030	0.015	0.098	0.012	0.041	0.018	0.236
3	0.052	0.001	0.049	0.579	0.024	0.000	0.026	0.730
4	0.022	0.052	0.058	0.329	0.010	0.005	0.000	0.477
5	0.008	0.096	0.027	0.074	0.024	0.043	0.135	0.407
6	0.015	0.074	0.031	0.198	0.011	0.053	0.126	0.507
7	0.049	0.155	0.058	0.566	0.035	0.087	0.152	1.102
8	0.018	0.007	0.032	0.528	0.051	0.117	0.015	0.768
9	0.007	0.038	0.060	0.558	0.025	0.053	0.013	0.754
10	0.033	0.216	0.112	0.099	0.059	0.108	0.231	0.858
11	0.012	0.045	0.000	0.101	0.007	0.062	0.133	0.360
12	0.002	0.071	0.059	0.815	0.075	0.482	0.058	1.563
13	0.000	0.001	0.011	0.000	0.000	0.113	0.000	0.124
14	0.004	0.066	0.163	0.588	0.001	0.000	0.030	0.852
15	0.013	0.074	0.240	0.284	0.007	0.206	0.039	0.861
16	0.044	0.024	0.062	0.038	0.026	0.065	0.032	0.291
17	0.019	0.000	0.053	0.029	0.000	0.041	0.000	0.143
18	0.045	0.079	0.192	0.273	0.038	0.034	0.105	0.766
19	0.003	0.042	0.005	0.770	0.000	0.068	0.024	0.912
20	0.113	0.219	0.005	0.739	0.116	0.251	0.310	1.754
21	0.112	0.241	0.157	0.326	0.265	0.168	0.346	1.615
22	0.025	0.089	0.262	0.120	0.050	0.033	0.070	0.651

4. CONCLUSÕES

A conversão mineralógica é uma poderosa aliada na busca por novas variáveis e metodologias a serem aplicadas na descrição de uma jazida e na modelagem geometalúrgica.

O desenvolvimento da rotina para a determinação da matriz de transformação se mostrou bastante robusto, porém existem ainda muitas incertezas quanto à escolha das amostras que eventualmente determinarão a função de transformação. Amostras muito distintas, como por exemplo predominante lateríticas ou caulínicas provavelmente tem uma matriz de transformação apropriada para estes casos específicos. Em outras palavras, não se pode assumir que todos os tipos de rocha nas imediações de um domínio tenham a mesma função de transformação. Porém, é bastante provável que as bauxitas que constituem minério lavrável na camada tenham uma função de transformação única.

O cálculo da composição mineralógica a partir de uma análise química é bastante simples e pode ser feito utilizando uma técnica de minimização, como o próprio Solver™, disponível no Excel™.

O problema mais significativo encontrado neste trabalho é quanto ao limite de detecção pelo método de Rietveld/DRX. Para minerais que ocorrem em quantidades relativamente baixas, com alguns pontos percentuais, as quantidades medidas podem conter erros relativos grandes. Nestes casos, parece ser mais adequado utilizar a composição química teórica destes minerais nas funções de transformação, em lugar da composição química estimado pelo método apresentado aqui.

AGRADECIMENTOS

Agradecemos à Mineração Rio do Norte (MRN) pela parceria em projetos de pesquisa com a Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG) e a todos que contribuíram para o desenvolvimento desse trabalho.

REFERÊNCIAS

COHEN, David. WARD, Colin R. SEDNORM— a program to calculate a normative mineralogy for sedimentary rocks based on chemical analyses. 1991. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/009830049190026A>. Acesso em: 25 abr. 2023.

DHAR, Priyanka. THORNHILL, Maria. KOTA, Hanumantha Rao. Investigation of Copper Recovery from a New Copper Deposit (Nussir) in Northern Norway. 2019. Disponível em: <https://doi.org/10.1080/08827508.2019.1635475>. Acesso em: 25 abr. 2023.

GITHUB. Julia for Numerical Computation in MIT Courses. 2021. Disponível em: <https://github.com/mitmath/julia-mit>. Acesso em: 25 abr. 2023.

HERRMANN, Walter. BERRY, Ron F. MINSQ – a least squares spreadsheet method for calculating mineral proportions from whole rock major element analyses. 2002. Disponível em: <https://pubs.geoscienceworld.org/gaea/article/2/4/361/22550/MINSQ-a-least-squares-spreadsheet-method-for>. Acesso em: 25 abr. 2023.

PARIAN, Medhi. LAMBERG, Perri. MOCKEL, Robert. ROSENKRANZ, Jan. Analysis of mineral grades for geometallurgy: Combined element-to-mineral conversion and quantitative X-ray diffraction. 2015. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0892687515001934>. Acesso em: 18 abr. 2023.

PAKTUNC, A. Dogan. MODAN—a computer program for estimating mineral quantities based on bulk composition: Windows version. 2001. Disponível em: <https://dl.acm.org/doi/10.1016/S0098-3004%2801%2900006-1>. Acesso em: 25 abr. 2023.

SCHNEIDER, Claudio. Geometalurgia, Mineração de precisão e sustentabilidade. 2014. Disponível em: https://www.cetem.gov.br/antigo/clipping/item/download/2286_93035e3cffd92e27217b90fab4cf19c8. Acesso em: 25 abr. 2023.