



**UNIVERSIDAD DE CHILE
FACULTAD DE CIENCIAS FISICAS Y MATEMATICAS
DEPARTAMENTO DE INGENIERIA DE MINAS**

**MODELACION TERMO-FLUIDODINAMICA EN EL PROCESO DE CONVERSION
CONTINUA ENAMI DE MATA DE COBRE EN REACTOR DE LECHO EMPACADO**

MEMORIA PARA OPTAR AL TÍTULO DE INGENIERO CIVIL DE MINAS

EXEQUIEL ALONSO MARAMBIO DIAZ

**PROFESOR GUIA:
LEANDRO VOISIN ARAVENA**

**MIEMBROS DE LA COMISION:
CHRISTIAN IHLE
JACQUES WIERTZ**

**SANTIAGO DE CHILE
MARZO 2014**

Resumen

El proceso de conversión de mata a cobre blíster es una etapa tradicional e indispensable del proceso productivo de cobre metálico a partir de concentrados sulfurados, sin embargo, sus costos asociados por concepto de energía son crecientes y las normas medioambientales resultan ser cada vez más estrictas respecto a las emisiones de gases fugitivos e impurezas, esto ha motivado el desarrollo de procesos continuos y de menor costo. Es dentro de este marco, que el grupo de pirometalurgia de la Universidad de Chile, en conjunto con ENAMI y el AMTC (Advanced Mining Technology Center), ha investigado y desarrollado un nuevo proceso de conversión continua basado en la oxidación de mata de cobre con un flujo de aire o aire enriquecido con oxígeno en contracorriente en un reactor de lecho empacado con una capacidad de 80 [g/min].

En el espíritu de este proyecto, es que en el presente estudio se modeló de forma computacional la fluidodinámica, termodinámica y cinética del azufre presente en el sistema de conversión continua de cobre en lecho empacado, en lo que comúnmente se conoce como modelo CTFD. Esto, con el fin de obtener parámetros de operación que sean aplicables a la actual planta piloto ubicada en la fundición Hernán Videla Lira de ENAMI, y posteriormente a escala industrial cuando el sistema entre en operación.

De este modo, se realizaron simulaciones tanto de sectores del lecho empacado, como de reactores a escala laboratorio e industrial, en dos y en tres dimensiones, y tanto en estado estacionario como transiente. En base a éstas, es que se encontró una región de operación con buenos resultados que viene guiada por parámetros de operación como son la velocidad inicial (u_i), fuertemente ligada al número de Reynolds del sistema (Re), la porosidad del lecho (P) y la altura de éste. Región que se resume en las siguientes ecuaciones para 4 alturas distintas de lecho (25, 47, 100 y 195 [cm]):

$$\begin{array}{ll} P_{25} = 12.33 \cdot \ln(u_i) + 79.2 & P_{25} = 21.39 \cdot \ln(Re) - 141 \\ P_{47} = 27.65 \cdot \ln(u_i) + 159.9 & P_{47} = 13.95 \cdot \ln(Re) - 70.4 \\ P_{100} = 54.85 \cdot \ln(u_i) + 233.3 & P_{100} = 61.13 \cdot \ln(Re) - 457.2 \\ P_{195} = 14.43 \cdot \ln(u_i) + 84.2 & P_{195} = 16.35 \cdot \ln(Re) - 99.5 \end{array}$$

Además, en base a los resultados, se encontró que la desulfuración de cobre está fuertemente dominada por la convección en todos sus procesos y que para ser llevada a cabo con buenos resultados el flujo que atraviesa el empaquetamiento debe ser de carácter laminar, independiente que este se componga de dos fluidos inmiscibles en contracorriente.

Sin embargo, pese a los resultados encontrados, éstos necesitan ser validados en estudios futuros, lo cual mejoraría el modelo, dándole más realismo y complejidad al mismo, transformando la simulación en una fuerte herramienta a tener en cuenta a la hora de llevar a cabo la operación.

Pese a lo anterior, se destaca que en base a estos estudios y otros cercanos realizados, existe una concreta y promisoría utilización de la nueva tecnología de conversión continua en reactor de lecho empacado como reemplazo de aquellas tradicionales, la cual solo debe ser optimizada y mejorada en ciertos aspectos. Debido a esto, es que el presente trabajo pretende ser un buen referente que contribuya a la consagración de esta tecnología por sobre las existentes.

Abstract

The conversion of copper matte to Blister, is a traditional and essential stage during the production process of metallic copper from sulfide concentrates, however, higher energy costs and environmental standards are becoming increasingly stringent regarding fugitive gas emissions and impurities, thereby, the development of continuous processes with lower operational costs have been considered. Thus, the pyrometallurgy group of University of Chile in partnership with ENAMI and the AMTC (Advanced Mining Technology Center) has been investigating and developing a new continuous converting process based on the oxidation of copper matte with a blast of air or oxygen-enriched air in countercurrent into a packed bed reactor with a capacity of 80 [g/min].

In the spirit of this project, in the present study was modeled computationally the fluid dynamics, thermodynamics and kinetics of sulfur in the system of continuous converting of copper in packed bed, in what is commonly known as CTFD model. This, in order to obtain operating parameters that are applicable to the current pilot plant in the Hernán Videla Lira smelting of ENAMI, and subsequently on an industrial scale when the system will be operating.

In this way, both simulations of packed bed sectors as in laboratory-scale reactor and industrial-scale in two and three dimensions were performed, and both at the steady state and transient. Based on these, an operating region with good results which is guided by operating parameters such as the initial speed (u_i), strongly linked to the Reynolds number of the system (Re), the porosity of the bed (P) and the height of the latter was found. Region which is summarized in the following equations for 4 different bed heights (25, 47, 100 and 195 [cm]):

$$\begin{array}{ll} P_{25} = 12.33 \cdot \ln(u_i) + 79.2 & P_{25} = 21.39 \cdot \ln(Re) - 141 \\ P_{47} = 27.65 \cdot \ln(u_i) + 159.9 & P_{47} = 13.95 \cdot \ln(Re) - 70.4 \\ P_{100} = 54.85 \cdot \ln(u_i) + 233.3 & P_{100} = 61.13 \cdot \ln(Re) - 457.2 \\ P_{195} = 14.43 \cdot \ln(u_i) + 84.2 & P_{195} = 16.35 \cdot \ln(Re) - 99.5 \end{array}$$

Furthermore, based on the results, it was found that the copper desulfurization is strongly dominated by convection in all processes and to be carried out with good results the flow through the packing must be of laminar character, independent which this is constituted by two immiscible fluids in countercurrent.

However, in spite of the results, they need to be validated in future studies, which would improve the model, giving more realism and complexity to it, transforming the simulation in a strong tool to consider when the operation will be carry out.

Despite the above, it is highlighted that based on these studies and other nearby made, there is a concrete and promising use of the new technology of continuous converting in packed bed reactor as a replacement for the traditional ones, which should only be optimized and improved in certain aspects. Because of this, the present work is intended as a good reference that contributes to the consecration of this technology over the existing ones.

Agradecimientos

A ENAMI por su cooperación con material e información indispensable para la realización de esta memoria.

Al Departamento de Ingeniería de Minas, lugar que me ha brindado los mejores momentos que he vivido durante mi estancia en la universidad. Mención especial para Juanita Vergara y Luchito, quienes me salvaron la vida en tantas oportunidades, siempre les estaré agradecido.

A mi familia, que siendo sincero, poco les importa el contenido de esta memoria, pero que siempre me han apoyado de forma incondicional, contra viento y marea, han estado allí. Aunque poco lo demuestre, saben que los quiero.

Al profesor Leandro Voisin por haberme guiado y entregado los conocimientos y la confianza necesaria para enfrentar la vida profesional de la mejor manera posible.

A los profesores de mi comisión: Christian Ihle y Jacques Wiertz por sus valiosos aportes, los cuales hicieron de éste un trabajo de calidad.

A Marcos Cáceres, por su desinteresada e imprescindible colaboración en la entrega de datos. Muchas, muchas gracias.

A todos los que me han ayudado de forma directa e indirecta, e incluso a veces sin pensarlo o saberlo, a llegar hasta este punto de mi vida. Empezando por mi madre Susana y mi hermana Solange, personas que siempre han estado conmigo y que se han bancado tantos momentos junto a mí, no tengo palabras para expresar todo lo que significan. A mi abuela Nora, que con su especial cariño siempre me ha apoyado, cuidado y protegido. A mi tata Manolo, que no sabes cómo me gustaría que estuvieras acá viejo, te debo tanto de lo que he logrado, que solo espero que donde estés, que sé que es el mejor lugar, te sientas orgulloso de mi. Y, a ese profesor Cubano de la escuela, que me motivo a seguir luchando en la vida, sin ti no sabría dónde estaría ahora.

A todas las maravillosas personas, grandes amigos y compañeros que conocí y compartí alguna vez durante mi estancia en la universidad, que para ser justo con todos, y luego no me reclamen que no los nombré, ya que son tantos y se me puede quedar alguien por allí, no daré detalles. Pero todos saben quiénes son y cuánto los quiero, los aprecio y les estoy agradecido, y que siempre tendrán un lugar especial en mi corazón.

Finalmente, a mis mascotas, mi guitarra, mis bandas favoritas de rock y metal y al Colo-Colo por haber hecho más alegre y placentera las largas jornadas de estudio y elaboración de esta memoria.

MUCHAS GRACIAS

*A mi abuelo, que estés donde estés...
Este título también es tuyo.*

Tabla de contenido

CAPITULO 1: INTRODUCCION.....	1
1.1. Presentación del tema.....	1
1.2. Motivación	2
1.2. Objetivos	2
1.2.1. Objetivos Generales	2
1.2.2. Objetivos Específicos	3
1.3. Alcances	3
CAPITULO 2: ANTECEDENTES DE LA TECNOLOGIA DE CONVERSION DE COBRE	4
2.1. Descripción general del proceso de conversión	4
2.1.1. Soplado a escoria.....	6
2.1.2. Soplado a mata (cobre).....	7
2.2. Tecnología actual de conversión - Convertidor Peirce-Smith.....	8
2.3. Tecnologías de conversión continua	10
2.3.1. Proceso Mitsubishi	10
2.3.2. Proceso Kennecott – Outokumpu.....	11
2.3.3. Proceso Ausmelt C3	12
2.3.4. Conversión continua de cobre en lecho empacado.....	14
CAPITULO 3: ANTECEDENTES DE LA MODELACION TERMO-FLUIDODINAMICA EN LECHO EMPACADO	18
3.1. Modelos empíricos	18
3.1.1. Modelo de caída de presión para flujo laminar	18
3.1.2. Modelo de caída de presión para flujo turbulento	21
3.1.3. Modelo de caída de presión para flujo intermedio	22
3.1.4. Modelo de flujos en contracorriente.....	22
3.2. Modelos computacionales	23
3.2.1. Modelo de lecho empacado para refinación continua de cobre.....	23
3.2.2. Modelo para moldeo continuo de acero	24
3.2.3. Modelo de solidificación de una gota de aluminio.....	26
3.2.4. Modelo de transferencia de masa en plumas de burbujas	27
3.3. Consideraciones al momento de modelar.....	28
CAPITULO 4: METODOLOGIA Y ANTECEDENTES EN LA SIMULACION TERMO-FLUIDODINAMICA DE LA CONVERSION CONTINUA DE MATA DE COBRE	29

4.1.	Conceptualización del problema	29
4.2.	Modelamiento multifísico	29
4.3.	Modelos J1, J2 y J3	30
4.3.1.	Geometría y consideraciones.....	30
4.3.2.	Ecuaciones Gobernantes	32
4.3.3.	Condiciones de borde generales	37
4.4.	Modelos CS, BCC, FCC, HCP y 2D	37
4.4.1.	Geometría y consideraciones.....	37
4.4.2.	Ecuaciones Gobernantes	39
4.4.3.	Condiciones de borde generales	40
4.5.	Modelo J3D	40
4.5.1.	Geometría y consideraciones.....	40
4.5.2.	Ecuaciones Gobernantes	41
4.5.3.	Condiciones de borde	41
CAPITULO 5: RESULTADOS Y DISCUSION		42
5.1.	Modelos J1, J2 y J3	42
5.1.1.	Solución.....	42
5.1.2.	Modelos J1 y J2: Efecto de la difusividad y porcentaje de oxígeno inyectado	42
5.1.3.	Modelo J1: Efecto de porosidad y razón de área de mata versus perímetro de reacción	46
5.2.	Modelos CS, BCC, FCC, HCP y 2D	83
5.2.1.	Solución.....	83
5.3.	Modelo J3D	93
5.3.1.	Solución.....	93
5.4.	Tiempos de residencia y presión dentro del lecho	101
CAPITULO 6: CONCLUSIONES Y PAUTAS PARA TRABAJO FUTURO.....		105
BIBLIOGRAFÍA.....		109
ANEXO A: Detalles de cálculo y modelo JP.....		111
Detalle de las propiedades físicas de los fluidos en <i>COMSOL Multiphysics</i>		111
Detalle de las condiciones iniciales de cada simulación		112
Modelo JP: Simulación por flujo en medios porosos.....		114
ANEXO B: Detalles de resultados de simulación en <i>COMSOL Multiphysics</i>		116

Índice de figuras

Figura 1: Diagrama de Ellingham-Richardson para óxidos metálicos ^[3]	5
Figura 2: Diagrama de fases sistema binario FeO-SiO ₂ ^[4]	6
Figura 3: Diagrama de fases sistema binario Cu-S ^[5]	7
Figura 4: Esquema del convertidor (a la izquierda) ^[6] y convertidor de la fundición Chagres (a la derecha).	8
Figura 5: Funcionamiento convertidor Peirce-Smith y campana principal ^[7]	9
Figura 6: Esquema del proceso Mitsubishi ^[8]	11
Figura 7: Esquema de los hornos de fusión y conversión (desacoplados) Kennecott-Outokumpu ^[9]	12
Figura 8: Horno de conversión continua Ausmelt ^[10]	13
Figura 9: Esquema del horno de conversión continua de lecho empacado ^[11]	14
Figura 10: Planta piloto-industrial de conversión continua en lecho empacado.	17
Figura 11: Tortuosidad del flujo a través de un lecho empacado.	18
Figura 12: Representación esquemática de capilares rectos.	18
Figura 13: Esquema de un capilar individual.	19
Figura 14: Perfiles de concentración de oxígeno para distintos tamaños de reactor ^[16]	24
Figura 15: Perfil transversal de temperatura del acero moldeado ^[17]	25
Figura 16: Perfil transversal de flujo calórico del acero moldeado ^[17]	25
Figura 17: Comparación de resultados de temperatura a lo largo del equipo en la simulación y medidos ^[17]	26
Figura 18: Resultados caso isoterma ^[18]	27
Figura 19: Resultados caso no isoterma ^[18]	27
Figura 20: Sección de lecho en 2D en COMSOL Multiphysics (Modelo J1)	30
Figura 21: Esquema del nuevo proceso de conversión continua ENAMI a escala laboratorio en COMSOL Multiphysics (Modelo J2)	31
Figura 22: Esquema del nuevo proceso de conversión continua ENAMI a escala de planta piloto en COMSOL Multiphysics (Modelo J3)	32
Figura 23: Empaquetamientos atómicos conocidos ^[30]	37
Figura 24: Modelos CS, BCC, FCC y HCP en Comsol Multiphysics	38
Figura 25: Modelo 2D transiente en Comsol Multiphysics	38
Figura 26: Esquema de sección de lecho del nuevo proceso de conversión continua ENAMI en COMSOL Multiphysics (Modelo J3D)	41
Figura 27: Perfil de velocidad del Modelo J1 para una concentración de oxígeno de 40% y modelo de difusividad de Nernst-Einstein	43
Figura 28: Perfil de concentración de azufre del Modelo J1 para una concentración de oxígeno de 40% y modelo de difusividad de Nernst-Einstein	43
Figura 29: Perfil de velocidad del Modelo J2 para una concentración de oxígeno de 40% y modelo de difusividad de Wilke-Chang	45
Figura 30: Perfil de concentración de azufre del Modelo J2 para una concentración de oxígeno de 40% y modelo de difusividad de Wilke-Chang	45
Figura 31: Perfil de velocidad Modelo J1 para una porosidad del 15%	47
Figura 32: Perfil de concentración de azufre Modelo J1 para una porosidad del 15%	48
Figura 33: Perfil de temperatura Modelo J1 para una porosidad del 15%	49

Figura 34: Perfil de velocidad Modelo J2 para una porosidad del 15%	56
Figura 35: Perfil de concentración de azufre Modelo J2 para una porosidad del 15%	57
Figura 36: Perfil de temperatura Modelo J2 para una porosidad del 15%	58
Figura 37: Perfil de velocidad Modelo J2 para una porosidad del 15% y velocidad inicial 0.005 [m/s].....	61
Figura 38: Perfil de concentración de azufre Modelo J2 para una porosidad del 15% y velocidad inicial 0.005 [m/s]	62
Figura 39: Perfil de temperatura Modelo J2 para una porosidad del 15% y velocidad inicial 0.005 [m/s]	63
Figura 40: Perfiles de velocidad de metal blanco Modelo J2 – Pares de velocidad inicial y porosidad. De izquierda a derecha y de arriba abajo pares: 0.005[m/s] y porosidad 15%; 0.0075[m/s] y porosidad 20%; 0.009[m/s] y porosidad 30%; 0.012[m/s] y porosidad 40% y; 0.019[m/s] y porosidad 50%.	67
Figura 41: Perfiles de concentración de azufre en metal blanco Modelo J2 – Pares de velocidad inicial y porosidad. De izquierda a derecha y de arriba abajo pares: 0.005[m/s] y porosidad 15%; 0.0075[m/s] y porosidad 20%; 0.009[m/s] y porosidad 30%; 0.012[m/s] y porosidad 40% y; 0.019[m/s] y porosidad 50%.	69
Figura 42: Perfiles de temperatura en metal blanco Modelo J2 – Pares de velocidad inicial y porosidad. De izquierda a derecha y de arriba abajo pares: 0.005[m/s] y porosidad 15%; 0.0075[m/s] y porosidad 20%; 0.009[m/s] y porosidad 30%; 0.012[m/s] y porosidad 40% y; 0.019[m/s] y porosidad 50%.	71
Figura 43: Perfiles de velocidad de metal blanco Modelo J3 – Tríos de velocidad inicial, porosidad y altura de lecho. De izquierda a derecha y de arriba abajo Tríos: 0.05[m/s], 41% y 195 [cm]; 0.025[m/s], 31% y 197[cm]; 0.03[m/s], 41% y 100[cm]; 0.025[m/s], 31% y 98[cm]; 0.045[m/s], 41% y 24[cm]; 0.02[m/s], 31% y 25[cm].....	75
Figura 44: Perfiles de concentración de azufre en metal blanco Modelo J3 – Tríos de velocidad inicial, porosidad y altura de lecho. De izquierda a derecha y de arriba abajo Tríos: 0.05[m/s], 41% y 195 [cm]; 0.025[m/s], 31% y 197[cm]; 0.03[m/s], 41% y 100[cm]; 0.025[m/s], 31% y 98[cm]; 0.045[m/s], 41% y 24[cm]; 0.02[m/s], 31% y 25[cm].	77
Figura 45: Perfiles de temperatura en metal blanco Modelo J3 – Tríos de velocidad inicial, porosidad y altura de lecho. De izquierda a derecha y de arriba abajo Tríos: 0.05[m/s], 41% y 195 [cm]; 0.025[m/s], 31% y 197[cm]; 0.03[m/s], 41% y 100[cm]; 0.025[m/s], 31% y 98[cm]; 0.045[m/s], 41% y 24[cm]; 0.02[m/s], 31% y 25[cm].....	79
Figura 46: Perfil de velocidad de la mezcla dependiente del tiempo en su último segundo de simulación para las distintitas estructuras. De arriba abajo y de izquierda a derecha: CS, BCC, FCC, HCP y 2D.	85
Figura 47: Perfil de concentración de azufre dependiente del tiempo en su último segundo de simulación para las distintitas estructuras. De arriba abajo y de izquierda a derecha: CS, BCC, FCC, HCP y 2D.	87
Figura 48: Perfil de temperatura dependiente del tiempo en su último segundo de simulación para las distintitas estructuras. De arriba abajo y de izquierda a derecha: CS, BCC, FCC, HCP y 2D.....	89
Figura 49: Perfiles de velocidad para 5 planos yz distintos equidistantes – modelo J3D	95
Figura 50: Perfiles de velocidad para 3 planos yz distintos equidistantes en 3 dimensiones (izquierda) y perfiles externos de velocidad en 3 dimensiones (derecha) – modelo J3D.....	96
Figura 51: Perfiles de concentración de azufre para 5 planos yz distintos equidistantes – modelo J3D	97
Figura 52: Perfiles de concentración de azufre para 3 planos yz distintos equidistantes en 3 dimensiones (izquierda) y perfiles externos de concentración de azufre en 3 dimensiones (derecha) – modelo J3D.....	98
Figura 53: Perfiles de temperatura para 5 planos yz distintos equidistantes – modelo J3D.....	99
Figura 54: Perfiles de temperatura para 3 planos yz distintos equidistantes en 3 dimensiones (izquierda) y perfiles externos de temperatura en 3 dimensiones (derecha) – modelo J3D	100
Figura 55: Cotas de presión en los distintos modelos simulados	104

Figura 56: Perfiles de concentración de azufre mediante medios porosos - Modelo J1 (derecha) y modelo J2 (izquierda).....	115
Figura 57: Perfil de concentración de azufre del Modelo J1 para una concentración de oxígeno de 21% y modelo de difusividad de Wilke-Chang.....	116
Figura 58: Perfil de concentración de azufre del Modelo J1 para una concentración de oxígeno de 30% y modelo de difusividad de Wilke-Chang.....	116
Figura 59: Perfil de concentración de azufre del Modelo J1 para una concentración de oxígeno de 40% y modelo de difusividad de Wilke-Chang.....	117
Figura 60: Perfil de concentración de azufre del Modelo J1 para una concentración de oxígeno de 21% y modelo de difusividad de Nernst-Einstein	117
Figura 61: Perfil de concentración de azufre del Modelo J1 para una concentración de oxígeno de 30% y modelo de difusividad de Nernst-Einstein	118
Figura 62: Perfil de concentración de azufre del Modelo J2 para una concentración de oxígeno de 21% y modelo de difusividad de Wilke-Chang.....	118
Figura 63: Perfil de concentración de azufre del Modelo J2 para una concentración de oxígeno de 30% y modelo de difusividad de Wilke-Chang.....	119
Figura 64: Perfil de concentración de azufre del Modelo J2 para una concentración de oxígeno de 21% y modelo de difusividad de Nernst-Einstein	119
Figura 65: Perfil de concentración de azufre del Modelo J2 para una concentración de oxígeno de 30% y modelo de difusividad de Nernst-Einstein	120
Figura 66: Perfil de concentración de azufre del Modelo J2 para una concentración de oxígeno de 40% y modelo de difusividad de Nernst-Einstein	120
Figura 67: Perfiles de velocidad, concentración de azufre y temperatura para una porosidad de 20% Modelo J1.....	121
Figura 68: Perfiles de velocidad, concentración de azufre y temperatura para una porosidad de 30% Modelo J1.....	122
Figura 69: Perfiles de velocidad, concentración de azufre y temperatura para una porosidad de 40% Modelo J1.....	123
Figura 70: Perfiles de velocidad, concentración de azufre y temperatura para una porosidad de 50% Modelo J1.....	124
Figura 71: Perfiles de velocidad, concentración de azufre y temperatura para una porosidad de 60% Modelo J1.....	125
Figura 72: Perfiles de velocidad, concentración de azufre y temperatura para una porosidad de 70% Modelo J1.....	126
Figura 73: Perfiles de velocidad, concentración de azufre y temperatura para una porosidad de 80% Modelo J1.....	127
Figura 74: Perfiles de velocidad, concentración de azufre y temperatura para una porosidad de 90% Modelo J1.....	128
Figura 75: Perfiles de velocidad, concentración de azufre y temperatura para una porosidad de 100% Modelo J1.....	129
Figura 76: Perfiles de velocidad, concentración de azufre y temperatura para una porosidad de 20% Modelo J2.....	130
Figura 77: Perfiles de velocidad, concentración de azufre y temperatura para una porosidad de 30% Modelo J2.....	131

Figura 78: Perfiles de velocidad, concentración de azufre y temperatura para una porosidad de 40% Modelo J2.....	132
Figura 79: Perfiles de velocidad, concentración de azufre y temperatura para una porosidad de 50% Modelo J2.....	133
Figura 80: Perfiles de velocidad, concentración de azufre y temperatura Modelo J2 para una porosidad del 15% y velocidad inicial 0 [m/s].....	134
Figura 81: Perfiles de velocidad, concentración de azufre y temperatura Modelo J2 para una porosidad del 15% y velocidad inicial 0.015 [m/s].....	135
Figura 82: Perfiles de velocidad, concentración de azufre y temperatura Modelo J2 para una porosidad del 15% y velocidad inicial 0.03 [m/s].....	136
Figura 83: Perfiles de velocidad, concentración de azufre y temperatura Modelo J2 para una porosidad del 15% y velocidad inicial 0.07 [m/s].....	137
Figura 84: Perfiles de velocidad, concentración de azufre y temperatura Modelo J2 para una porosidad del 15% y velocidad inicial 0.15 [m/s].....	138
Figura 85: Perfiles de velocidad, concentración de azufre y temperatura Modelo J2 para una porosidad del 15% y velocidad inicial 0.3 [m/s].....	139

Índice de gráficos

Gráfico 1: Simplificación de Sieder y Tate	35
Gráfico 2: Simplificación de Hsu y Westwater.....	36
Gráfico 3: Energía y temperatura máxima de reacción en función del oxígeno inyectado.....	36
Gráfico 4: Velocidad de metal blanco en función de la altura y porosidad Modelo J1.....	47
Gráfico 5: Concentración de S en metal blanco en función de la altura y porosidad Modelo J1	48
Gráfico 6: Temperatura de la sección en función de la altura y porosidad Modelo J1	49
Gráfico 7: Numero de Reynolds promedio en función de la altura y porosidad Modelo J1	50
Gráfico 8: Numero de Reynolds ponderado en función de la altura y porosidad Modelo J1	51
Gráfico 9: Números de Reynolds promedio y ponderado en función de la altura y porosidad Modelo J1..	51
Gráfico 10: Velocidad de metal blanco en función de la altura y porosidad Modelo J1 - 5 mejores.....	52
Gráfico 11: Concentración de S en metal blanco en función de la altura y porosidad Modelo J1 - 5 mejores	52
Gráfico 12: Temperatura de la sección en función de la altura y porosidad Modelo J1 - 5 mejores	53
Gráfico 13: Numero de Reynolds promedio en función de la altura y porosidad Modelo J1 - 5 mejores ...	53
Gráfico 14: Numero de Reynolds ponderado en función de la altura y porosidad Modelo J1 - 5 mejores..	54
Gráfico 15: Numero de Reynolds promedio y ponderado en función de la altura y porosidad Modelo J1 - 5 mejores	54
Gráfico 16: Velocidad de metal blanco en función de la altura y porosidad Modelo J2.....	55
Gráfico 17: Concentración de S en metal blanco en función de la altura y porosidad Modelo J2.....	56
Gráfico 18: Temperatura de metal blanco en el horno en función de la altura y porosidad Modelo J2.....	57
Gráfico 19: Numero de Reynolds promedio en función de la altura y porosidad Modelo J2	58
Gráfico 20: Numero de Reynolds ponderado en función de la altura y porosidad Modelo J2	59
Gráfico 21: Numero de Reynolds promedio y ponderado en función de la altura y porosidad Modelo J2 .	60

Gráfico 22: Velocidad de metal blanco en función de la altura y velocidad inicial Modelo J2 – Porosidad 15%	61
Gráfico 23: Concentración de S en metal blanco en función de la altura y velocidad inicial Modelo J2 – Porosidad 15%	62
Gráfico 24: Temperatura de metal blanco en función de la altura y velocidad inicial Modelo J2 – Porosidad 15%	63
Gráfico 25: Numero de Reynolds promedio en función de la altura y velocidad inicial Modelo J2 – Porosidad 15%	64
Gráfico 26: Numero de Reynolds en función de la altura y velocidad inicial Modelo J2 – Porosidad 15% (Sector del lecho)	64
Gráfico 27: Numero de Reynolds ponderado en función de la altura y velocidad inicial Modelo J2 – Porosidad 15%	65
Gráfico 28: Numero de Reynolds promedio y ponderado en función de la altura y velocidad inicial Modelo J2 – Porosidad 15%.....	65
Gráfico 29: Velocidad de metal blanco en función de la altura Modelo J2 – Pares de velocidad inicial y porosidad.....	66
Gráfico 30: Concentración de S en metal blanco en función de la altura Modelo J2 – Pares de velocidad inicial y porosidad.....	68
Gráfico 31: Temperatura de metal blanco en función de la altura Modelo J2 – Pares de velocidad inicial y porosidad.....	70
Gráfico 32: Numero de Reynolds promedio en metal blanco en función de la altura Modelo J2 – Pares de velocidad inicial y porosidad.....	72
Gráfico 33: Relación entre porosidad y velocidad inicial para una altura promedio de lecho de 47[cm]....	73
Gráfico 34: Relación entre porosidad y Numero de Reynolds para una altura promedio de lecho de 47[cm]	73
Gráfico 35: Velocidad de metal blanco en función de la altura Modelo J3 – Tríos de velocidad inicial, porosidad y altura de lecho.....	74
Gráfico 36: Concentración de azufre en metal blanco en función de la altura Modelo J3 – Tríos de velocidad inicial, porosidad y altura de lecho	76
Gráfico 37: Temperatura de metal blanco en función de la altura Modelo J3 – Tríos de velocidad inicial, porosidad y altura de lecho.....	78
Gráfico 38: Numero de Reynolds promedio en función de la altura Modelo J3 – Tríos de velocidad inicial, porosidad y altura de lecho.....	80
Gráfico 39: Numero de Reynolds promedio en función de la altura Modelo J3 – Tríos de velocidad inicial, porosidad y altura de lecho – Zona de lecho	80
Gráfico 40: Relación entre velocidad inicial, porosidad y altura de lecho para una operación confiable....	81
Gráfico 41: Relación entre Numero de Reynolds, porosidad y altura de lecho para una operación confiable	82
Gráfico 42: Efecto en la temperatura de los distintos modelos de convectividad para la estructura 2D transiente, donde N es el modelo normal con h constante, S-T considerando el modelo de h de Sieder y Tate y H-W el modelo de h de Hsu y Westwater	83
Gráfico 43: Velocidad promedio de la mezcla a la salida de las estructuras en función del tiempo.....	84
Gráfico 44: Concentración de azufre promedio en metal blanco a la salida de las estructuras en función del tiempo.....	86

Gráfico 45: Temperatura promedio en las salidas laterales de las estructuras en función del tiempo	88
Gráfico 46: Numero de Reynolds a la salida de las estructuras en función del tiempo	90
Gráfico 47: Velocidad promedio a la salida de las estructura 2D en función del tiempo e inyección de aire	91
Gráfico 48: Concentración de azufre promedio a la salida de las estructura 2D en función del tiempo e inyección de aire	92
Gráfico 49: Temperatura promedio en las salidas laterales de las estructura 2D en función del tiempo e inyección de aire	92
Gráfico 50: Numero de Reynolds promedio a la salida de las estructura 2D en función del tiempo e inyección de aire	93
Gráfico 51: Velocidad de metal blanco en función de la altura de lecho - Modelo J3D.....	94
Gráfico 52: Concentración de azufre en metal blanco en función de la altura de lecho - Modelo J3D	96
Gráfico 53: Temperatura de metal blanco en función de la altura de lecho - Modelo J3D.....	98
Gráfico 54: Numero de Reynolds promedio en función de la altura de lecho - Modelo J3D	101
Gráfico 55: Histograma de tiempos de residencia medidos en modelos con buen desempeño	102
Gráfico 56: Comparación de tiempos de residencia medidos versus tiempo de residencia promedio según Warczok	103
Gráfico 57: Comparación de modelos para la concentración de azufre en función de la altura - En verde medios porosos y en rojo mediante geometría establecida – Modelo J1	114
Gráfico 58: Comparación de modelos para la concentración de azufre en función de la altura - En verde medios porosos y en rojo mediante geometría establecida – Modelo J2	115

Índice de tablas

Tabla 1: Comparación de tecnologías de conversión.....	13
Tabla 2: Características del horno piloto de conversión continua.....	14
Tabla 3: Análisis químico de los productos de la conversión continua en lecho empacado ^[11]	16
Tabla 4: Valores de las constantes cinéticas de acuerdo a la concentración de oxígeno	33
Tabla 5: Resultados preliminares Modelo J1	44
Tabla 6: Resultados preliminares Modelo J2	46
Tabla 7: Estructuras y sus características geométricas.....	84
Tabla 8: Detalle de cálculo de las distintas simulaciones realizadas.....	112

CAPITULO 1: INTRODUCCION

1.1. Presentación del tema

El proceso de conversión de cobre consiste en una oxidación selectiva a alta temperatura de una solución compuesta principalmente por sulfuros de dicho metal y sulfuros de hierro, típicamente llamada mata, que proviene de una etapa anterior de fusión de concentrados sulfurados de cobre. Su propósito es eliminar el hierro, el azufre y otras impurezas produciendo así un cobre metálico líquido llamado Blíster. Debido a su importancia en el proceso global de producción de cobre a partir de sulfuros, esta etapa ha sido considerada como la operación unitaria preponderante dentro de una fundición.

En sus inicios, el procesamiento de matas de cobre se efectuaba realizando una oxidación parcial del sulfuro de cobre a óxido de cobre, seguido de una reacción de reducción de dicho óxido con el exceso de sulfuro de cobre remanente para dar origen a cobre metálico y dióxido de azufre, proceso que resultaba ser costoso, tedioso y excesivamente lento.

En el año 1880, gracias a la exitosa implementación del horno Bessemer en la industria siderúrgica, P. Manhés y P. David lograron modificar dicho reactor permitiendo su utilización en la conversión de cobre a escala industrial, generando un ciclo más rápido y reduciendo los costos de operación.

Sin embargo, fue en 1909 en la fundición de Garfield en Utah cuando W.H. Peirce y E.A.C Smith lograron convertir con éxito mata de cobre a Blíster en un convertidor horizontal revestido con material refractario básico. Desde entonces, este reactor denominado convertidor Peirce-Smith, en honor a sus creadores, ha sido la tecnología más utilizada para esta etapa del proceso pirometalúrgico de producción de cobre.

El éxito de éste y cualquier otro proceso de conversión no sólo se sustentan en el cumplimiento de las metas operacionales. Éstos deben ser versátiles a la hora de enfrentarse y satisfacer, los continuos y cada vez más estrictos requerimientos medioambientales, los incrementos en los costos energéticos y las competencias productivas que permanentemente disminuyen los costos de tratamiento.

Para hacer frente a estas problemáticas, la investigación y el desarrollo de nuevos procesos apuntan a la creación de tecnologías continuas de conversión, como es el caso del reactor de conversión continua en lecho empacado, el cual entrega una nueva y promisoría alternativa dentro de la metalurgia extractiva del cobre.

1.2. Motivación

La operación de conversión, de mata a cobre Blíster, en un convertidor Peirce-Smith se caracteriza por ser discontinua o batch, involucrando tiempos de espera e ineficiencias energéticas, reduciendo la productividad de los reactores y la vida útil de los refractarios. Además, estas tecnologías se caracterizan por la producción de gases de salida de composición y volumen variable y la emisión de fuentes contaminantes fugitivas que atentan al medio ambiente y al desarrollo de una operación segura.

Durante las últimas tres décadas, la tendencia tecnológica ha apuntado a la búsqueda de nuevos procesos de conversión continua que satisfagan las cada vez más exigentes prácticas operacionales y ambientales. De ello, diversos procesos tales como Mitsubishi, Kennecott-Outokumpu y Ausmelt, entre otros, han sido desarrollados demostrando grandes avances respecto a la conversión batch a escala piloto e incluso a escala industrial.

Investigaciones por parte de la Cátedra de Pirometalurgia del Departamento de Ingeniería de Minas de la Universidad de Chile dieron origen al proyecto FONDEF D04I1307 “Nuevo Proceso Continuo de Conversión de Mata a Cobre Blíster”, cuyo propósito fue desarrollar una nueva tecnología basada en la oxidación continua de mata de cobre líquida mediante la inyección neumática en contra corriente de aire o aire enriquecido con oxígeno a través de un lecho empacado contenido en un reactor vertical cilíndrico, generando como productos dos fases condensadas inmiscibles de cobre Blíster y escoria de hierro y una fase gaseosa rica en SO_2 .

Bajo este marco, ya se han realizado dos estudios sobre el funcionamiento del reactor, en donde destaca la obtención de un modelo fluidodinámico empírico ^[1] y un estudio de cinética de oxidación de la mata y distribución de impurezas entre los productos ^[2], por lo tanto, resulta indispensable continuar con la investigación de esta tecnología mediante un estudio de modelación termo-fluidodinámica que prediga el funcionamiento del horno y además entregue parámetros de operación.

1.2. Objetivos

Para comenzar, se plantean los objetivos asociados al trabajo a realizar en la memoria.

1.2.1. Objetivos Generales

- Estudiar la termo-fluidodinámica y la cinética del azufre (desulfuración) del reactor de conversión continua de cobre de lecho empacado mediante el modelamiento numérico con ayuda de un software de carácter comercial.

- Determinar límites o parámetros de operación del reactor de conversión continua de cobre de lecho empacado mediante el modelamiento numérico, los cuales deberán ser validados mediante pruebas futuras a escala laboratorio.

1.2.2. Objetivos Específicos

- Definir las variables críticas que influyen en la operación del reactor.
- Determinar perfiles de velocidad dentro del reactor en función de las variables del sistema en una geometría bi-dimensional, modelando mediante el software *COMSOL Multiphysics*.
- Determinar perfiles de temperatura dentro del reactor en función de las variables del sistema.
- Determinar perfiles de concentración de azufre (desulfuración) dentro del reactor en función de las variables del sistema.
- Estudiar cómo afectan las reacciones exotérmicas al interior del reactor en el sistema.
- Determinar la influencia de la geometría del lecho en el comportamiento del sistema.

1.3. Alcances

El presente trabajo permitirá predecir la fluidodinámica, termodinámica y la cinética del azufre (desulfuración), además de entregar parámetros de operación, para un proceso continuo de conversión de cobre en un horno de lecho empacado, mediante la creación de un modelo computacional basado en la información recogida de pruebas realizadas tanto a escala de laboratorio como a escala de planta piloto en las que se consideraron las variables más importantes del proceso de conversión.

Se pretende que los modelos y resultados obtenidos sean una referencia para futuras investigaciones sobre dicha tecnología y que además entreguen nueva y valiosa información para el adecuado control de la planta piloto que se encuentra hoy en día en la fundición Paipote de ENAMI y para la eventual posterior planta a escala industrial de conversión continua en lecho empacado.

CAPITULO 2: ANTECEDENTES DE LA TECNOLOGIA DE CONVERSION DE COBRE

2.1. Descripción general del proceso de conversión

La mata proveniente de la etapa de fusión de cobre contiene hierro y azufre como componentes principales y sobre un 2% en peso de oxígeno disuelto. Presenta, además, cantidades menores de metales como impurezas (Pb, Zn, As, Sb, etc.) que por razones termodinámicas no son posibles de eliminar parcial o completamente de la fase rica en cobre.

La conversión de matas cupríferas tiene como propósito la eliminación de hierro y azufre presentes en la mata como Cu_2S y FeS , y en menor grado, de otras impurezas metálicas anteriormente mencionadas que se encuentran disueltas en su estado elemental o formando óxidos y sulfuros. Para esto es necesario oxidar la mata, entre 1150 y 1250°C, mediante el soplado con aire o aire enriquecido fomentando una escorificación del hierro y una volatilización del azufre como SO_2 . Las reacciones de oxidación son altamente exotérmicas permitiendo un proceso autógeno, es decir, sin requerir una fuente de calor externa.

Termodinámicamente, el oxígeno presenta una mayor afinidad por el hierro y el azufre antes que el cobre, por lo tanto, existiendo la posibilidad de reaccionar con alguna especie, el oxígeno lo hará preferencialmente con hierro y azufre para oxidarlos a FeO y Fe_3O_4 y a SO_2 respectivamente. La mayor afinidad del oxígeno por estos elementos da origen a una selectividad que puede justificarse termodinámicamente mediante una simple comparación de los datos de energía libre representados mediante el diagrama de Ellingham-Richardson para óxidos metálicos (Figura 1) ^[3].

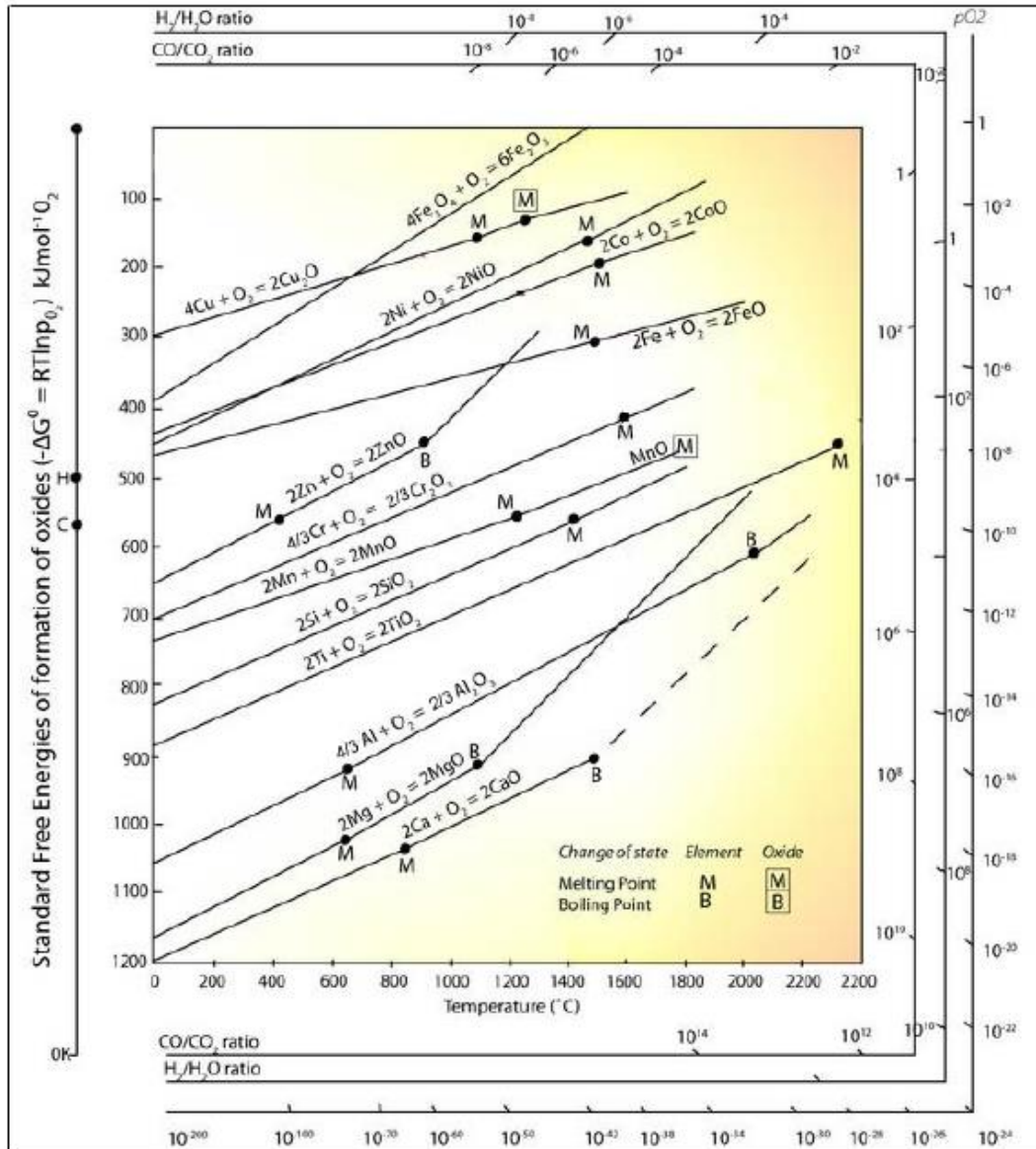


Figura 1: Diagrama de Ellingham-Richardson para óxidos metálicos^[3]

Esta selectividad posibilita un desarrollo secuencial, o dicho de otro modo, impide eliminar el hierro y todo el azufre en una misma etapa debido a que la oxidación del Cu_2S es menos favorable que aquella del FeS , desde un punto de vista termodinámico. De esta manera, la conversión se realiza en dos etapas claramente definidas: Soplado a escoria y soplado a cobre.

2.1.1. Soplado a escoria

También conocida como soplado a hierro, consiste en la eliminación del hierro y el azufre asociados al FeS de la mata.

El FeS se oxida a FeO, el cual es un compuesto muy reactivo, particularmente frente al oxígeno y a los refractarios. Es un óxido básico que tiene un punto de fusión cercano a los 1380°C cuando se encuentra en estado puro, es termodinámicamente inestable en presencia de aire ya que tiende a oxidarse a la solución sólida de FeO·Fe₂O₃, de manera simplificada Fe₃O₄, magnetita. Para minimizar la actividad química de este óxido, debe ponerse en contacto con un óxido ácido que no interfiera en el proceso. Tales características las presenta la sílice, que al momento de ser agregada tiende a acomplejar al hierro en forma de ortosilicato ferroso comúnmente denominado escoria fayalita cuya estequiometría es 2FeO·SiO₂, de manera simplificada Fe₂SiO₄.

La fayalita, corresponde a un compuesto intermedio de bajo punto de fusión como se aprecia en el diagrama binario de fases FeO-SiO₂ (Figura 2) ^[4].

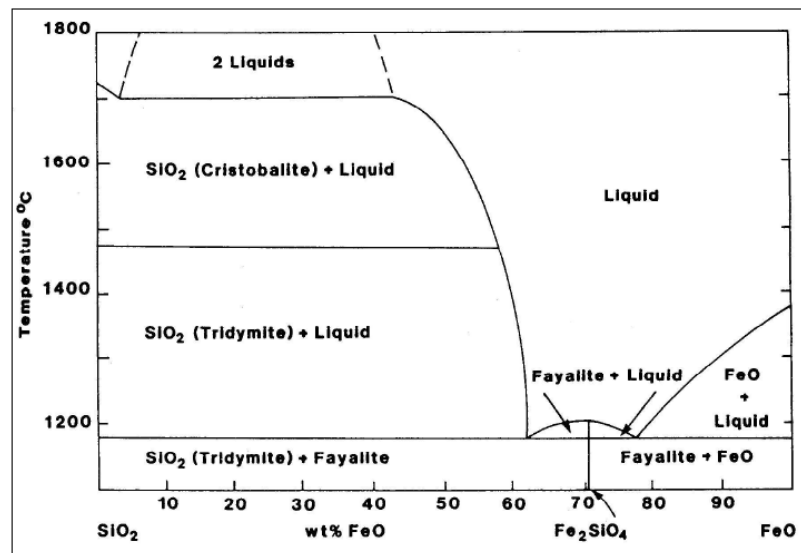


Figura 2: Diagrama de fases sistema binario FeO-SiO₂ ^[4]

La etapa formadora de escoria finaliza cuando el FeS de la mata se ha oxidado casi completamente, específicamente, hasta un punto en donde la mata contiene menos de un 1% de FeS disuelto. La escoria fayalítica producida, conteniendo entonces hasta un 15% de cobre atrapado y/o disuelto, se retira del sistema dejando en el reactor una fase condensada compuesta de Cu₂S impuro y, en lo posible, exenta de FeS.

2.1.2. Soplado a mata (cobre)

Una vez finalizado el soplado a escoria y retirada la fase del convertidor, se debe eliminar, desde el metal blanco (Cu_2S) remanente, el azufre a su forma de SO_2 por oxidación mediante soplado con aire o aire enriquecido con oxígeno.

El cobre metálico fundido, Blíster, se forma en el convertidor por una combinación de reacciones fuertemente exotérmicas y muy espontáneas dentro del rango de temperaturas de operación, siendo una práctica común enfriar el horno añadiendo chatarra de cobre, para evitar sobre-calentamientos que conllevan diluciones excesivas de cobre en la escoria en esta etapa. Como el único producto es el Blíster, en principio la segunda etapa no genera escoria. En la práctica, el Cu_2O que se puede formar cerca de las zonas de soplado ataca los ladrillos refractarios disolviéndolos o también formando cromitas de cobre, originando pequeñas cantidades de escoria.

La secuencia de las reacciones químicas que permiten la generación del Blíster puede ser explicada a partir de un análisis del sistema binario Cu-S (Figura 3) ^[5].

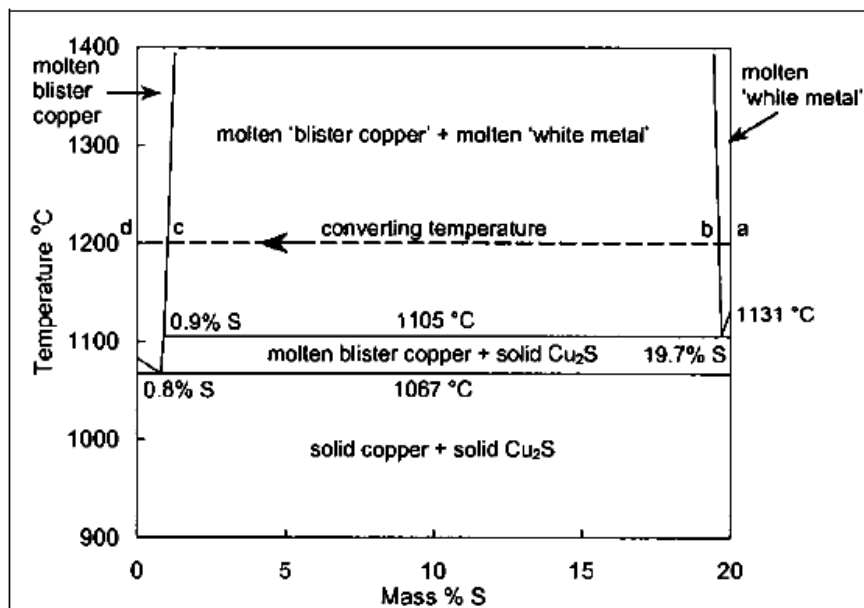


Figura 3: Diagrama de fases sistema binario Cu-S ^[5]

El soplado a cobre se lleva a cabo hasta que aparecen las primeras trazas de Cu_2O . El producto final corresponde a un cobre Blíster con aproximadamente un 98% Cu, 0,5% O y 0,05% S, además de impurezas metálicas y metales preciosos.

2.2. Tecnología actual de conversión - Convertidor Peirce-Smith

El convertidor más utilizado hoy en día para tratar matas de cobre es el convertidor Peirce-Smith (Figura 4). Corresponde a un reactor cilíndrico horizontal compuesto por una carcasa de acero de 4 a 5 [cm] de espesor revestidos con 0.35 a 0.45 [m] de refractario básico de cromo-magnesita ($MgO-Cr_2O_3$).

La conversión de mata de cobre a Blíster en convertidores Peirce-Smith, en una fundición de mediana-alta capacidad de tratamiento (1500-4000 tpd de concentrado) resulta en una operación discontinua cuyo ciclo demora de 8 a 12 horas y utiliza de 2 a 5 convertidores alineados. La operación de los convertidores se planifica de modo tal que no todos se utilicen al mismo tiempo, de forma que aquellos que estén en la línea de operación se encuentren en diferentes etapas del ciclo de conversión para poder recibir en todo momento la mata proveniente de los hornos continuos de fusión.

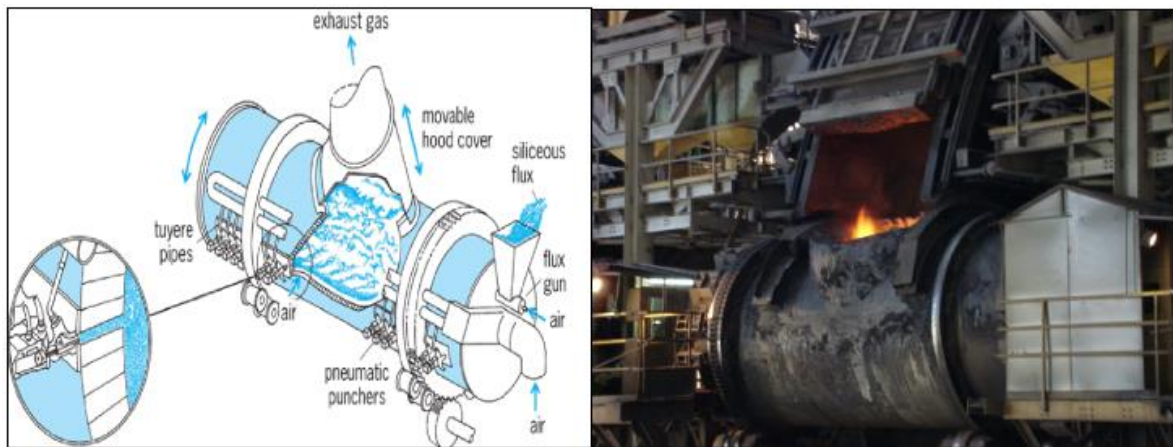


Figura 4: Esquema del convertidor (a la izquierda) ^[6] y convertidor de la fundición Chagres (a la derecha).

El ciclo de conversión está compuesto de las siguientes etapas:

- Carguío de mata o eje al convertidor.
- Soplado a escoria.
- Vaciado de escoria.
- Soplado a cobre.
- Vaciado de cobre Blíster.

Los materiales son cargados y descargados de cada convertidor utilizando grandes ollas refractarias que son transportadas a través de un puente grúa. Los gases de salida de cada convertidor son capturados durante el soplado por una gran campana externa ubicada sobre la boca del reactor, la cual está conectada a un sistema de ventilación común que los envía a la planta de ácido sulfúrico (Figura 5). En el convertidor Peirce-Smith la mata o el eje se carga por la boca y la conversión se lleva a cabo inyectando aire a la fase de mata líquida por toberas.

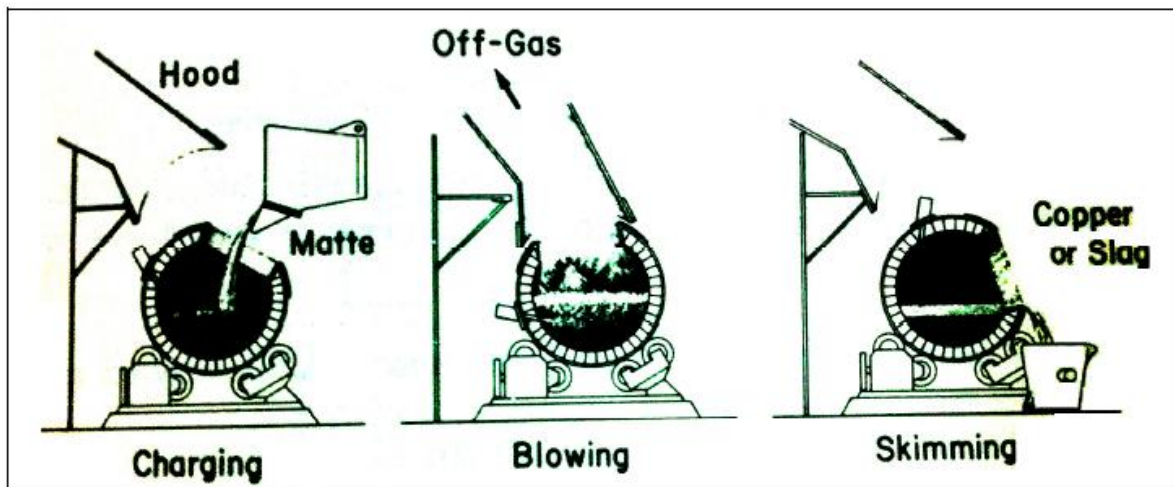


Figura 5: Funcionamiento convertidor Peirce-Smith y campana principal ^[7]

Como el soplado se efectúa en la fase mata, es necesario mantener un stock de ésta finalizado el soplado a escoria para iniciar el soplado a Blíster sobre la fase sulfurada. Además existen variaciones en el ciclo de conversión, una de ellas consiste en realizar múltiples soplados a escoria, mediante sucesivas alimentaciones de mata, para lograr una cantidad suficiente de Blíster acorde a la etapa de refinación y por otro lado es posible realizar un soplado directo a Blíster cuando la ley de alimentación es superior al 70% de cobre. Esto último ocurre típicamente en operaciones donde se utilizan Convertidores Teniente como tecnología de fusión.

Las ventajas de este convertidor son su simplicidad y su flexibilidad de tratar variados materiales, puesto que puede fundir escoria, scrap de cobre y toda clase de materiales reciclados en un amplio rango de tamaño.

Dentro de las desventajas, la principal es que en todas las etapas de la operación se incurre en significativas emisiones fugitivas de gases, otras claras desventajas son, la deficiencia de calor y la eventual pobre y compleja escorificación al procesar matas de alta ley. La escoria producida es semi-sólida, puesto que debido a la alta presión parcial de oxígeno, 10^{-6} [atm], presenta cantidades sobre un 20% en peso de cristales de magnetita, $Fe_3 O_4$, ésta, a su vez conlleva el atrapamiento mecánico de cobre el cual en conjunto con aquel químico soluble puede llegar a contenidos del orden de 18% en peso. Otra seria desventaja es la fluctuación en el volumen, flujo y concentración de dióxido de azufre (SO_2) producido, debido principalmente a la operación discontinua y a la dilución con el aire del medio; este gas constituye la alimentación de la planta de tratamiento de gases y por ello afecta la eficiencia de dicha operación y la calidad del ácido sulfúrico a generar.

2.3. Tecnologías de conversión continua

2.3.1. Proceso Mitsubishi

El proceso Mitsubishi ^[8] fue el primer proceso industrial de producción continua de cobre Blíster. Es un proceso a baño fundido que combina fusión, limpieza de escorias y conversión en una operación continua gracias a tres hornos interconectados. Su primera operación comercial aparece en el año 1974 en la fundición de Naoshima, en Japón. Posteriormente, en 1981, la compañía Falconbridge Ltda. instaló una nueva planta en Kidd Creek ubicada en Canadá que actualmente se encuentra fuera de operación. Sumadas a ellas se encuentran las fundiciones de Onsan, situada en Corea del Sur, la fundición de Gresik localizada en Indonesia y Port Kembla ubicada en Australia.

Este proceso consta de un horno de fusión (Horno S, *Smelting*), el cual es alimentado de concentrado seco, sílice y material de recicló, en donde se oxida el hierro y el azufre mediante lanzas de inyección de concentrado y aire enriquecido en oxígeno dispuestas verticalmente sobre el baño para producir una mata líquida con aproximadamente un 68% de cobre en equilibrio con una escoria fayalítica y una fase gaseosa compuesta principalmente de SO₂ y polvos en suspensión.

Ambas fases condensadas son sangradas y llevadas, mediante un sistema de canaletas, al horno eléctrico de limpieza de escorias (Horno CL, *Cleaning*) que permite separar, en un ambiente reductor bajo la presencia de electrodos de grafito, la mata de una escoria que contiene del orden de 0,7 a 0,9% en peso de Cu.

La mata fluye continuamente hacia el horno de conversión (Horno C, *Converting*), en el cual se inyecta aire enriquecido con oxígeno mediante lanzas verticales en conjunto con carbonato de calcio (CaCO₃) y escoria granulada del mismo reactor como componente alcalino de formación de escoria y carga fría o material de enfriamiento, respectivamente.

El cobre resultante es transportado de forma continua a través de sifón a hornos de retención a la espera de ser alimentado a los hornos de refinación. La escoria resultante del horno de conversión posee alrededor de un 14% en peso de Cu y es granallada para luego ser recirculada al horno de fusión o utilizada como carga fría durante la conversión.

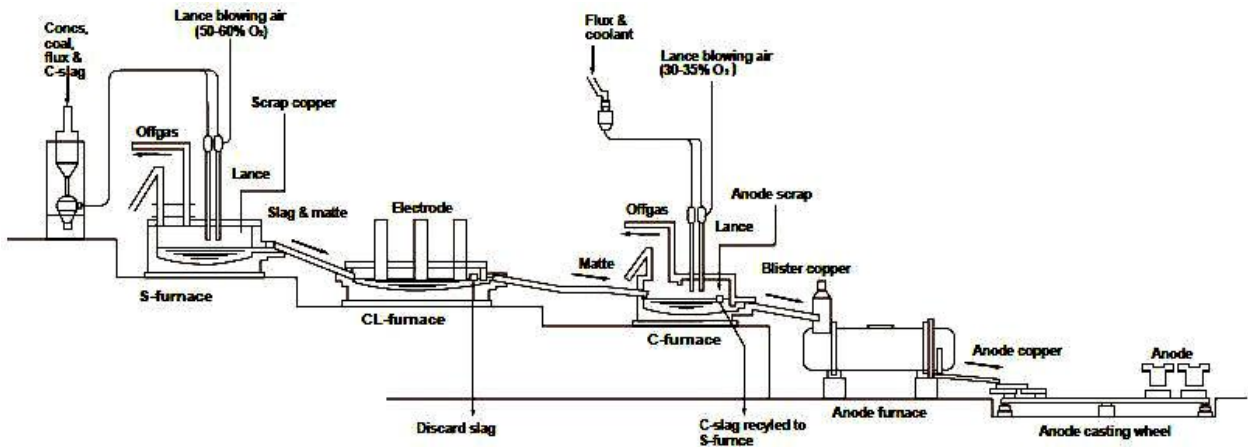


Figura 6: Esquema del proceso Mitsubishi [8]

2.3.2. Proceso Kennecott – Outokumpu

El proceso flash Kennecott – Outokumpu comienza a operar a fines del año 1995 en la fundición de Garfield en Utah. Las restricciones ambientales y la necesidad de expansión motivaron el reemplazo de tres reactores de fusión Noranda y cuatro convertidores Peirce-Smith por un horno de fusión flash y otro de conversión flash. Actualmente, ésta es la única fundición en que este proceso secuencial se encuentra en operación.

La conversión flash utiliza un horno flash Outokumpu para convertir mata de cobre previamente granallada y molida a un tamaño de 50 micrones en cobre Blíster. Los requerimientos de este proceso son los siguientes:

- Mata de cobre proveniente del horno de fusión con una ley cercana al 70% Cu.
- Granallado de la mata fundida en partículas de 0,5 [mm] utilizando un torrente de agua.
- Molienda hasta producir granos de 50 [μ m].
- Secado de los granos de mata.
- Alimentación continua de los finos granos de mata en conjunto con CaO y aire enriquecido con 80% de oxígeno a través de un quemador de material alimentado al horno de conversión flash.
- Recolección continua de gases de salida.
- Remoción periódica de escoria y cobre Blíster.

Una ventaja de este proceso en relación al proceso Mitsubishi es la independencia entre las etapas de fusión y conversión (procesos desacoplados). La mata sólida puede ser almacenada mientras el horno de

conversión se está reparando, y ésta se puede convertir mientras el horno de fusión no se encuentra operando.

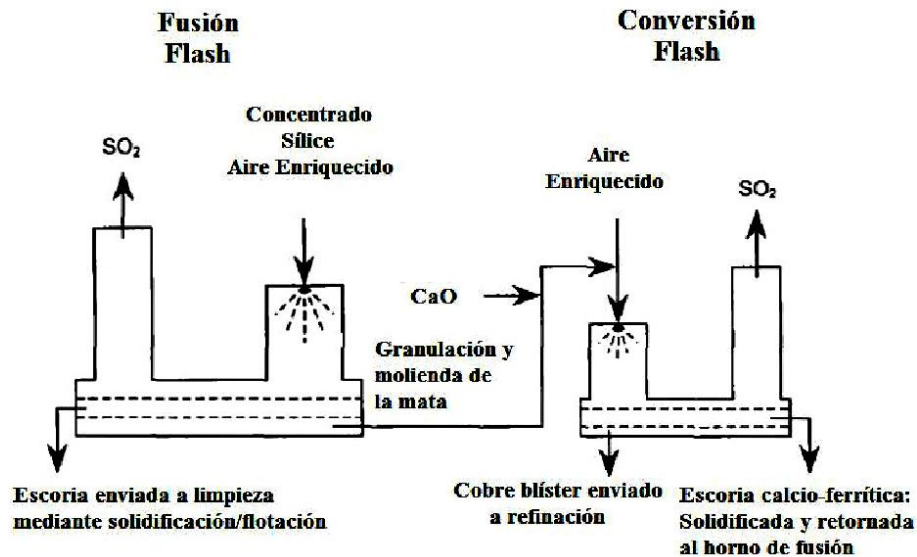


Figura 7: Esquema de los hornos de fusión y conversión (desacoplados) Kennecott-Outokumpu^[9]

2.3.3. Proceso Ausmelt C3

Durante la década del setenta, CSIRO desarrolló la primera evaluación y demostración de una nueva tecnología para la fusión y conversión de concentrado sulfurado de cobre a cobre Blíster. Esta tecnología incorpora el uso de una lanza sumergible en el baño para generar las reacciones de conversión deseadas (Figura 8)^[10]. La lanza está conformada por dos tubos concéntricos, por el tubo interno circula combustible (gas natural u otro) mientras que por el tubo externo circula aire enriquecido que es “arremolinado” mediante una especie de tornillo interno que gira en torno al tubo central. Este aire otorga una rápida transferencia de calor desde el exterior de la lanza hacia el gas permitiendo un enfriamiento de las paredes del tubo, lo cual genera una solidificación de la escoria adherida protegiéndola del desgaste asociado a las condiciones extremas de operación.

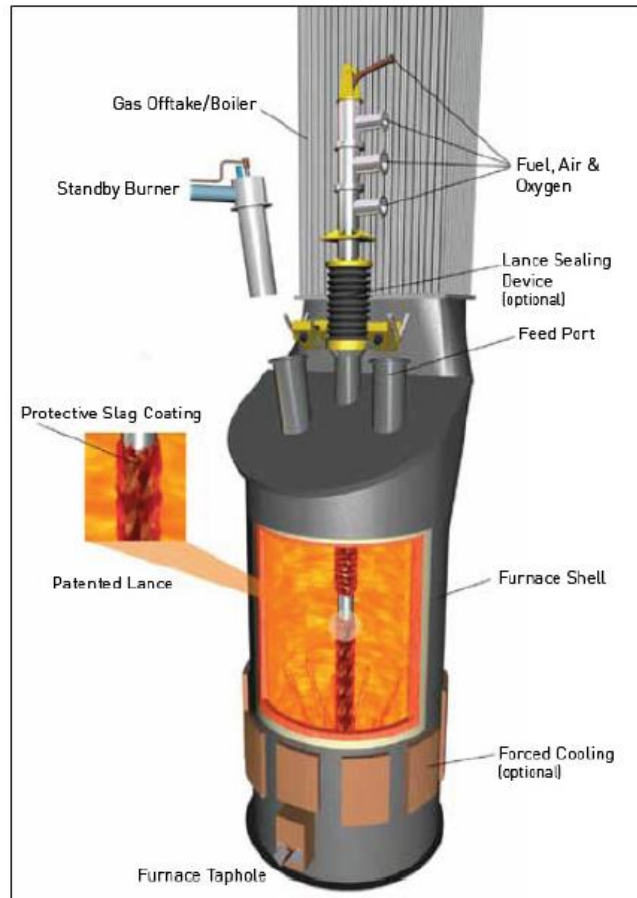


Figura 8: Horno de conversión continua Ausmelt ^[10]

A continuación (Tabla 1) se resumen los actuales procesos de conversión batch y continua.

Tabla 1: Comparación de tecnologías de conversión.

Tecnología	Peirce-Smith	Mitsubishi	Kenecott-Outokumpu	Ausmelt
Número de reactores	> 200	4	1	1
Modo de operación	Batch	Continuo	Continuo	Continuo
Cu Blíster [t/año]	Variable	120000 - 262000	270000	>150000
Tipo de alimentación	Líquida	Líquida	Sólida	Sólida/Líquida
%Cu en escoria	2 - 15	14 - 16	14 - 20	15 - 25
%S en Blíster	0.001 - 0.3	0.7 - 0.9	0.2 - 0.4	0.2
Fijación de S [%]	75 - 90	> 95	> 95	> 95
Duración de campaña	6 meses	3 años	5 años	> 2 años
Sistema de escoria	Fayalítica	Calcio-Ferrítica	Calcio-Ferrítica	Olivina
Fases de operación	Escoria/Metal blanco/Metal	Escoria/Metal	Escoria/Metal	Escoria/Metal
Fusión/Conversión independientes	Si	No	Si	Si
Control de emisiones fugitivas	Pobre	Muy buena	Excelente	Muy buena
Flexibilidad	Muy buena	Regular	Pobre	Buena
Remoción de impurezas	Excelente para matas de 60% Cu	Regularmente efectiva para matas de alta ley (>70%)	Menos efectiva para matas de alta ley (>70%)	Levemente menos efectiva que en los CPS

2.3.4. Conversión continua de cobre en lecho empacado

La conversión de mata de cobre a Blíster se lleva a cabo en un reactor de geometría cilíndrica vertical que contiene en su interior un lecho empacado refractario. Es así que al interior del horno se desarrolla el transporte gravitacional continuo de mata líquida y fundentes de SiO_2 , CaO y Al_2O_3 , a través de la porosidad del lecho en contracorriente con aire o aire enriquecido con oxígeno inyectado a través de toberas ubicadas en la parte inferior del reactor.

En la medida que descienden las fases líquidas la escoria calcio-alúmina-silicatada reacciona con el hierro contenido en la mata generando una escoria alúmino-olivina que además contiene óxidos menores de cromita y magnesia puesto que el lecho empacado está conformado por restos de ladrillos refractarios de cromo-magnesita (Figura 9).

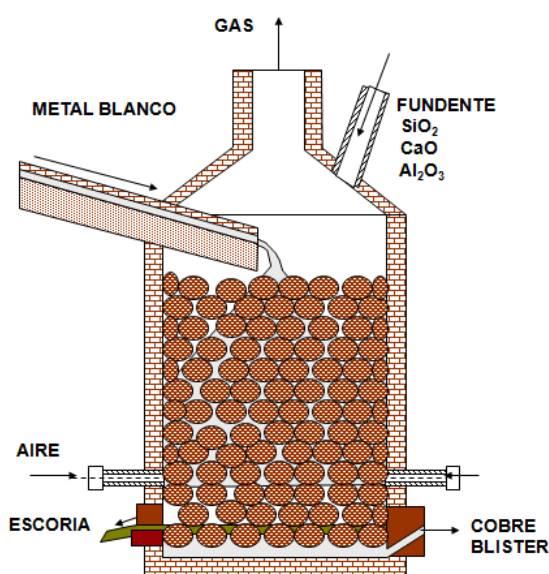


Figura 9: Esquema del horno de conversión continua de lecho empacado ^[11]

Algunas características operacionales del proceso se detallan en la tabla 2. ^[11]

Tabla 2: Características del horno piloto de conversión continua.

<i>Alimentación de metal blanco [t/h]</i>	5
<i>Flujo de aire [Nm³/h]</i>	5000
<i>Flujo de oxígeno [Nm³/h]</i>	-
<i>Altura reactor [m]</i>	2.4
<i>Diámetro interno [m]</i>	1.2
<i>Espesor [m]</i>	0.3
<i>Altura interna toberas [m]</i>	0.3
<i>Altura para salida de cobre [m]</i>	0.2
<i>Diámetro promedio relleno [m]</i>	0.05
<i>Densidad de relleno [gr/cm³]</i>	2.85
<i>Material de relleno</i>	Granos de refractario Cromo-Magnesita

En el proceso de conversión continua en lecho empacado, en comparación a procesos de conversión por suspensión o en baño, la tasa de conversión es alta debido a la presencia del lecho refractario que resulta en una amplia superficie de reacción ante el paso de la mata líquida que enfrenta un flujo ascendente en contracorriente de aire o aire enriquecido con oxígeno.

La escoria generada en el reactor de aluminio-olivina se sangra continuamente por un orificio situado por debajo del nivel de toberas mientras que el cobre Blíster se retira de manera continua por el lado diametralmente opuesto del reactor a una altura inferior del nivel de escoria utilizando un bloque de sangría-sifón para su evacuación.

Los gases generados durante el proceso, principalmente SO_2 , O_2 y N_2 , ascienden a través del lecho y son evacuados por la parte superior del reactor siendo capturados por una campana y conducidos a la planta de tratamiento de gases para la recuperación de polvos y la producción de ácido sulfúrico.

Los principales fenómenos que ocurren en el reactor y que involucran las fases antes mencionadas son los siguientes:

- Flujo gravitacional de mata en el lecho poroso
- Flujo en contracorriente del gas oxidante
- Generación de calor por oxidación de la mata
- Intercambio de calor por contacto líquido-gas, mata-gases
- Intercambio de calor por contacto líquido-sólido, mata-lecho
- Intercambio de calor por contacto sólido-gas, lecho-gases
- Formación de escoria aluminio-olivina y blíster
- Sangrado de fases condensadas, escoria y blíster

Las ventajas del proceso de conversión continua en lecho empacado son numerosas, dentro de ellas se encuentra; la simplicidad de su construcción y operación, la baja inversión del proceso, los bajos costos de operación, OPEX, la flexibilidad de tratamiento debido a la posibilidad de procesar mata líquida y/o sólida chancada, scrap o chatarra de cobre y otras cargas frías.

Por otro lado, el transporte gravitacional de las fases condensadas líquidas por canales cubiertas y sin movimiento del reactor resulta en una disminución del riesgo operacional y en la hermetización del proceso, que conlleva una disminución de las emisiones fugitivas y una generación estable de gases concentrados que alimenta la planta de tratamiento de gases y ácido sulfúrico.

El proceso fue probado exitosamente a escala de laboratorio para una capacidad de 5 [kg/h] compuesta por un crisol de carburo de silicio como reactor de conversión de 2.5 pulgadas de diámetro y 29 [cm] de altura.^[34]

La mata sólida fue agregada manualmente a intervalos discretos de tiempo a un crisol de carburo de silicio dispuesto en un horno superior de fusión que disponía de un sifón de descarga en la parte inferior. La mata fundida derramaba por acumulación hacia el reactor de conversión de lecho empacado en donde se agregaba, en superficie, manualmente la mezcla de fundentes de acuerdo a balance pre-establecido.

Análisis químicos realizados demostraron la factibilidad técnica del proceso (Tabla 3)^[11] corroborando además una alta tasa de oxidación de la mata producto de la dispersión que ésta, así como la escoria experimentan al descender por el lecho refractario empacado.

Tabla 3: Análisis químico de los productos de la conversión continua en lecho empacado^[11]

	Cu	Fe	S	O	Fe3O4	CaO	SiO2
	% en peso						
Metal Blanco (Alimentación)	79	0.8	20.2	-	-	-	-
Escoria (Conversión)	14.23	24.4	3.34	-	1.9	12.13	33.9
Blíster	98.27	-	1.03	0.013	-	-	-

Se instaló una planta piloto-industrial (Figura 10) en la fundición Hernán Videla Lira de ENAMI que tiene una capacidad de tratamiento de 5 [t/h] de mata fragmentada proveniente del Convertidor Teniente. La planta cuenta además con un horno auxiliar de fusión de mata, similar a la utilizada en las pruebas de laboratorio pero obviamente de mayor tamaño y calentado mediante quemadores de oxi-combustión. En la actualidad se trabaja en la optimización del proceso para la realización de pruebas.



Figura 10: Planta piloto-industrial de conversión continua en lecho empacado.

CAPITULO 3: ANTECEDENTES DE LA MODELACION TERMO-FLUIDODINAMICA EN LECHO EMPACADO

3.1. Modelos empíricos

3.1.1. Modelo de caída de presión para flujo laminar

La modelación de flujo laminar a través de un lecho empacado es posible mediante un conjunto de tubos capilares cilíndricos que siguen tortuosos caminos como se muestra en la Figura 11:

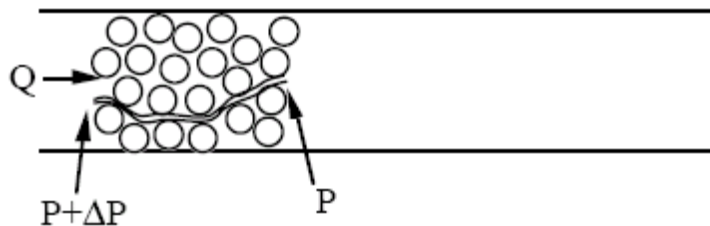


Figura 11: Tortuosidad del flujo a través de un lecho empacado.

En la Figura, Q representa el flujo volumétrico, $P + \Delta P$ la presión de flujo a la entrada del lecho y P la presión del flujo después de atravesar el lecho.

Si se representa el largo equivalente de uno de los tubos capilares tortuosos por L_e , es evidente que, el largo equivalente es mayor al largo del lecho L . A través de este supuesto, es posible considerar el lecho como un conjunto de tubos capilares rectos, cada uno de largo equivalente L_e , tal como se muestra en la Figura 12:

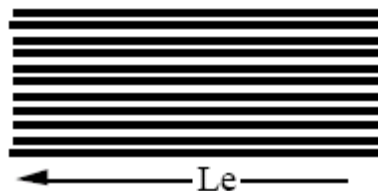


Figura 12: Representación esquemática de capilares rectos.

Luego, enfocando el análisis hacia un capilar individual de longitud L_e , se tiene que:

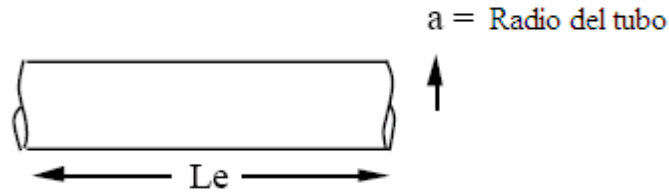


Figura 13: Esquema de un capilar individual.

Si se realiza un balance de fuerzas sobre el cilindro, en cuyo interior circula un fluido determinado, se tienen presentes fuerzas de presión y cizalle sobre las paredes del mismo, lo cual, se representa mediante las siguientes ecuaciones:

$$(P + \Delta P)\pi r^2 = 2\pi r L_e \tau + P\pi r^2 \quad (\text{Ec. 3.1})$$

$$\Delta P \pi r^2 = -2\pi r L_e \left(\mu \frac{du}{dr} \right) \quad (\text{Ec. 3.2})$$

Donde, τ es el esfuerzo de corte o cizalle; μ es la viscosidad del fluido; r la dirección radial del capilar y du/dr corresponde al gradiente de velocidad en la dirección radial.

De este modo, debido a la geometría cilíndrica del capilar, es posible integrar la ecuación diferencial presentada, asumiendo como condición de borde velocidad nula en el borde (radio a) y máxima en el centro del capilar, resultando el siguiente perfil de velocidades:

$$u(r) = \frac{\Delta P}{4\mu L_e} (a^2 - r^2) \quad (\text{Ec. 3.3})$$

Integrando nuevamente este perfil sobre la sección total del capilar, se obtiene el flujo volumétrico q a través del capilar:

$$q = \int_0^a 2\pi r u(r) dr = \frac{\pi a^2 \Delta P}{8\mu L_e} \quad (\text{Ec. 3.4})$$

Este resultado sigue la **Ley de Hagen – Poissulle**, valida exclusivamente para un régimen de flujo laminar.

Definiendo n como el número total de capilares por unidad de área presentes en el lecho, la velocidad superficial del fluido ($U_0 = \text{flujo volumétrico total} / \text{área de sección transversal del lecho}$) es:

$$U_0 = n \cdot q \quad (\text{Ec. 3.5})$$

Por otra parte, la fracción de vacíos ε se puede definir como sigue:

$$\varepsilon = \frac{\pi a^2 n L_e}{L_e} = n \pi a^2 \quad (\text{Ec. 3.6})$$

Combinando la ecuación de Hagen – Poissulle con las definiciones anteriores, se tiene:

$$U_0 = nq = \frac{n \pi \Delta P a^4}{8 \mu L_e} = \frac{\varepsilon \Delta P a^2}{8 \mu L_e} \quad (\text{Ec. 3.7})$$

De este modo, la caída de presión a través del lecho es:

$$\Delta P = \frac{8 \mu L_e U_0}{\varepsilon a^2} \quad (\text{Ec. 3.8})$$

Definiendo:

$$S_v = \frac{\text{Superficie de partículas expuestas al paso del flujo}}{\text{Volúmen total ocupado por las partículas}} \quad (\text{Ec. 3.9})$$

$$S_v = \frac{2 n \pi a L_e}{L_e (1 - \varepsilon)} = \frac{2 \pi a n}{(1 - \varepsilon)} = \frac{2 \varepsilon}{(1 - \varepsilon) a} \quad (\text{Ec. 3.10})$$

con lo cual es posible reescribir el radio del capilar a en función de S_v y la fracción de vacíos ε :

$$a = \frac{2 \varepsilon}{(1 - \varepsilon) S_v} \quad (\text{Ec. 3.11})$$

Sustituyendo este resultado en las expresiones para U_0 y ΔP presentadas anteriormente, se obtiene:

$$U_0 = \frac{\Delta P \varepsilon^3}{2 \mu L_e (1 - \varepsilon)^2 S_v^2} \quad (\text{Ec. 3.12})$$

$$\Delta P = \frac{2 (1 - \varepsilon)^2 S_v^2 \mu U_0 L_e}{\varepsilon^3} \quad (\text{Ec. 3.13})$$

Asumiendo como aproximación que los granos del relleno son esféricos, se puede escribir S_v en función del diámetro de partícula D_p :

$$S_v = \frac{\pi D_p^2}{\pi D_p^3 / 6} = \frac{6}{D_p} \quad (\text{Ec. 3.14})$$

Finalmente, se tiene:

$$\Delta P = \frac{72 (1 - \varepsilon)^2 \mu U_0 L_e}{\varepsilon^3 D_p^2} \quad (\text{Ec. 3.15})$$

Resultados empíricos de la caída de presión para flujo laminar ($R_e < 10$) arrojan el siguiente resultado, conocido como *ecuación de Blake Kozney*:

$$\Delta P = \frac{150(1-\varepsilon)^2 \mu U_0 L}{\varepsilon^3 D_p^2} \quad (\text{Ec. 3.16})$$

Con lo cual se concluye que el largo equivalente L_e , para el caso de un fluido laminar, es aproximadamente el doble del largo real del lecho empacado L .

3.1.2. Modelo de caída de presión para flujo turbulento

En este caso, la aproximación se hace de la misma forma que en el caso anterior, es decir, modelando el flujo como aquel que se mueve a través de un conjunto de capilares de largo equivalente. En el caso turbulento, aparecen fuerzas de fricción y energía cinética, cuya aproximación principal es:

$$\Delta P = \frac{\lambda \rho u^2 L_e}{2a} \quad (\text{Ec. 3.17})$$

En donde, λ representa el factor de fricción de Darcy del capilar y u la velocidad del flujo en el lecho, lo cual equivale al cociente entre la velocidad superficial u_0 y fracción de vacíos ε .

Así, de la aproximación de flujo laminar se tiene que:

$$a = \frac{2\varepsilon}{(1-\varepsilon)S_v} \quad (\text{Ec. 3.18})$$

Con lo cual:

$$\Delta P = \frac{\lambda \rho (1-\varepsilon) S_v L_e u_0^2}{4\varepsilon^3} \quad (\text{Ec. 3.19})$$

Resultado que se conoce con el nombre de *ecuación de Burke – Plumer*.

Asumiendo que para números de Reynolds elevados ($R_e > 1000$) el producto λL_e se puede aproximar como κL , donde κ es una constante a determinar empíricamente. Los resultados experimentales ^[12, 13] concluyen que la constante κ se puede aproximar al valor de 0,291, con lo cual:

$$\Delta P = 0,291 \rho L u_0^2 \left(\frac{6}{D_p} \right) \left(\frac{1-\varepsilon}{\varepsilon^3} \right) = \left(\frac{1,75 \rho L u_0^2}{D_p} \right) \left(\frac{1-\varepsilon}{\varepsilon^3} \right) \quad (\text{Ec. 3.20})$$

3.1.3. Modelo de caída de presión para flujo intermedio

La relación entre el valor del flujo volumétrico y la caída de presión del lecho empacado para régimen transiente, está dado por la adición de los resultados independientes para flujo laminar y flujo turbulento. Esta nueva ecuación recibe el nombre de *ecuación de Ergun* y es la de mayor aplicación para predecir caídas de presión en casos de flujo único circulante ^[12, 13].

$$\Delta P = \frac{150(1-\varepsilon)^2 \mu u_0 L}{\varepsilon^3 D_p^2} + \frac{1,75 \rho L u_0^2 (1-\varepsilon)}{D_p \varepsilon^3} \quad (\text{Ec. 3.21})$$

3.1.4. Modelo de flujos en contracorriente

La complejidad inherente de los sistemas multifases, en especial aquellos en que los fluidos se mueven a través de un medio poroso, deja muchos asuntos sin resolver y genera numerosas inconsistencias y aproximaciones cuestionables. El modelamiento de esta situación es complicado debido a la dificultad de incluir los diferentes fenómenos involucrados en la interacción gas-líquido, en contacto irregular con partículas sólidas.

En estos sistemas, tanto la fluidodinámica como la termodinámica de éstos están influenciadas por una amplia gama de variables, entre las que se incluye:

- Propiedades físicas de los fluidos: Viscosidad, conductividad térmica, densidad, compresibilidad, etc.
- Variables de operación: Flujos, presiones y temperaturas.
- Características del sólido: Tamaño, forma, rugosidad, etc.
- Configuración del lecho: Porosidad, área específica de transferencia, granulometría, razón entre el diámetro de partícula y el diámetro de columna, dimensiones de de la columna.

En la literatura disponible es posible encontrar diversos intentos por predecir los valores de caída de presión y retención del líquido (holdup). Entre estos se encuentran:

3.1.4.1. Modelo propuesto por Koo y Sangani ^[14]:

Este modelo se basa en que el líquido genera una capa homogénea sobre cada una de las partículas pertenecientes al lecho. Aquí, se modela el encuentro entre los fluidos con un modelo capilar, en que por el centro asciende el flujo gaseoso y por las paredes desciende el flujo líquido, considerando la interacción de las diferentes fuerzas involucradas, entre las que se encuentran, las de cizalle, tracción, gravedad, etc., con lo cual se genera un complejo modelo matemático que es válido bajo ciertas restricciones y supuestos.

3.1.4.2. Modelo propuesto por Iliuta y Larachi ^[15]:

Este modelo considera una aproximación mediante uno o dos planos inclinados paralelos e intercomunicados que incluye la situación del relleno parcialmente humedecido, con regiones carentes de circulación líquido – gas que se describen a través de planos húmedos o secos de acuerdo a factores asociados a la viscosidad.

La limitación de este modelo es que es solo aplicable en condiciones de operación de precarga del lecho empacado, vale decir, exclusivamente cuando la diferencia de presión varía con el cuadrado de la velocidad del gas, lo cual es no deseable si se quiere aprovechar al máximo la superficie de contacto generada al interior del lecho.

3.2. Modelos computacionales

Debido a la dificultad de obtener parámetros y aproximaciones razonables para este tipo de configuraciones, es que últimamente ha sido frecuente recurrir al modelamiento computacional de este tipo de problemas, cuyos resultados pueden ser una base confiable dependiendo del nivel de realidad que se les otorgue.

Es por eso que a continuación, se presentan diversos autores que han modelado de forma computacional, ya sea por medio de software comerciales (FLUENT, COMSOL, MATLAB, etc.) como software creados en algún lenguaje computacional (C++, JAVA, VISUAL BASICS, etc.).

3.2.1. Modelo de lecho empacado para refinación continua de cobre

Durante el 2012, *Mansilla* ^[16] trabajó en la obtención de un modelo CFD que explica la dinámica de la reducción de cobre en el proceso de refinación continua en lecho empacado en *Comsol Multiphysics*.

El sistema abarca la modelación de un horno de laboratorio relleno con esferas de material reductor (carbón) por el cual fluye el cobre blíster proveniente de la etapa de conversión y que, en contacto con las esferas reductoras, producen su desoxidación (ver figura 14).

Para lograr dicho objetivo, es que trabaja con las ecuaciones generales de transferencia de masa y las de Navier-Stokes, además de las reacciones típicas del proceso de reducción de cobre.

Los resultados alcanzados por el estudio, muestran un buen ajuste del modelo computacional, debido a que se espera que una buena refinación de cobre alcance niveles bajo los 1500 [ppm] de oxígeno, lo cual predice el modelo y se verifica en las pruebas de laboratorio.

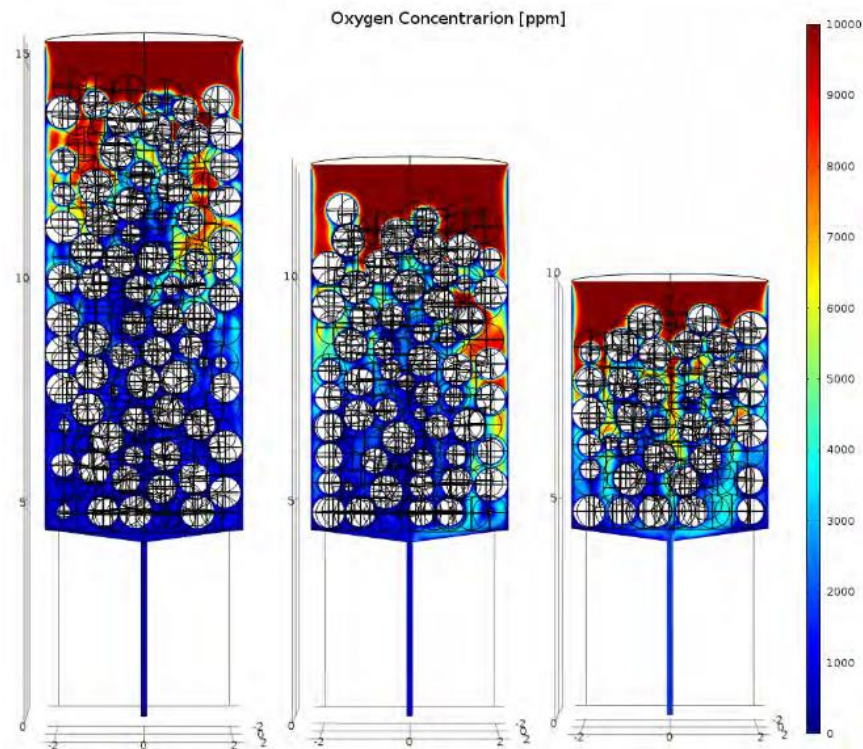


Figura 14: Perfiles de concentración de oxígeno para distintos tamaños de reactor ^[16].

3.2.2. Modelo para moldeo continuo de acero

Daville-Cavellin y *Cheze*^[17], en el año 2008 presentaron un modelo de simulación CTFD para moldeo continuo de acero desarrollado en *Comsol Multiphysics*.

El modelo abarcó tanto la fluidodinámica como termodinámica del sistema, en donde se predice el comportamiento del acero fundido a altas temperaturas, su interacción con el entorno (máquina de moldeo) y como éste cambia de estado al reducir su temperatura.

El modelamiento de sistemas como estos, supone la utilización de complejas ecuaciones, como son las de Navier-Stokes modificadas con energía para flujo turbulento y las de Fourier para modelar la transferencia de calor en el sistema, en conjunto con supuestos razonables para simplificar el problema.

Los resultados de las simulaciones fueron comparados con datos medidos y arrojaron errores de no más del 10%, lo cual da cuenta de la precisión del modelo, además de las capacidades del software.

En las figuras 15 y 16 se muestran perfiles de temperatura y flujo calórico de una sección transversal de acero moldeado, y en la figura 17 un perfil de temperatura a lo largo de la barra de acero moldeada, en donde se compara el modelo con los datos medidos.

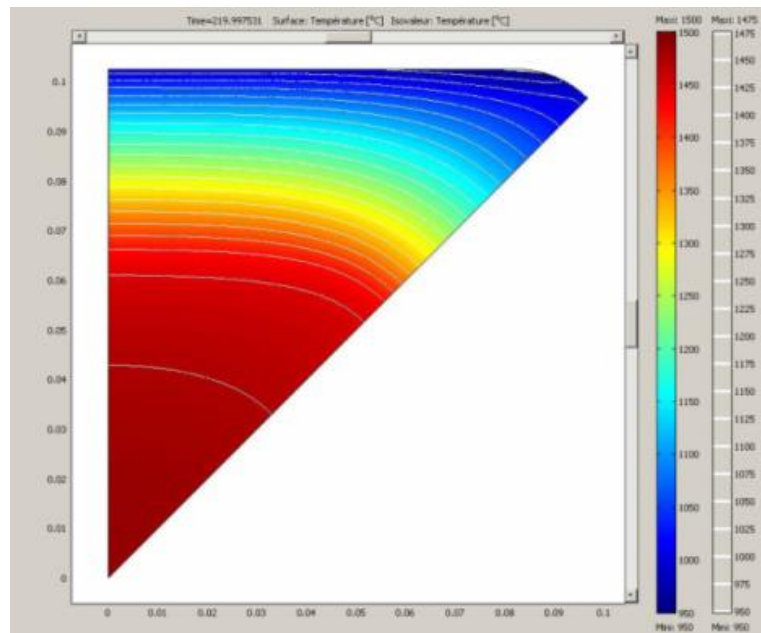


Figura 15: Perfil transversal de temperatura del acero moldeado [17].

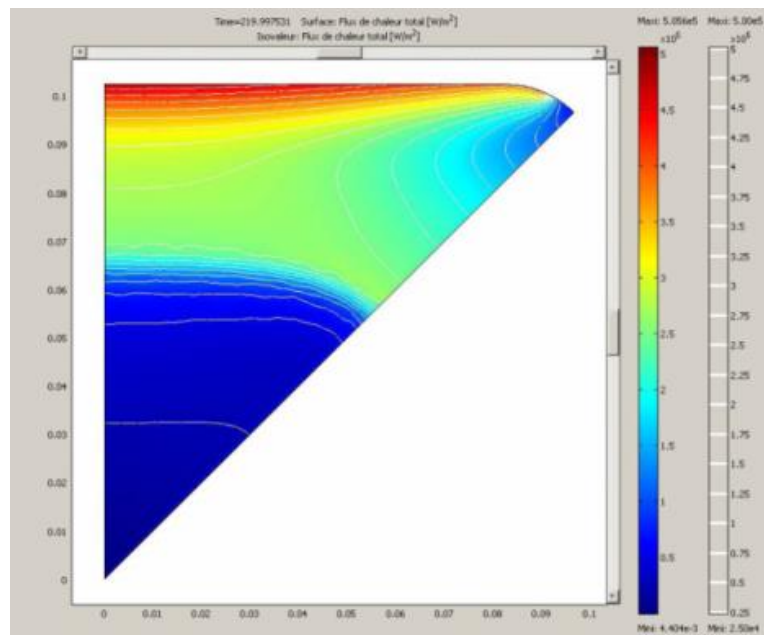


Figura 16: Perfil transversal de flujo calórico del acero moldeado [17].

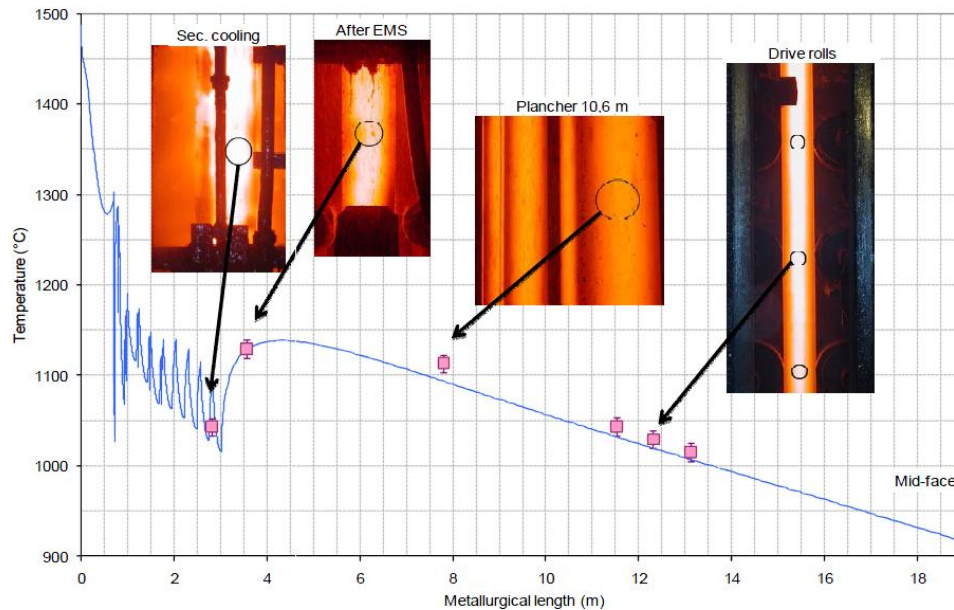


Figura 17: Comparación de resultados de temperatura a lo largo del equipo en la simulación y medidos ^[17].

3.2.3. Modelo de solidificación de una gota de aluminio

En 2006, *Marín* ^[18] presenta un modelo CTFD de simulación para la solidificación de una gota de aluminio al estrellarse sobre una placa de acero utilizado *Comsol Multiphysics*.

La importancia de este modelo radica en que genera una variedad de fenómenos físicos acoplados que lo transforman en un problema complicado y desafiante. Además, entrega pautas para la utilización y resolución de ecuaciones no triviales mediante el uso del software, entre las que se encuentran las de Navier-Stokes, de Fourier y de Voller y Prakash, como también de consideraciones que simplifican el problema en sí como es la utilización de la simetría del sistema.

Problemas de este estilo, si bien no tienen una aplicación inmediata en la industria, tienen una importancia tremenda a nivel académico, dado que ayudan al entendimiento de todos los fenómenos físicos que se ven involucrados en cuestiones tan simples como puede ser la caída de una gota de fluido o la solidificación de ésta. Por otro lado, gracias a este tipo de problemas se ve la capacidad del software para modelar sistemas no estacionarios y como éste se adapta a las condiciones establecidas.

En las figuras 18 y 19 se muestran instantes de tiempo del modelo de solidificación de la gota de aluminio en los casos isotermal y no isotermal.

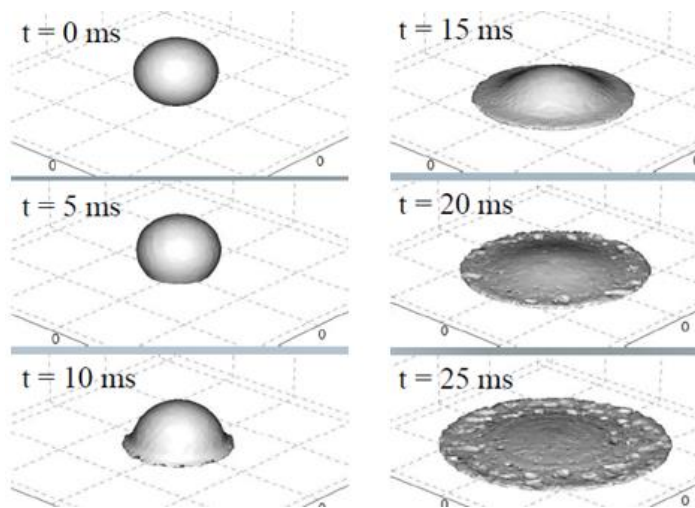


Figura 18: Resultados caso isothermal ^[18].

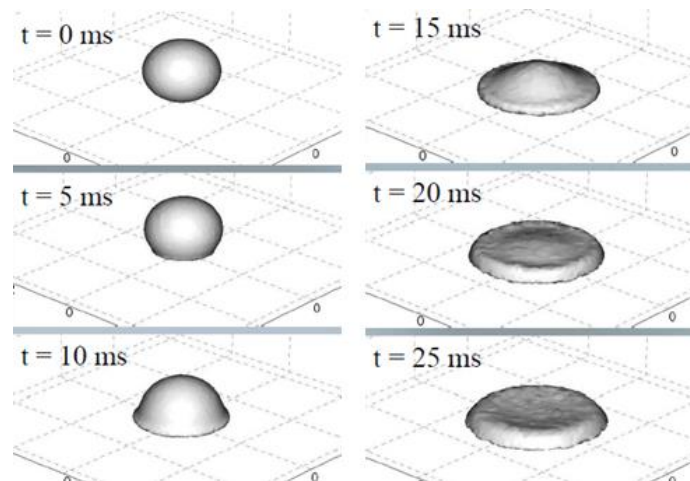


Figura 19: Resultados caso no isothermal ^[18].

3.2.4. Modelo de transferencia de masa en plumas de burbujas

Buscaglia, Bombardelli y García ^[19] en el año 2001, investigaron las plumas de aireación de reservorios de aguas residuales profundas mediante un CFD, en el que destaca la transferencia de masa de gas desde las plumas al reservorio. Un modelo matemático altamente complejo fue creado, en el que se considera la interacción entre dos fluidos, tomando en cuenta columnas de burbujas diluidas. Con este fin, es que se tomaron en cuenta las ecuaciones de Navier-Stokes, las del sistema cinético – friccional ($k - \epsilon$) para flujo turbulento, la velocidad de resbalamiento de las burbujas, la concentración de las variables y la química del sistema.

Los resultados muestran una buena relación entre las variables medidas, como es la disolución del gas en el líquido, el holdup del gas, la velocidad de las burbujas y el radio de éstas, y una correspondencia con el modelo experimental. A partir de este tipo de investigación, es posible entregar una base sólida para la

aplicación de modelos CFD para plumas de aireación como extensión natural de modelos integrales populares. Por otro lado, a partir de la resolución de este tipo de problemas, se crea una base que se puede tomar como referencia para la cinética y transferencia de masa de otros sistemas en los cuales se ven envueltos dos fluidos interactuando entre sí, como es el caso de la conversión de cobre en lecho empacado.

3.3. Consideraciones al momento de modelar

Previo al estudio a realizar, ya se han realizado otros dos estudios sobre la conversión de cobre en lecho empacado desde los cuales se basan gran parte de los supuestos y consideraciones a ser utilizados en este estudio.

Entre estos estudios destaca el realizado por *Urzúa*^[1] en su memoria de modelamiento físico de la fluidodinámica en lecho empacado, en la cual se concluye que es poco posible escalar un modelo de planta a uno de escala laboratorio sin alejarse de forma ostensible de los resultados esperados. En base a esto, es que es indispensable mantener ciertos parámetros adimensionales como el número de Reynolds, Sherwood, Smith o Prandtl de forma constante desde el modelo de planta al modelo de laboratorio, lo cual se logra poniendo especial cuidado en el tipo de flujo tratado y la geometría utilizada en los modelos. De esta forma, se espera mejorar este aspecto en base a las simulaciones, pues los resultados obtenidos por Urzúa son debatibles, al realizar pruebas en un sistema poco representativo.

Por otro lado, *Díaz*^[2] en su tesis de cinética de oxidación del cobre en lecho empacado entrega bases para el correcto funcionamiento del horno en cuanto al proceso de conversión (oxidación) rescatadas de numerosas pruebas a escala laboratorio del sistema. En ésta, se hace referencia a que el horno con al menos un 70% de partículas de material refractario y flujos de aire con un 40% de oxígeno en la alimentación hacen que la conversión del cobre dentro del lecho sea mucho más rápida al aumentar el tiempo de residencia (holdup) del fluido en el sistema y su exposición al aire enriquecido con oxígeno.

CAPITULO 4: METODOLOGIA Y ANTECEDENTES EN LA SIMULACION TERMO-FLUIDODINAMICA DE LA CONVERSION CONTINUA DE MATA DE COBRE

4.1. Conceptualización del problema

El sistema a modelar, a modo simplificado, consiste en un reactor cilíndrico en cuyo interior se encuentra material fragmentado cromo-magnesiano disperso (lecho) con cierta granulometría. A través de este, fluye la mata de cobre (líquida), la cual se encuentra en contracorriente con un flujo de aire enriquecido con oxígeno. Es en este contacto donde ocurre la conversión y aparecen dos nuevas fases líquidas y una gaseosa (además de las de un principio) que son cobre blíster, escoria y los gases de salida del reactor (ver Figura 9).

La idea es identificar la mecánica de este proceso, predecir cambios en los flujos, en la temperatura y en la cinética de desulfuración, como también identificar parámetros críticos en la operación del sistema. Es por ello, que se ocupará modelación computacional para su resolución.

Ahora, en esta aproximación a la resolución del modelamiento, se muestra en específico algunos modelos estacionarios del comportamiento del transporte de azufre (desulfuración), la fluidodinámica y la termodinámica del metal blanco en un horno a escala de laboratorio a través de un plano principal representativo del sistema, como también del flujo por medio de una sección plana del lecho cromo-magnesiano. También, se muestran algunos modelos transientes, con las mismas consideraciones mencionadas, que muestran los primeros instantes del proceso en sectores pequeños del lecho

En este sentido, lo que se quiere es tener una base, que posteriormente se pueda validar mediante pruebas de laboratorio o a escala piloto para el desarrollo futuro de un modelo más complejo, el cual pretende considerar una geometría en tres dimensiones, transporte tanto de azufre, oxígeno y hierro, y la generación e interacción dinámica entre las fases presentes en el horno.

4.2. Modelamiento multifísico

La complejidad presente en los procesos con fluidos a altas temperaturas, hace necesaria su simplificación para su representación matemática, de donde los resultados obtenidos son llevados posteriormente a una escala industrial. En este caso, simplificaciones en el tamaño del reactor y geometría del lecho, como es el uso de un empaquetamiento circular en el caso de dos dimensiones (esférico en tres dimensiones), son

utilizados, basado en la amplia gama de publicaciones relacionadas en donde se utiliza el mismo método, pues su porosidad y área de reacción son bien conocidos.

Por otro lado, hay que poner especial énfasis en el tipo de flujo descrito y en cómo se modela su movimiento, pues de esta propiedad dependen fuertemente los otros modelos, ya sean termodinámicos o cinéticos. De este modo, se tendrá especial cuidado en abordar esta componente y se intentará ver qué sucede al variar entre los distintos modelos existentes para describir el movimiento de un fluido (laminar, turbulento, multifase, medios porosos, etc.).

4.3. Modelos J1, J2 y J3

4.3.1. Geometría y consideraciones

En este caso, se consideran tres geometrías a ser estudiadas, un primer arreglo (modelo J1), en donde lo que se busca es ver que ocurre en una sección del lecho de $0.01 \text{ [m}^2\text{]}$ en dos dimensiones, compuesta de circunferencias (esferas en tres dimensiones) con una distribución de tamaño aleatoria que varía entre los 0.5 [cm] hasta los 3 [cm] de diámetro, y cuya ubicación espacial también es aleatoria (Figura 20).

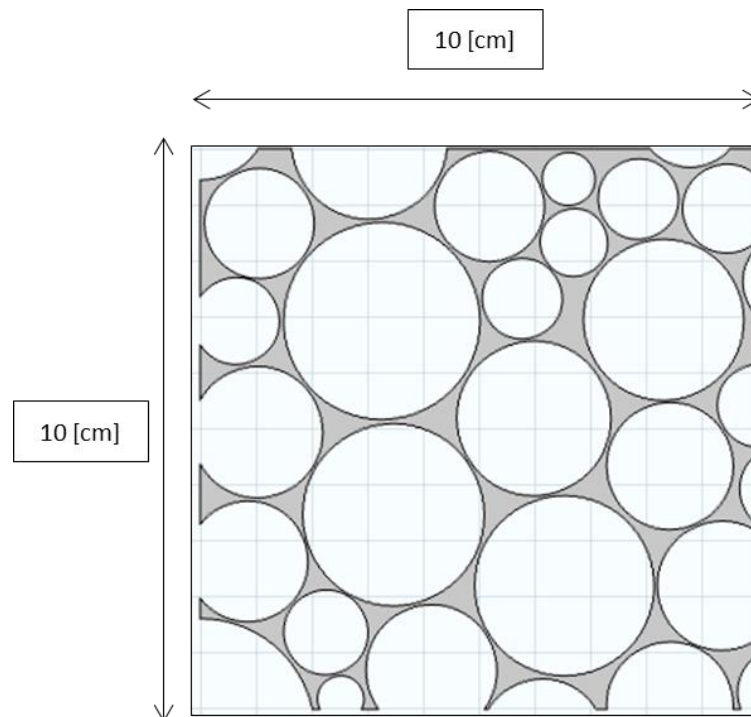


Figura 20: Sección de lecho en 2D en COMSOL Multiphysics (Modelo J1)

En un segundo arreglo (modelo J2), se tiene un reactor a escala laboratorio en dos dimensiones, cuya altura es de 50 [cm] y la base es de 30 [cm], al cual se le agregan dos boquillas inferiores para la salida de cobre Blíster y escoria alumino-olivina, ubicadas al lado derecho de la base y a 5 [cm] de altura del lado izquierdo de la base, respectivamente, y cuyas dimensiones son 15 [cm] de largo y 2 [cm] de ancho. Otras dos boquillas son ubicadas a ambos lados del reactor, a 10 [cm] de la base, las cuales tienen la función de alimentar aire enriquecido al sistema y cuyas dimensiones son 10 [cm] de largo y 1 [cm] de ancho. Por otro lado, el lecho está compuesto de circunferencias (esferas en tres dimensiones) con una distribución de tamaño aleatoria que va entre los 0.5 [cm] a 10 [cm] de diámetro, y cuya ubicación espacial también es aleatoria. En este caso, la idea es emular el diseño expuesto en la Figura 9 en un modelo de dos dimensiones de menor tamaño (escala laboratorio), que resguarde las propiedades esperadas para un posterior diseño de tres dimensiones.

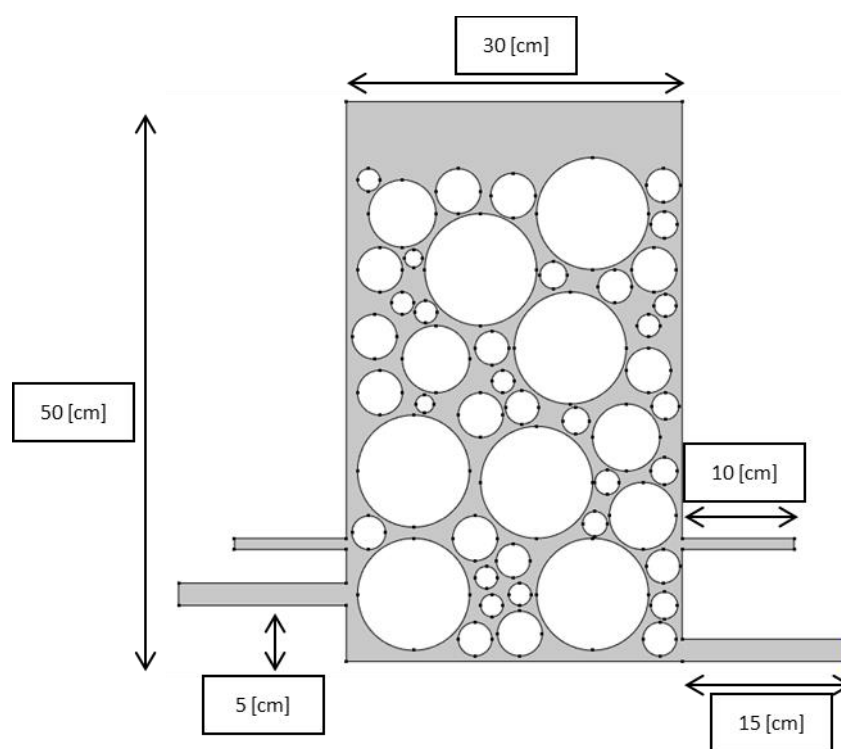


Figura 21: Esquema del nuevo proceso de conversión continua ENAMI a escala laboratorio en COMSOL Multiphysics (Modelo J2)

El tercer modelo (J3) similar al anterior (J2), pero más cercano a las dimensiones del horno ocupado en las pruebas a escala piloto realizadas en la fundición Hernán Videla Lira de ENAMI. Este cuenta con una base de entre 20 y 30 [cm] de diámetro, salidas de cobre blíster y escoria de 15 [cm] de largo por 3[cm] de ancho, entradas de aire enriquecido de 10 [cm] de largo por 2 [cm] de ancho y una altura variable de lecho de entre 25 [cm] a 195 [cm]. Las circunferencias de material refractario en este caso poseen un diámetro de 5 [cm] y su fin es estudiar el comportamiento del sistema ante cambios en la altura del lecho.

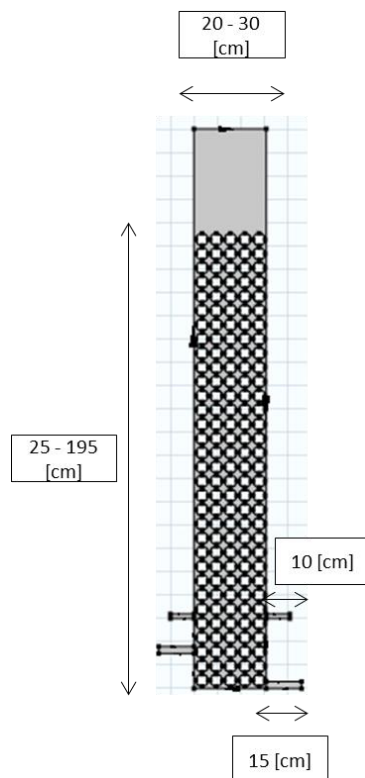


Figura 22: Esquema del nuevo proceso de conversión continua ENAMI a escala de planta piloto en COMSOL Multiphysics (Modelo J3)

Cabe destacar que en los tres modelos se consideró solo un flujo de metal blanco fundido atravesando el lecho empacado, en donde las propiedades del fluido (viscosidad, densidad, calor específico, constante de transferencia de calor, etc.) corresponden a las del cobre líquido y son funciones de la temperatura de acuerdo a los parámetros del software (ver Anexo A).

4.3.2. Ecuaciones Gobernantes

El transporte de masa de azufre en metal blanco líquido fue modelado con la ecuación general de difusión y convección en régimen permanente:

$$\nabla \cdot (-D\nabla c) + u\nabla c = R \quad (\text{Ec. 4.1})$$

donde D es el coeficiente de difusión de azufre en metal blanco, c es la concentración molar de azufre, u es la velocidad local del metal blanco y R es la concentración aportada por las reacciones internas. De acuerdo a la literatura [1, 2, 20, 21, 35], la desulfuración de metal blanco con oxígeno implica las siguientes reacciones químicas:





En donde la solubilidad final en el cobre Blíster queda representada por:



Díaz ^[2] encontró que la cinética de desulfuración para un convertidor continuo de lecho empacado depende de la fracción volumétrica de oxígeno en el aire inyectado, según se muestra en la tabla 4:

Tabla 4: Valores de las constantes cinéticas de acuerdo a la concentración de oxígeno

% de Oxígeno	Constante cinética [s^{-1}]
21	0.0145
30	0.0155
40	0.0160

Valores que son normalizados de acuerdo a **Warczok et al** ^[20], según la ecuación:

$$k_n = k \frac{V_m}{A_r} \quad (\text{Ec. 4.6})$$

donde k_n es la constante cinética normalizada, V_m es el volumen de la mata y A_r es el área de reacción, que en este caso de dos dimensiones, sería el área de la mata dividida el perímetro de reacción. A la temperatura de operación de 1473 [K], la cinética de reacción del azufre sigue una ley de primer orden según **Díaz** ^[2] y **Fukunaka et al** ^[21], en donde se tiene la condición de borde de **Robin** ^[22] para toda la superficie compuesta por material cromo-magnesiano:

$$-\hat{n} \cdot (-D\nabla c + uc) = -k \cdot c \quad (\text{Ec. 4.7})$$

donde k es la constante cinética normalizada del modelo según **Warczok et al** ^[20] (ecuación 4.6).

La fluidodinámica fue simulada a través de las ecuaciones de Navier-Stokes para un flujo incompresible en estado estacionario:

$$\rho(u \cdot \nabla)u = \nabla \cdot [-pI + \mu(\nabla u + (\nabla \mu)^T)] + g \quad (\text{Ec. 4.8})$$

$$\nabla \cdot u = 0 \quad (\text{Ec. 4.9})$$

donde p es la presión en el metal blanco, μ es la viscosidad dinámica, ρ y g la densidad y la aceleración de gravedad, respectivamente.

La difusividad del SO_2 en cobre fue calculada mediante los modelos de *Nernst-Einstein*^[23] y *Wilke-Chang*^[24], cuyas ecuaciones se muestran a continuación:

$$D_{ab} = \frac{kT}{4\pi\mu_b R_a} \quad (\text{Ec. 4.10})$$

$$D_{ab} = 7.4 \times 10^{-8} \frac{\sqrt{\psi_b M_b T}}{\mu \bar{V}_a^{0.6}} \quad (\text{Ec. 4.11})$$

donde D_{ab} es el coeficiente de difusión de masa de un soluto A a través de un solvente B, μ_b es la viscosidad dinámica del solvente puro B, R_a es el radio de la partícula de soluto A, T es la temperatura absoluta, k es una constante del modelo, ψ_b es el “parámetro de asociación” del solvente B, \bar{V}_a es el volumen molar del soluto A, M_b es la masa molecular del solvente B y μ es la viscosidad de la solución¹.

La transferencia de calor fue modelada de acuerdo a la ecuación general de energía para estado estacionario y flujo incompresible:

$$\rho C_p u \cdot \nabla T = \nabla \cdot (k \nabla T) + Q \quad (\text{Ec. 4.12})$$

Donde, T es la temperatura del metal blanco, C_p es el calor específico del metal blanco a presión constante, k es la conductividad térmica del metal blanco y Q es el calor externo (energía) proporcionado al sistema.

El intercambio de calor entre el aire y el metal blanco es considerado del tipo convectivo forzado, por lo tanto, la ecuación tiene la siguiente forma:

$$q = h(T_{amb} - T) \quad (\text{Ec. 4.13})$$

donde, h es el coeficiente de transferencia de calor convectivo y T_{amb} es la temperatura ambiente.

El coeficiente de transferencia de calor del metal blanco h , fue calculado mediante los modelos de convección forzada para flujo interno de *Sieder y Tate*^[25]:

$$Nu_D = 1.86 \left(Re \cdot Pr \cdot \frac{D}{L} \right)^{1/3} \left(\frac{\mu_b}{\mu_w} \right)^{0.14} \quad (\text{Ec. 4.14})$$

Y el modelo de convección para ebullición laminar en un tubo vertical de *Hsu y Westwater*^[26]:

¹ El uso de estos modelos es principalmente debido a la falta de información existente en la literatura con respecto a estos parámetros, sin embargo, sus resultados son concordantes con los valores esperados para las circunstancias estudiadas^[27, 28].

$$h \left[\frac{\mu_v^2}{g \rho_v (\rho_l - \rho_v) k_v^3} \right]^{1/3} = 0.002 Re^{0.6} \quad (\text{Ec. 4.15})$$

$$Re = \frac{4\dot{m}}{\pi D_v \mu_v} \quad (\text{Ec. 4.16})$$

donde Nu_D es el número de Nusselt, Re es el número de Reynolds, Pr es el número de Prandtl, D es el diámetro característico, L es el largo característico, μ_b es la viscosidad dinámica a la temperatura del lecho y μ_w es la viscosidad dinámica a la temperatura de la pared. Por su parte, μ_v es la viscosidad dinámica de la fase gaseosa, k_v es la conductividad térmica de la fase gaseosa, ρ_v es la densidad de la fase gaseosa, ρ_l es la densidad de la fase líquida, D_v es el diámetro característico de la fase gaseosa (burbuja) y \dot{m} es la tasa de flujo másico en $[lb/h]$.

Pero debido a la dificultad presente en estas últimas dos ecuaciones, dado que dependen fuertemente de la temperatura y de la velocidad de flujo, es que se procedió a simplificarlas a una expresión más fácil que dependa solo de la temperatura, manteniendo la velocidad de flujo constante de acuerdo a un número de Reynolds promedio en base a la geometría estudiada, generando los modelos presentes a continuación:

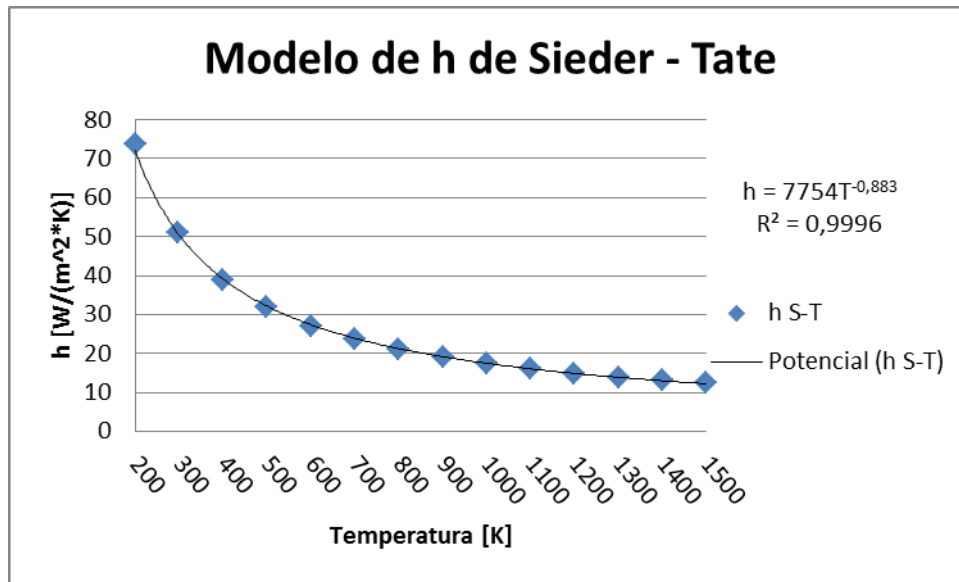


Gráfico 1: Simplificación de Sieder y Tate

$$h_{st} = 7754 \cdot T^{-0.883} \quad (\text{Ec. 4.17})$$

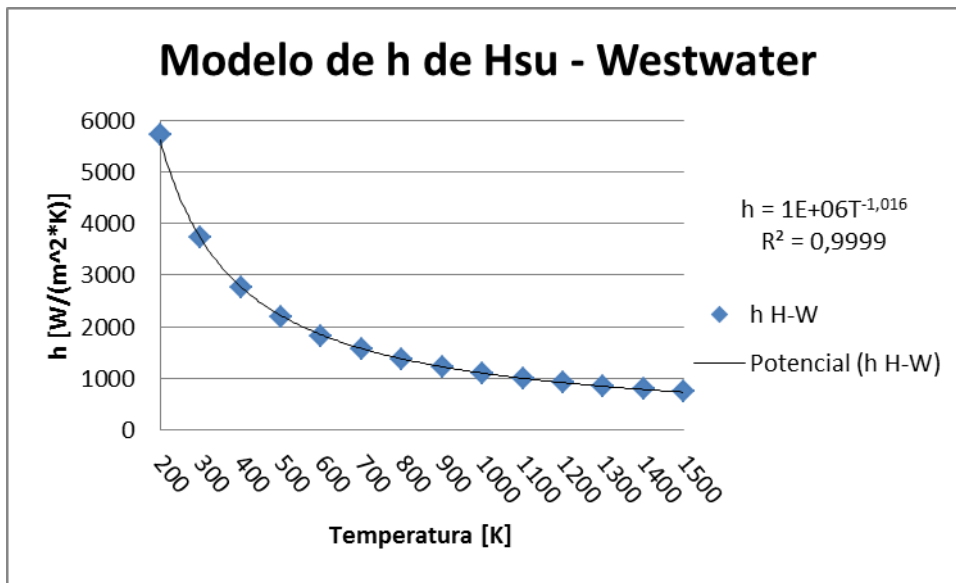


Gráfico 2: Simplificación de Hsu y Westwater

$$h_{hw} = 1000000 \cdot T^{-1.016} \quad (\text{Ec. 4.18})$$

En los cuales, los coeficientes h_{st} y h_{hw} fueron ajustados mediante una regresión de carácter potencial. Finalmente, el calor generado por las reacciones dentro del horno de conversión fue calculado mediante el software *HSC* [29], variando la cantidad de oxígeno inyectado y normalizando los valores por la cantidad de metal blanco presente en el horno, según se muestra en el gráfico 3:

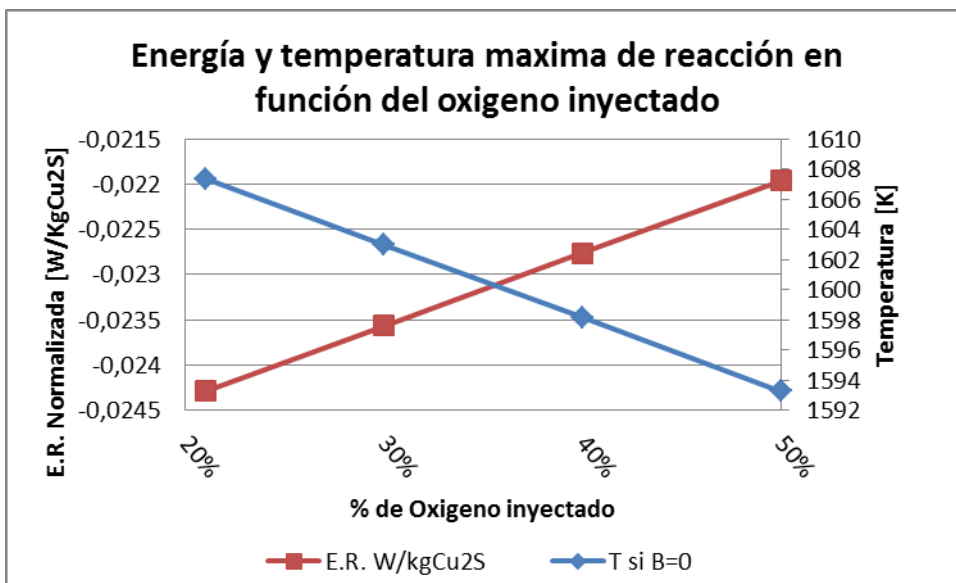


Gráfico 3: Energía y temperatura máxima de reacción en función del oxígeno inyectado

En donde se muestra también la temperatura máxima alcanzada a la salida del reactor si el balance de energía fuese nulo, es decir, si no hubiese pérdidas de ésta.

4.3.3. Condiciones de borde generales²

Las condiciones de borde consideradas en el modelo fueron:

- No deslizamiento en los bordes de material refractario como en las paredes del reactor.
- Pared adiabática en los bordes de material refractario como en las paredes del reactor.
- Concentración inicial de azufre igual a la cantidad molar presente en el Cu_2S , es decir, $49375 [mol/m^3]$.
- Temperatura inicial de $1473.15 [K]$.
- Temperatura externa y del aire inyectado de $298.15 [K]$.
- Velocidad inicial variable, cercana a la utilizada en las pruebas a escala laboratorio y piloto considerando un número de Reynolds constante.

4.4. Modelos CS, BCC, FCC, HCP y 2D

4.4.1. Geometría y consideraciones

La geometría considerada en estos modelos de tres dimensiones dan cuenta de una sección pequeña del lecho, en el cual, se tiene esferas de $5 [cm]$ de diámetro en contacto siguiendo la simetría característica de los empaquetamientos atómicos conocidos, es decir, cubica simple (CS), centrado en las caras (FCC), centrado en el cuerpo (BCC) y hexagonal compacta (HCP).

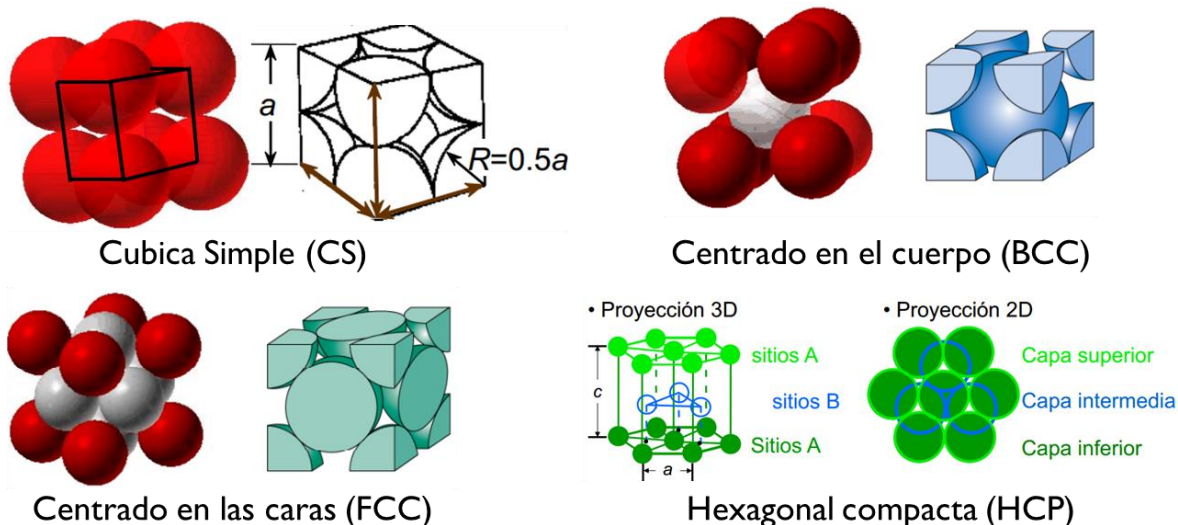


Figura 23: Empaquetamientos atómicos conocidos^[30].

² El detalle de todas las condiciones de borde se puede encontrar en el Anexo A.

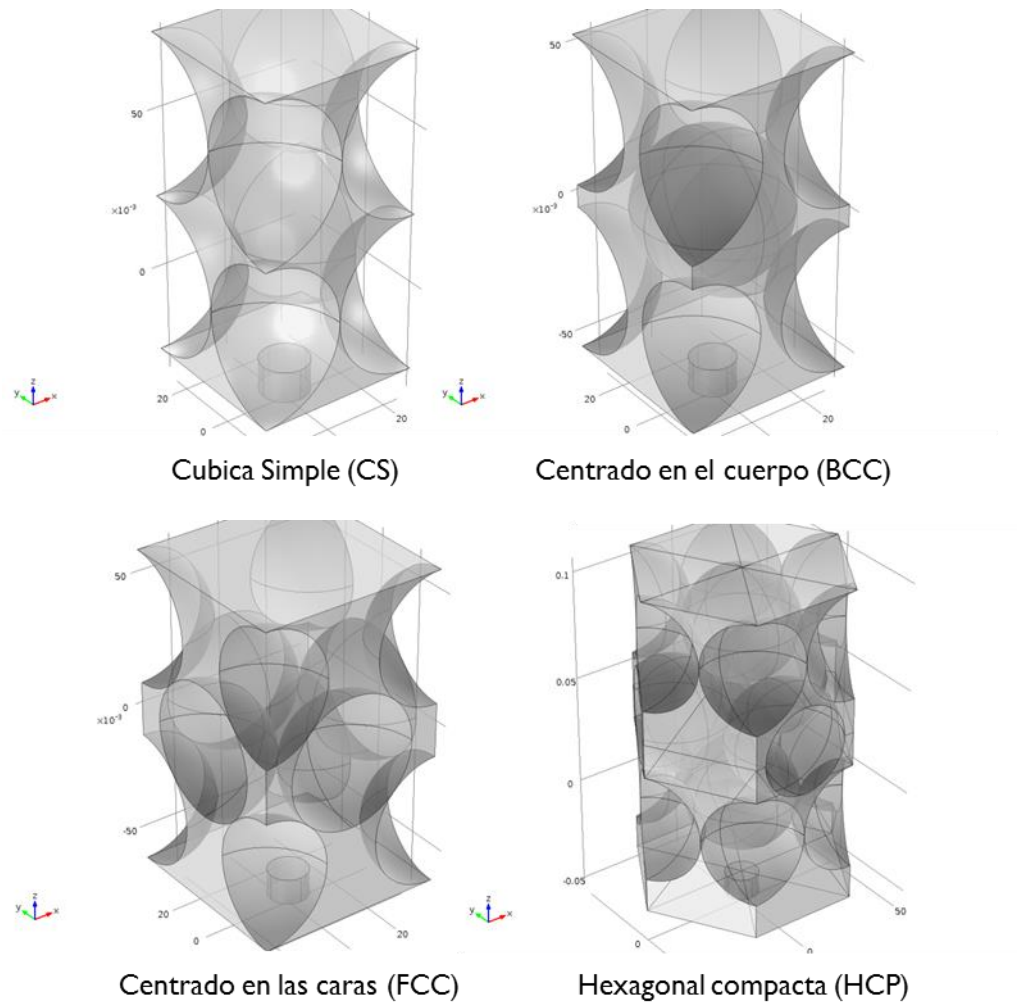


Figura 24: Modelos CS, BCC, FCC y HCP en Comsol Multiphysics

También, se consideró una geometría en dos dimensiones con tres circunferencias de 5 [cm] de diámetro enfocado en una sección pequeña del lecho de 100 [cm²].

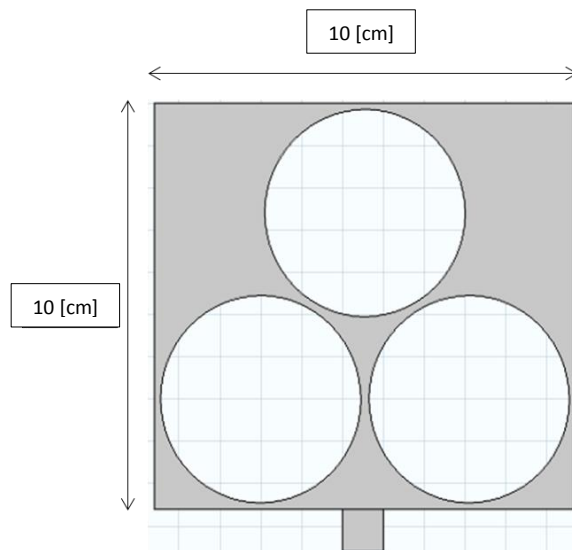


Figura 25: Modelo 2D transiente en Comsol Multiphysics

La razón de esto es variar principalmente la porosidad y la razón de volumen de mata versus área de reacción anteriormente mencionada, ver si existe algún cambio significativo en los primeros instantes de desarrollo del sistema dentro del horno (estado transiente) y si hay alguna relación entre los modelos de tres dimensiones y uno equivalente de dos dimensiones. Estudio que se realiza de forma paralela a los anteriormente mencionados.

Se debe mencionar que en este caso, se consideró una descripción de movimiento de flujos multifase en contra corriente³, en donde se tiene cobre líquido descendiendo por acción de la gravedad en contacto con aire inyectado, con sus respectivas propiedades físicas (viscosidad, conductividad térmica, densidad, capacidad calórica, etc.) en función de la temperatura según se muestran en el software (ver Anexo A).

4.4.2. Ecuaciones Gobernantes

Las ecuaciones gobernantes en este caso son exactamente las mismas mostradas en los modelos J1, J2 y J3, con excepción del término transiente en la ecuación de general de difusión, Navier-Stokes y general de energía, tal como se muestran a continuación:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \nabla c = \nabla \cdot (D \nabla c) + R \quad (\text{Ec. 4.19})$$

$$\rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} + (u \cdot \nabla) u \right) = \nabla \cdot [-pI + \mu(\nabla u + (\nabla \mu)^T)] + g \quad (\text{Ec. 4.20})$$

$$\rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot u \right) = 0 \quad (\text{Ec. 4.21})$$

$$\rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + u \cdot \nabla T \right) = \nabla \cdot (k \nabla T) + Q \quad (\text{Ec. 4.22})$$

También, se agregan las ecuaciones de nivel establecido para flujos inmiscibles de *Olsson y Kreiss*^[31]:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u \cdot \nabla \phi = \gamma \nabla \cdot \left(\varepsilon \nabla \phi - \phi(1 - \phi) \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \right) \quad (\text{Ec. 4.23})$$

$$\rho = \rho_1 + (\rho_2 - \rho_1) \phi \quad (\text{Ec. 4.24})$$

$$\mu = \mu_1 + (\mu_2 - \mu_1) \phi \quad (\text{Ec. 4.25})$$

En donde ϕ es un parámetro que marca la separación de flujos inmiscibles exactamente en $\phi = 0.5$ y que toma valores entre 0 y 1, perteneciendo a la región de un fluido bajo 0.5 y a la otra sobre este valor. Por su

³ Cabe mencionar que la modelación mediante flujo en medios porosos fue tomada en cuenta sin buenos resultados, por lo cual, fue descartada. Revisar Anexo A.

parte, ρ y μ son la densidad y viscosidad dinámica de la mezcla de flujos inmiscibles, que se calculan a partir del parámetro mencionado y las respectivas densidades y viscosidades dinámicas de cada fluido presente, mientras que ε y γ son parámetros que utiliza el software para calcular el ancho de la capa límite entre los fluidos inmiscibles^[31].

Finalmente, se agrega la relación de *Harrison et al*^[32] que da cuenta de la tensión superficial del cobre líquido, siendo:

$$\sigma_{Cu} \left[\frac{mN}{m} \right] = (1552 \pm 35) - (0.176 \pm 0.023) \cdot T[K^\circ] \quad (\text{Ec. 4.26})$$

4.4.3. Condiciones de borde generales⁴

Las condiciones de borde consideradas en estos modelos fueron:

- No deslizamiento en los bordes de material refractario.
- Pared adiabática en los bordes de material refractario.
- Concentración inicial de azufre igual a la cantidad molar presente en el Cu_2S , es decir, $49375 [mol/m^3]$.
- Temperatura inicial de $1473.15 [K]$.
- Temperatura externa y del aire inyectado de $298.15 [K]$.
- Velocidad inicial del cobre líquido nula, por lo que se mueve por su propio peso.
- Velocidad inicial del aire inyectado variable, manteniendo un número de Reynolds constante de acuerdo a las pruebas realizadas en laboratorio y planta piloto.
- Simetría en los bordes externos de cada geometría utilizada.

4.5. Modelo J3D

4.5.1. Geometría y consideraciones

En este último modelo, la geometría considerada da cuenta de una sección cubica pequeña del lecho del horno utilizado en la planta piloto en tres dimensiones de aproximadamente $13.5 [cm]$ de lado. En este, se tiene esferas de $5 [cm]$ de diámetro en contacto siguiendo la configuración atómica hexagonal compacta (HCP) ya mostrada, pues ésta es la que más se aproxima a la realidad del sistema.

⁴ El detalle de todas las condiciones de borde se puede encontrar en el Anexo A.

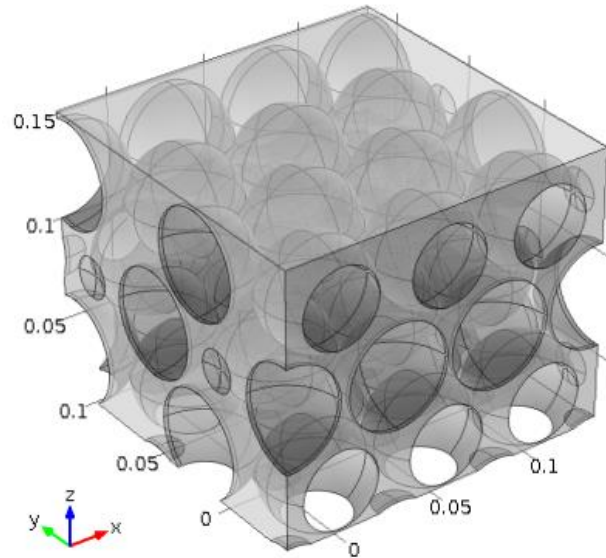


Figura 26: Esquema de sección de lecho del nuevo proceso de conversión continua ENAMI en COMSOL Multiphysics (Modelo J3D)

El fin de este modelo es comparar resultados de velocidad, desulfuración y temperatura con los modelos de carácter estacionario anteriores de dos dimensiones bajo las mismas condiciones de operación y en lo posible respaldar sus resultados.

4.5.2. Ecuaciones Gobernantes

En este caso, las ecuaciones que gobiernan el sistema son exactamente las mismas mostradas en los modelos J1, J2 y J3, es decir, de la ecuación 4.1 a la 4.18.

4.5.3. Condiciones de borde

Las condiciones de borde consideradas en este modelo fueron:

- No deslizamiento en los bordes de material refractario.
- Pared adiabática en los bordes de material refractario.
- Concentración inicial de azufre igual a la cantidad molar presente en el Cu_2S , es decir, $49375 [mol/m^3]$.
- Temperatura inicial de $1473.15 [K]$.
- Velocidad inicial del metal blanco de $0.001 [m/s]$.
- Simetría en los bordes externos de la geometría.

CAPITULO 5: RESULTADOS Y DISCUSION

5.1. Modelos J1, J2 y J3

5.1.1. Solución

La herramienta de elementos finitos *COMSOL Multiphysics 4.2* fue utilizada para llevar a cabo la resolución del modelo, generando una malla apropiada para resolver las ecuaciones involucradas, con alrededor de 20000⁵ elementos finitos dependiendo de la simulación. Los cálculos fueron llevados a cabo en un computador con un procesador i7-3930K con seis núcleos de 3.2 GHz y una memoria total de 64 GByte.

5.1.2. Modelos J1 y J2: Efecto de la difusividad y porcentaje de oxígeno inyectado

Partiendo por estudios preliminares, ambos modelos fueron analizados con el fin de encontrar algún patrón visible o que se pudiera descartar para simplificar modelos futuros. Así, se realizaron 6 simulaciones preliminares a cada modelo (12 en total), considerando solo la fluidodinámica y la cinética de desulfuración del sistema. En éstos, se varió la concentración de oxígeno inyectado y el modelo de difusividad empleado, tal como se mostró en las ecuaciones gobernantes del modelo.

En el modelo J1, como se mencionó anteriormente, lo que se busca es ver que ocurre en una sección del lecho de 0.01 [m²], cuya razón de área de mata versus perímetro de reacción (en dos dimensiones) es de 0.0011 [m].

Lo encontrado como resultado de la simulación en este caso, es un flujo sin desviaciones de su carácter laminar de acuerdo a parámetros del software⁶, dado que solo se analiza cómo se comporta el flujo en esta pequeña sección del empaquetamiento. Por otro lado, es posible apreciar que no se tiene una fuerte dependencia del modelo de difusividad con respecto a la existente con el modelo de concentración de oxígeno, teniéndose una gran tasa de reacción al avanzar el fluido. De este modo, se puede interpolar perfectamente este modelo para obtener una altura de lecho en la cual es posible obtener cobre Blíster con una concentración aceptable de azufre, es decir, menor a 10000 [ppm], que para este caso en particular

⁵ En adelante, los valores de elementos finitos utilizados se justifican de acuerdo a la convergencia encontrada en el software.

⁶ Hace referencia al número de Reynolds utilizado por el software, el cual es cuestionado dado que el largo característico utilizado por éste es el ancho de elemento finito. Más adelante se verá como calcular de mejor forma este parámetro.

sería de unos 55 [cm], lo cual se obtiene observando la tasa de variación de concentración mostrada en la tabla 5.

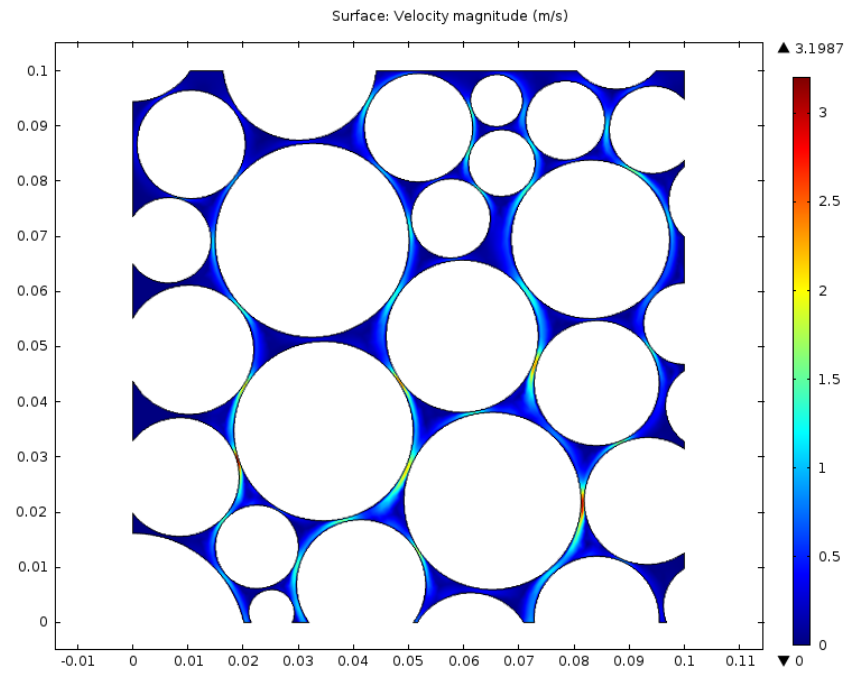


Figura 27: Perfil de velocidad del Modelo J1 para una concentración de oxígeno de 40% y modelo de difusividad de Nernst-Einstein

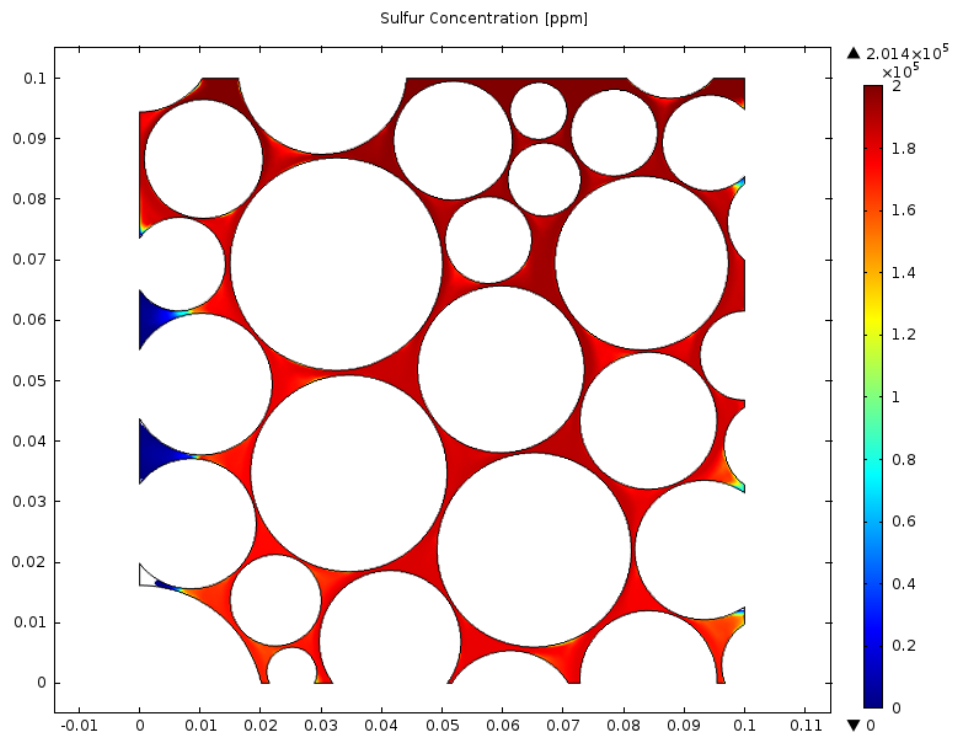


Figura 28: Perfil de concentración de azufre del Modelo J1 para una concentración de oxígeno de 40% y modelo de difusividad de Nernst-Einstein

Tabla 5: Resultados preliminares Modelo J1

Modelo de difusividad	Difusividad $\left[\frac{m^2}{s}\right]$	A/P [m]	Porosidad	% de Oxígeno	Concentración final de S en Blister [ppm]	Variación de concentración por cm de avance [ppm/cm]
Wilke- Chang	5.14×10^{-9}	0.0011	0.151	21	161362	3863,8
				30	165378	3462,2
				40	165340	3466
Nernst-Einstein	3.14×10^{-9}	0.0011	0.151	21	161962	3803,8
				30	163707	3629,3
				40	165952	3404,8

En cuanto al modelo J2, en éste se aprecia que el flujo pese a partir prácticamente del reposo no se mantiene del todo laminar e ingresa a algunas zonas pequeñas en donde el número de Reynolds alcanza valores de hasta 8000 (de acuerdo al software⁷), manteniéndose en un régimen transicional. A simple vista, se aprecia que este valor depende fuertemente del arreglo del lecho y sobre todo de la relación de área de mata versus perímetro de reacción, que en este caso es 0.0104 [m], mayor al empleado en el modelo J1. Por su parte, en cuanto a la concentración de azufre, se aprecia que ésta responde de buena forma con respecto al reactor, eliminándose alrededor 78% del azufre inicial (200000 [ppm]) con la configuración dada, lo cual da un buen indicio de la utilización de esta tecnología.

Si bien, el porcentaje final de azufre en el Blíster debería ser menor al 1%, lo que se busca en esta etapa es demostrar que la desulfuración es posible. Por otro lado, es posible notar que los modelos de difusividad, que si bien difieren mucho entre sí, no influyen tanto en el cálculo final de concentración, como sí lo hace el porcentaje de oxígeno utilizado en el aire enriquecido, pero aun así no es un factor determinante en el resultado final (ver tabla 6).

⁷ Como se explicó, es un valor que es cuestionado dado que el largo característico utilizado por el software es el ancho de elemento finito, por lo tanto, más adelante se verá como calcular de mejor forma este parámetro.

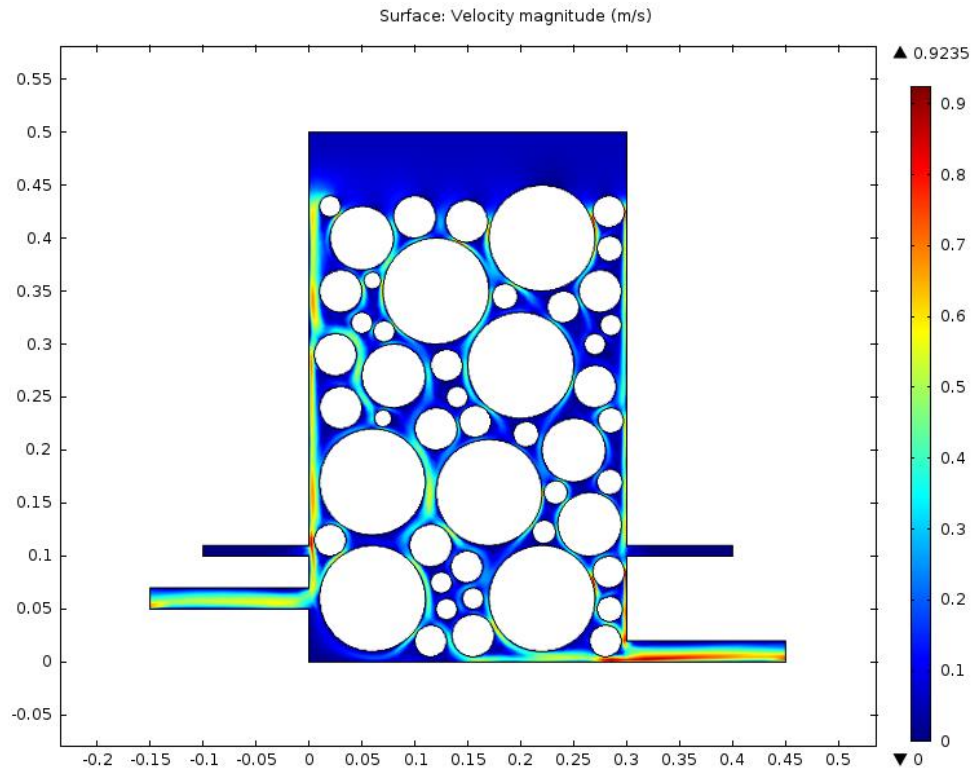


Figura 29: Perfil de velocidad del Modelo J2 para una concentración de oxígeno de 40% y modelo de difusividad de Wilke-Chang

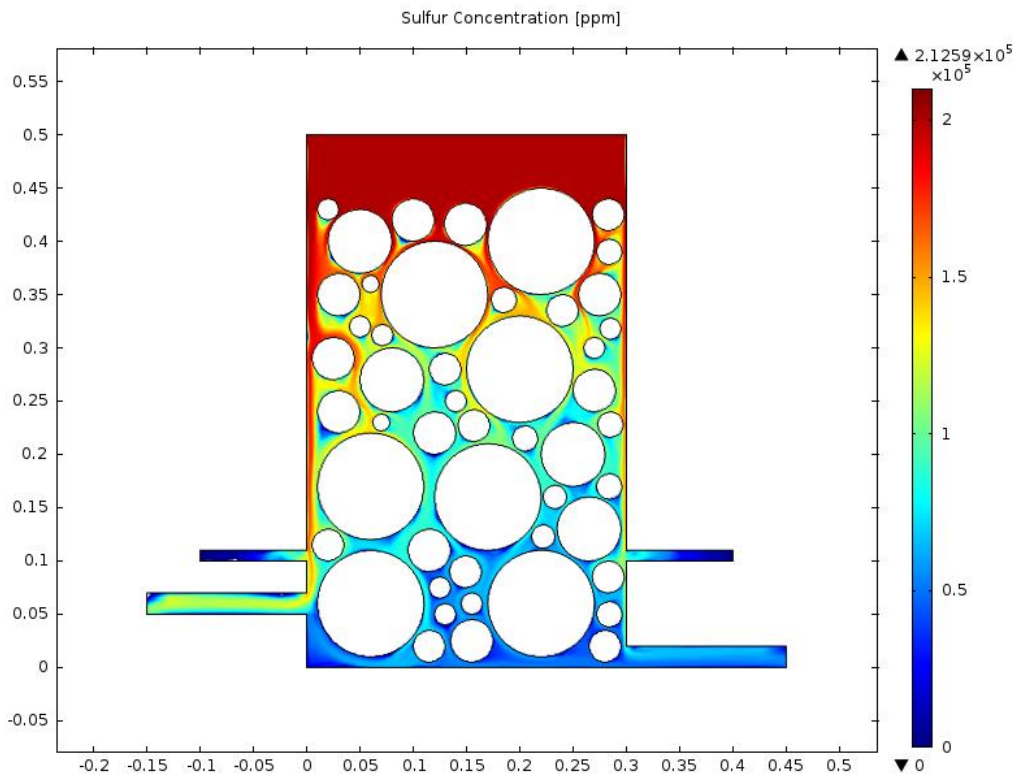


Figura 30: Perfil de concentración de azufre del Modelo J2 para una concentración de oxígeno de 40% y modelo de difusividad de Wilke-Chang

Tabla 6: Resultados preliminares Modelo J2

Modelo de difusividad	Difusividad $\left[\frac{m^2}{s}\right]$	A/P [m]	Porosidad	% de Oxígeno	Concentración final de S en Blister [ppm]	Variación de concentración por cm de avance [ppm/cm]
Wilke- Chang	5.14×10^{-9}	0.0104	0.419	21	46744	3065,1
				30	44538	3109,2
				40	43521	3129,6
Nernst-Einstein	3.14×10^{-9}	0.0104	0.419	21	46776	3064,5
				30	44593	3108,1
				40	43503	3129,9

Es posible apreciar más detalles y resultados de estas simulaciones en la sección de Anexos.

5.1.3. Modelo J1: Efecto de porosidad y razón de área de mata versus perímetro de reacción

Como se evidenció en los resultados anteriores, el modelo de difusividad no juega un papel importante en los resultados de las simulaciones, siendo su efecto es casi despreciable. Por lo tanto, en lo que sigue se utilizó el modelo de Nernst-Einstein por sobre el de Wilke-Chang, debido a que en su concepción es más representativo de la realidad del sistema, aunque ambos modelos presentan valores que están dentro de un rango razonable según la literatura^[27, 28]. En tanto, basado en lo mostrado no es concluyente que mejores resultados se consigan a una determinada concentración de oxígeno en la inyección de aire, pero debido a las pruebas presentadas por *Díaz*^[2] en sus estudios a escala de laboratorio, en adelante se siguió trabajando con una razón de oxígeno inyectado del 40%. De este modo, se procedió a analizar qué sucedía al variar la porosidad presente en esta sección pequeña de lecho, y por ende, la razón de área de mata versus perímetro de reacción, obteniéndose los resultados del gráfico 4:

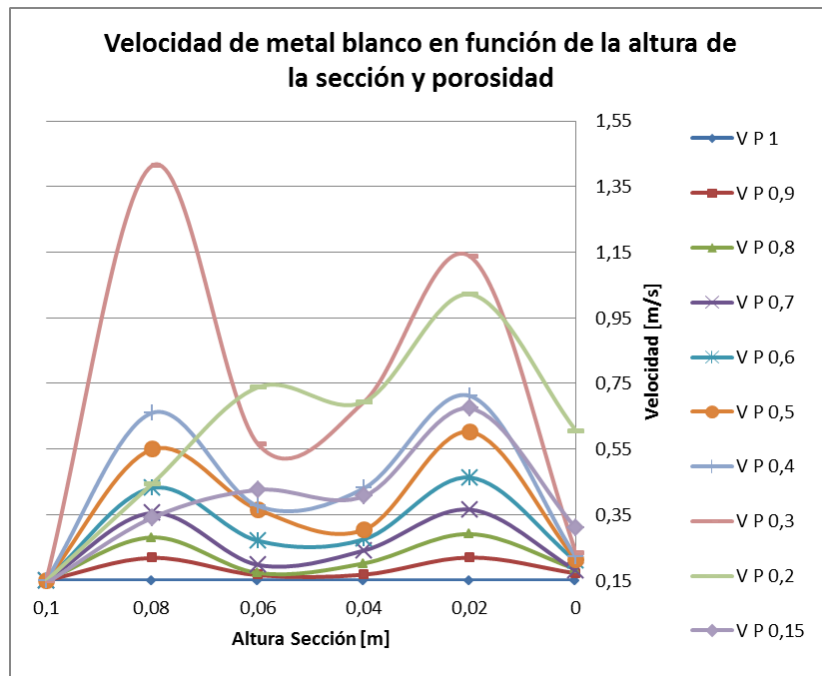


Gráfico 4: Velocidad de metal blanco en función de la altura y porosidad Modelo J1

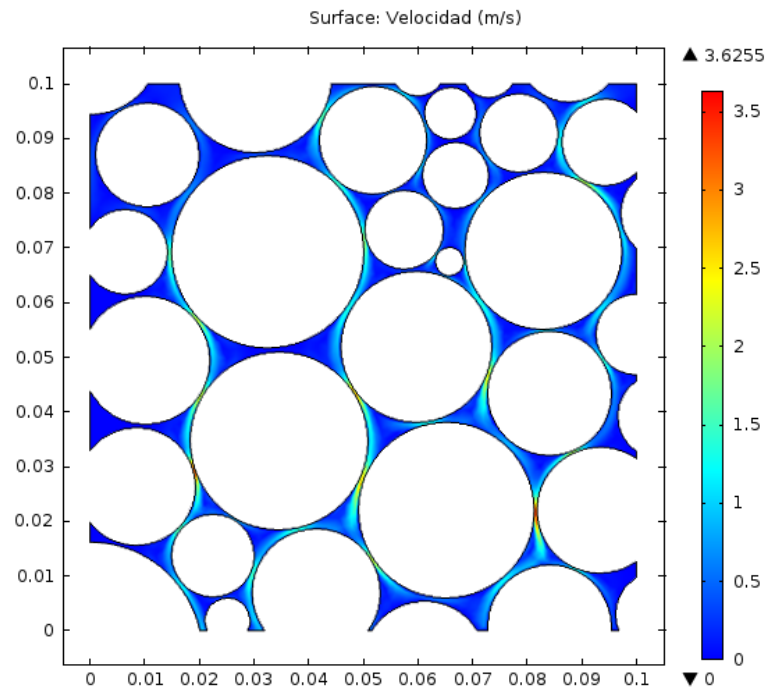


Figura 31: Perfil de velocidad Modelo J1 para una porosidad del 15%

En cuanto a la velocidad, ésta fue medida y promediada cada 2 [cm] en la vertical (líneas de cota) sobre la sección estudiada, de acuerdo a la ecuación:

$$\bar{u} = \frac{1}{b-a} \int_a^b u(x) dx \quad (\text{Ec. 5.1})$$

en donde, \bar{u} es la velocidad promedio obtenida del perfil de velocidad $u(x)$ desde un punto a hasta un punto b en el eje x . Se varió entre las distintas porosidades, desde una porosidad del 100% (P 1 en los gráficos), hasta una porosidad del 15% (P 0,15 en los gráficos), manteniendo la velocidad inicial constante. Los resultados muestran una tendencia al aumento de la velocidad del flujo a medida que el lecho se vuelve menos poroso, lo cual es razonable al pensar en una reducción del segmento por el cual éste atraviesa (ver gráfico 4).

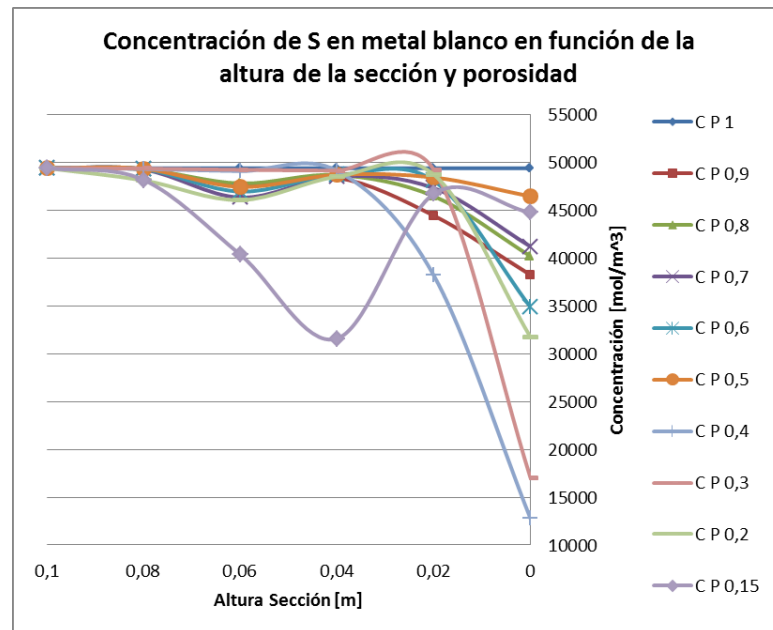


Gráfico 5: Concentración de S en metal blanco en función de la altura y porosidad Modelo J1

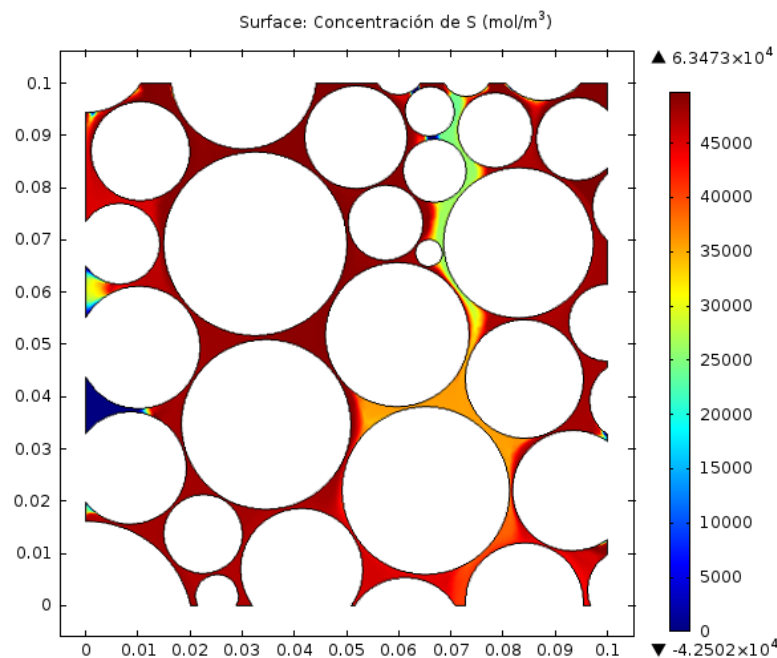


Figura 32: Perfil de concentración de azufre Modelo J1 para una porosidad del 15%

La concentración tuvo el mismo tratamiento explicado para la velocidad (concentración promedio de acuerdo a ecuación 5.1) y en ésta, no se aprecia una gran dependencia sobre la porosidad empleada en la configuración, aunque si se nota una tendencia en los primeros 4 [cm] de lecho (desde 10 [cm] hasta los 6 [cm]) en los cuales atraviesa el fluido (ver gráfico 5).

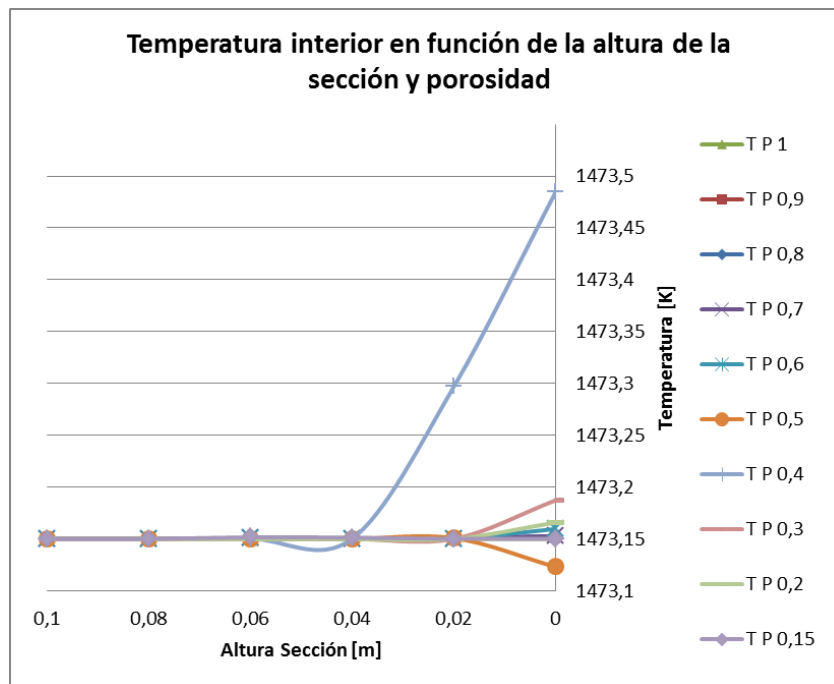


Gráfico 6: Temperatura de la sección en función de la altura y porosidad Modelo J1

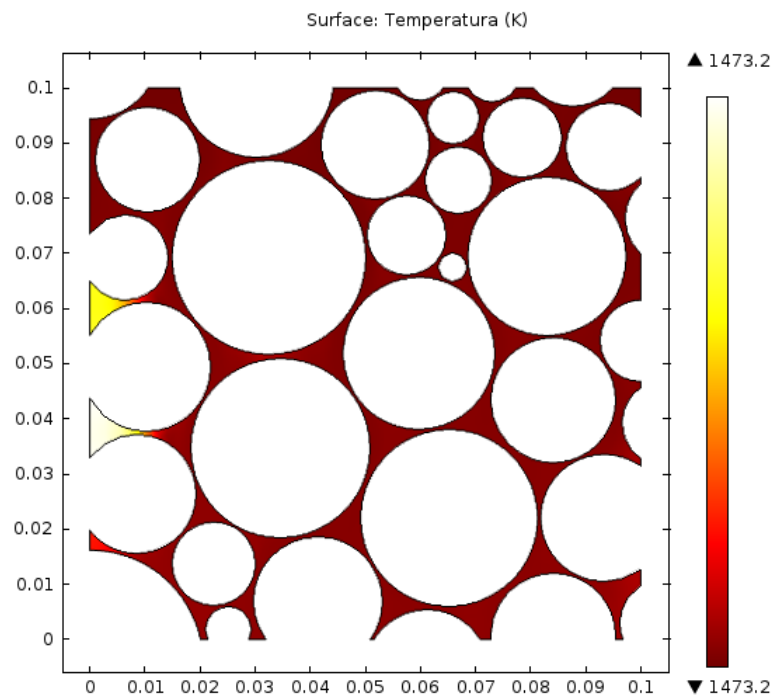


Figura 33: Perfil de temperatura Modelo J1 para una porosidad del 15%

La temperatura, al igual que las otras dos variables, fue calculada de la misma manera (temperatura promedio de acuerdo a ecuación 5.1) y en ésta no se aprecia una dependencia clara con la porosidad, siendo las desviaciones de temperatura casi despreciables. Cabe destacar que el modelo de convectividad utilizado finalmente fue el de Hsu y Westwater, lo cual se justifica en pruebas paralelas realizadas a los modelos de tres dimensiones (ver sección 5.2.2.).

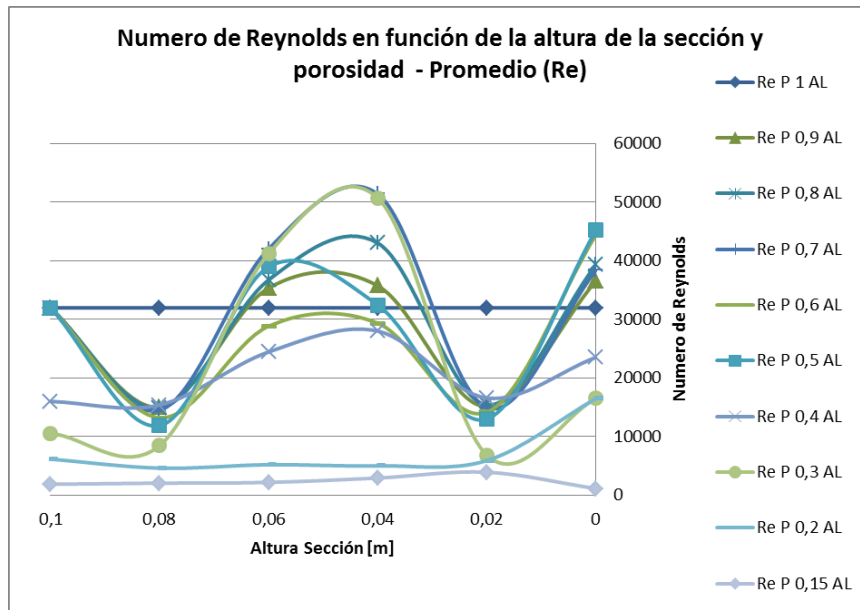


Gráfico 7: Numero de Reynolds promedio en función de la altura y porosidad Modelo J1

Un primer número de Reynolds (Re) fue medido en base a la velocidad promedio, tal como se explicó anteriormente, y al largo promedio en donde se midió esa velocidad promedio, es decir:

$$Re = \frac{\rho \bar{u} \bar{L}}{\mu} \quad (\text{Ec. 5.2})$$

Donde, ρ es la densidad del metal blanco, μ es la viscosidad dinámica del metal blanco, \bar{u} es la velocidad promedio en una línea de cota de la sección estudiada, y \bar{L} es el largo promedio de esa línea de cota, calculado como:

$$\bar{L} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n L_i \quad (\text{Ec. 5.3})$$

Donde L_i son los distintos largos (segmentos entre material refractario) que componen esa línea de cota. De este modo, es posible apreciar que mientras disminuye la porosidad este valor decrece y además que tiene una relación directa con los perfiles de velocidad mostrados anteriormente (ver gráfico 7).

Por otro lado, un segundo número de Reynolds (Re^*) fue medido en base a la velocidad promedio y al largo total ponderado por la porosidad, es decir:

$$Re = \frac{\rho \bar{u} \dot{L}}{\mu} \quad (\text{Ec. 5.4})$$

$$\dot{L} = P \cdot L \quad (\text{Ec. 5.5})$$

Donde, P es la porosidad y L el largo total de la medición, que en este caso es el ancho de la sección (10 [cm]). En éste, se aprecia un aumento de valores con respecto al anterior, básicamente debido al nuevo largo empleado, lo cual sitúa al modelo en una zona de turbulencia y hace dudar de la validez de esta aproximación (ver gráfico 8).

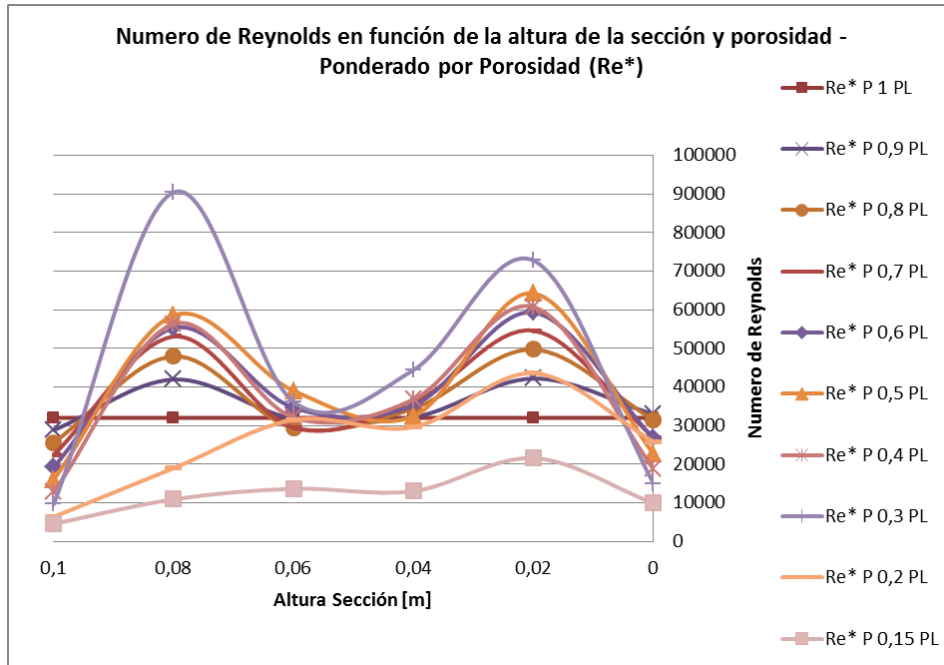


Gráfico 8: Numero de Reynolds ponderado en función de la altura y porosidad Modelo J1

Ambos modelos de Reynolds se ven representados en el siguiente gráfico, en donde se aprecia claramente la sobrevaloración del segundo modelo.

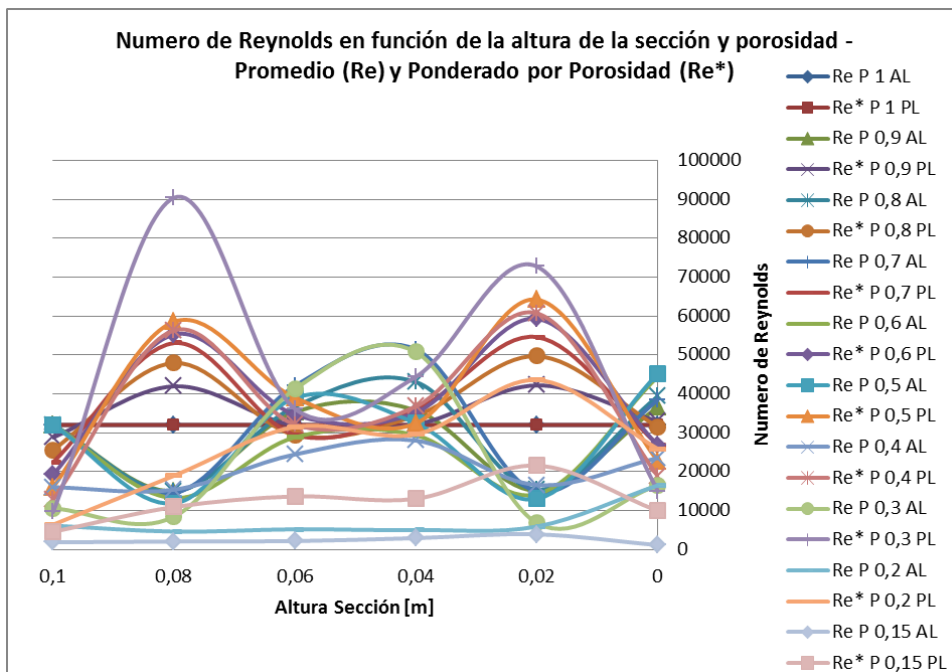


Gráfico 9: Números de Reynolds promedio y ponderado en función de la altura y porosidad Modelo J1

Con el fin de aclarar la información recopilada, y asumiendo que lo más probable es que la porosidad finalmente empleada será menor a 50% es que se muestran a continuación los mejores 5 casos de forma más detallada (porosidades desde 50% a 15%), en donde es posible reforzar las ideas planteadas anteriormente.

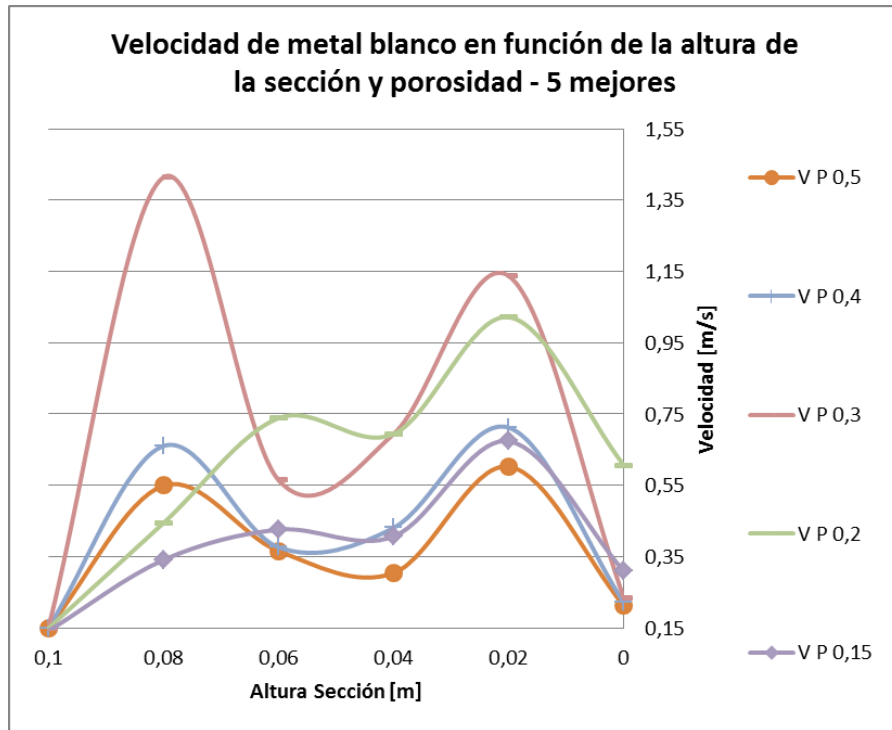


Gráfico 10: Velocidad de metal blanco en función de la altura y porosidad Modelo J1 - 5 mejores

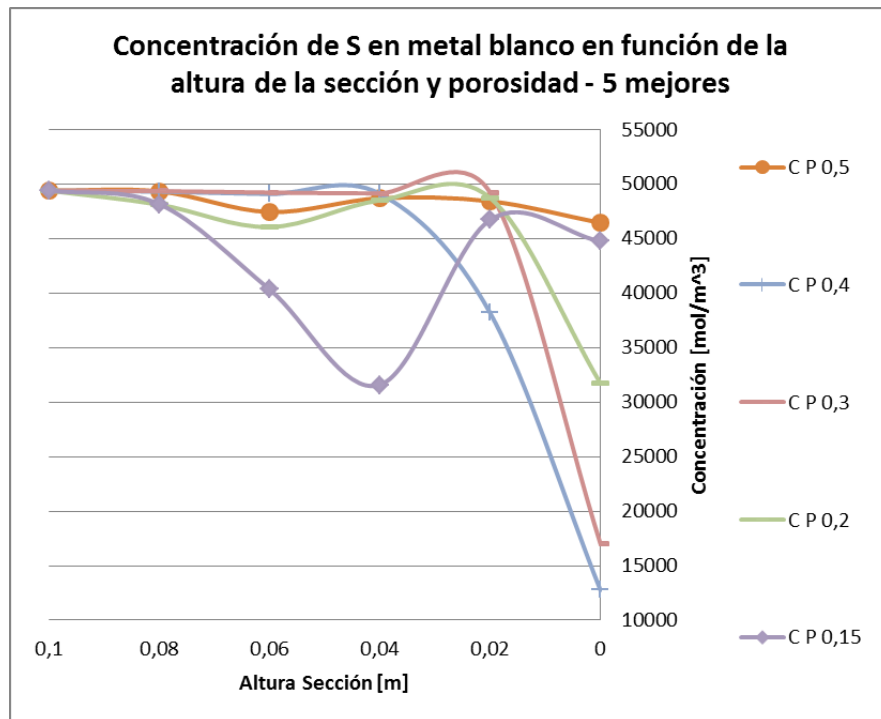


Gráfico 11: Concentración de S en metal blanco en función de la altura y porosidad Modelo J1 - 5 mejores

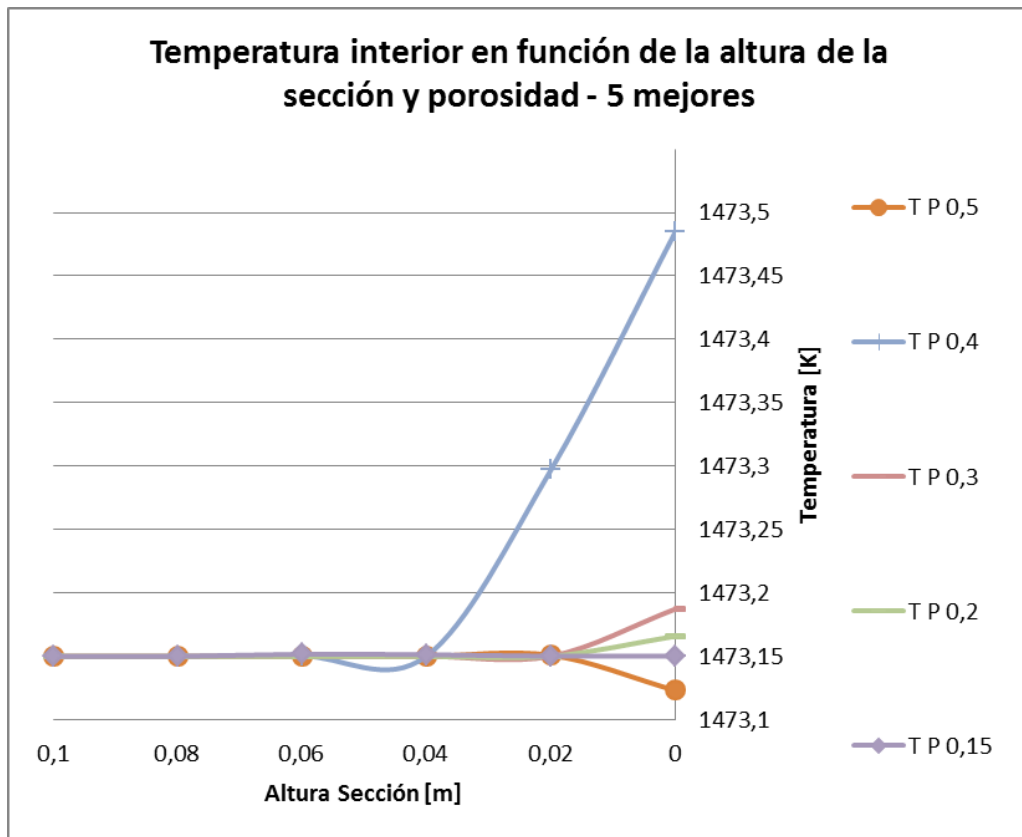


Gráfico 12: Temperatura de la sección en función de la altura y porosidad Modelo J1 - 5 mejores

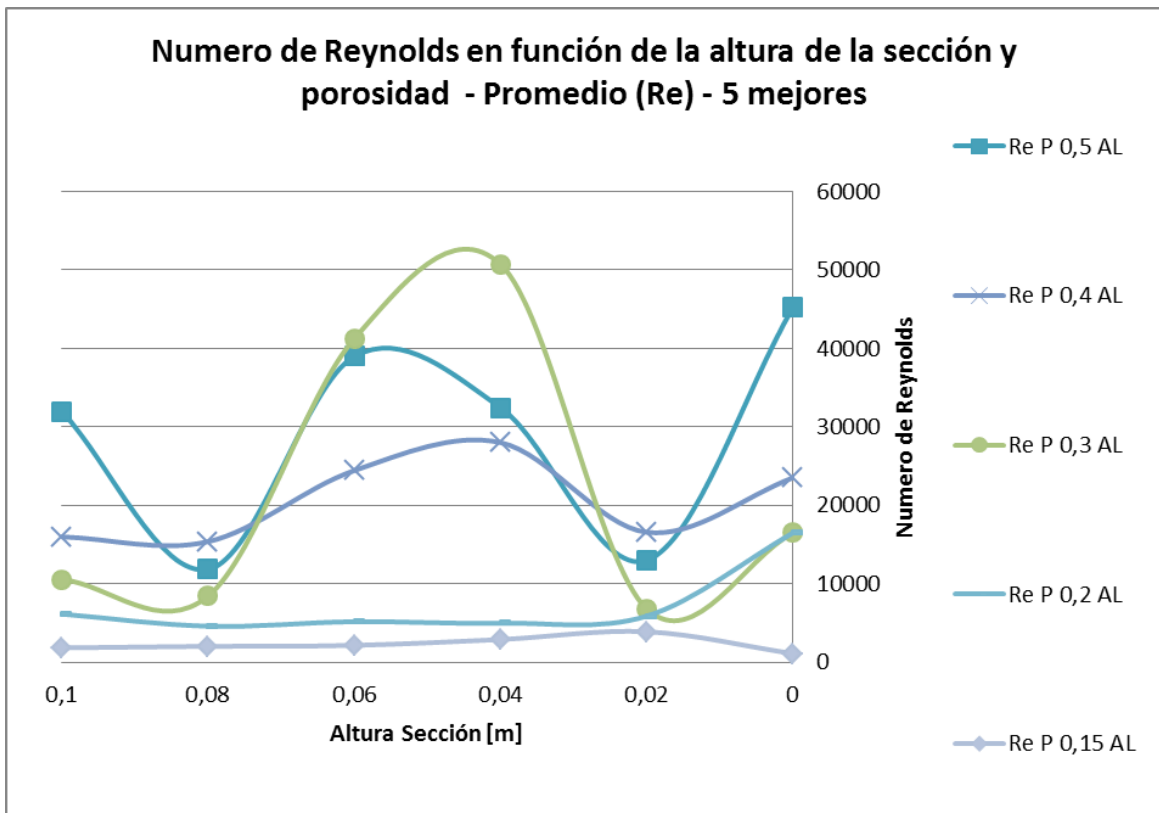


Gráfico 13: Numero de Reynolds promedio en función de la altura y porosidad Modelo J1 - 5 mejores

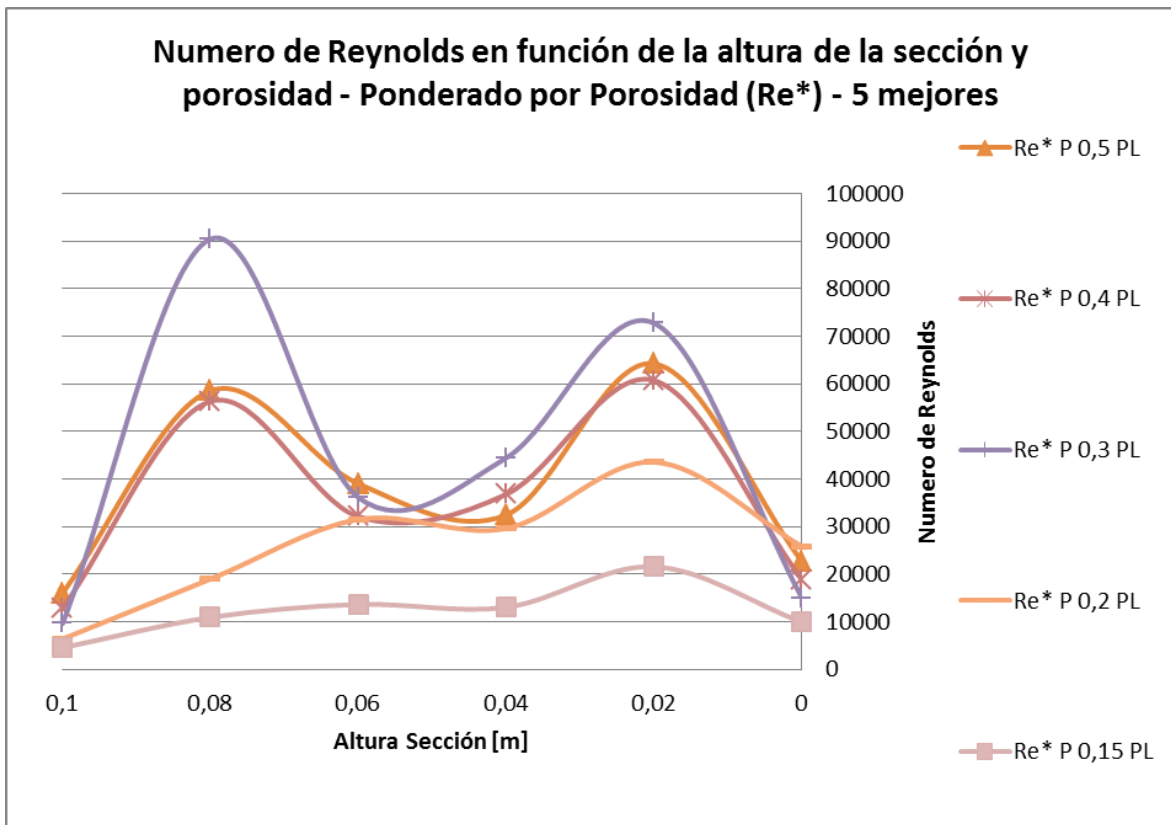


Gráfico 14: Numero de Reynolds ponderado en función de la altura y porosidad Modelo J1 - 5 mejores

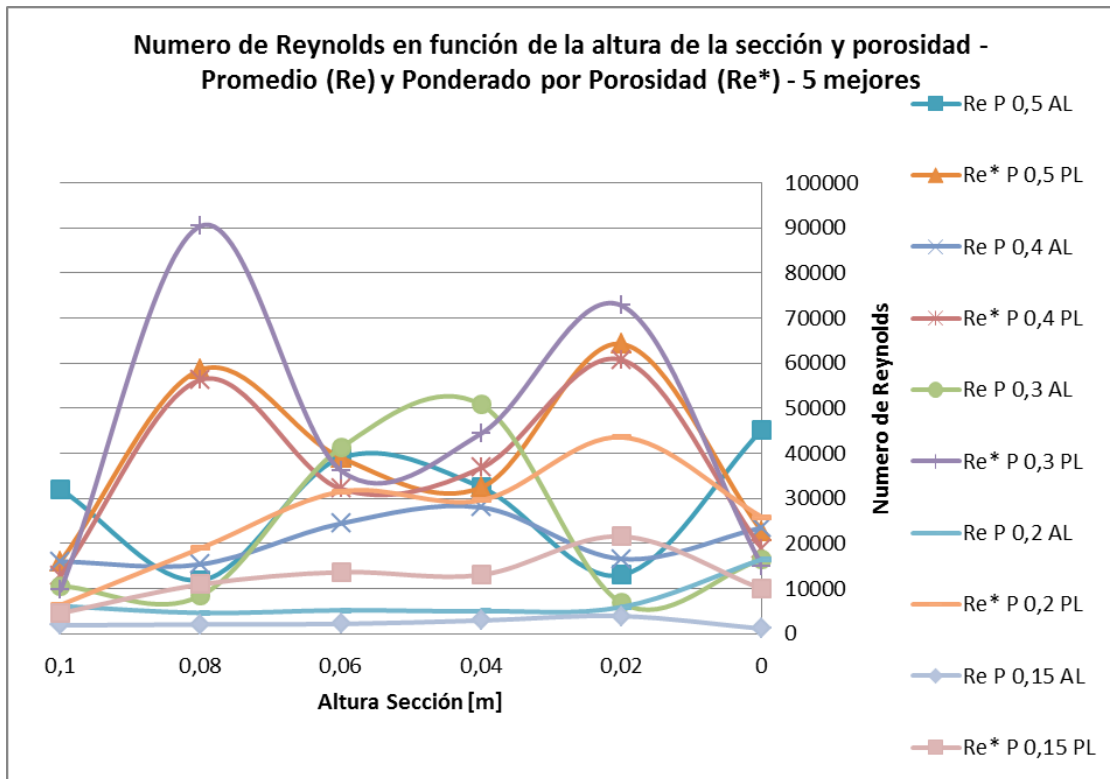


Gráfico 15: Numero de Reynolds promedio y ponderado en función de la altura y porosidad Modelo J1 - 5 mejores

Es posible revisar más detalles y resultados de estas simulaciones en la sección de Anexos.

5.1.4. Modelo J2: Efecto de porosidad y razón de área de mata versus perímetro de reacción

Con el fin de reforzar resultados, se procedió a realizar el mismo tratamiento mostrado anteriormente para el modelo J1 sobre el modelo J2. En éste, y debido a lo ya argumentado, se trabajó en base a una velocidad inicial constante, una concentración de oxígeno del 40%, el modelo de difusividad de Nernst-Einstein, el modelo de convectividad de Hsu y Westwater, y solo se varió entre las porosidades bajo 50% (desde 50% hasta 15%), debido a que es muy poco probable que se utilice una porosidad mayor. Las mediciones fueron realizadas del mismo modo que en el modelo J1, solo que cada 5[cm] de altura, obteniéndose:

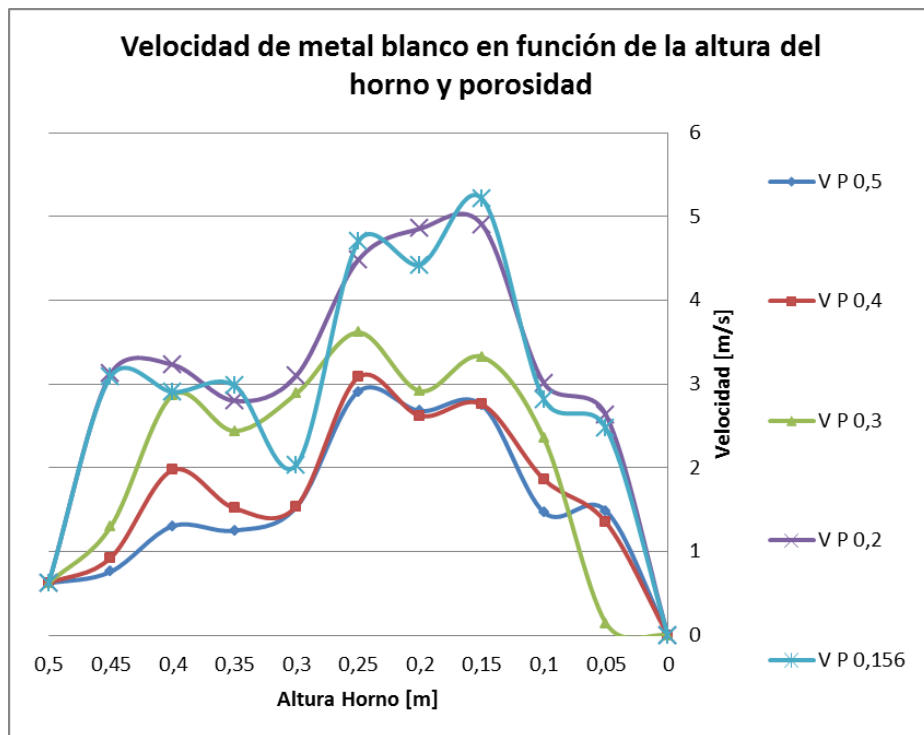


Gráfico 16: Velocidad de metal blanco en función de la altura y porosidad Modelo J2

Al igual que en el modelo J1, la velocidad tiene una relación inversa con la porosidad, esto debido nuevamente a la disminución de espacio por donde atraviesa el flujo, aumentando la velocidad de éste (ver gráfico 16).

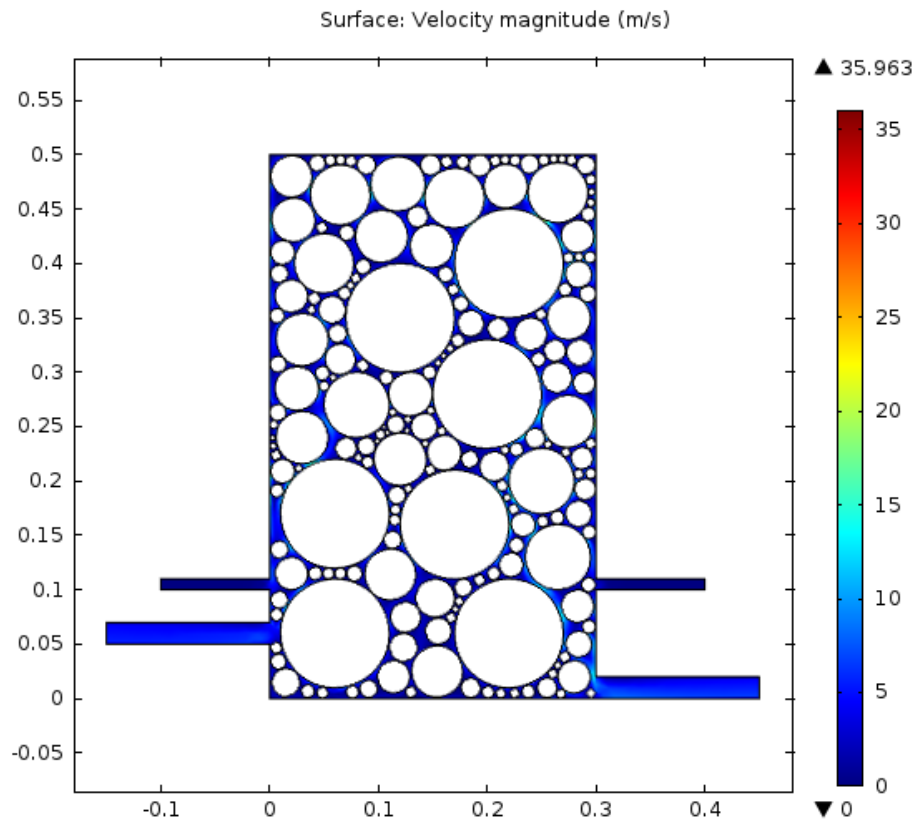


Figura 34: Perfil de velocidad Modelo J2 para una porosidad del 15%

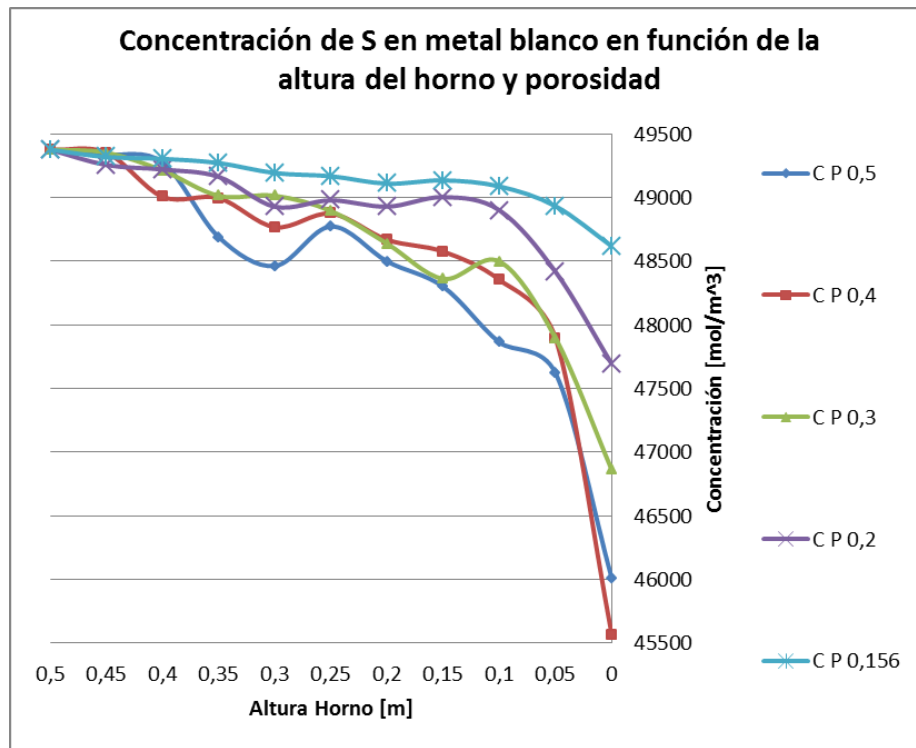


Gráfico 17: Concentración de S en metal blanco en función de la altura y porosidad Modelo J2

Por otro lado, en este caso es posible apreciar una relación directa de la porosidad con la rapidez de reacción del flujo, siendo más rápido mientras más poroso sea el lecho, lo cual aclara más el efecto con respecto al modelo J1 y hace pensar que la reacción estaría controlada por la convectividad que por la difusividad (ver gráfico 17).

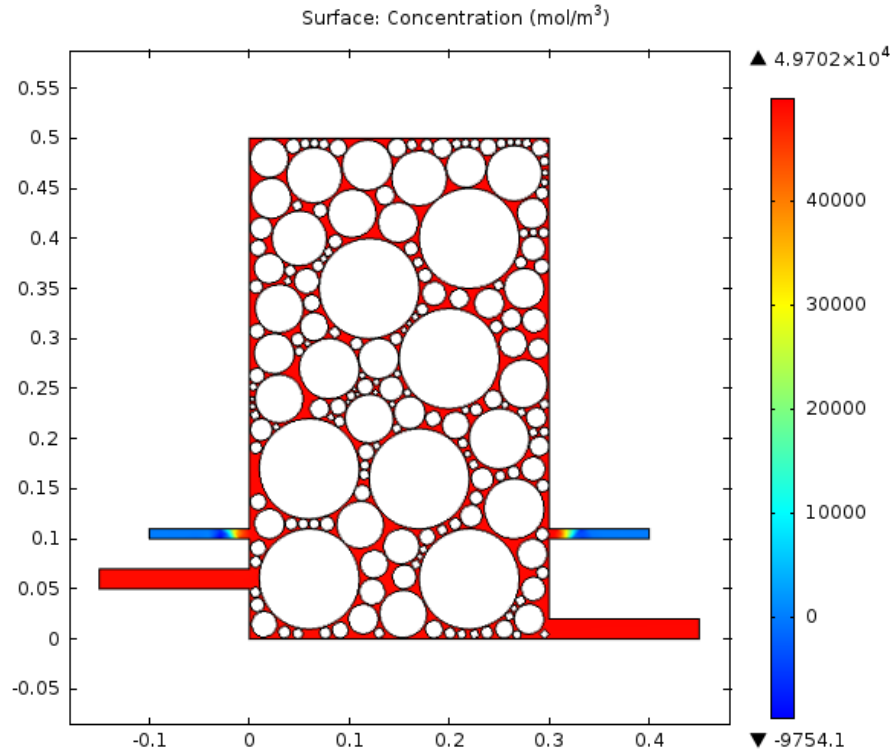


Figura 35: Perfil de concentración de azufre Modelo J2 para una porosidad del 15%

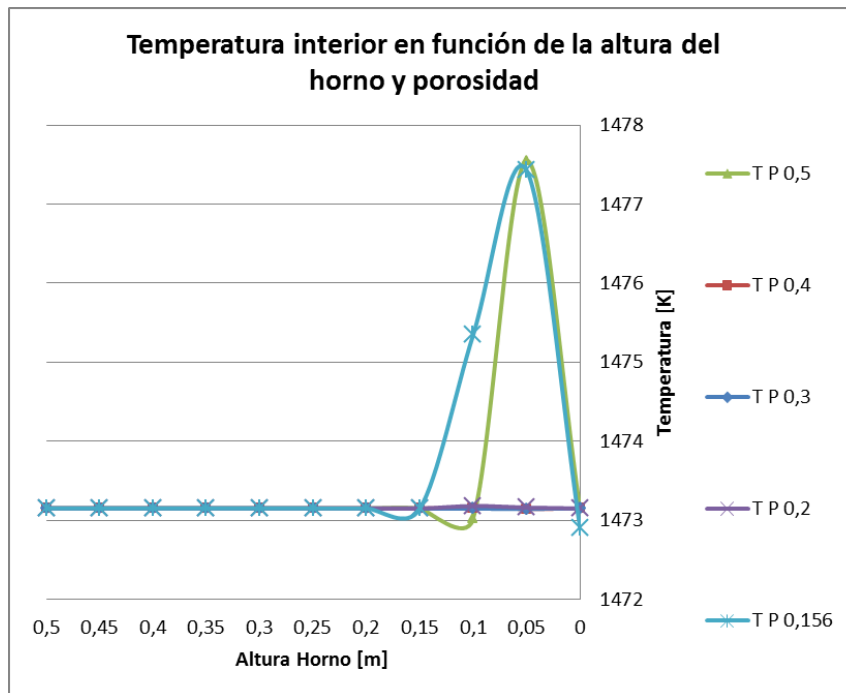


Gráfico 18: Temperatura de metal blanco en el horno en función de la altura y porosidad Modelo J2

En tanto, como se aprecia en el grafico 18 la temperatura no guarda relación con la porosidad del lecho, siendo constante en todas las configuraciones. El salto en la temperatura se debe principalmente a las zonas de salida y entradas de oxigeno del horno (Modelo J2), en donde la temperatura sufre fluctuaciones (ver Figura 36).

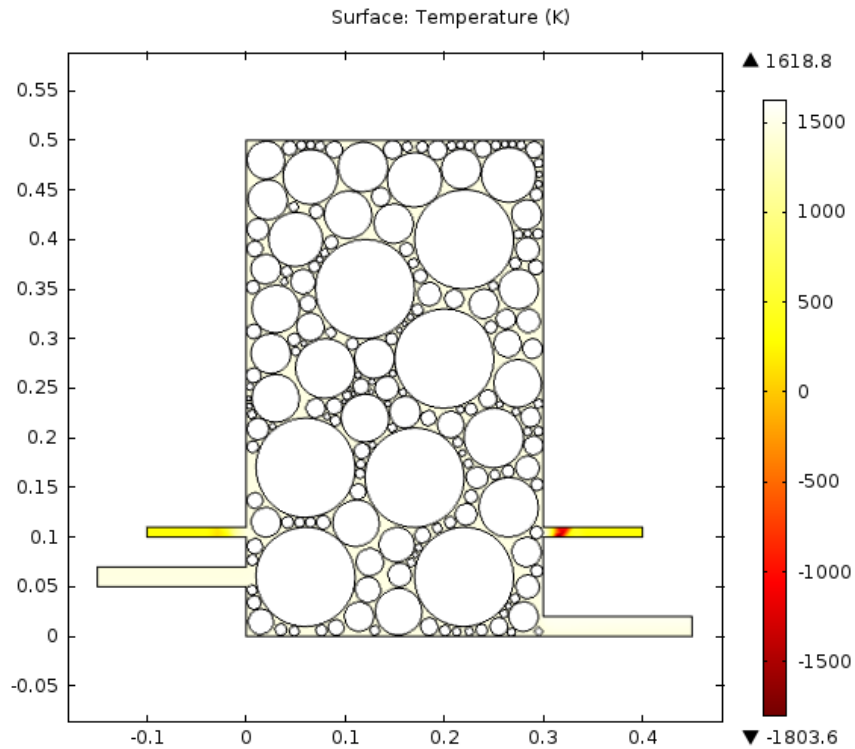


Figura 36: Perfil de temperatura Modelo J2 para una porosidad del 15%

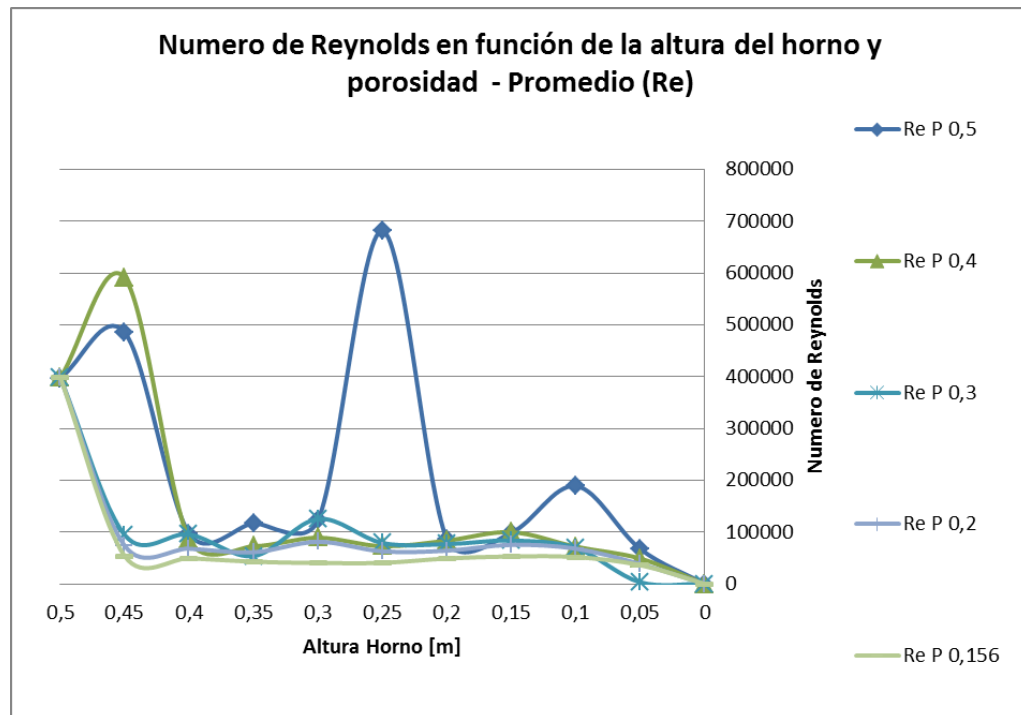


Gráfico 19: Numero de Reynolds promedio en función de la altura y porosidad Modelo J2

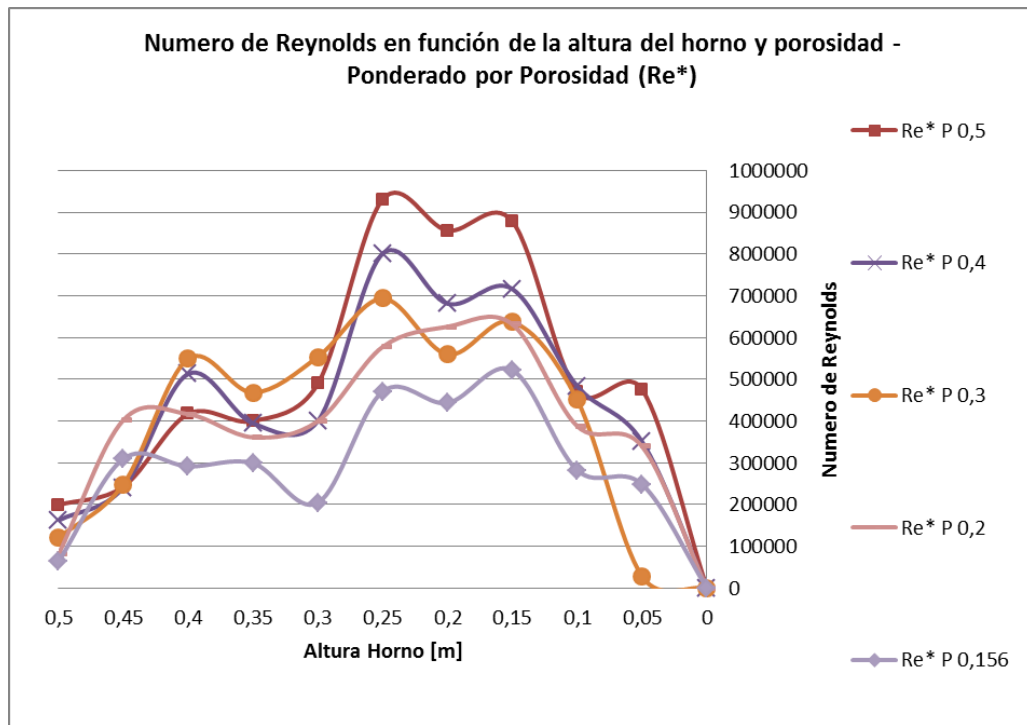


Gráfico 20: Numero de Reynolds ponderado en función de la altura y porosidad Modelo J2

De la misma forma que para el modelo J1, se calculó el número de Reynolds mediante las dos metodologías mostradas anteriormente, y nuevamente es clara la tendencia del modelo ponderado (Re^*) de sobrevalorar el sistema con respecto al modelo promediado (Re). En este caso, ambos modelos representan turbulencias, lo cual es debido principalmente a las altas velocidades alcanzadas dentro del empaquetamiento y la alta densidad del metal blanco (ver gráficos 19 y 20).

Finalmente, ambos modelos fueron graficados en conjunto, apreciándose nuevamente las diferencias en los valores entre ellos y haciendo dudar otra vez del segundo modelo empleado (ponderado).

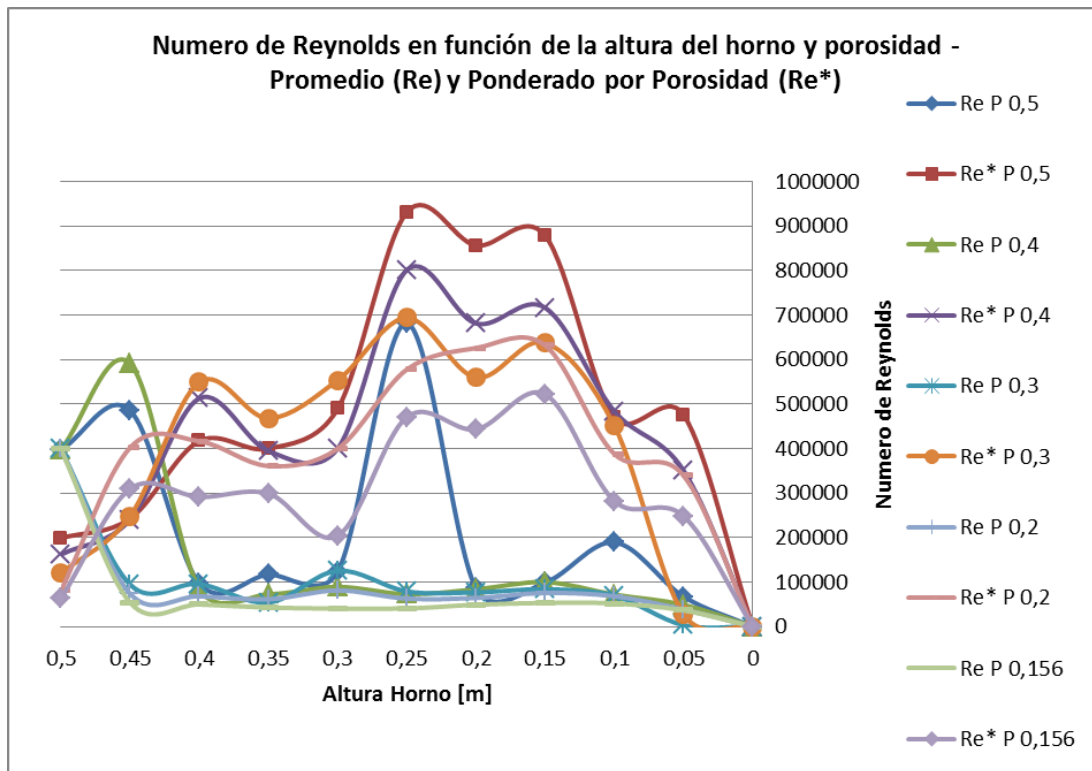


Gráfico 21: Numero de Reynolds promedio y ponderado en función de la altura y porosidad Modelo J2

Más detalles y resultados de estas simulaciones es posible observar en la sección de Anexos.

5.1.5. Modelo J2: Efecto de la velocidad inicial

Dado que los resultados mostrados anteriormente en cuanto a la desulfuración de cobre son poco concluyentes con respecto a su dependencia con la porosidad, es que se procedió a analizar que ocurría con respecto a su dependencia con la velocidad inicial empleada, y por ende, la velocidad del proceso, dejando la porosidad fija en 15% por ser más representativa. En este caso, se analizó solo el Modelo J2 dado que es más representativo del horno final en donde se llevaran a cabo las pruebas y el proceso, fijando la tasa de oxígeno inyectado en 40%, utilizando el modelo de difusividad de Nernst-Einstein, el modelo de convectividad de Hsu y Westwater y realizando mediciones cada 5[cm] de altura de lecho, tal como se mostró anteriormente.

La velocidad dentro del horno en este caso muestra una relación directa con respecto a la velocidad inicial dada al flujo de metal blanco, lo cual es razonable pues a mayor flujo de entrada mayor debería ser la velocidad por la cual éste se desplaza dentro del lecho (ver gráfico 22).

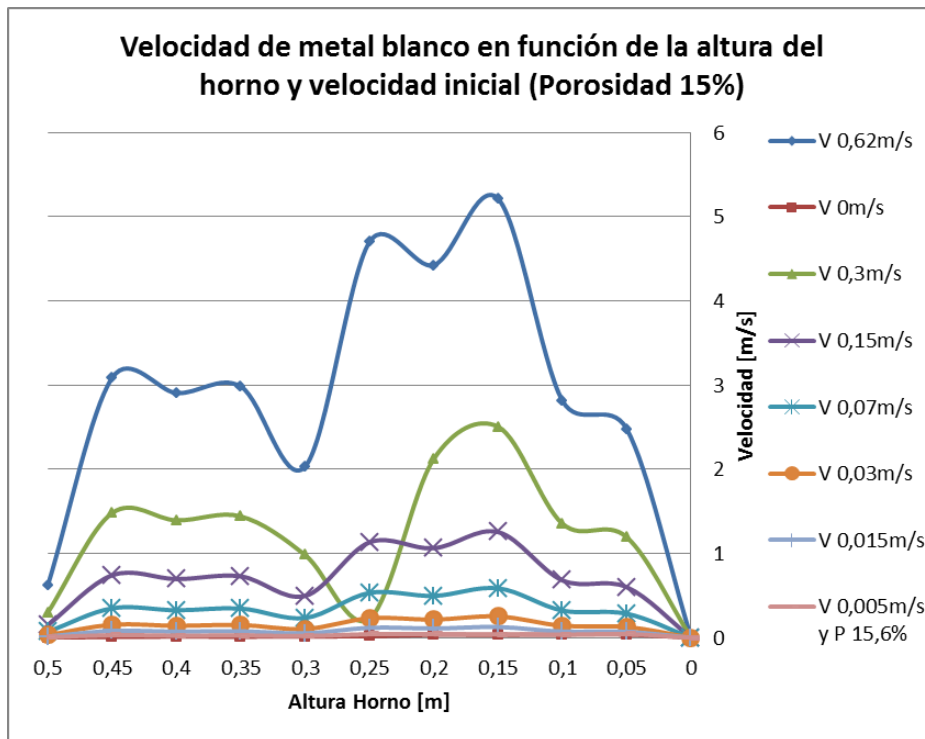


Gráfico 22: Velocidad de metal blanco en función de la altura y velocidad inicial Modelo J2 – Porosidad 15%

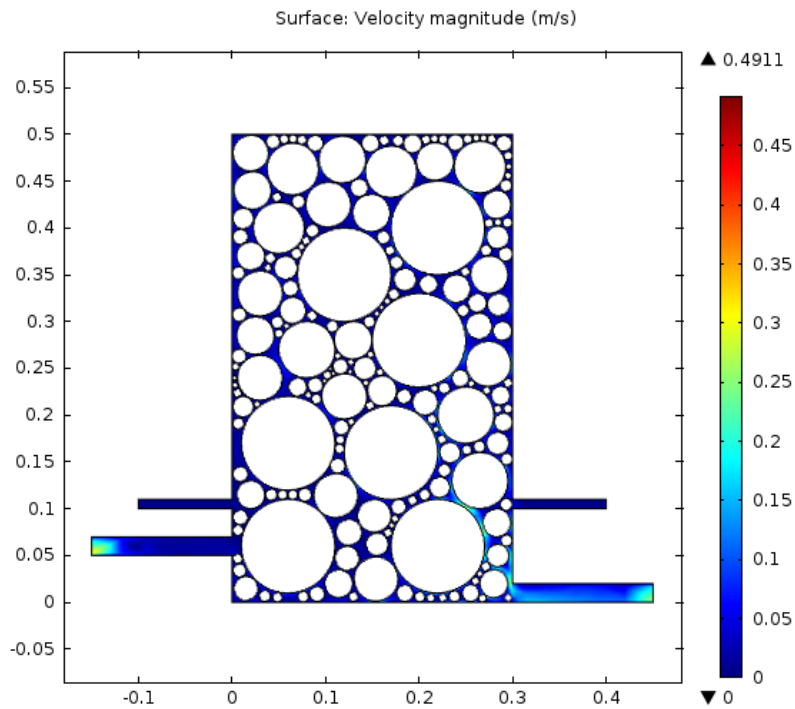


Figura 37: Perfil de velocidad Modelo J2 para una porosidad del 15% y velocidad inicial 0.005 [m/s]

En tanto, la concentración de azufre dentro del horno muestra una característica muy llamativa que es la dependencia fuerte con la velocidad de entrada, y por ende, con la velocidad con que el flujo se desplaza a través del lecho. Como se aprecia en el gráfico 23, a medida que disminuye la velocidad mejor es la

desulfuración de la mata, llegando a una velocidad “óptima”⁸ de 0.005 [m/s] para el caso de esta porosidad de 15% (alrededor de 0.03 [m/s] a escala de planta piloto, considerando un número de Reynolds promedio de 1200). Esto, hace pensar en la existencia de pares de velocidad de flujo y porosidad que harían que el proceso fuese posible dentro de del horno, además de confirmar las sospechas de que el proceso está fuertemente dominado por la convectividad.

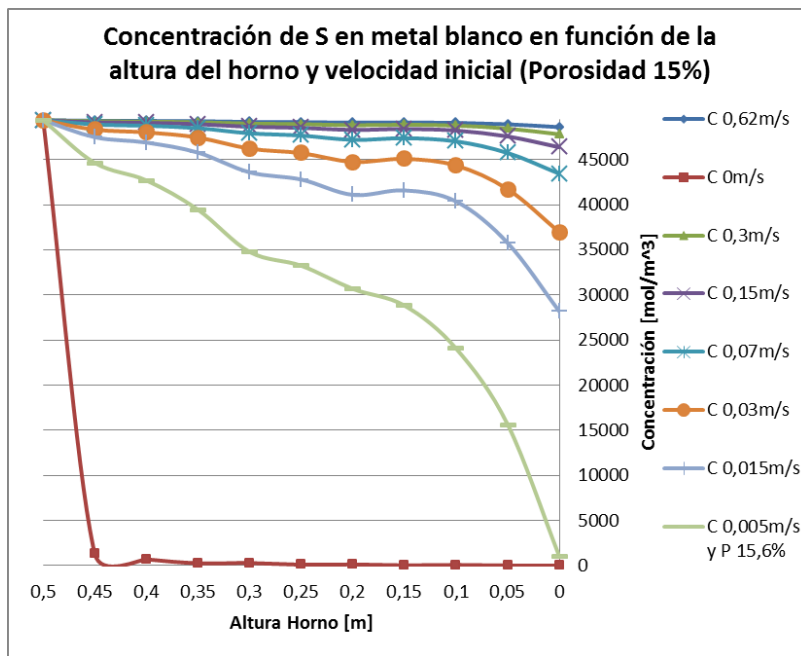


Gráfico 23: Concentración de S en metal blanco en función de la altura y velocidad inicial Modelo J2 – Porosidad 15%

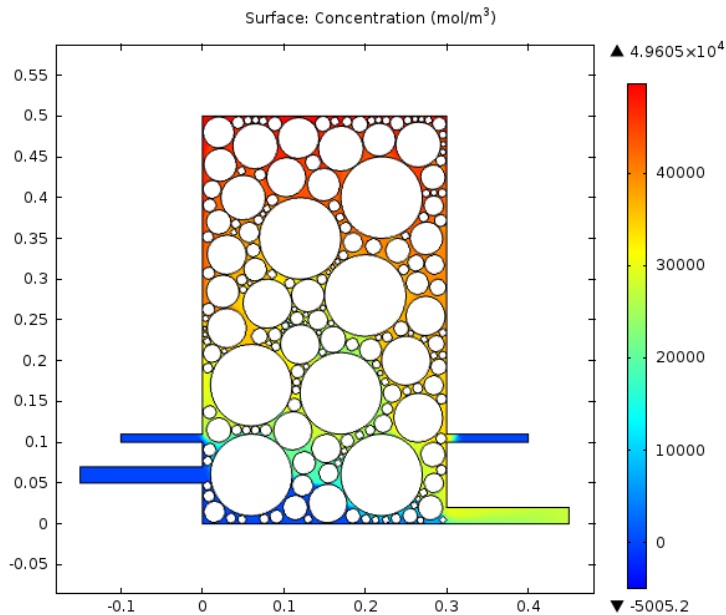


Figura 38: Perfil de concentración de azufre Modelo J2 para una porosidad del 15% y velocidad inicial 0.005 [m/s]

⁸ En adelante se le llamara “óptima” a una combinación con buenos resultados operacionales, lo cual, no significa que ésta sea resultado de una función de optimización.

La temperatura en este caso, muestra un comportamiento casi constante para todas las velocidades, pero disminuye drásticamente al descender mucho la velocidad a una cercana al reposo. Esto, es esperable y se debe a un escaso movimiento del flujo, el cual casi no reacciona y se detiene enfriándose. Por otro lado, este fenómeno reafirma la idea de que el sistema está fuertemente dominado por la convectividad. Lo peculiar, es que al operar en una velocidad que al parecer es óptima para esta porosidad (0.005 [m/s] a 15%), la temperatura desciende hacia el final del lecho, lo cual podría ser perjudicial para el proceso y habría que tener especial cuidado al llegar a operar en este punto, teniéndose que subir probablemente la temperatura de éste (ver gráfico 24).

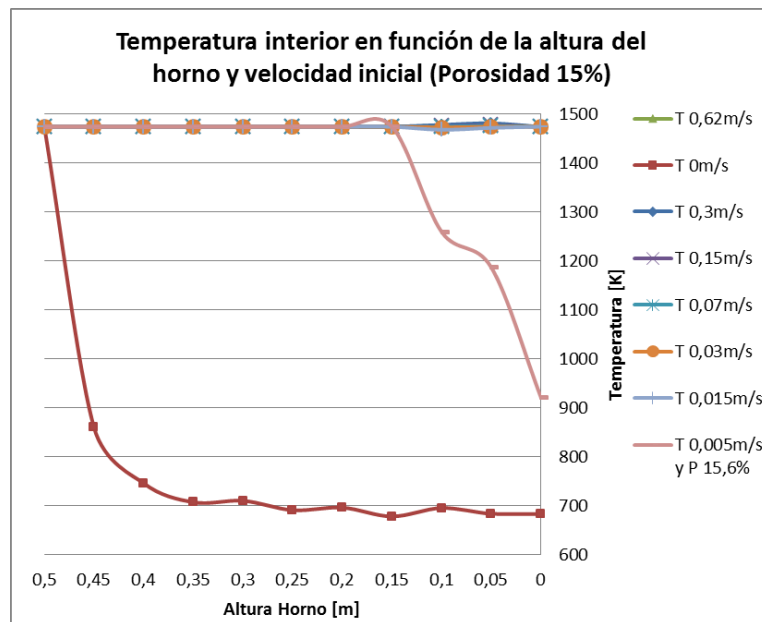


Gráfico 24: Temperatura de metal blanco en función de la altura y velocidad inicial Modelo J2 – Porosidad 15%

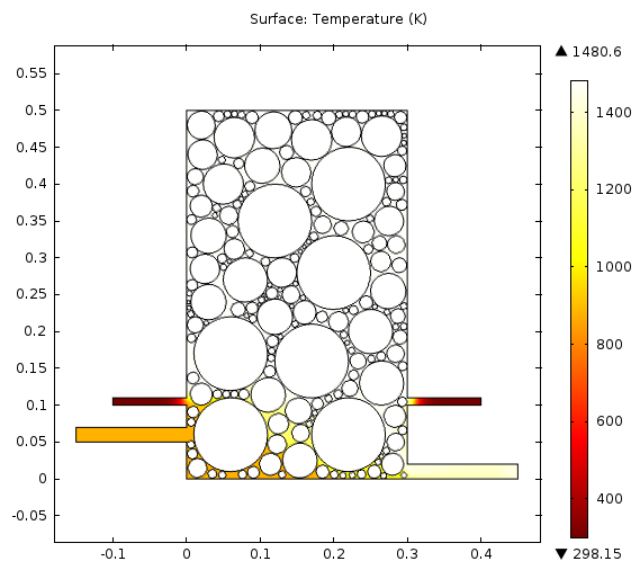


Figura 39: Perfil de temperatura Modelo J2 para una porosidad del 15% y velocidad inicial 0.005 [m/s]

El número de Reynolds promedio (Re) en este caso disminuye sustancialmente en comparación con los casos anteriores, lo cual indica que buenos resultados se obtienen con bajos números de Reynolds o de carácter laminar como se aprecia en los gráficos 25 y 26, sobretodo en éste último, donde se grafica este valor especialmente para el interior del lecho, y se ve su coherencia con el valor de velocidad anteriormente encontrado.

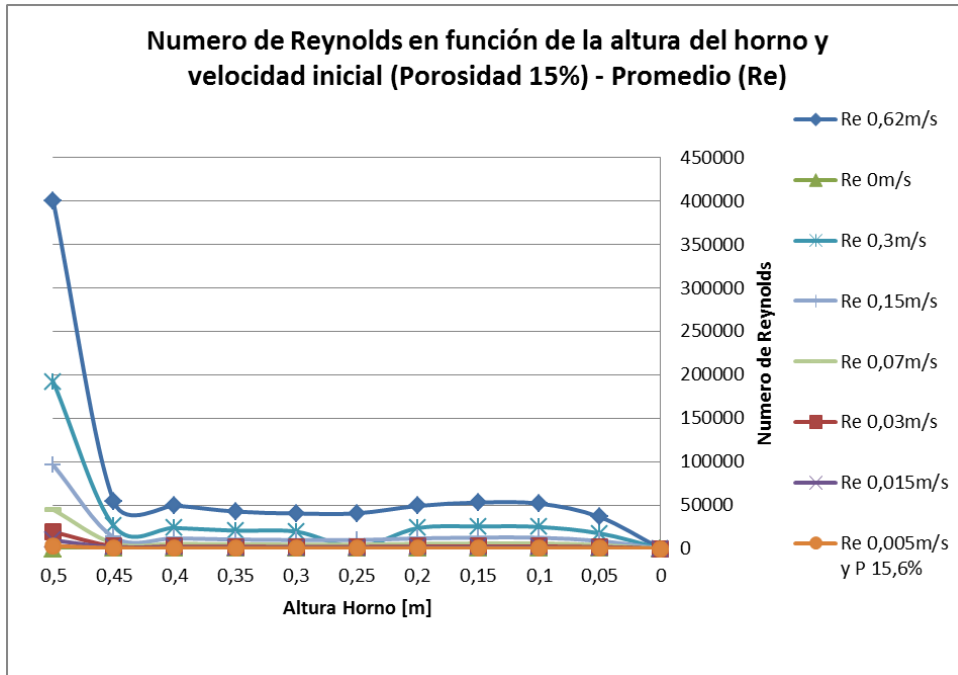


Gráfico 25: Numero de Reynolds promedio en función de la altura y velocidad inicial Modelo J2 – Porosidad 15%

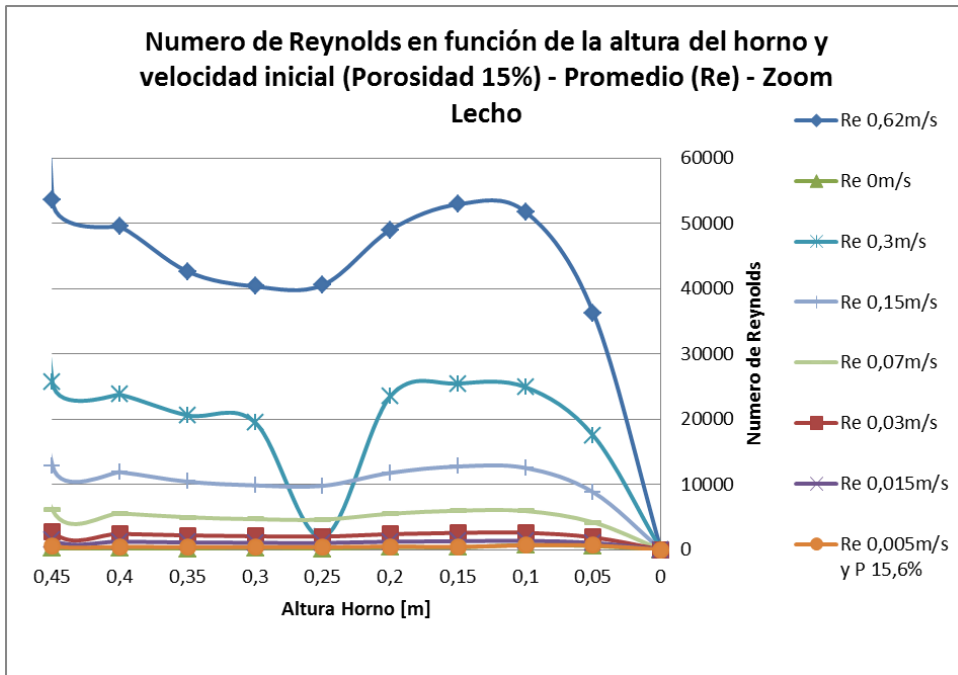


Gráfico 26: Numero de Reynolds en función de la altura y velocidad inicial Modelo J2 – Porosidad 15% (Sector del lecho)

Luego, se graficó el valor de Reynolds ponderado (Re^*), en el cual nuevamente se aprecia la sobrevaloración de este valor con respecto al anterior (ver gráfico 28), descartándose la legitimidad de éste por sobre el otro. Esto, se respalda en la forma en que se calcula el número de Reynolds promedio, dado que éste ocupa un largo característico medible, en comparación con el otro que se basa en un supuesto.

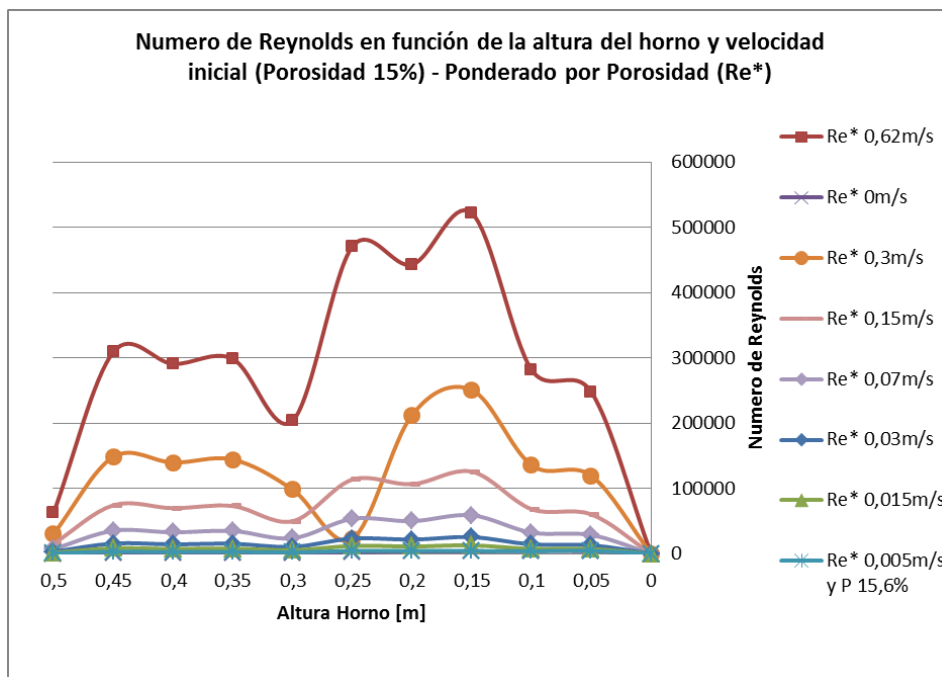


Gráfico 27: Numero de Reynolds ponderado en función de la altura y velocidad inicial Modelo J2 – Porosidad 15%

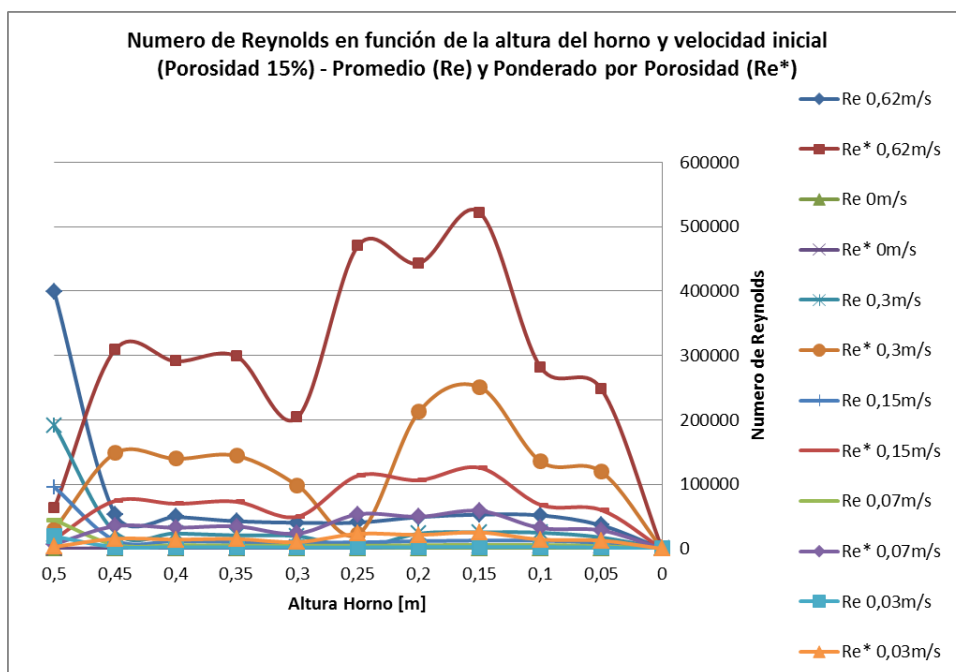


Gráfico 28: Numero de Reynolds promedio y ponderado en función de la altura y velocidad inicial Modelo J2 – Porosidad 15%

Más detalles y resultados de simulaciones se pueden ver en la sección de Anexos.

5.1.6. Modelo J2: Pares de velocidad inicial y porosidad

Tal como se mencionó anteriormente, la posible existencia de pares de velocidades iniciales y porosidades fue un acontecimiento demasiado interesante como para dejarlo pasar a la ligera, por lo tanto, este fenómeno fue estudiado para saber si dichas sospechas eran correctas. De este modo, mediante un método de ensayo y error, más la intuición de una relación directa entre la porosidad y la velocidad inicial, tomando como punto de partida los 0.005 [m/s] encontrados para el lecho con porosidad de 15%, es que se procedió a buscar dichos pares. En este caso, y al igual que los modelos anteriores, se mantuvo el modelo de difusividad de Nernst-Einstein, el modelo de convectividad de Hsu y Westwater, una tasa de inyección de oxígeno del 40% y se realizaron mediciones cada 5 [cm] de altura de lecho.

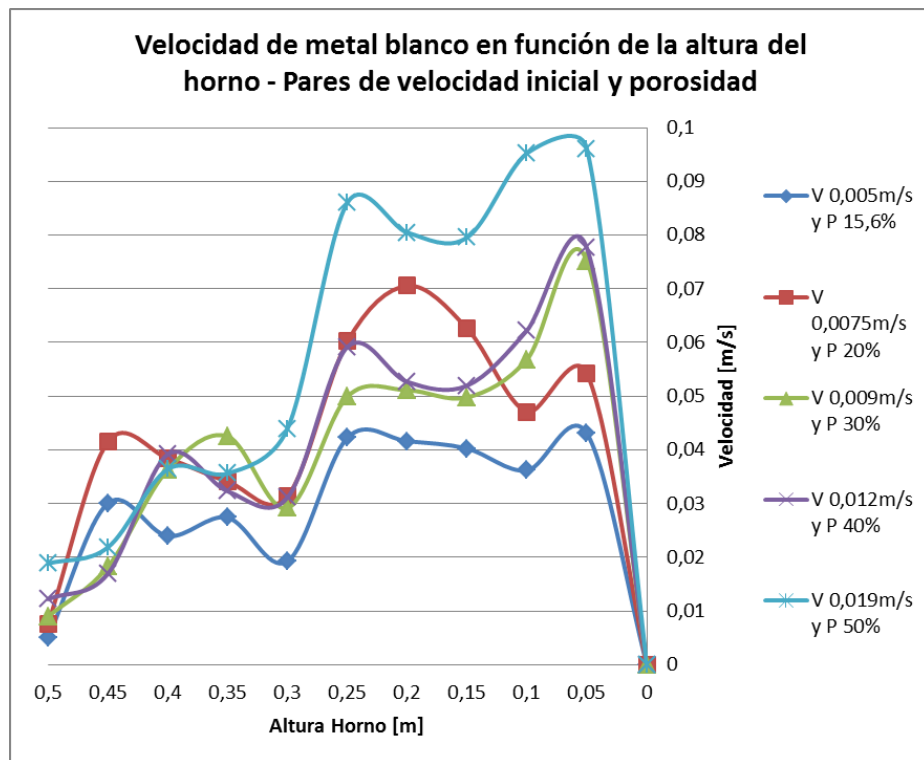


Gráfico 29: Velocidad de metal blanco en función de la altura Modelo J2 – Pares de velocidad inicial y porosidad

Como se aprecia en el gráfico 29, una buena velocidad para el proceso guarda una directa relación con la porosidad del lecho, siendo mayor a medida que éste es más poroso. Además, se refleja una forma muy parecida del perfil de velocidad para cada uno de los pares de velocidad y porosidad, solo variando en la intensidad de ésta de forma proporcional al valor inicial y al espacio por donde atraviesa el flujo, lo cual es coherente con resultados anteriores, y esperable para el proceso.

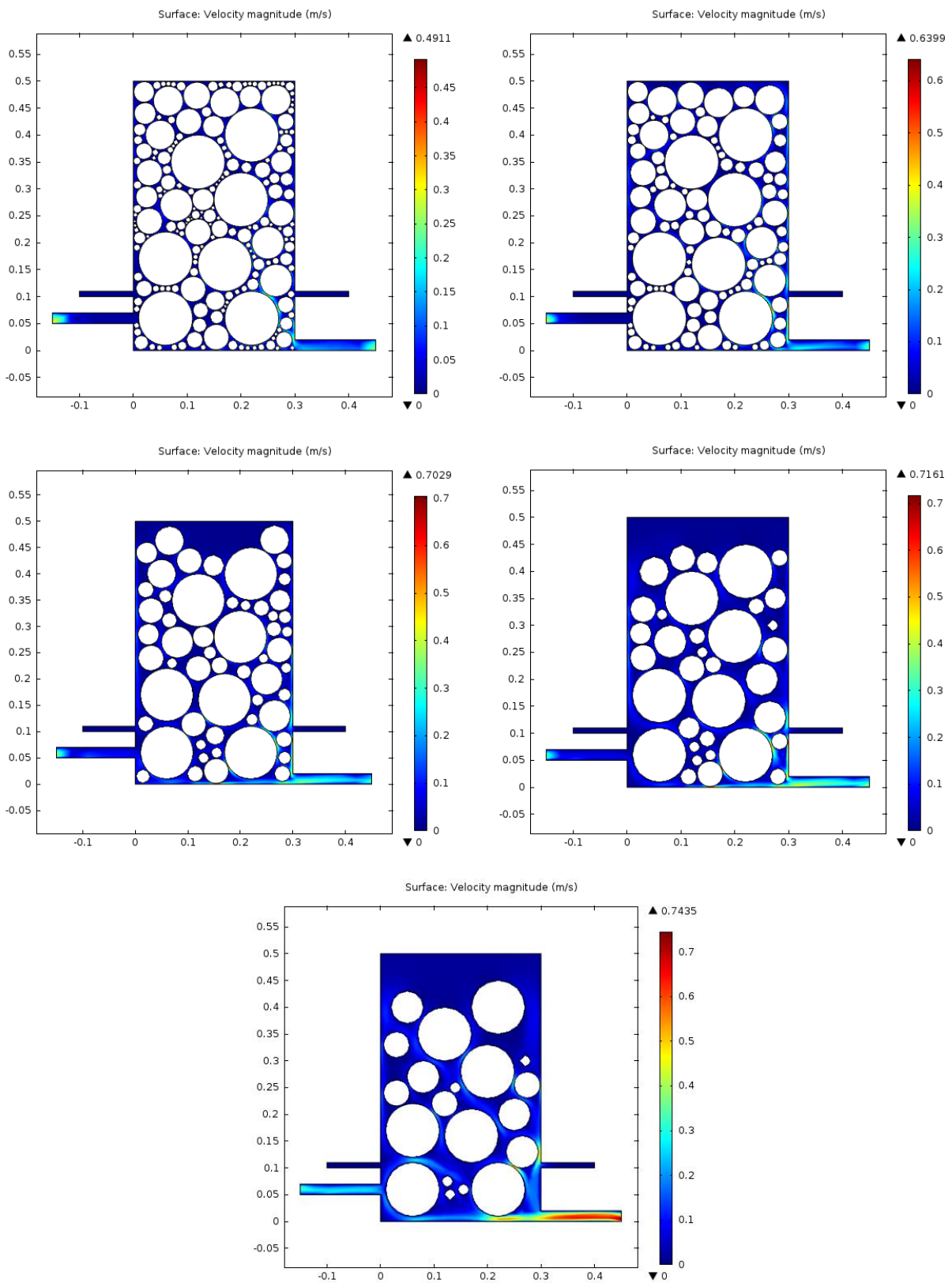


Figura 40: Perfiles de velocidad de metal blanco Modelo J2 – Pares de velocidad inicial y porosidad. De izquierda a derecha y de arriba abajo pares: 0.005[m/s] y porosidad 15%; 0.0075[m/s] y porosidad 20%; 0.009[m/s] y porosidad 30%; 0.012[m/s] y porosidad 40% y; 0.019[m/s] y porosidad 50%.

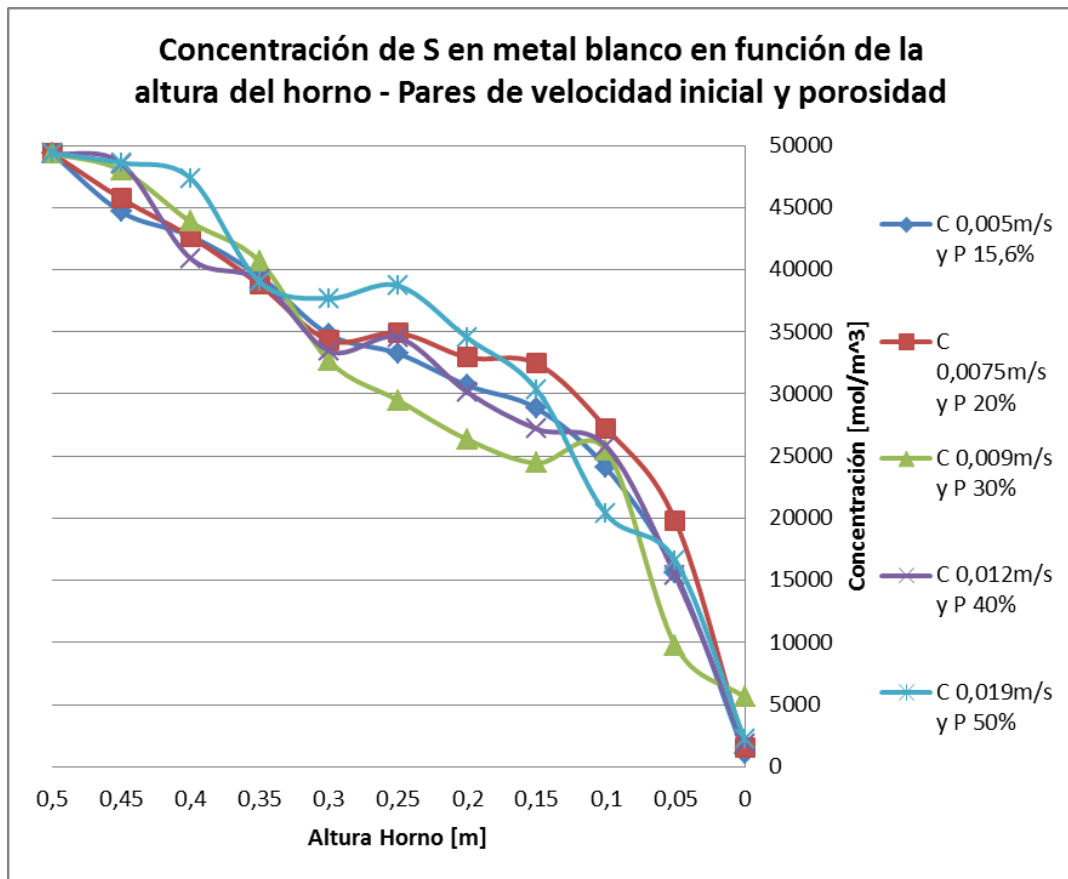


Gráfico 30: Concentración de S en metal blanco en función de la altura Modelo J2 – Pares de velocidad inicial y porosidad

La concentración de azufre en metal blanco es la variable más preponderante en el proceso y, como se muestra en el gráfico 30, los pares de velocidad y porosidad utilizados responden de forma excelente al proceso. Esto, demuestra la dependencia entre la velocidad y la porosidad utilizada en el proceso, en donde existen pares que lo hacen posible (ver Figura 41), lo cual habla de una zona de operación específica para éste.

Este elemento, que hasta el momento no había sido tomado en cuenta en los análisis previos, hace pensar en la dependencia del proceso con otras variables geométricas, como es la altura de lecho.

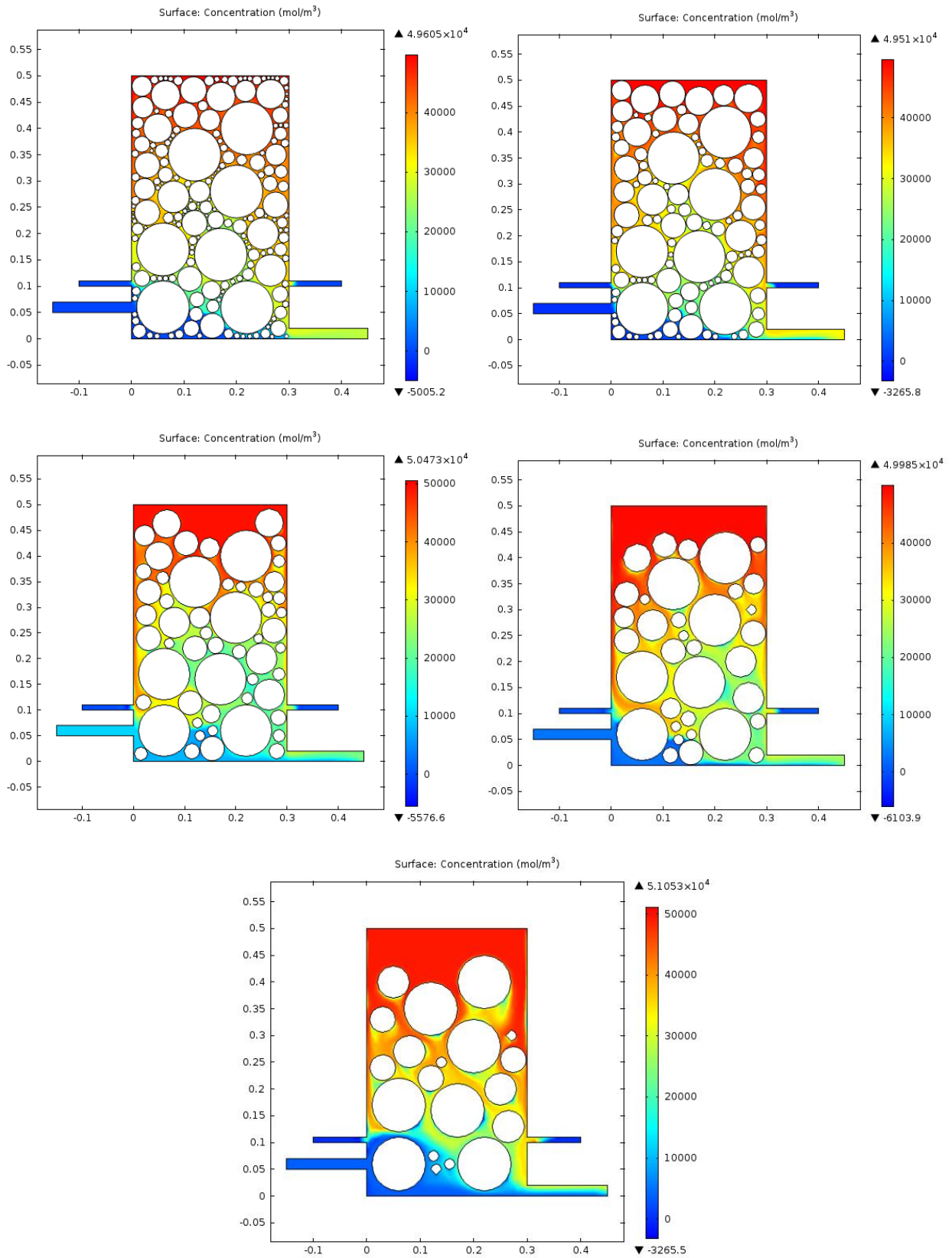


Figura 41: Perfiles de concentración de azufre en metal blanco Modelo J2 – Pares de velocidad inicial y porosidad. De izquierda a derecha y de arriba abajo pares: 0.005[m/s] y porosidad 15%; 0.0075[m/s] y porosidad 20%; 0.009[m/s] y porosidad 30%; 0.012[m/s] y porosidad 40% y; 0.019[m/s] y porosidad 50%.

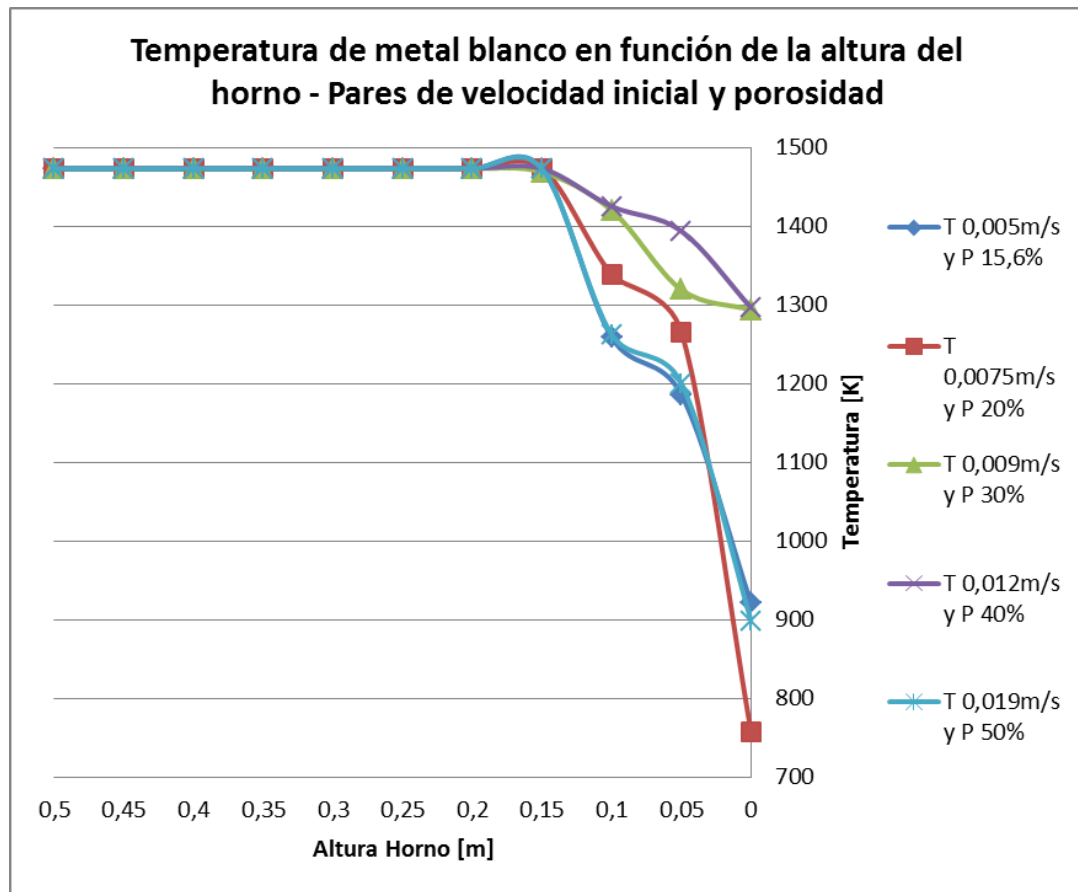


Gráfico 31: Temperatura de metal blanco en función de la altura Modelo J2 – Pares de velocidad inicial y porosidad

La temperatura en tanto, pese a mantenerse casi constante con todas las configuraciones de velocidad y porosidad utilizadas, hacia el final del lecho, y como se mostró anteriormente, sufre una caída considerable, lo cual podría ser perjudicial para el proceso. Es por esto que, se recomendaría aumentar la temperatura del sistema hasta un punto en que no sea perjudicial para éste, es decir alrededor de los 1500 [K], con el fin de amortiguar esa caída de temperatura hacia el final, la cual es provocada por la entrada de aire enriquecido de oxígeno, las salidas de cobre blíster y escoria aluminio-olivina desde el horno y al termino del proceso de desulfuración. Además, también sería recomendable operar en un par de velocidad y porosidad bajas, en la cual el flujo de calor no se vea tan afectado por la convectividad, estableciendo un nuevo desafío para los operadores.

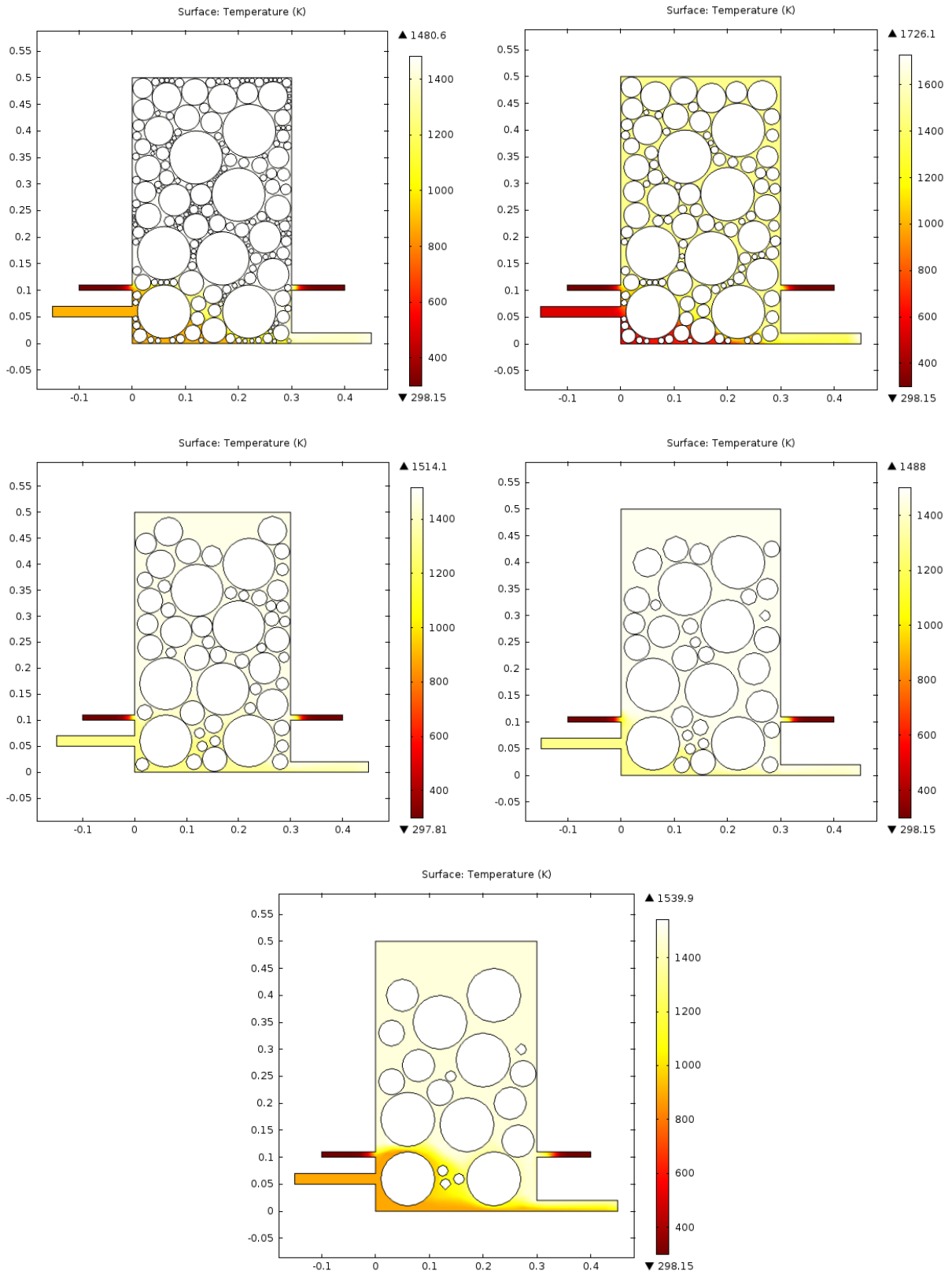


Figura 42: Perfiles de temperatura en metal blanco Modelo J2 – Pares de velocidad inicial y porosidad. De izquierda a derecha y de arriba abajo pares: 0.005[m/s] y porosidad 15%; 0.0075[m/s] y porosidad 20%; 0.009[m/s] y porosidad 30%; 0.012[m/s] y porosidad 40% y; 0.019[m/s] y porosidad 50%.

Por su parte, el número de Reynolds promedio fue calculado para cada par de velocidad y porosidad estudiada, y éste demuestra la clara necesidad de un flujo laminar para que el proceso sea llevado a cabo con buenos resultados (ver gráfico 32). Esto vendría a ser un parámetro a ser controlado en pruebas futuras y da cuenta que, independiente de que el proceso sea dominado por un flujo en contracorriente, en el global, el avance del metal blanco debe poseer características de flujo laminar.

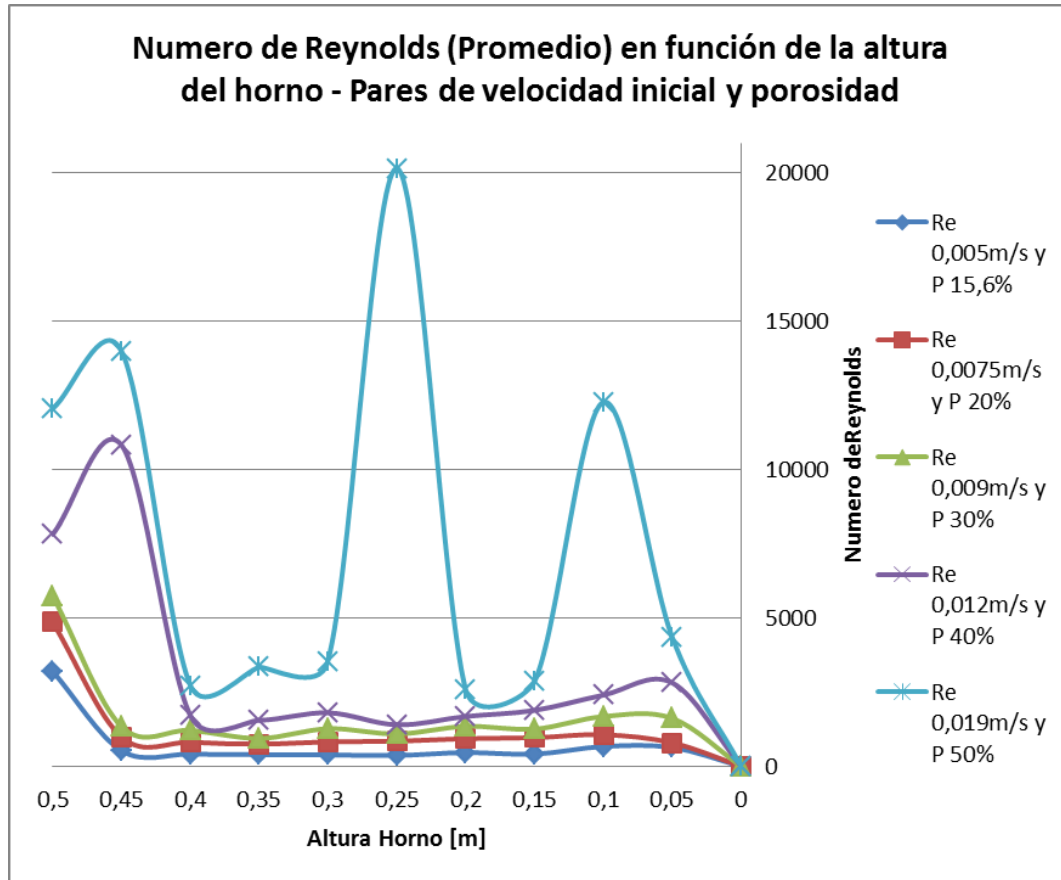


Gráfico 32: Numero de Reynolds promedio en metal blanco en función de la altura Modelo J2 – Pares de velocidad inicial y porosidad

De este modo, finalmente la relación entre la velocidad inicial y la porosidad fue retratada en el gráfico 33, en donde se aprecia una línea de operación para el proceso que puede ser resumida en la siguiente ecuación logarítmica:

$$P = 27.65 \cdot \ln(u_i) + 159.9 \quad (\text{Ec. 5.6})$$

Donde P es la porosidad y u_i es la velocidad inicial del proceso. Similarmente, una segunda relación derivada de ésta, y quizás más válida, se retrata en el gráfico 34, en donde la porosidad se relaciona con el número de Reynolds promedio del sistema, siendo:

$$P = 13.95 \cdot \ln(Re) - 70.44 \quad (\text{Ec. 5.7})$$

Cabe destacar que todas estas mediciones fueron realizadas en un lecho con altura promedio de 47[cm], lo cual hace pensar en una posible variación de la línea de operación al variar la altura de lecho utilizada.

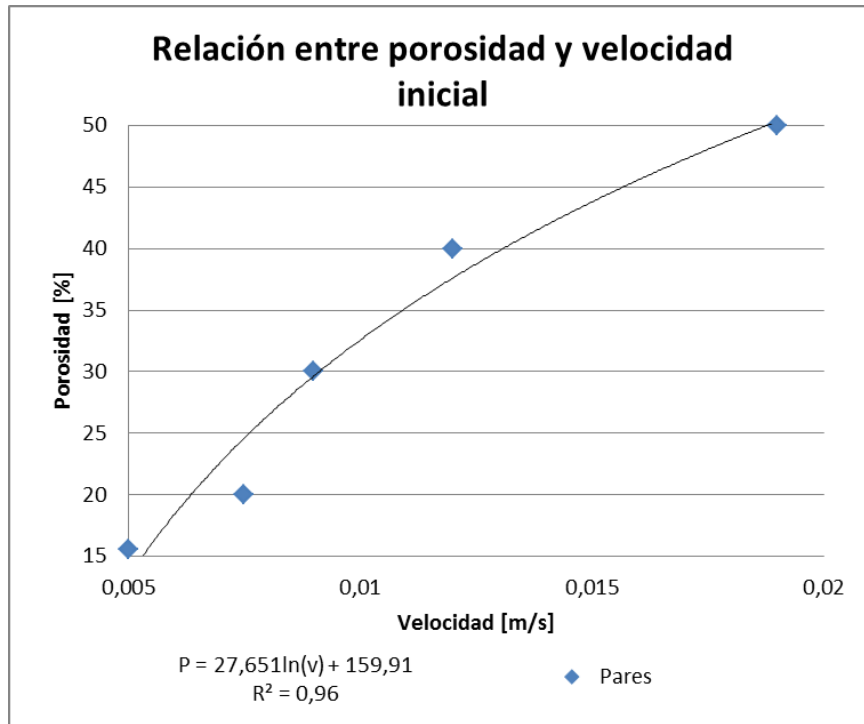


Gráfico 33: Relación entre porosidad y velocidad inicial para una altura promedio de lecho de 47[cm]

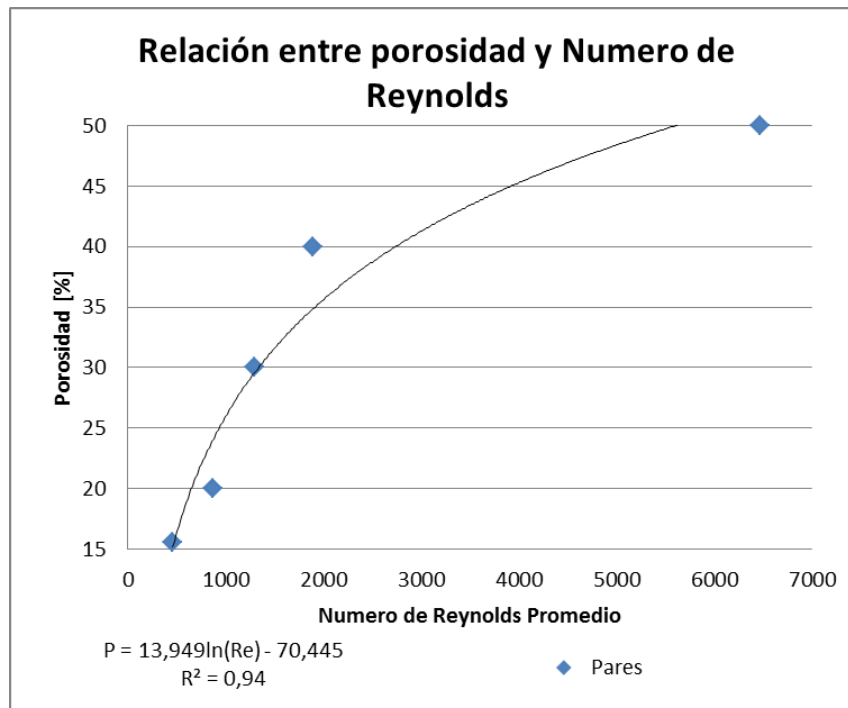


Gráfico 34: Relación entre porosidad y Numero de Reynolds para una altura promedio de lecho de 47[cm]

5.1.7. Modelo J3: Tríos de velocidad inicial, porosidad y altura de lecho

Luego de estudiar la relación entre la velocidad inicial y la porosidad, se procedió a analizar los cambios de estas relaciones con respecto a la altura de lecho utilizado. La idea en este caso es tratar de encontrar una región que sirva de guía para futuras pruebas de validación y para la operación misma del sistema de conversión. Por otro lado, como en modelos anteriores, cabe mencionar que en éstos también se mantuvo el modelo de difusividad de Nernst-Einstein, el modelo de convectividad de Hsu y Westwater, una tasa de inyección de oxígeno del 40% y se realizaron mediciones cada 5[cm] o 20[cm] de altura de lecho, dependiendo de la altura de éste.

Partiendo por la velocidad de flujo, ésta muestra la misma forma sinusoidal típica vista hasta el momento en todas las combinaciones “óptimas” de velocidad inicial, porosidad y altura de lecho, aumentando en forma general si la porosidad o la velocidad inicial lo hacen. En cuanto a la altura de lecho, en este sentido no se ve gran cambio, lo que se puede interpretar como una consecuencia directa de las combinaciones de velocidad inicial y porosidad, que por sí solas son correctas (ver gráfico 35).

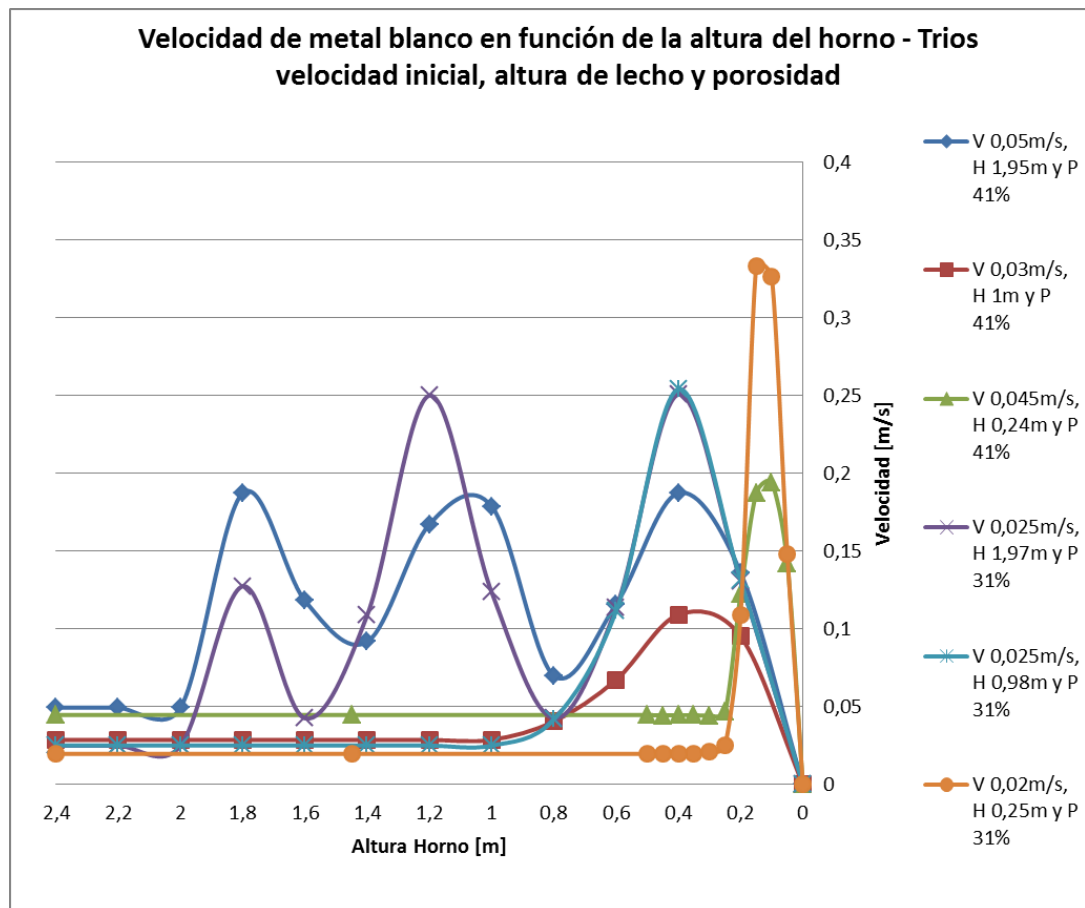


Gráfico 35: Velocidad de metal blanco en función de la altura Modelo J3 – Tríos de velocidad inicial, porosidad y altura de lecho

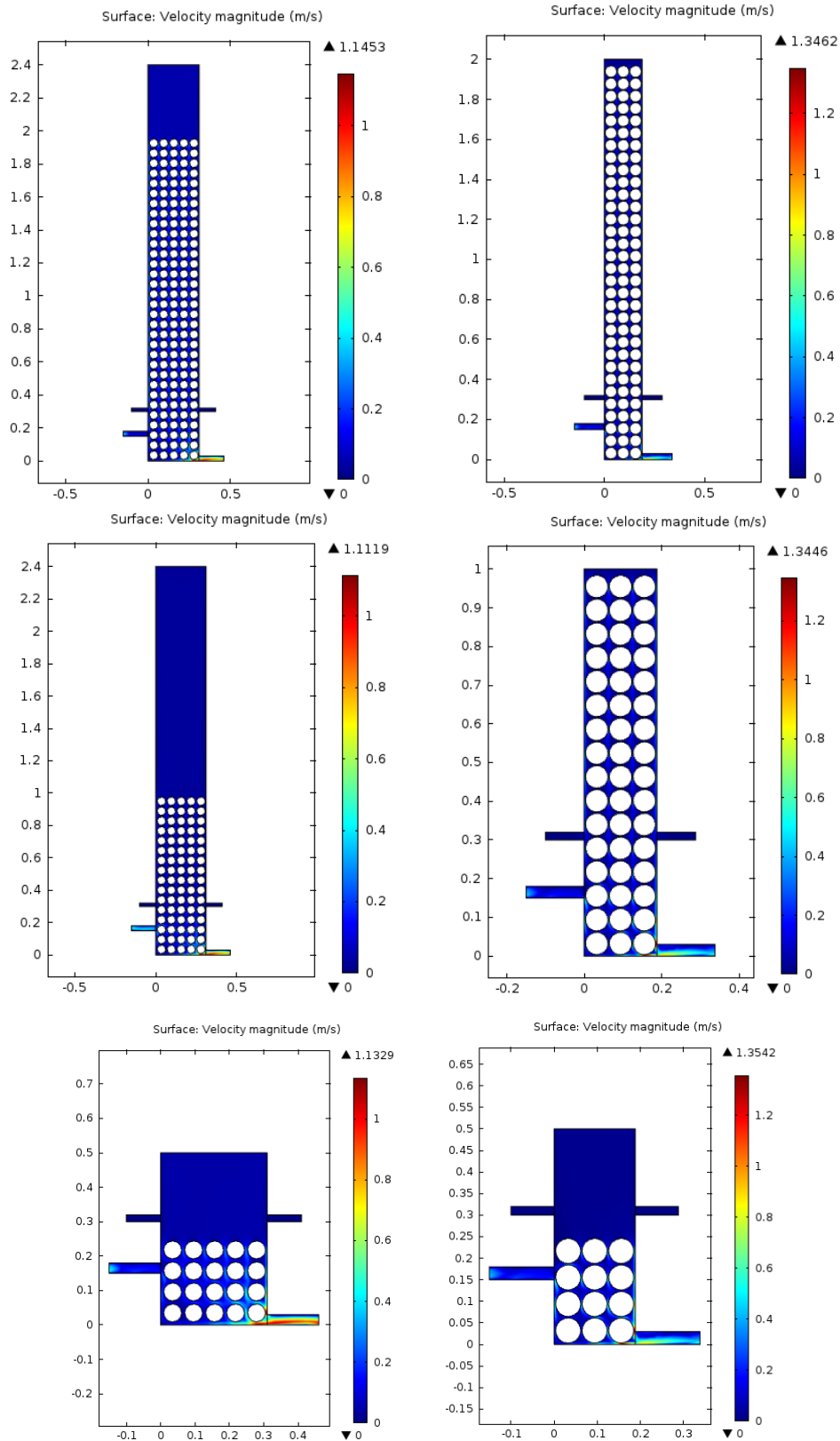


Figura 43: Perfiles de velocidad de metal blanco Modelo J3 – Trios de velocidad inicial, porosidad y altura de lecho. De izquierda a derecha y de arriba abajo Trios: 0.05[m/s], 41% y 195 [cm]; 0.025[m/s], 31% y 197[cm]; 0.03[m/s], 41% y 100[cm]; 0.025[m/s], 31% y 98[cm]; 0.045[m/s], 41% y 24[cm]; 0.02[m/s], 31% y 25[cm].

En cuanto a la concentración de azufre, es fácil observar (ver gráfico 36) que todas las combinaciones de velocidad inicial, porosidad y altura de lecho generan los mismos resultados finales, lo cual se debe principalmente a la velocidad con la que atraviesa el flujo por los distintos lechos, confirmando nuevamente que la desulfuración de cobre está dominada fuertemente por la convectividad.

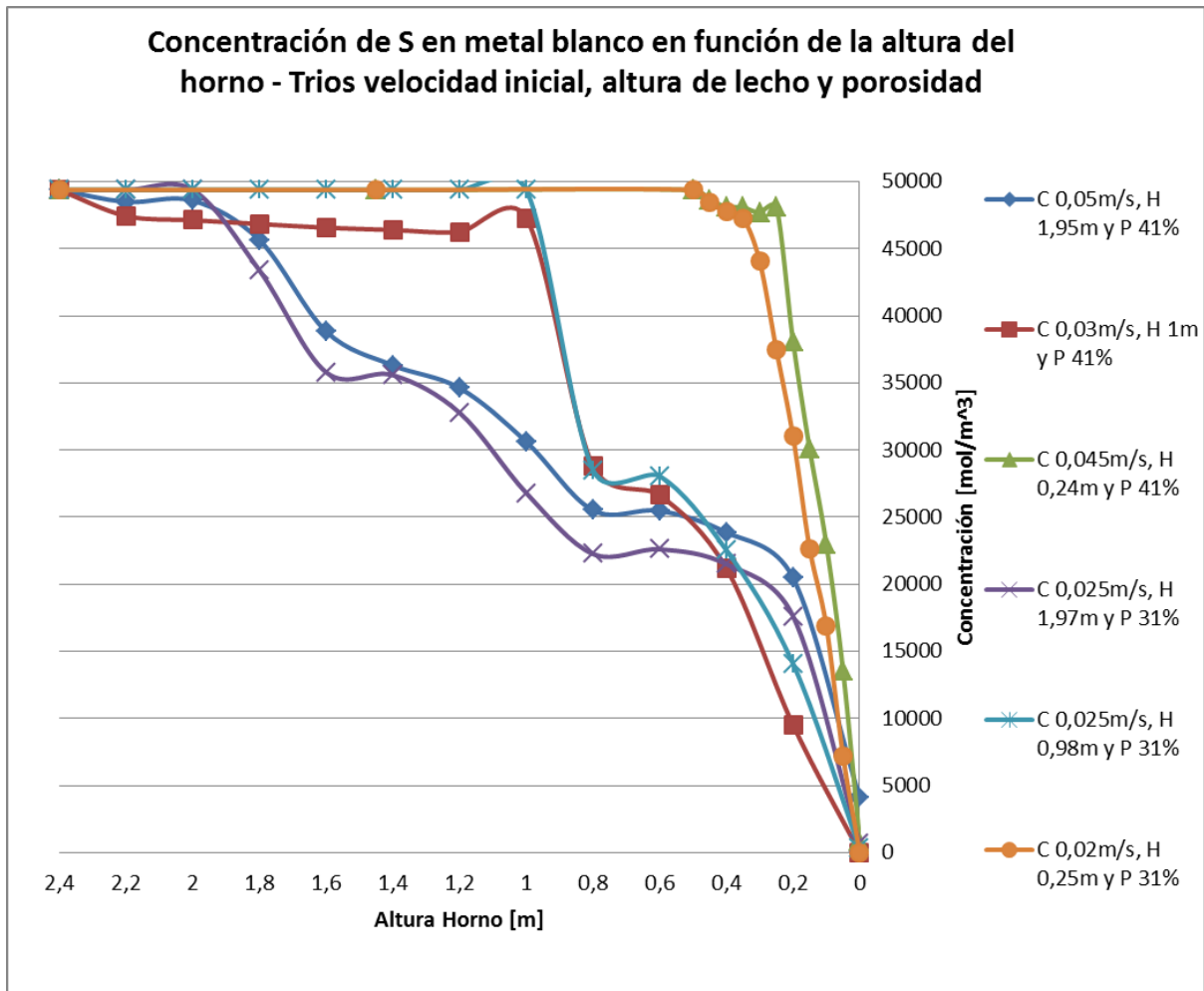


Gráfico 36: Concentración de azufre en metal blanco en función de la altura Modelo J3 – Tríos de velocidad inicial, porosidad y altura de lecho

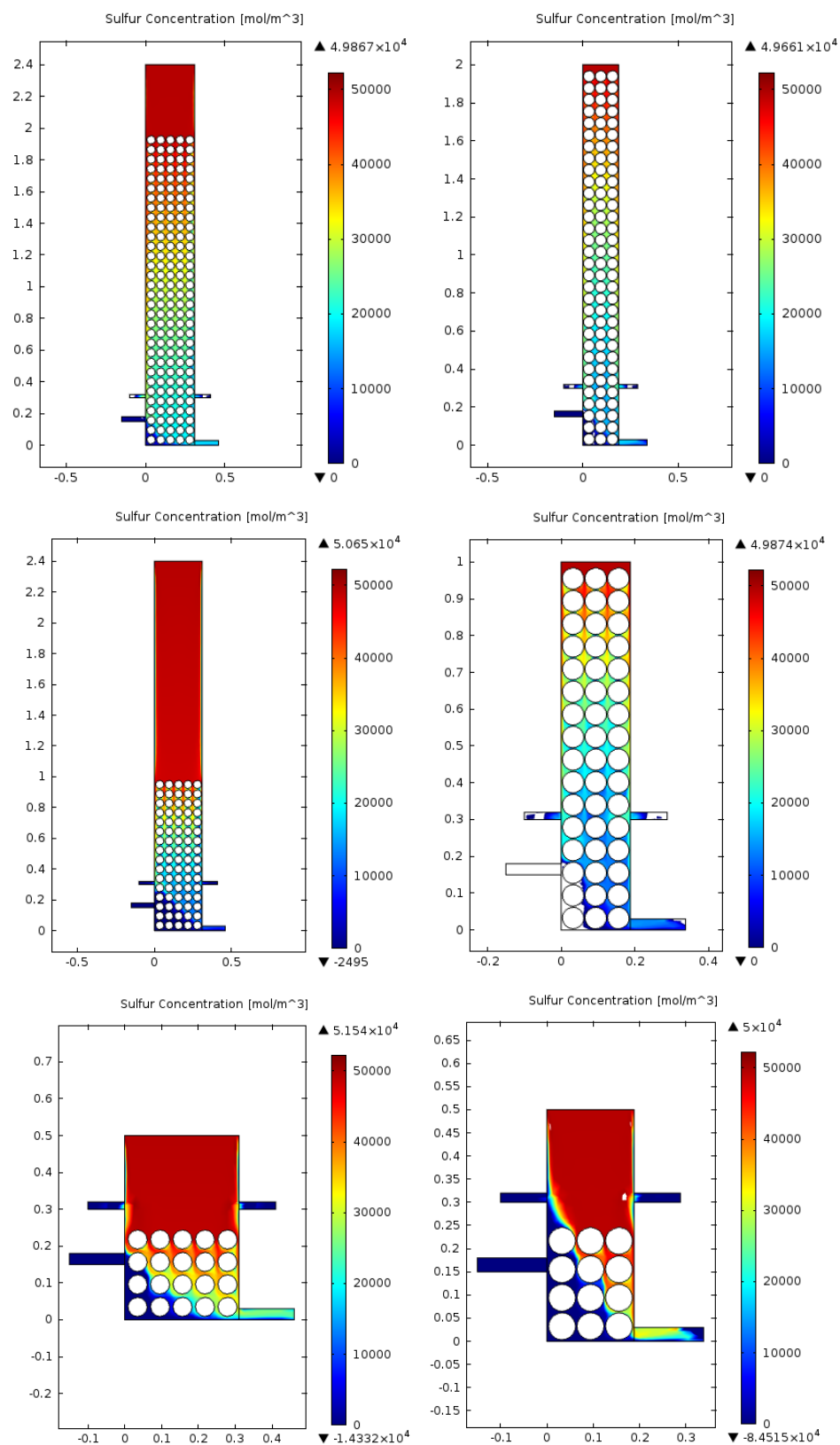


Figura 44: Perfiles de concentración de azufre en metal blanco Modelo J3 – Tríos de velocidad inicial, porosidad y altura de lecho. De izquierda a derecha y de arriba abajo Tríos: 0.05[m/s], 41% y 195 [cm]; 0.025[m/s], 31% y 197[cm]; 0.03[m/s], 41% y 100[cm]; 0.025[m/s], 31% y 98[cm]; 0.045[m/s], 41% y 24[cm]; 0.02[m/s], 31% y 25[cm].

La temperatura por su parte, al igual que en la mayoría de los modelos ya mostrados, se mantiene constante y desciende hacia la zona de inyección de aire, independiente de la forma del lecho, lo cual se debe principalmente a la velocidad general con la que atraviesa el flujo por la zona de disminución de temperatura. De esta forma, se ve una coherencia con todas las pruebas realizadas anteriormente, confirmando resultados ya mostrados y nuevamente recomendando aumentar la temperatura global del sistema para evitar inconvenientes (ver gráfico 37).

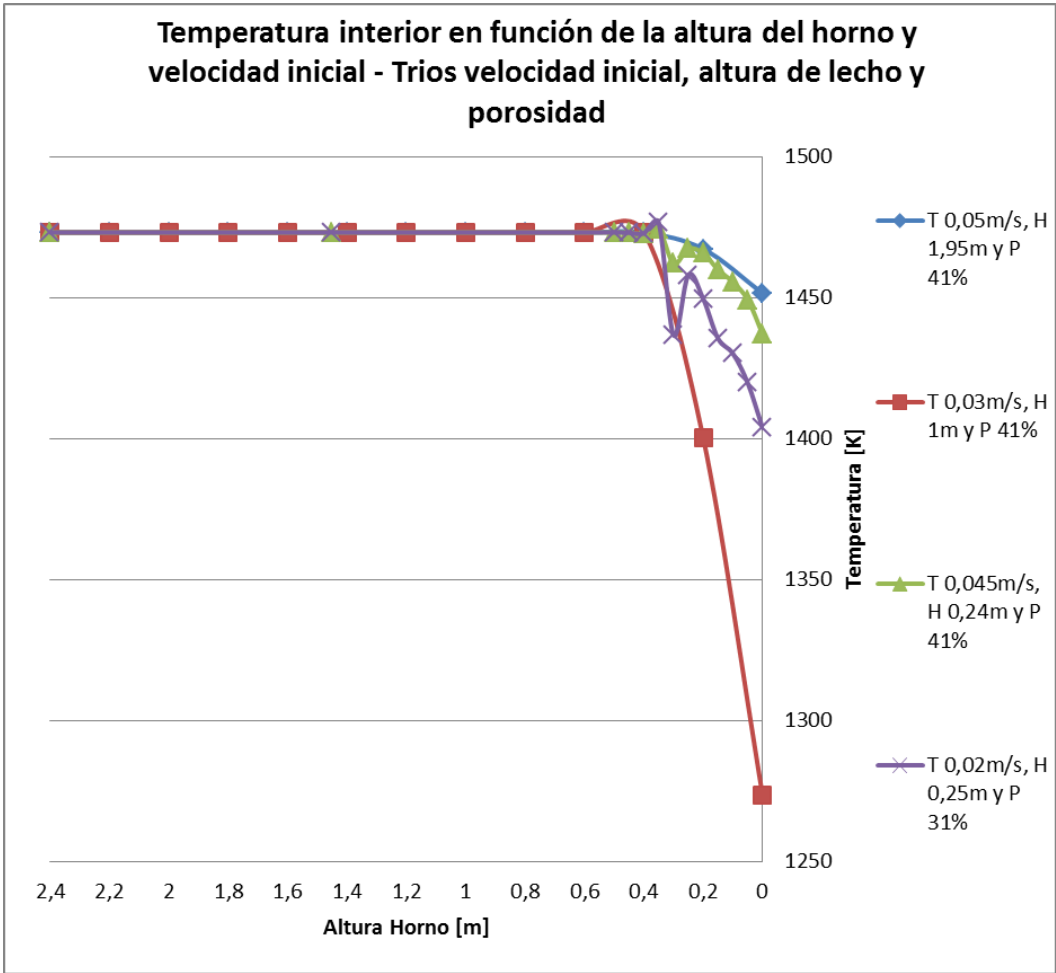


Gráfico 37: Temperatura de metal blanco en función de la altura Modelo J3 – Tríos de velocidad inicial, porosidad y altura de lecho

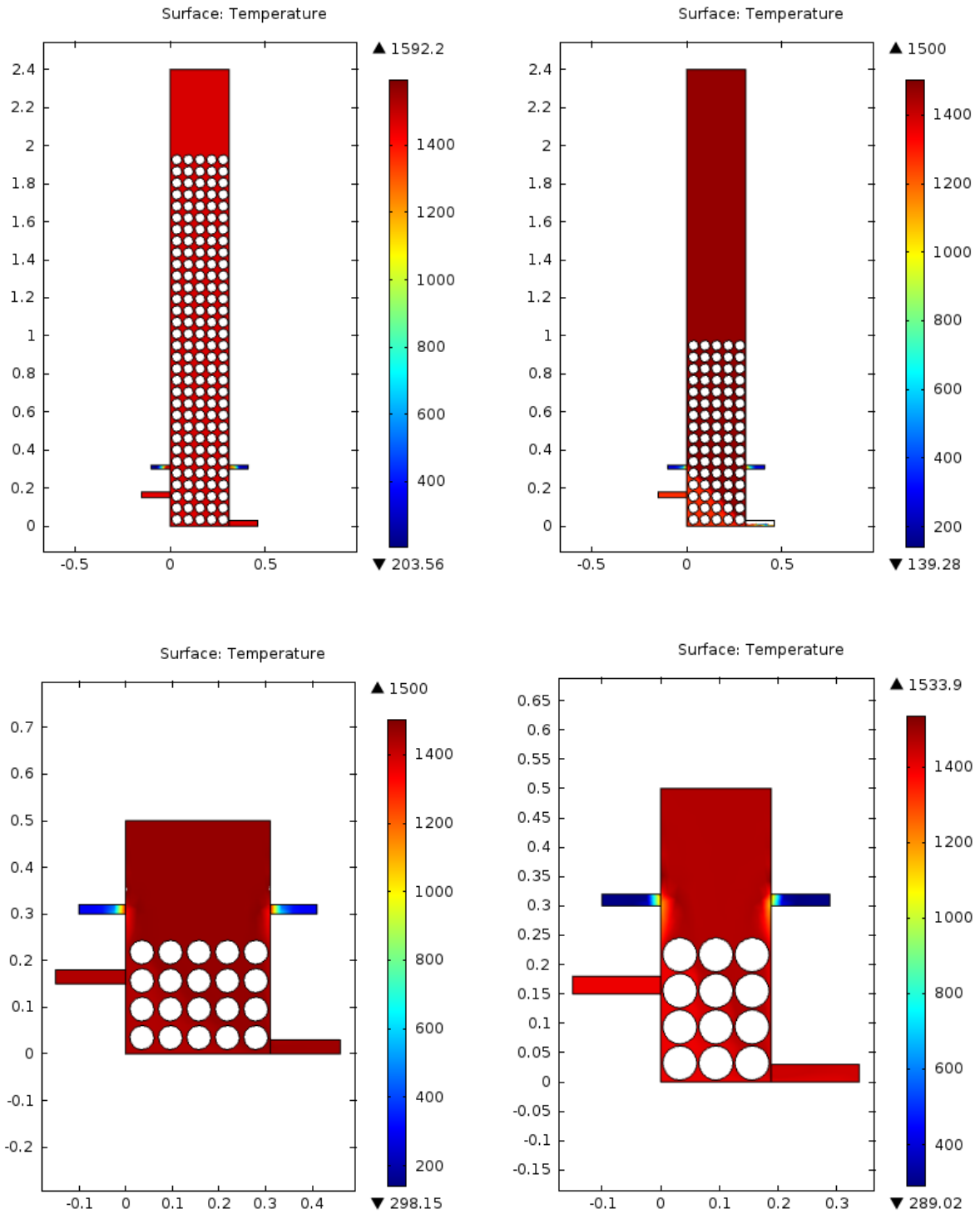


Figura 45: Perfiles de temperatura en metal blanco Modelo J3 – Tríos de velocidad inicial, porosidad y altura de lecho. De izquierda a derecha y de arriba abajo Tríos: 0.05[m/s], 41% y 195 [cm]; 0.025[m/s], 31% y 197[cm]; 0.03[m/s], 41% y 100[cm]; 0.025[m/s], 31% y 98[cm]; 0.045[m/s], 41% y 24[cm]; 0.02[m/s], 31% y 25[cm].

El número de Reynolds en tanto, presenta una constante en todos los tríos “óptimos” de velocidad inicial, porosidad y altura de lecho, y es que es de carácter laminar mientras el flujo atraviese el lecho (ver gráficos 38 y 39).

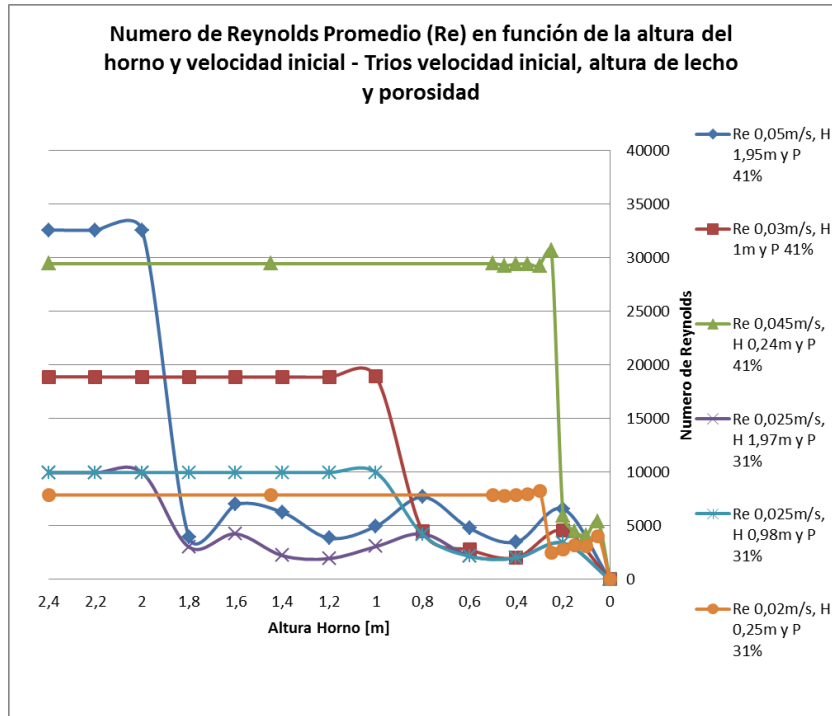


Gráfico 38: Numero de Reynolds promedio en función de la altura Modelo J3 – Tríos de velocidad inicial, porosidad y altura de lecho

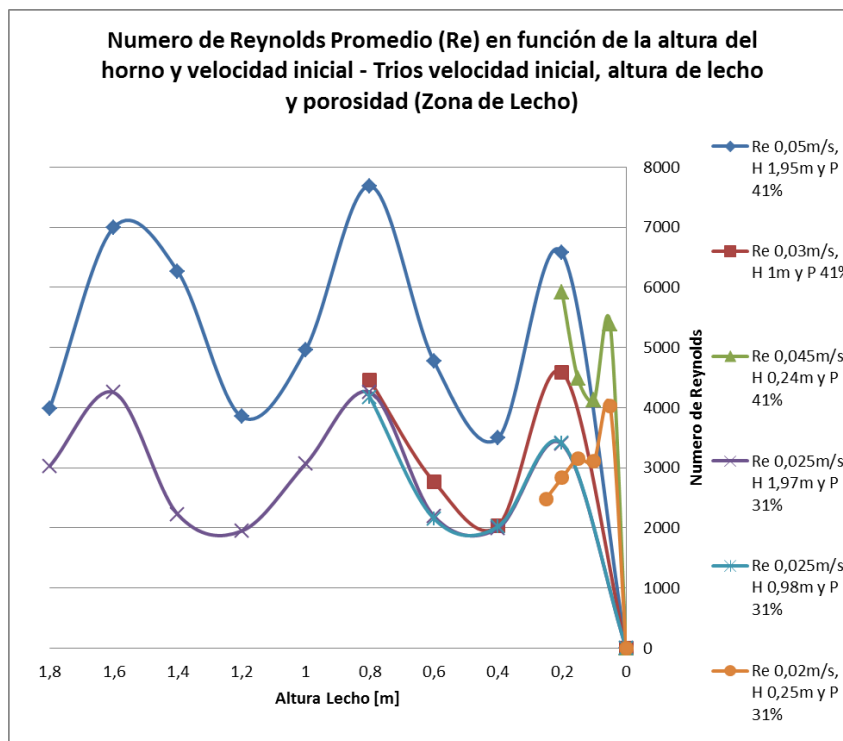


Gráfico 39: Numero de Reynolds promedio en función de la altura Modelo J3 – Tríos de velocidad inicial, porosidad y altura de lecho – Zona de lecho

Lo anterior, confirma resultados ya mostrados y da paso a la concepción de una región de operatividad en donde sería posible la desulfuración de cobre sin inconvenientes, la cual viene dada principalmente por parámetros que se pueden manipular fácilmente como lo es la velocidad inicial o el número de Reynolds en su defecto y la geometría del lecho.

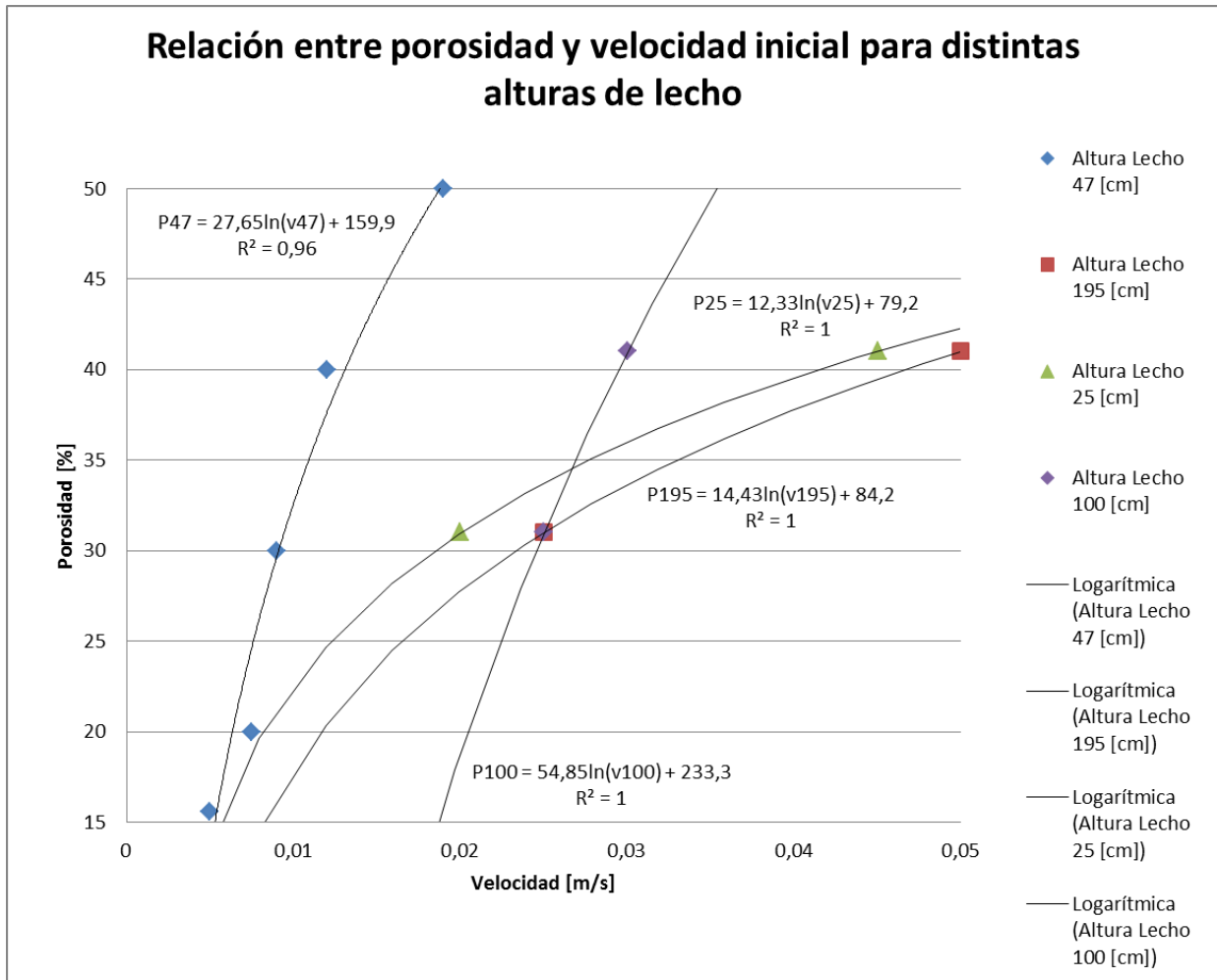


Gráfico 40: Relación entre velocidad inicial, porosidad y altura de lecho para una operación confiable

Así, se pueden obtener curvas de porosidad versus velocidad inicial para 25, 47, 100 y 195 [cm] de altura de lecho, las cuales vienen dadas por:

$$P_{25} = 12.33 \cdot \ln(u_i) + 79.2 \quad (\text{Ec. 5.8})$$

$$P_{47} = 27.65 \cdot \ln(u_i) + 159.9 \quad (\text{Ec. 5.9})$$

$$P_{100} = 54.85 \cdot \ln(u_i) + 233.3 \quad (\text{Ec. 5.10})$$

$$P_{195} = 14.43 \cdot \ln(u_i) + 84.2 \quad (\text{Ec. 5.11})$$

Notar que la ecuación 5.9 es idéntica a la ecuación 5.6 mostrada en la sección anterior.

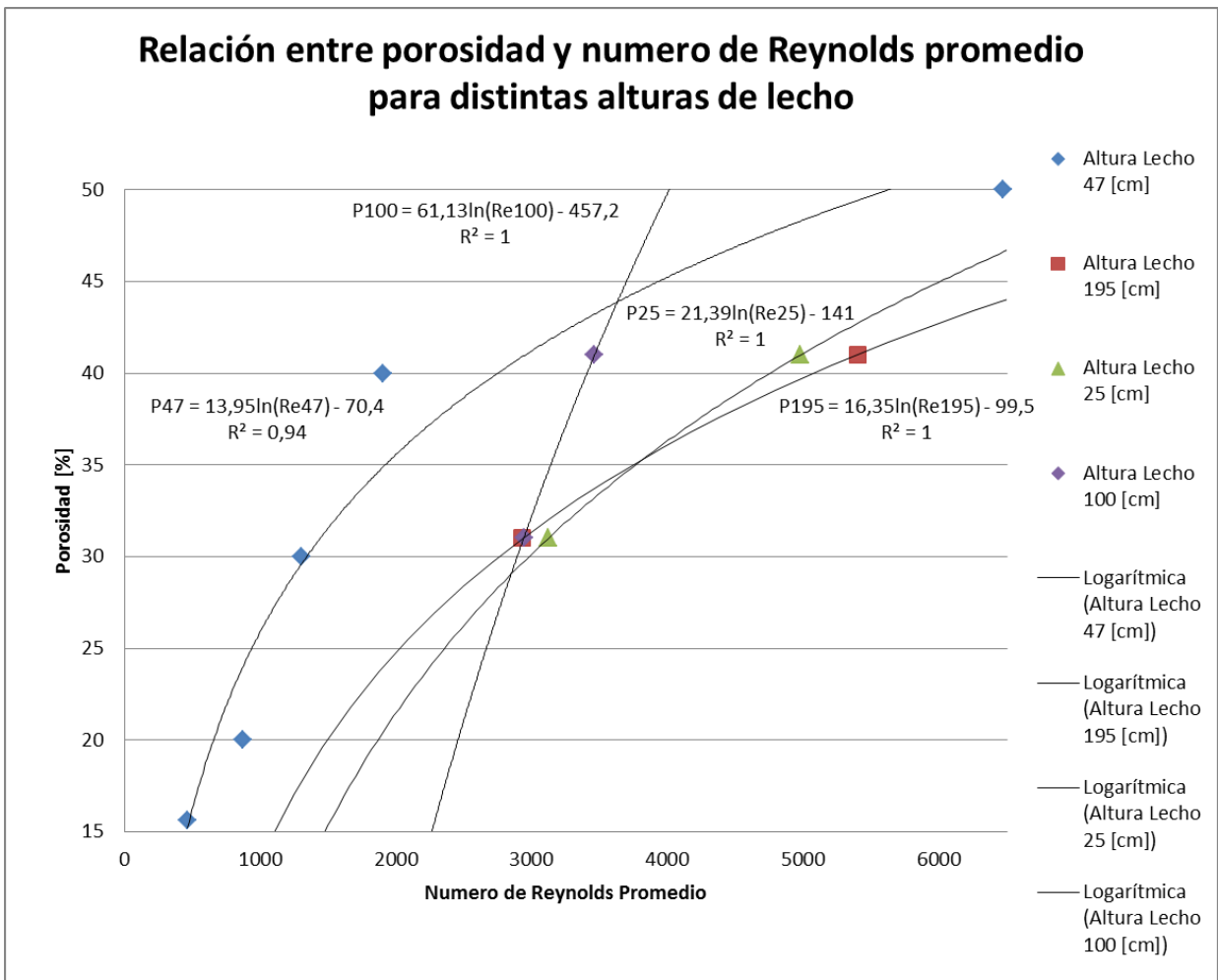


Gráfico 41: Relación entre Numero de Reynolds, porosidad y altura de lecho para una operación confiable

Curvas análogas de porosidad versus número de Reynolds promedio para 25, 47, 100 y 195 [cm] de altura de lecho, vienen dadas por:

$$P_{25} = 21.39 \cdot \ln(Re) - 141 \quad (\text{Ec. 5.12})$$

$$P_{47} = 13.95 \cdot \ln(Re) - 70.4 \quad (\text{Ec. 5.13})$$

$$P_{100} = 61.13 \cdot \ln(Re) - 457.2 \quad (\text{Ec. 5.14})$$

$$P_{195} = 16.35 \cdot \ln(Re) - 99.5 \quad (\text{Ec. 5.15})$$

Notar que la ecuación 5.13 es idéntica a la ecuación 5.7 mostrada en la sección anterior.

5.2. Modelos CS, BCC, FCC, HCP y 2D

5.2.1. Solución

La herramienta de elementos finitos *COMSOL Multiphysics 4.2* fue utilizada para llevar a cabo la resolución de estos modelos, generando una malla apropiada para resolver las ecuaciones involucradas con alrededor de 30000 elementos finitos dependiendo de la simulación. Los cálculos fueron llevados a cabo en un computador con un procesador i7-3930K con seis núcleos de 3.2 GHz y una memoria total de 64 GByte.

5.2.2. Modelo 2D: Efecto de la convectividad

Paralelamente a los estudios de los modelos J1, J2 y J3, se analizó en un modelo de dos dimensiones (2D) de carácter transiente como es que se comportaban los modelos de convectividad tanto de Sieder y Tate, como el de Hsu y Westwater y, uno con un valor del coeficiente de transferencia de calor constante igual a $100[\text{W}/\text{m}^2\text{K}]$ ^[33]. Esto, con el fin de determinar las diferencias entre los modelos empleados y ver cual se adaptaba mejor al sistema. De este modo, se procedió a medir la temperatura promedio en las salidas laterales de la pequeña estructura 2D en intervalos de tiempo de 0.05 [s] desde el instante inicial hasta los 3.5 [s], que es el periodo de tiempo que permitió el software. Cabe destacar, que en este caso se consideró como velocidad de entrada de aire 0.02 [m/s] y que el metal blanco se desplazaba solo por efecto de la gravedad.

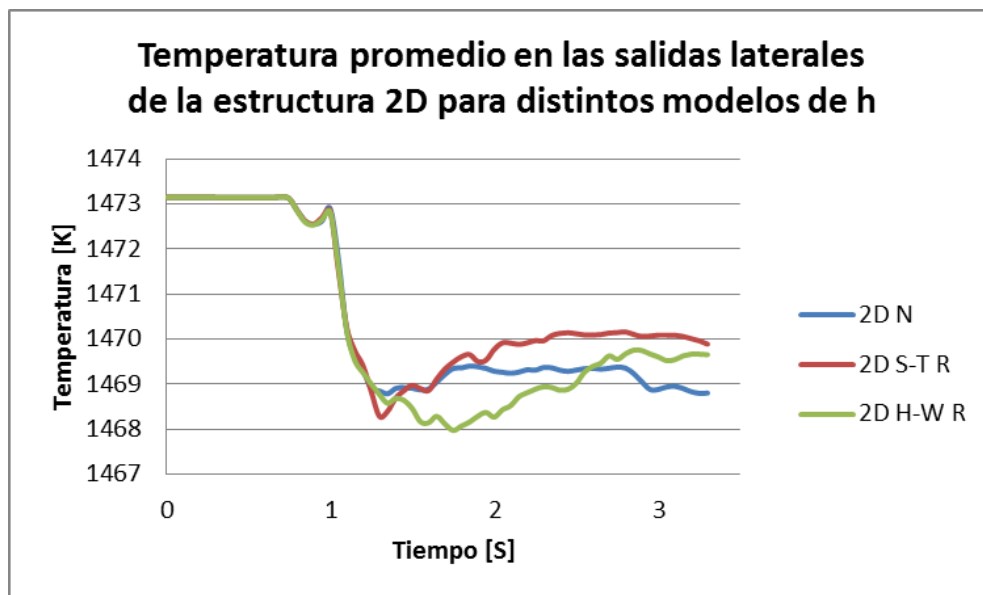


Gráfico 42: Efecto en la temperatura de los distintos modelos de convectividad para la estructura 2D transiente, donde N es el modelo normal con h constante, S-T considerando el modelo de h de Sieder y Tate y H-W el modelo de h de Hsu y Westwater

Es posible apreciar que los modelos de temperatura rápidamente se estabilizan en una temperatura un poco más baja que la inicial y que los modelos de convectividad empleados solo divergen entre sí por un margen de aproximadamente 1[K], lo cual es despreciable para la envergadura total del sistema (ver gráfico 42). De este modo, en adelante el modelo de convectividad empleado será el de Hsu y Westwater (tal como se comentó en la sección 5.1.3.), dado que es el que más se asemeja al comportamiento del sistema, aunque en términos prácticos el resultado es muy similar.

5.2.3. Efecto de la porosidad y razón entre volumen de mata y área de reacción

Luego de lo anterior, se procedió a analizar la influencia de la porosidad, y por ende, de la razón entre volumen de mata y área de reacción de los sistemas, la cual viene dada principalmente por la geometría utilizada, tal como se ve en la siguiente tabla:

Tabla 7: Estructuras y sus características geométricas

Estructura	Numero	V/A [m]	Porosidad
CS	1	0,0076	47,6%
BCC	2	0,0069	45,3%
FCC	3	0,0109	56,6%
HCP	4	0,0060	42,6%
2D	5	0,0092	42,8%

En cuanto a la velocidad, analizada bajo los mismos parámetros anteriormente mencionados, se aprecia una dependencia del flujo con la porosidad a la salida de la estructura, lo cual es coherente con los resultados obtenidos en los modelos J1, J2 y J3, siendo más acelerado a medida que la estructura es más porosa (FCC) y de mayor velocidad estacionaria a medida que es menos porosa (HCP).

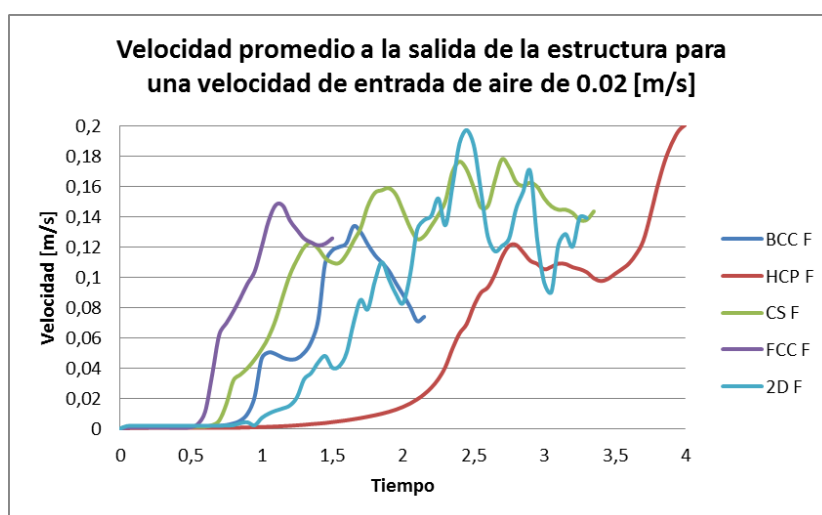


Gráfico 43: Velocidad promedio de la mezcla a la salida de las estructuras en función del tiempo

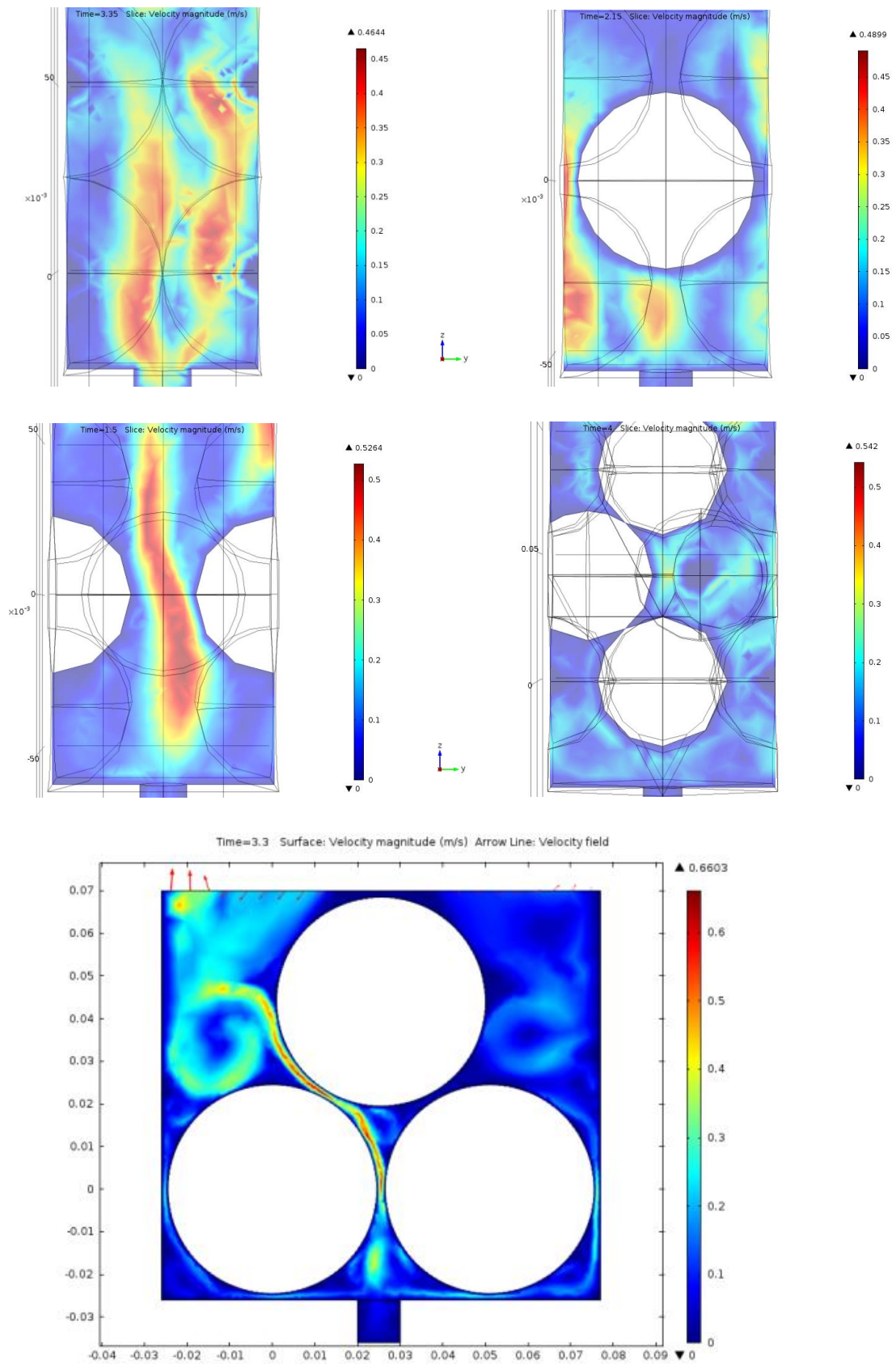


Figura 46: Perfil de velocidad de la mezcla dependiente del tiempo en su último segundo de simulación para las distintas estructuras. De arriba abajo y de izquierda a derecha: CS, BCC, FCC, HCP y 2D.

La concentración de azufre en tanto, tiene directa relación con la porosidad, y por ende, con la velocidad de flujo, lo cual es otra prueba más de que la desulfuración de mata de cobre está fuertemente dominada por la convectividad, confirmando resultados anteriores. Además, es posible percibir en este caso que mientras más poroso es el lecho más rápida es la reacción, dadas las condiciones de esta prueba, y que el sistema se establece finalmente alrededor de los 5000 [mol/m³] de azufre para este caso.

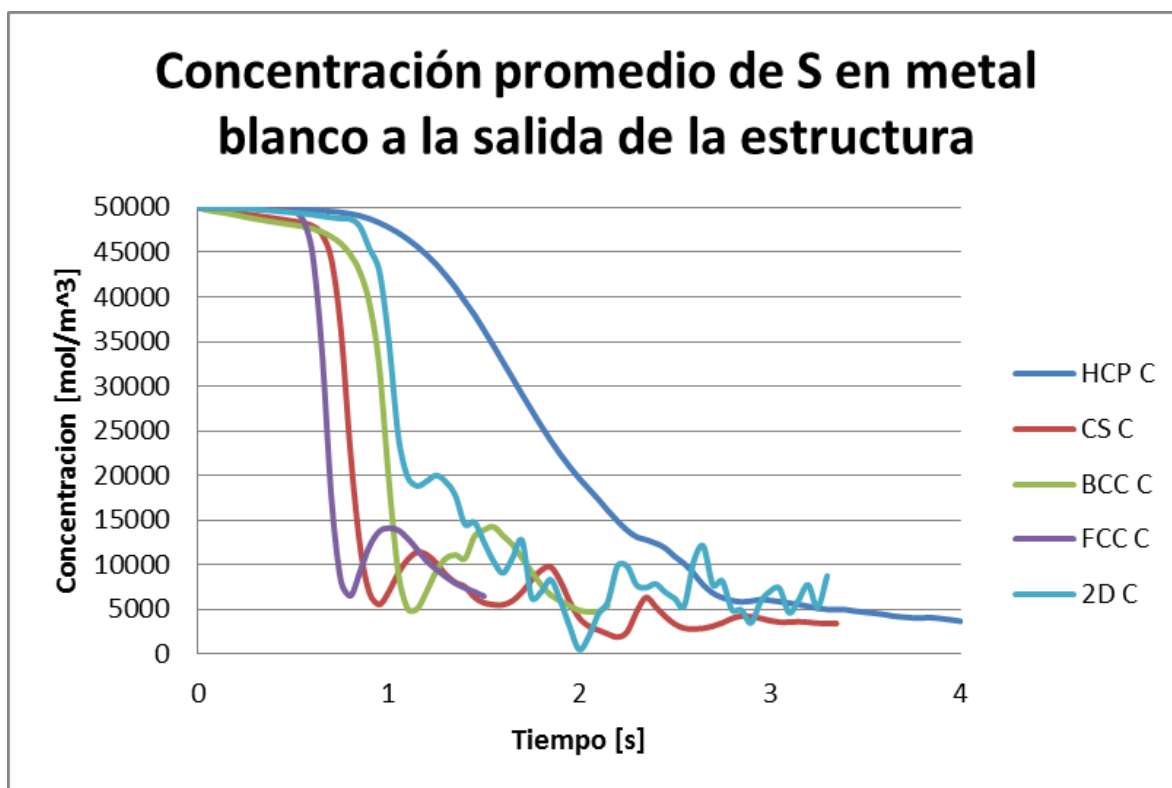


Gráfico 44: Concentración de azufre promedio en metal blanco a la salida de las estructuras en función del tiempo

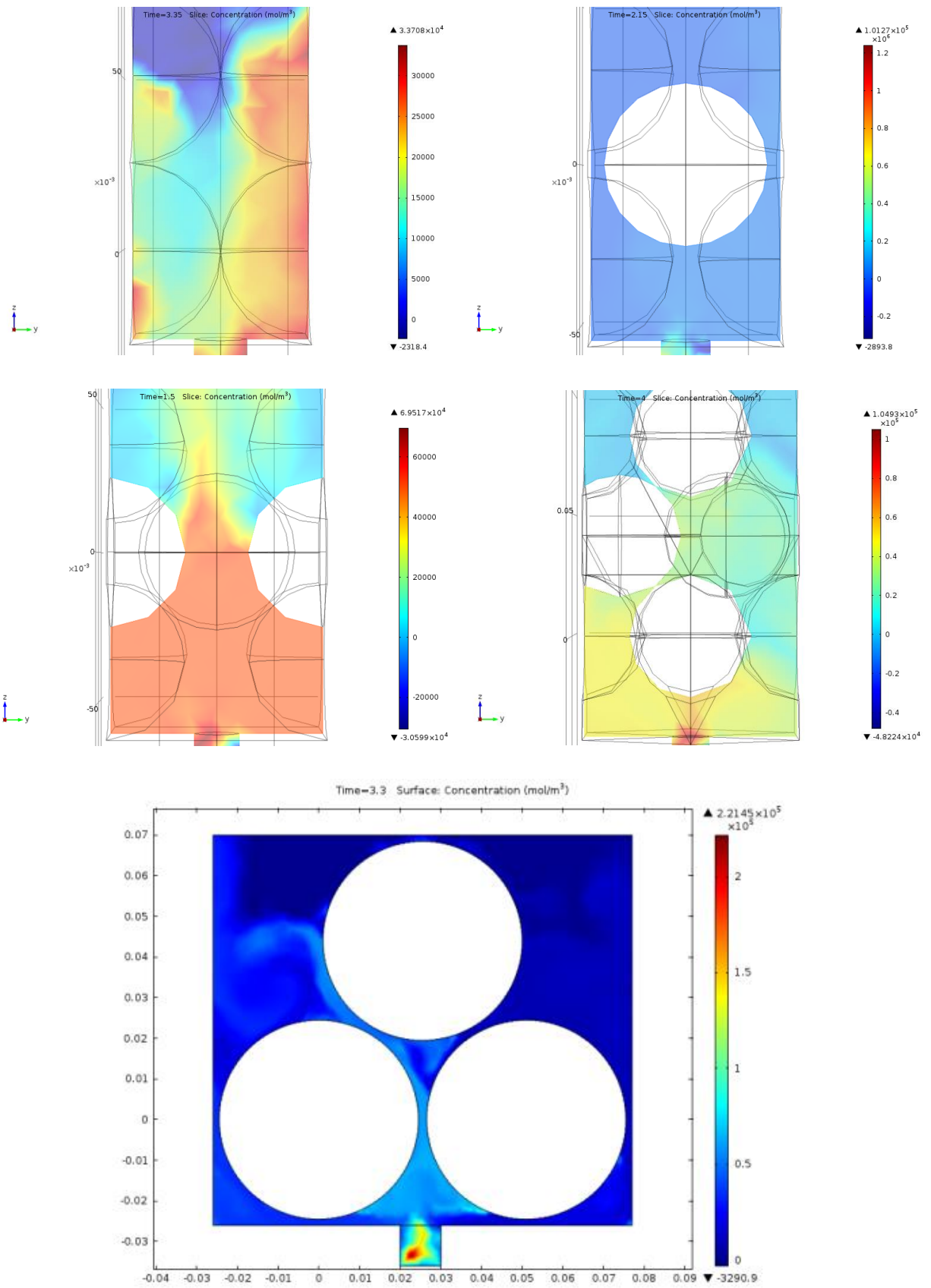


Figura 47: Perfil de concentración de azufre dependiente del tiempo en su último segundo de simulación para las distintas estructuras. De arriba abajo y de izquierda a derecha: CS, BCC, FCC, HCP y 2D.

Por su parte, la transferencia de calor, y por lo tanto, la temperatura del sistema no posee una relación directa con la porosidad, ocasionando variaciones de alrededor de 2 [K], lo cual es despreciable ante el contexto global ésta. Además, esto confirma nuevamente los resultados obtenidos para los modelos anteriores y de cierta forma les entrega validez.

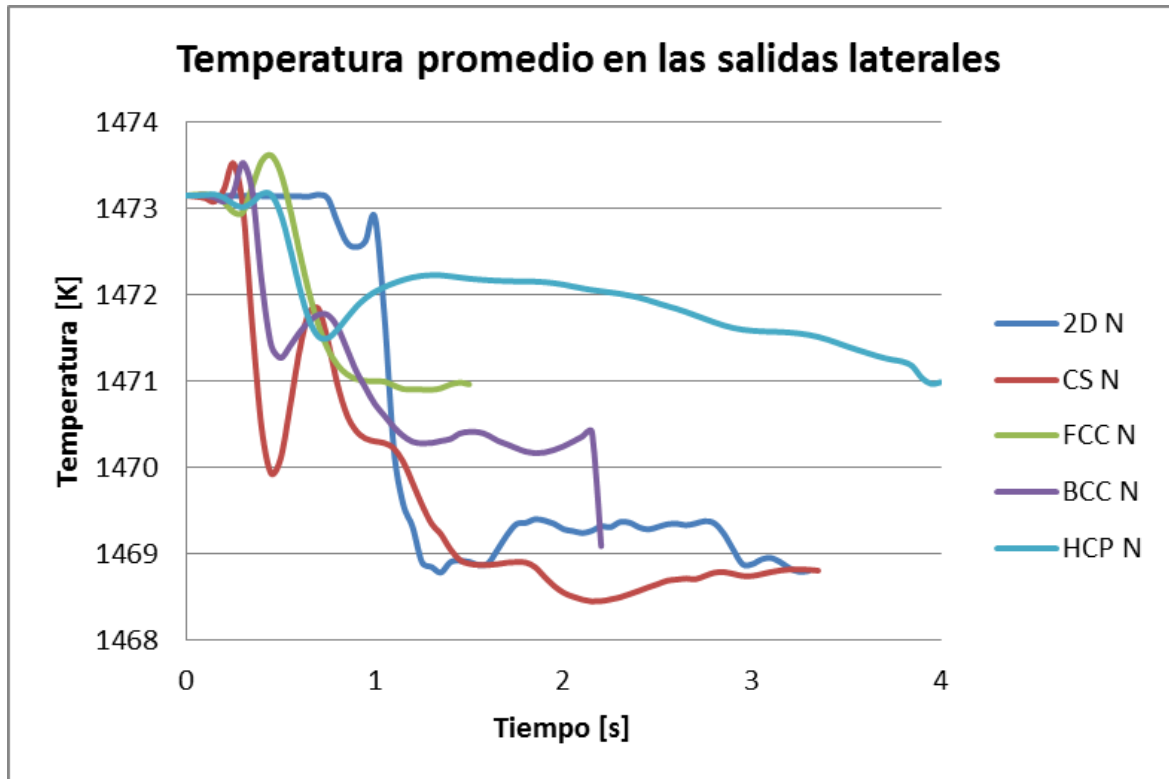


Gráfico 45: Temperatura promedio en las salidas laterales de las estructuras en función del tiempo

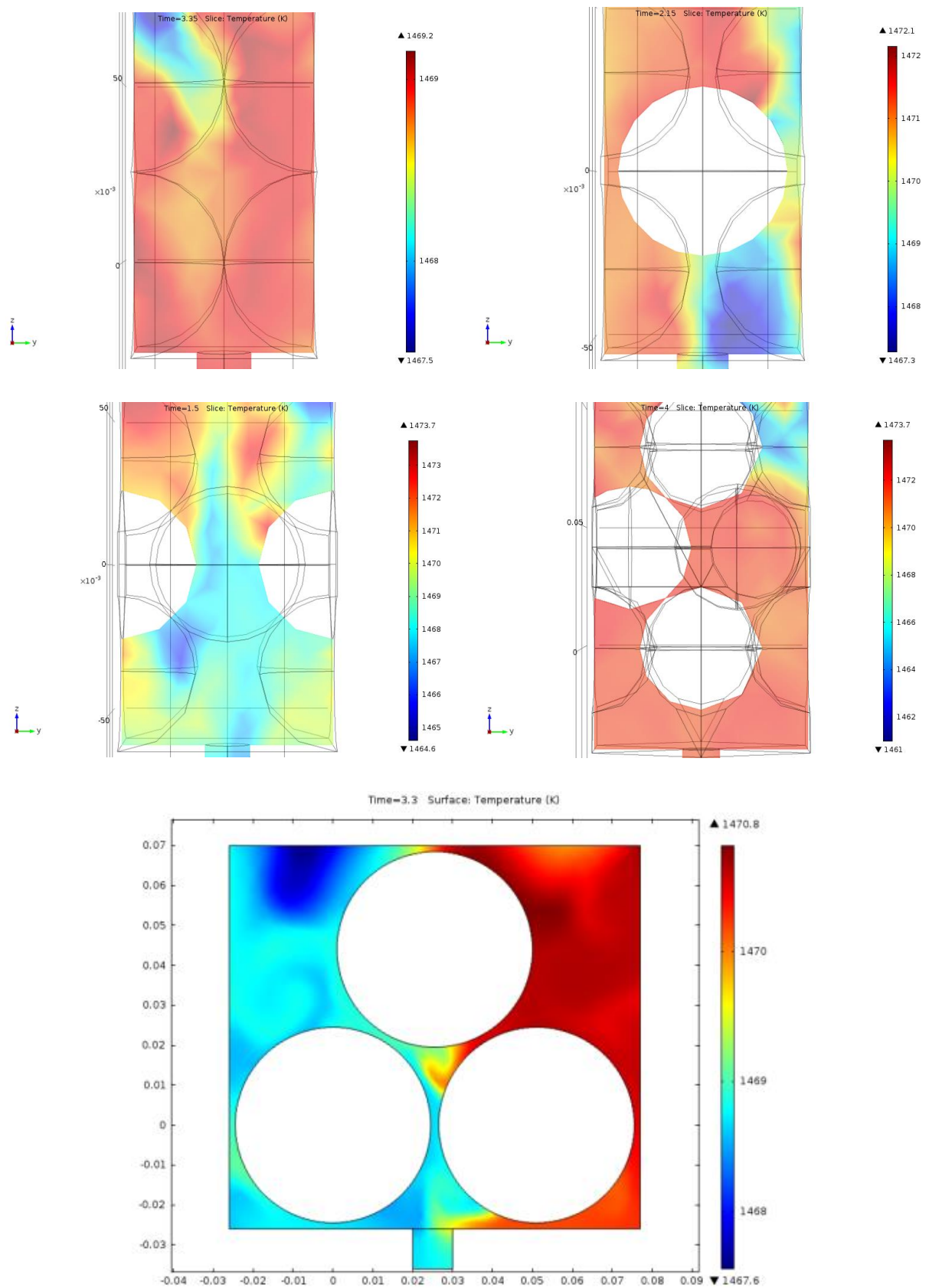


Figura 48: Perfil de temperatura dependiente del tiempo en su último segundo de simulación para las distintas estructuras. De arriba abajo y de izquierda a derecha: CS, BCC, FCC, HCP y 2D.

Finalmente, es posible apreciar el número de Reynolds en las diferentes estructuras estudiadas en función de tiempo, en las cuales se guarda una estrecha relación con la velocidad del flujo que atraviesa por éstas, y por ende, con la porosidad de la estructura. En la mayoría de los casos, el flujo es turbulento, pero hay que poner atención en la velocidad inicial de inyección de aire y en el ascenso de éste por la estructura, lo que aumenta su velocidad haciendo crecer el número de Reynolds, lo cual, como se vio en los modelos J1, J2 y J3, no es recomendable para el proceso. Ahora, aunque este resultado no es del todo bueno, sí es coherente con los resultados mostrados en los modelos J1, J2 y J3 para una velocidad de inyección de esta magnitud, la porosidad ocupada y el tamaño de la estructura.

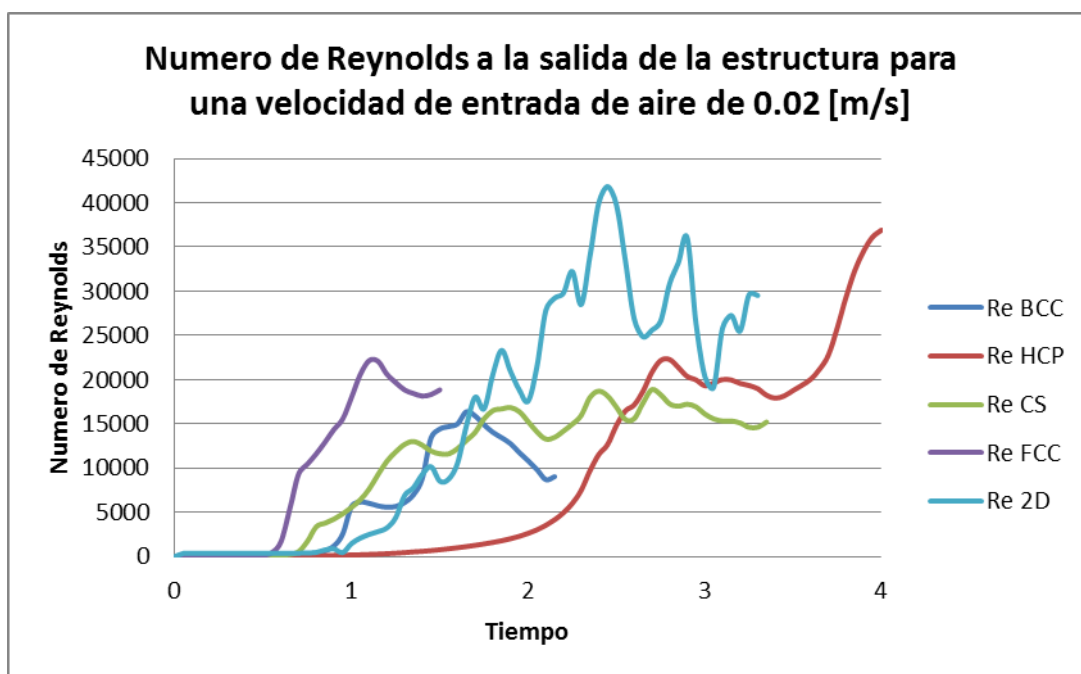


Gráfico 46: Numero de Reynolds a la salida de las estructuras en función del tiempo

Cabe destacar la gran similitud de resultados para todas las variables estudiadas entre el modelo 2D y los modelos de tres dimensiones empleados (CS, FCC, BCC y HCP), bajo las mismas condiciones, lo cual habla a priori de la validez de los resultados logrados con los modelos J1, J2 y J3.

5.2.4. Modelo 2D: Efecto de la velocidad de inyección de aire

Finalmente, se estudió para el modelo 2D el efecto que produce un cambio en la tasa de inyección de aire enriquecido al sistema, bajo los mismos parámetros mostrados anteriormente, variando la velocidad desde el reposo, es decir, desde un ascenso del aire solo por efecto del empuje de éste, hasta llegar una velocidad de 0.05 [m/s]. La razón de estudiar solo este modelo, se basa en la simplicidad de éste con respecto a los modelos de tres dimensiones y además, ante el hecho de que los resultados prácticamente no cambian, como se mostró anteriormente.

En el caso de la velocidad a la salida de la estructura, se observa una relación directa con la velocidad de inyección de aire, lo cual se aprecia claramente en el gráfico 47, y es coherente con lo esperado para este caso.

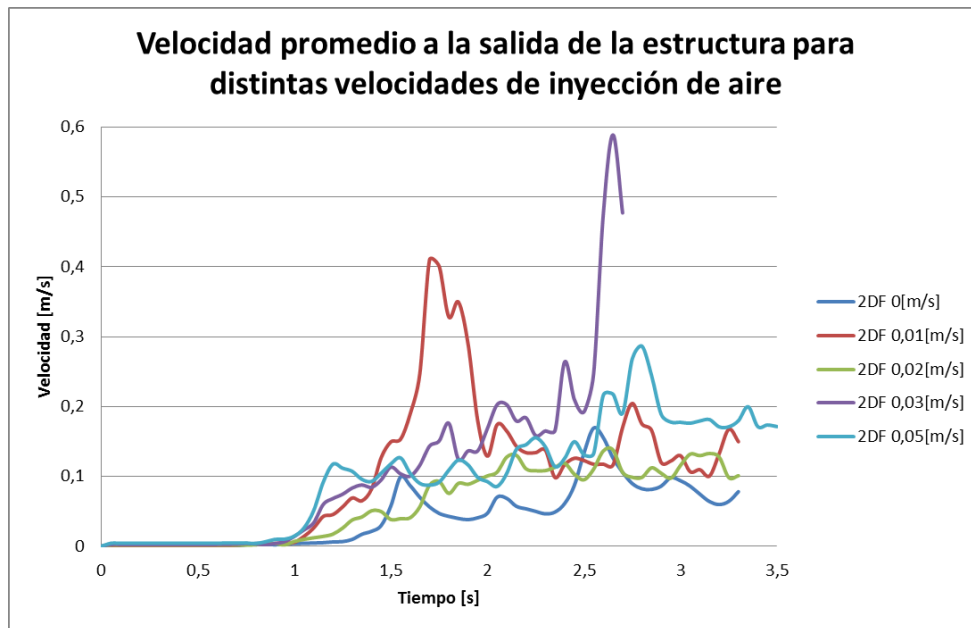


Gráfico 47: Velocidad promedio a la salida de las estructura 2D en función del tiempo e inyección de aire

Por otro lado, en cuanto a la concentración de azufre en el metal blanco, se obtiene prácticamente el mismo resultado para todas las velocidades de inyección, lo cual se podría explicar en base a una cierta saturación del sistema de desulfuración que solo permitiría retirar azufre hasta un cierto punto, y luego de eso, el sistema llegaría a un estado estacionario, dada la inyección continua tanto de aire como de metal blanco. Por otra parte, este resultado de cierta forma desmentiría los resultados que anteriormente apoyaban la idea de un sistema dominado por la convectividad, pero hay que tener en cuenta que la medición está hecha en donde escapa el aire de la estructura, y que además el metal blanco parte del reposo, moviéndose solo por efecto de la gravedad y cuyo efecto es muy poco notorio en los 3.5 [s] de simulación que permitió el software, lo cual no es determinante al momento de desmentir esta idea previa.

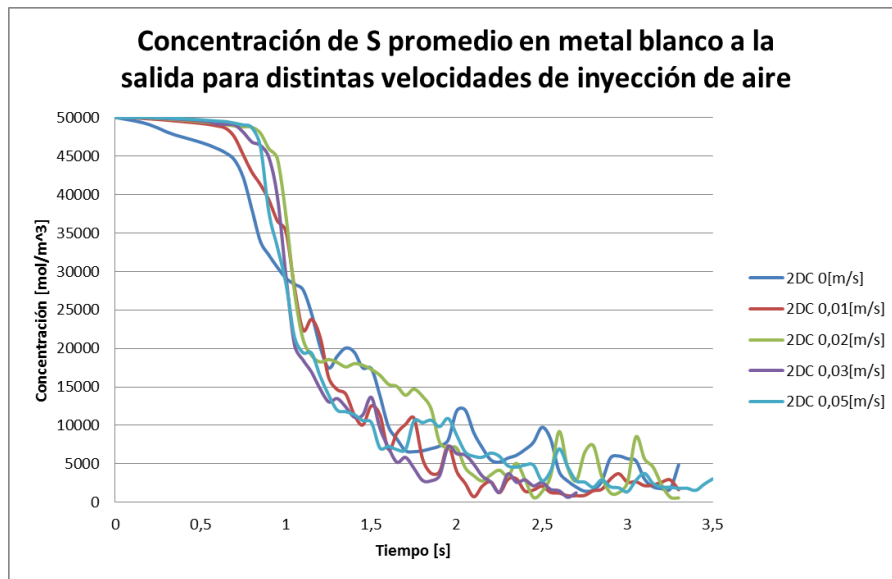


Gráfico 48: Concentración de azufre promedio a la salida de las estructura 2D en función del tiempo e inyección de aire

En tanto, la temperatura sí experimenta un cambio relevante al elevar el flujo de aire, lo cual es esperable y relevante a la hora de operar el sistema, pues una caída de temperatura podría llevar a una mala conversión de cobre. Además, este resultado también confirma lo que ocurre en los sistemas J1, J2 y J3 en las zonas de inyección de aire, donde la temperatura desciende cerca de dos grados Kelvin y nuevamente lleva a la propuesta de elevar un poco más la temperatura de operación quizás hasta los 1500 [K].

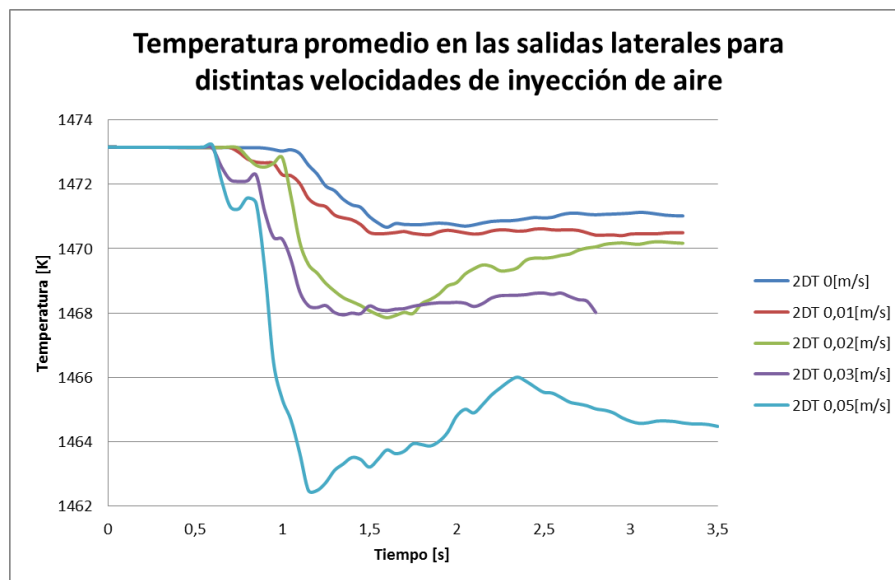


Gráfico 49: Temperatura promedio en las salidas laterales de las estructura 2D en función del tiempo e inyección de aire

En cuanto al número de Reynolds a la salida de la estructura, éste sigue exactamente el mismo patrón del perfil de velocidad mostrado anteriormente, lo cual es un hecho, al ser medidos bajo la misma geometría y propiedades de flujo. En este caso, los números muestran flujos totalmente turbulentos, lo que no es bueno para el proceso dada la evidencia anterior, pero sí es coherente con los resultados anteriormente mostrados

para el caso de una inyección de aire constante. Esto, hace pensar que la inyección de aire para el sistema debería ser a una velocidad muy reducida, menor que la del movimiento de mata, para que en el efecto global, el flujo caiga con un numero de Reynolds menor a 5000 que, como se mostró en los modelos J1, J2 y J3, al parecer es lo mejor para el proceso.

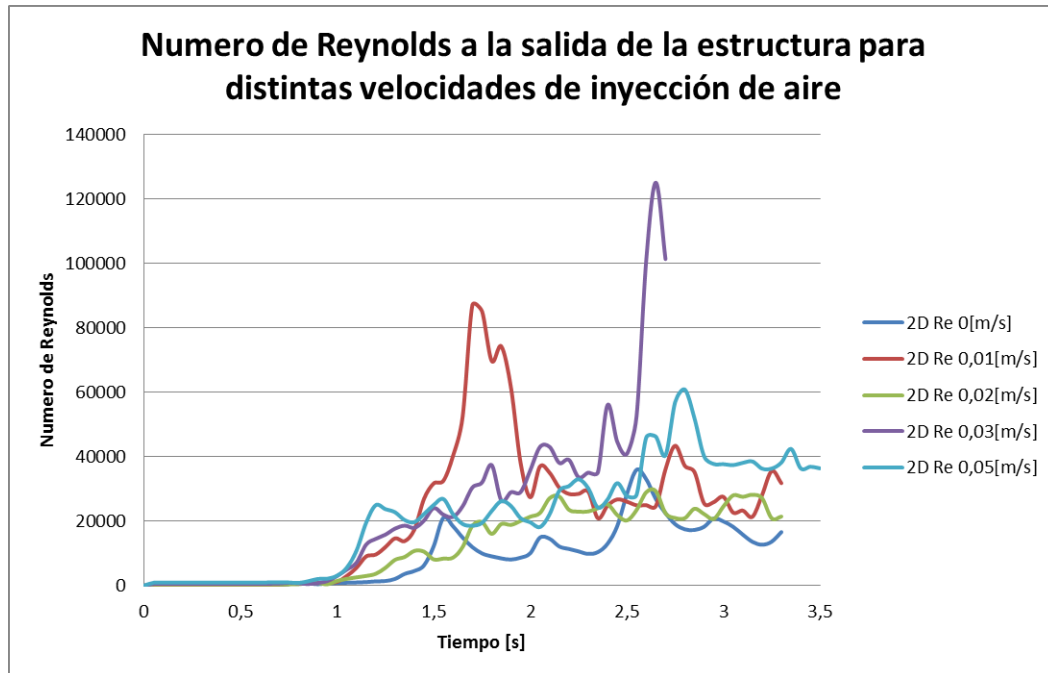


Gráfico 50: Numero de Reynolds promedio a la salida de las estructura 2D en función del tiempo e inyección de aire

5.3. Modelo J3D

5.3.1. Solución

La herramienta de elementos finitos *COMSOL Multiphysics 4.2* fue utilizada para llevar a cabo la resolución de este modelo, generando una malla apropiada para resolver las ecuaciones involucradas con alrededor de 150000 elementos finitos. Los cálculos fueron llevados a cabo en un computador con un procesador i7-3930K con seis núcleos de 3.2 GHz y una memoria total de 64 GByte.

5.3.2. Cambio a un modelo tridimensional y confirmación de resultados anteriores

Dados los resultados ya mostrados, es evidente al ver el gráfico 51 que la velocidad del flujo dentro del lecho posee el mismo comportamiento sinusoidal de todos los modelos de dos dimensiones, lo cual confirma los resultados anteriores y además demuestra nuevamente que los modelos en dos dimensiones

representan bien el sistema sin tener que recurrir a un gran gasto de recursos informáticos para la simulación del mismo proceso en tres dimensiones.

Cabe destacar que en este caso la velocidad se midió en 6 planos horizontales $\hat{x}\hat{y}$ equidistantes en la coordenada \hat{z} de acuerdo a la ecuación:

$$\bar{U} = \frac{\iint_D u(x,y) dx dy}{\iint_D dx dy} \quad (\text{Ec. 5.16})$$

Donde D es la región en donde se calcula la velocidad promedio.

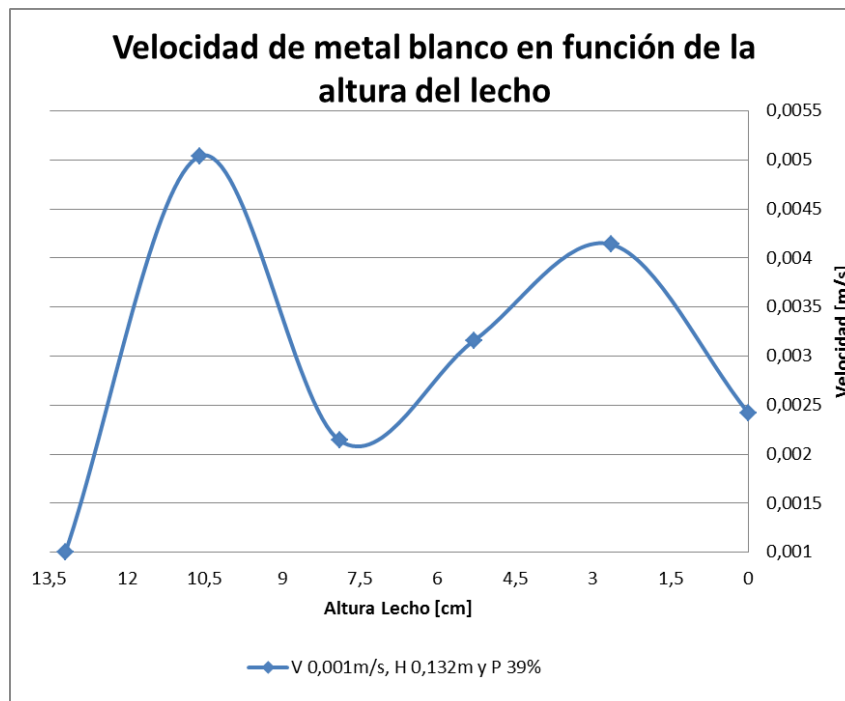


Gráfico 51: Velocidad de metal blanco en función de la altura de lecho - Modelo J3D

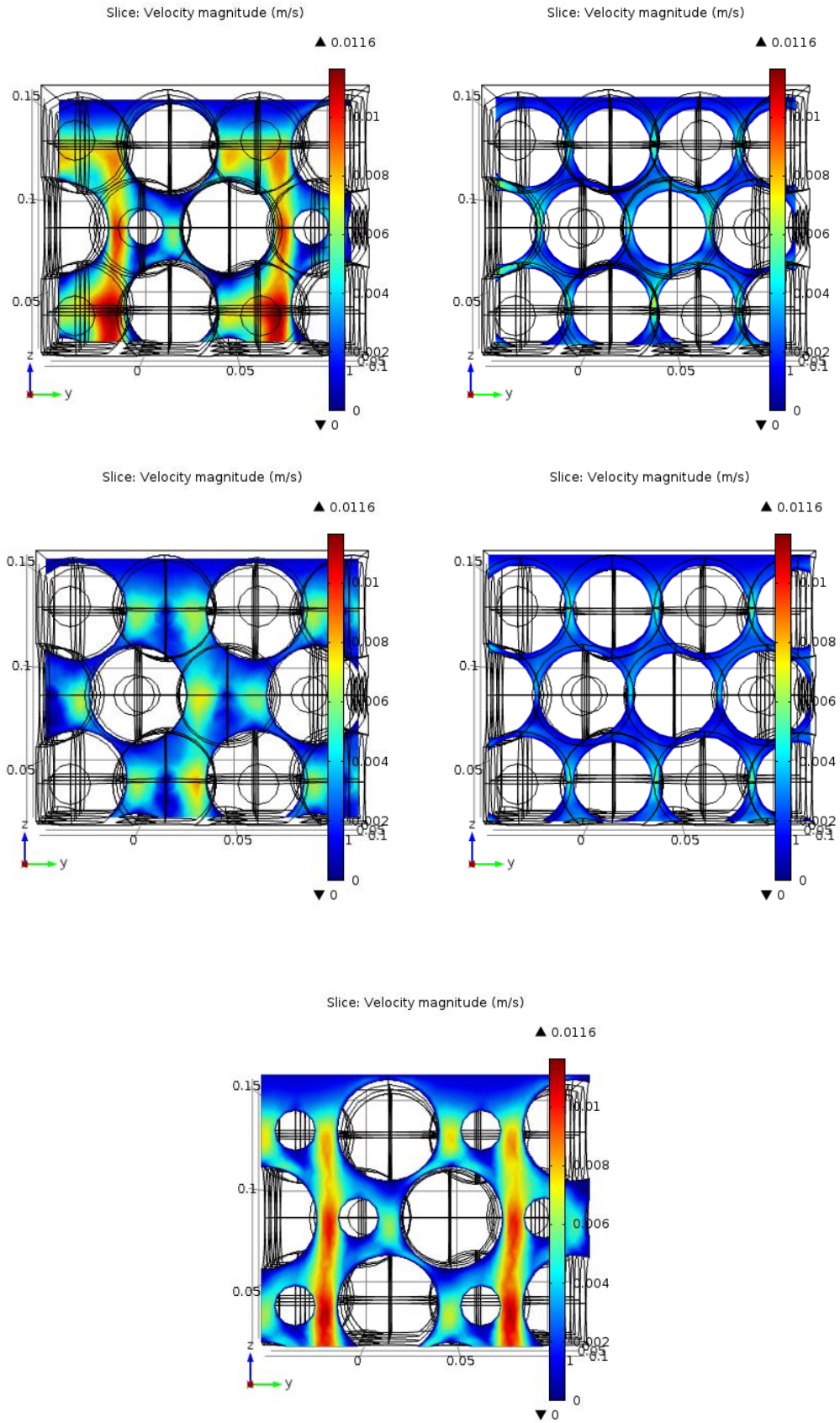


Figura 49: Perfiles de velocidad para 5 planos yz distintos equidistantes – modelo J3D

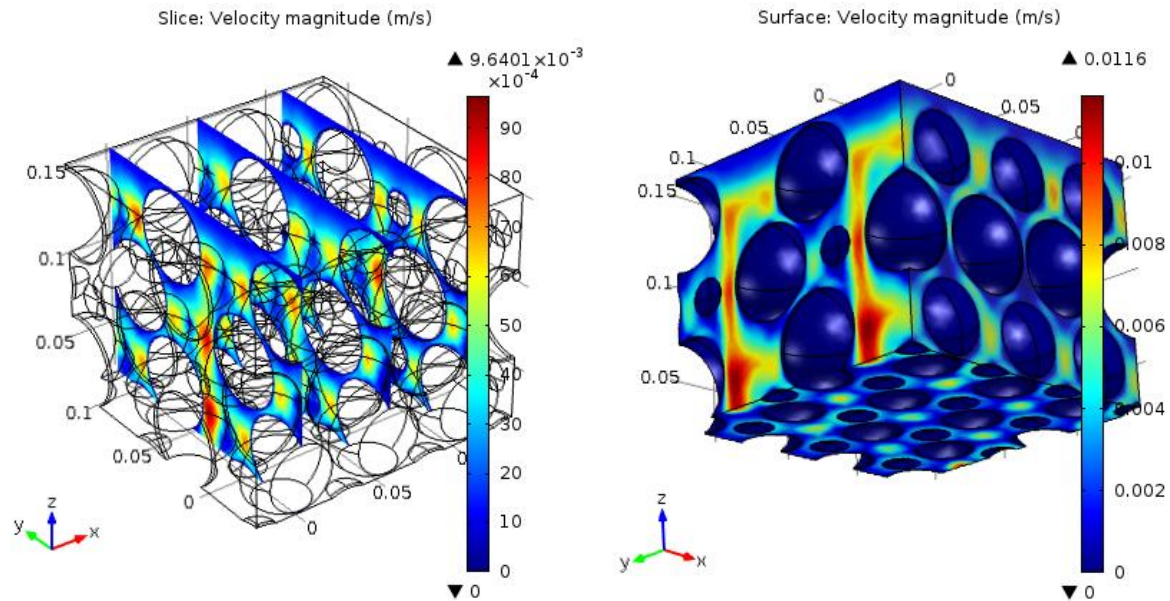


Figura 50: Perfiles de velocidad para 3 planos yz distintos equidistantes en 3 dimensiones (izquierda) y perfiles externos de velocidad en 3 dimensiones (derecha) – modelo J3D

La concentración de azufre sufre el mismo comportamiento mostrado anteriormente, lo que nuevamente reafirma los resultados obtenidos con los modelos de dos dimensiones. Además, es posible destacar la similitud de estos resultados con los obtenidos para el primer modelo de lecho de dos dimensiones estudiado J1, y al igual que en él, se puede extrapolar el resultado para que en un lecho de 40 [cm] de altura se obtengan resultados satisfactorios con la geometría empleada.

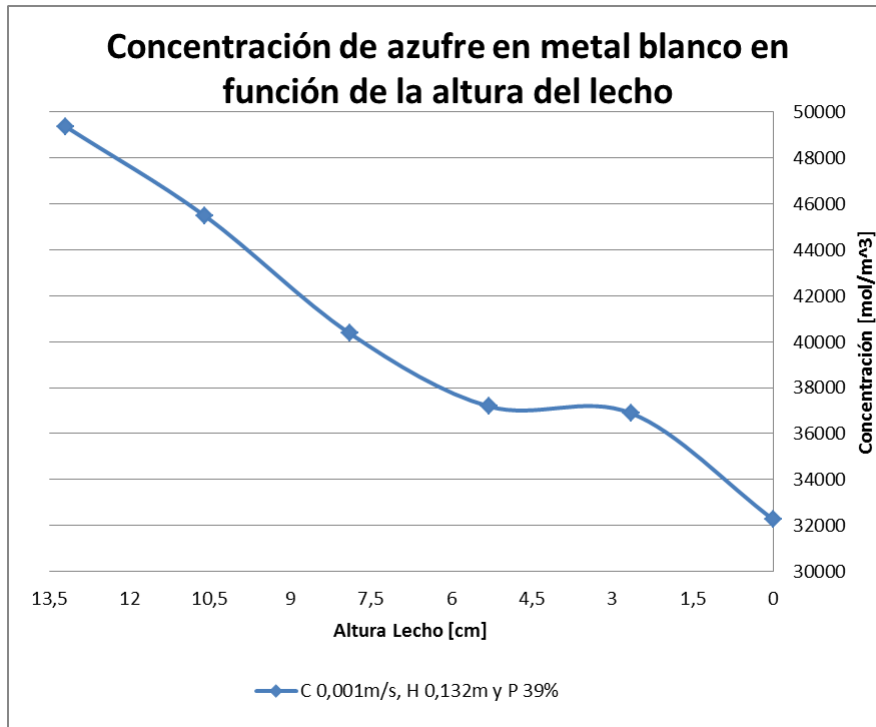


Gráfico 52: Concentración de azufre en metal blanco en función de la altura de lecho - Modelo J3D

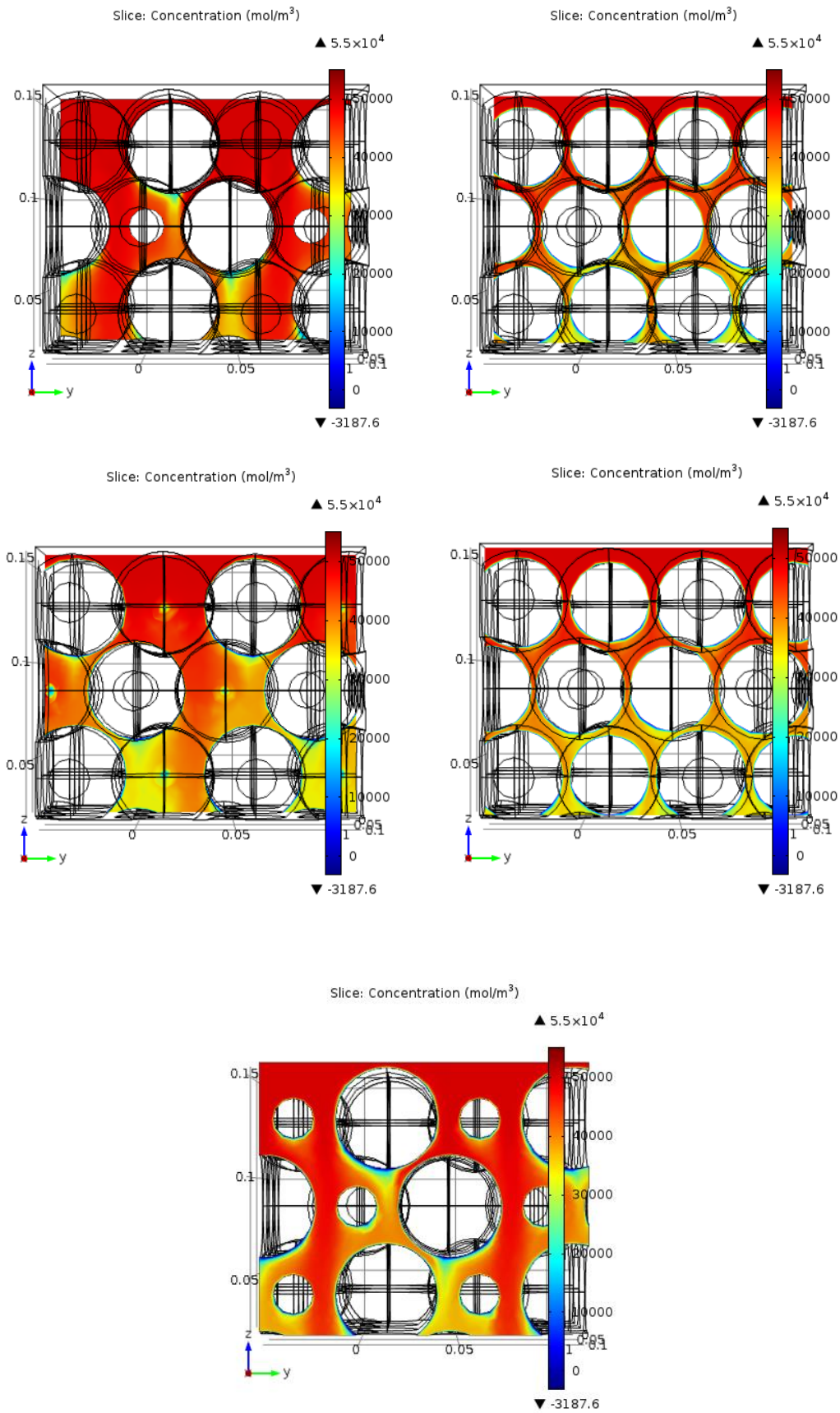


Figura 51: Perfiles de concentración de azufre para 5 planos yz distintos equidistantes – modelo J3D

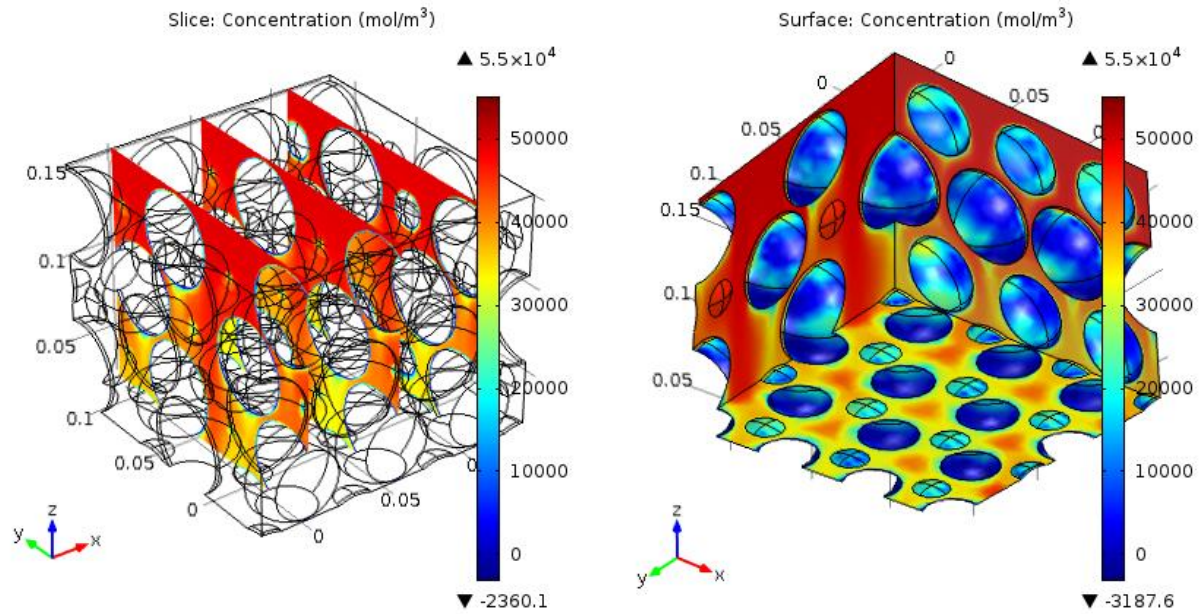


Figura 52: Perfiles de concentración de azufre para 3 planos yz distintos equidistantes en 3 dimensiones (izquierda) y perfiles externos de concentración de azufre en 3 dimensiones (derecha) – modelo J3D

En tanto la temperatura, que a simple vista sufre un comportamiento anormal a lo mostrado anteriormente, es decir, un incremento de ésta, contrario a la temperatura casi constante, disminuyendo hacia las salidas y entradas de aire del horno como se evidencio. Se explica por la ausencia de un sistema de enfriamiento convectivo dentro del modelo tridimensional, pues solo representa una sección del lecho y no el horno en su totalidad como se ve en los modelos anteriormente presentados, por lo cual, lo correcto sería comparar su resultado con el modelo J1 que presenta similares condiciones (ver gráficos 6, 12 y 53).

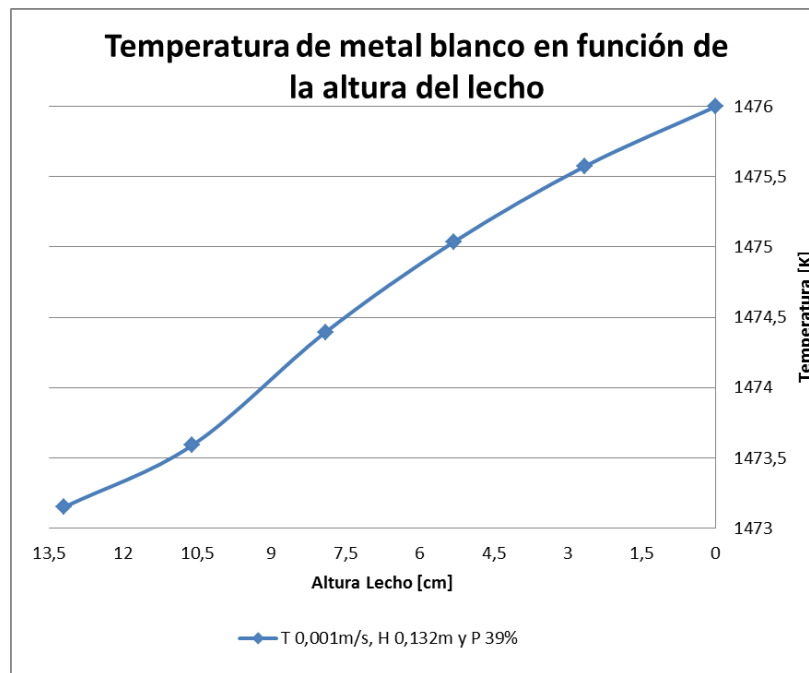


Gráfico 53: Temperatura de metal blanco en función de la altura de lecho - Modelo J3D

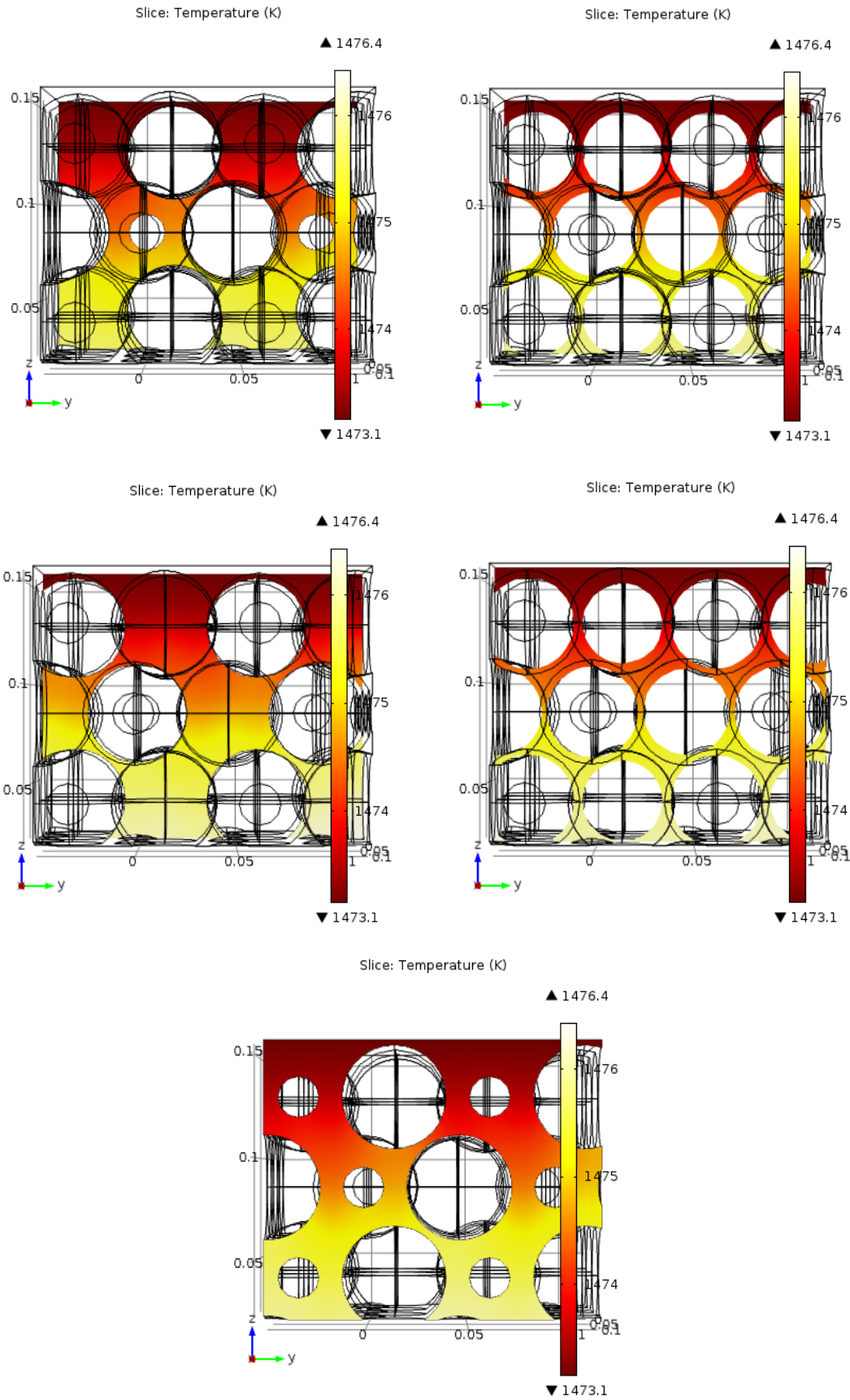


Figura 53: Perfiles de temperatura para 5 planos yz distintos equidistantes – modelo J3D

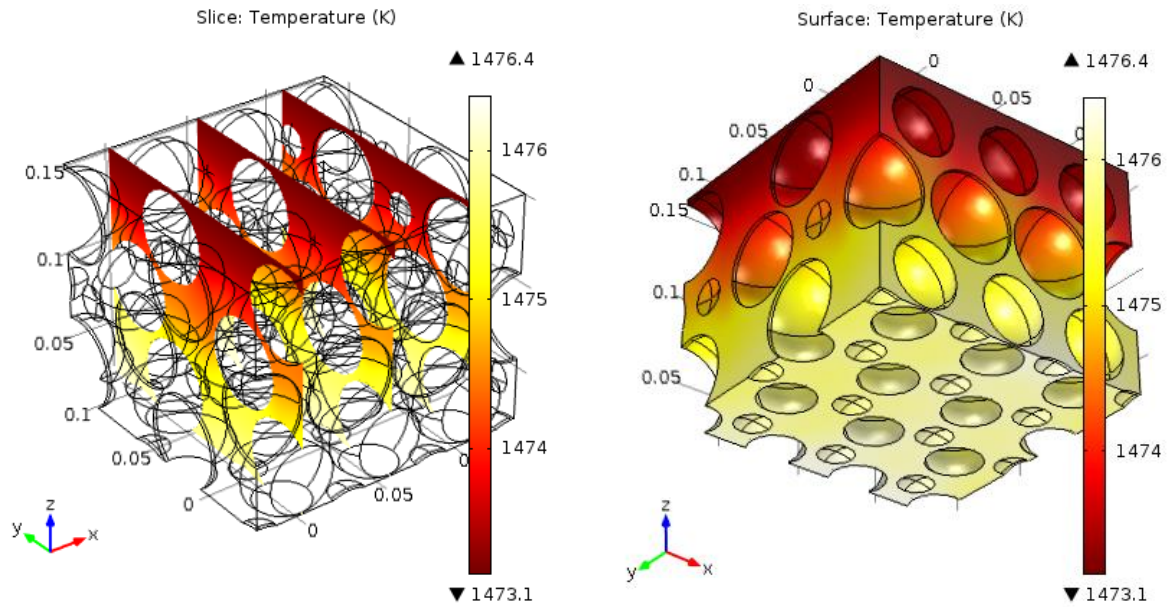


Figura 54: Perfiles de temperatura para 3 planos yz distintos equidistantes en 3 dimensiones (izquierda) y perfiles externos de temperatura en 3 dimensiones (derecha) – modelo J3D

Finalmente, el número de Reynolds fue calculado de acuerdo a la velocidad promedio presentada en la ecuación 5.16 y al diámetro hidráulico de la sección en donde se midió esa velocidad, siendo:

$$Re = \frac{\rho \bar{U} D_h}{\mu} \quad (\text{Ec. 5.17})$$

$$D_h = \frac{4 \cdot A}{P_m} = \frac{4 \left(\iint_D dx dy \right)}{\sum_{i=1}^n P_i} \quad (\text{Ec. 5.18})$$

En donde, D_h es el diámetro hidráulico, A es el área de la sección, P_m es el perímetro mojado de la sección y P_i son los distintos segmentos que conforman el perímetro mojado de esa sección.

Los resultados indican un fuerte comportamiento laminar (ver gráfico 54), lo cual nuevamente reafirma los resultados anteriores y demuestra que para un buen funcionamiento del sistema el régimen de flujo dentro del lecho en su totalidad debe ser laminar, independiente si en el movimiento total existen dos flujos en contra corriente.

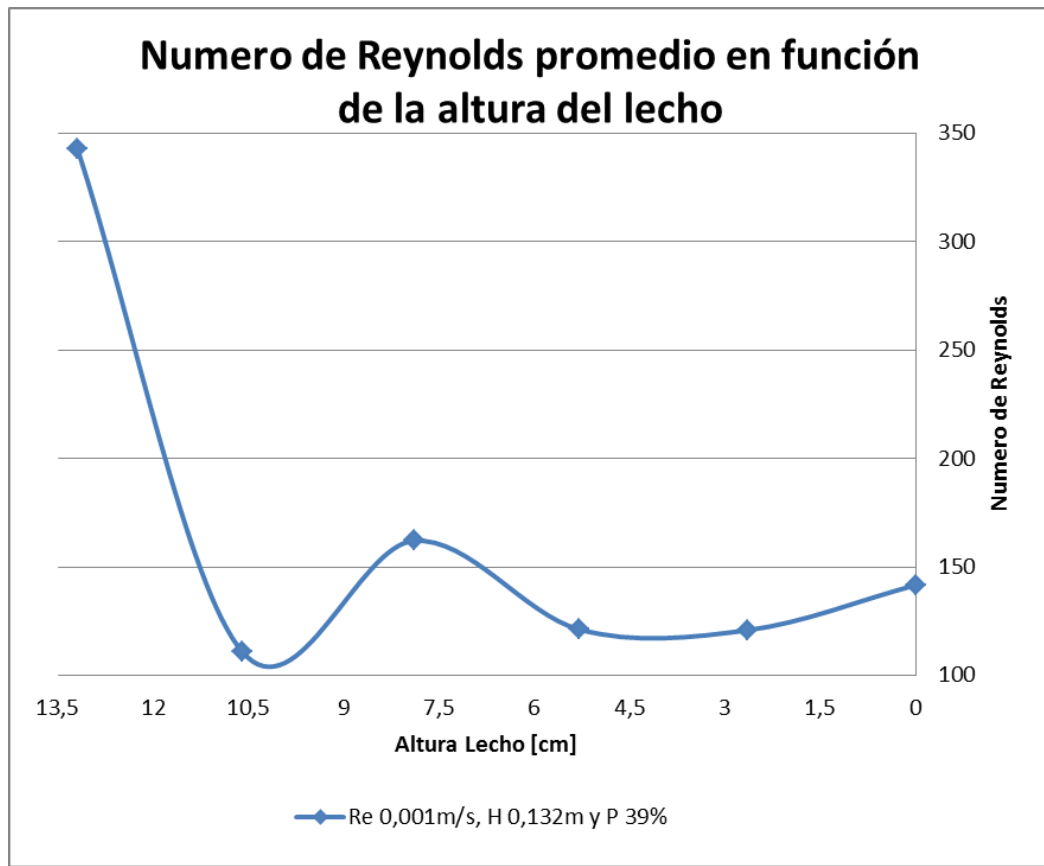


Gráfico 54: Numero de Reynolds promedio en función de la altura de lecho - Modelo J3D

Cabe destacar que para las mediciones de la concentración de azufre y de la temperatura promedio se utilizó la ecuación 5.16 con las respectivas variables correspondientes.

5.4. Tiempos de residencia y presión dentro del lecho

Luego de lo mostrado, es que se terminara el análisis de resultados con un estudio general a los tiempos de residencia de cada modelo con buen desempeño, tomando en cuenta tiempos estimados por el modelo y tiempos promedios de residencia según la ecuación presentada por *Warczok et al*^[11]:

$$t = \frac{1.5\pi D^2 H x \alpha \rho}{d F_m} \quad (\text{Ec. 5.19})$$

En donde, D es el diametro del horno en [m], H es la altura del lecho en [m], x es el espesor de la película de mata en [m], α es la fracción de área superficial de lecho cubierta por mata, ρ es la densidad de la mata en [kg/m³], d es el diametro de grano del lecho en [m], y F_m es el flujo másico de alimentación en [kg/s].

De este modo, se calculó en los modelos con buen desempeño (12 en total) los tiempos de residencia, en base a la distancia recorrida y a la velocidad promedio del flujo en el lecho, encontrándose que estos se ubicaban generalmente entre los 10 y 15 [s], con un tiempo medio de 14.5 [s] (ver gráfico 55).

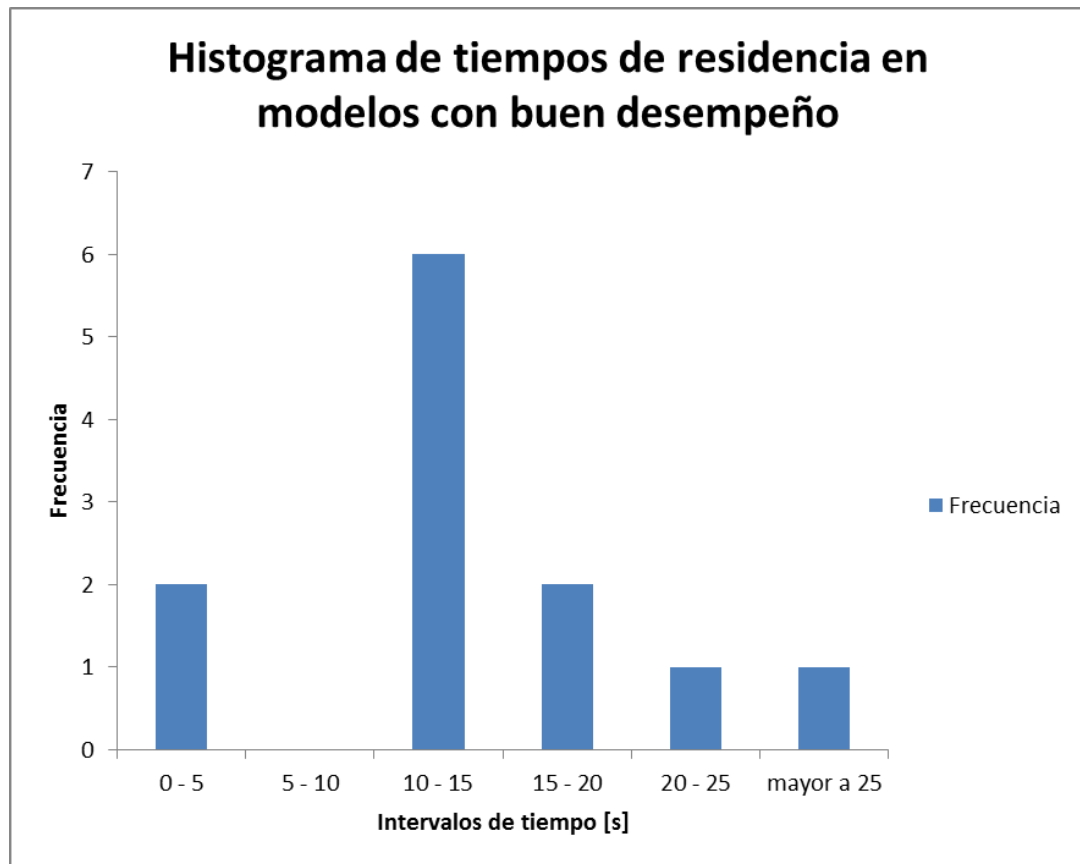


Gráfico 55: Histograma de tiempos de residencia medidos en modelos con buen desempeño

Sin embargo, al comparar los tiempos estimados por el modelo con respecto a los estimados con la ecuación 5.19, la diferencia se torna abismante, encontrándose razones de entre 8 a 11 veces, llegando a 3600 veces en el caso del modelo “J2 P40%” (no se aprecia la diferencia en el gráfico 56, pues esta truncado en el tiempo), para los pares medidos y estimados. En tanto, al comparar los resultados del modelo “J3D P39%”, en éste la diferencia cambia a favor del tiempo medido, lo que se refleja en una subestimación del resultado por parte de la ecuación 5.19, en vez de sobreestimarlos como se aprecia para los modelos de dos dimensiones.

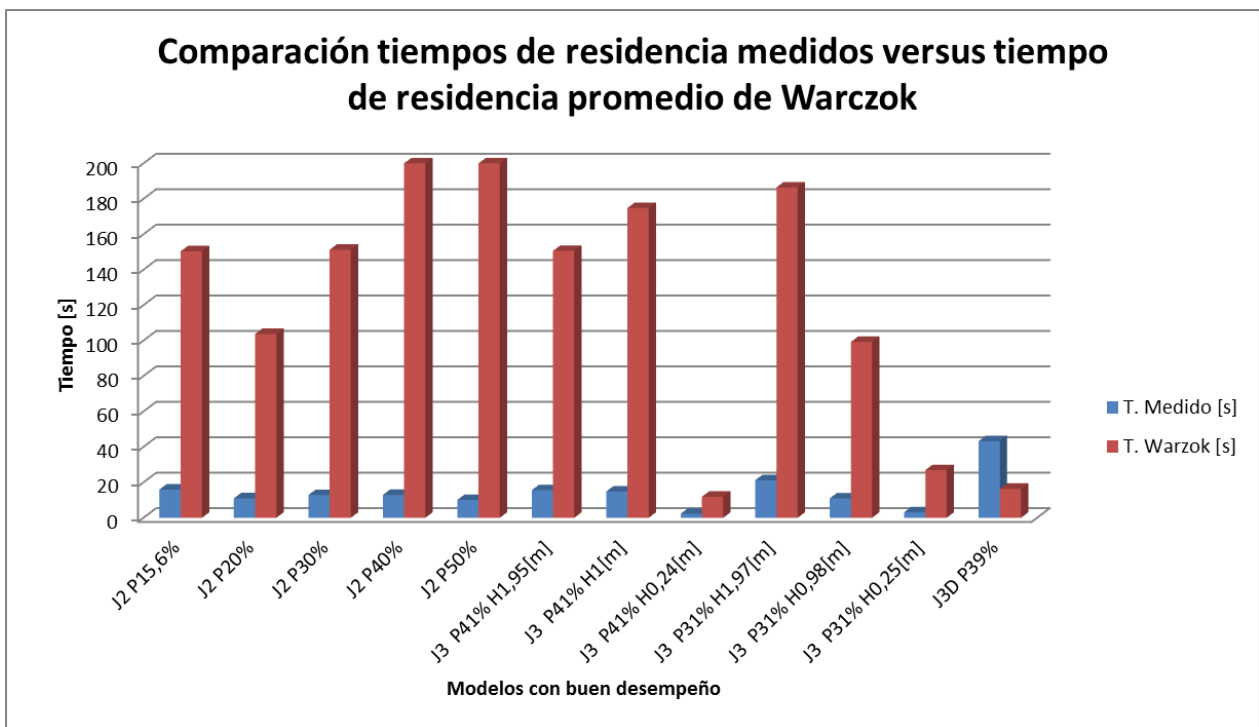


Gráfico 56: Comparación de tiempos de residencia medidos versus tiempo de residencia promedio según Warczok

Teniendo en cuenta lo anterior, queda propuesto un análisis mayor sobre este punto que involucre pruebas físicas, pues en base a lo mostrado, no es posible precisar de forma contundente con respecto a la ecuación 5.19 y los tiempos estimados en las simulaciones realizadas.

Por otro lado, en cuanto a la presión ejercida por el flujo dentro del reactor, basta con analizar los resultados entregados por el software (Figura 56) para percatarse que ésta se comporta según la ley de Bernoulli, es decir, siguiendo la ecuación:

$$P = \frac{1}{2}\rho v^2 + \rho gh \quad (\text{Ec. 5.20})$$

En donde, P es la presión del flujo, ρ es la densidad del fluido, v la velocidad del fluido, g la aceleración de gravedad y h la cota a la cual se encuentra ubica el flujo.

De esta manera, el software interpola linealmente en la altura desde la base, tomando como presión de salida del fluido 1 [atm]. Sin embargo, y al igual que el tiempo de residencia, no hay que tomar este resultado como correcto hasta que sea medido de forma física en laboratorio, pues en este caso solo se considera un flujo que atraviesa el lecho, conociéndose que en la realidad son dos, lo que puede variar este resultado.

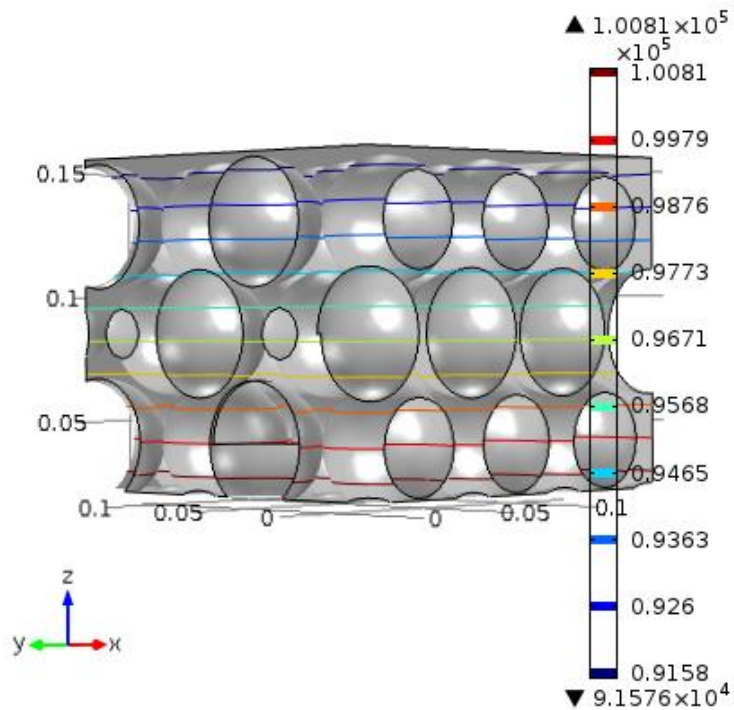
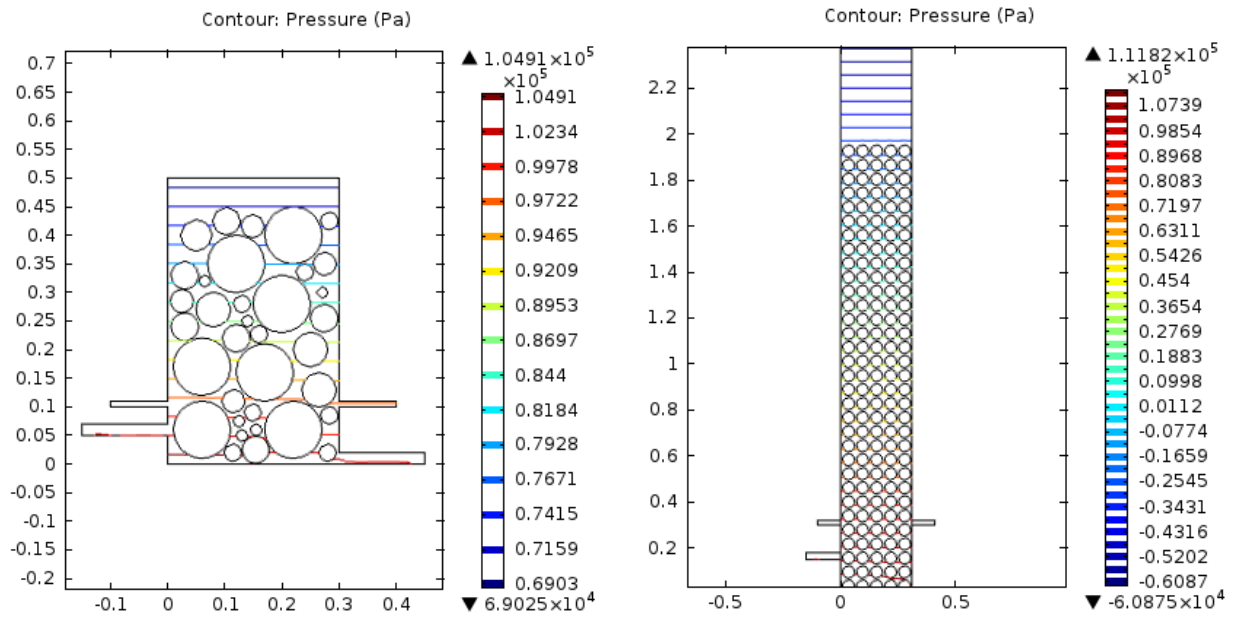


Figura 55: Cotas de presión en los distintos modelos simulados

CAPITULO 6: CONCLUSIONES Y PAUTAS PARA TRABAJO FUTURO

Comenzando por la desulfuración de mata de cobre, fenómeno que representa gran parte de la operación unitaria de conversión a blister, es que se aprecia dependencia con la concentración de oxígeno del aire de proceso que se inyecta al sistema. Las simulaciones no reflejan de manera fehaciente dicho efecto, sin embargo, de acuerdo a las pruebas realizadas ^[2] es posible obtener mejores resultados en la medida que aumenta la concentración de oxígeno. Lo anterior se atribuye a la mayor cantidad de oxígeno disponible y bien distribuido en la fase fundida que conlleva un eficiente incremento en la formación de SO₂, por lo tanto, se debe tener especial cuidado en su suministro, pues al exceder cierta concentración se corre peligro de sobre oxidar el sistema, además de elevar en demasía la temperatura, lo que culminaría con resultados adversos. Lo recomendable, sería operar en un rango que no exceda una concentración del 40% en volumen del oxígeno contenido en el aire de proceso.

También, es evidente que, de acuerdo a los resultados obtenidos en este trabajo, la desulfuración de cobre no está dominada por la difusividad, sino por la convectividad en el sistema, en donde los mayores efectos sobre la conversión fueron generados producto de los cambios en la velocidad de flujo ligado a la geometría del sistema, la cual puede ser cuantificada considerando la porosidad del empaque, la altura de éste y el factor de volumen de mata versus área de reacción (área de mata versus perímetro en el caso de dos dimensiones). De este modo, a medida que la porosidad es menor, la velocidad del fluido fundido a través del lecho aumenta debido a la disminución del área por donde éste circula y viceversa, lo que ocasiona perfiles oscilantes de velocidad a través del lecho. En tanto, a medida que la razón de volumen de mata versus área de reacción disminuye, la desulfuración es más lenta, pues este factor afecta de forma directa el coeficiente de transferencia de azufre entre el metal blanco y el aire inyectado.

Debido a lo anterior, es que los factores ligados a la fluidodinámica juegan un papel importante en la eficiencia de conversión, pudiendo encontrar una región de operación óptima y concreta en la cual, factores de operación como la velocidad inicial, la porosidad y la altura de lecho se vuelven trascendentes para lograr un buen funcionamiento.

- La velocidad inicial está ligada a un perfil de Número de Reynolds promedio dentro del empaque que no debe superar el valor de 5000, es decir, es un requisito indispensable que el flujo en su totalidad sea laminar para obtener una buena eficiencia, independientemente que considere dos fluidos inmiscibles en contracorriente.
- La porosidad se relaciona de forma directa con la velocidad inicial (número de Reynolds) para una altura de lecho dada, y varía en la medida que la altura de lecho cambia, lo que origina la región

de operación que se muestra en los gráficos 40 y 41, para 4 tamaños distintos de lecho, y que se resumen en las siguientes ecuaciones:

$$\begin{aligned} P_{25} &= 12.33 \cdot \ln(u_i) + 79.2 & P_{25} &= 21.39 \cdot \ln(Re) - 141 \\ P_{47} &= 27.65 \cdot \ln(u_i) + 159.9 & P_{47} &= 13.95 \cdot \ln(Re) - 70.4 \\ P_{100} &= 54.85 \cdot \ln(u_i) + 233.3 & P_{100} &= 61.13 \cdot \ln(Re) - 457.2 \\ P_{195} &= 14.43 \cdot \ln(u_i) + 84.2 & P_{195} &= 16.35 \cdot \ln(Re) - 99.5 \end{aligned}$$

En tanto, la transferencia de calor, descrita físicamente por la temperatura, casi no se ve afectada por variables geométricas, como es la porosidad y la altura del lecho, pero si por cambios del tipo convectivo forzado originados principalmente en las zonas de inyección de aire de proceso y en las salidas del reactor, donde la temperatura desciende sustancialmente, pudiendo originar problemas operacionales.

De este modo, un aumento en la velocidad de inyección del aire de proceso conlleva una disminución de la temperatura en un radio mayor cercano a las zonas de inyección, por lo cual, es un factor importante a considerar en la operación. Si bien las reacciones de oxidación de sulfuros originadas por la conversión son exotérmicas y conllevan un aumento de la temperatura en el sistema, dicho efecto es fuertemente contra restado por la disminución de la temperatura generada por la convección forzada. Debido a lo anterior, para sopesar las disminuciones de temperatura por convección forzada y no afectar en exceso el consumo de refractarios, se recomienda operar el reactor a una temperatura alrededor de los 1500[K].

Por otro lado, el estudio consideró la utilización de modelos de dos y tres dimensiones, obteniendo en ambos casos comportamientos similares, lo cual es un gran avance a tener en cuenta en futuras simulaciones, pues es posible lograr buenos y representativos resultados utilizando modelos 2D con un gasto computacional y tiempo de cálculo relativamente bajos, factor que es determinante a la hora de simular procesos tan complejos como este.

El presente estudio provee importantes resultados en términos de predicción, a través de simulaciones computacionales, de la operación de conversión de mata de cobre o metal blanco a blíster en un reactor de lecho empacado. Se recomienda validar los resultados mediante la ejecución de pruebas a escala laboratorio y posteriormente a escala piloto-industrial considerando al menos lo siguiente como línea base:

- Medición y búsqueda de un número de Reynolds laminar para un flujo de metal blanco fundido en conjunto con aire enriquecido en contracorriente en una probeta o crisol de alrededor de 2 [cm] de

diámetro, que es el diámetro hidráulico promedio en un lecho empacado compacto con esferas de 5 [cm], con el fin de demostrar que esta acción es posible.

- Medición del perfil de temperatura en la altura del reactor, principalmente en las zonas de ingreso de aire de proceso y en las salidas de fases fundidas.
- Medición de la concentración de azufre y cobre en las entradas y salidas del reactor, y en lo posible a distintas alturas, con el fin de confirmar las curvas de desulfuración obtenidas en las simulaciones.
- Medición de los tiempos de residencia y presión al interior del reactor, pues las mediciones realizadas en base a los resultados de las simulaciones y a la teoría no son completamente determinantes.
- Medición de propiedades físicas y termodinámicas de las fases fundidas, tales como la viscosidad, conductividad térmica, coeficiente de difusividad y densidad, puesto que existe una directa relación con la operación en la búsqueda de un modelo robusto y predictivo.

Conociendo las fortalezas y debilidades del presente estudio, se puede tomar como referencia para aproximar resultados a escala industrial, el horno de planta piloto existente de la fundición Hernán Videla Lira de ENAMI, el cual, cuenta con una altura de 2.4 [m], un diámetro de 1.2 [m] y está relleno aproximadamente hasta los 1.95 [m] por trozos de material refractario de cromo-magnesita con un diámetro promedio de 5 [cm]. Considerando los datos anteriores, es posible calcular la porosidad del sistema, que sería cercana a 38%, obteniendo un número de Reynolds promedio del orden de 4500, y con un diámetro hidráulico promedio de 2 [cm] se tendrá que la velocidad del fluido de mata fundida en contracorriente con el aire enriquecido 40% en volumen de oxígeno debe ser inferior a 10 [cm/s]. Esto, implicaría un tiempo de residencia promedio de 30 [s] y una tasa de procesamiento de mata de cobre fundida cercana a 780 [t/h] a una temperatura del reactor de alrededor de 1500[K], teniendo especial cuidado en mantener la temperatura en las zonas de inyección de aire de proceso.

La gran interrogante es saber si estos resultados serán acordes con aquellos a obtener en el proceso industrial, en donde se generan cuatro fases fundidas de mata, escoria, blíster y gas en un pseudo equilibrio que interactúan entre si y poseen propiedades independientes. Es esperable que el proceso industrial real, sea más lento que lo predicho por las simulaciones, pues la misma interacción del aire de

proceso en contracorriente ha de inducir mayores tiempos de residencia, además de desplazamiento y flotabilidad del material refractario en el interior.

Del mismo modo, es sabido que la viscosidad de las mezclas es variable según su composición, lo que influiría directamente en los resultados esperados, desviándolos en un grado indeterminado por la presencia de impurezas menores. Por otra parte, pérdidas de calor originadas por las mismas imperfecciones (no idealidad) del sistemas deben ser consideradas, por ende, es posible que en la realidad la temperatura de operación deba sobrepasar los 1500 [K] en ciertos sectores a fin de remediar la variabilidad.

Así, se espera en unas próximas etapas añadir más complejidad y realismo al modelo, analizando qué ocurre con otros elementos presentes en el sistema, como es el oxígeno, el hierro y el mismo cobre, además de mejorar el modelo a uno 3D de carácter animado en donde se aprecie la formación, dinámica de fases y su interacción al interior del reactor.

Finalmente, dado lo anterior y considerando las dificultades enfrentadas en el desarrollo del presente trabajo, queda demostrado que la nueva tecnología de conversión continua de mata de cobre o bien de metal blanco a blíster en lecho empacado resulta ser una tecnología eficiente y promisoras, pero que aún necesita ser estudiada con mayor detalle mediante pruebas experimentales a escala laboratorio y piloto con el fin de completamente la simulación predictiva y poder abordar de manera confiable el desarrollo de la tecnología y el proceso a escala industrial.

BIBLIOGRAFÍA

- [1]. Urzúa P., “Modelo físico predictivo de la fluidodinámica de lecho empacado para conversión continua de cobre”. Memoria de Ingeniería Química. Universidad de Chile. 2008.
- [2]. Díaz J., “Conversión de Mata de Cobre y Distribución de Impurezas en Lecho Empacado”, Tesis para optar al grado de Magister en Ciencias de la Ingeniería, Mención Metalurgia Extractiva, Universidad de Chile, 2012.
- [3]. Ellingham H. J. T., Reducibility of oxides and sulfides in metallurgical processes. Journal of the Society of Chemical Industry, 1944, Vol. 63, pp. 125-133.
- [4]. Bowen N.L., Schairer J.F., The system FeO–SiO₂. American Journal of Science, 1932, Vol. 24, pp. 177-213.
- [5]. Sharma S.N., Chang Y.A., A thermodynamic analysis of the copper sulfur system. Metallurgical Transactions B, 1980, Vol. 11B, pp. 575-583.
- [6]. Biswas A.K., Davenport W.G., Extractive Metallurgy of Copper. Oxford Pergamon Press, 1980. 470p.
- [7]. Davenport W.G., Partelpoeg E.H., Flash Smelting: Analysis, Control and Optimization. Oxford, Pergamon Press, 1987. 324p.
- [8]. Mitsubishi Materials Corporation. The Mitsubishi Process – Copper Smelting for the 21st Century [en línea]. <www.mmc.co.jp/sren/MI_Brochure.pdf>.
- [9]. Yazawa A., Takeda Y., Waseda Y., Thermodynamic properties and structure of ferrite slags and their process implications. Canadian Metallurgical Quarterly, 1981, Vol. 2, pp.129-134.
- [10]. Outotec Ausmelt TSL Process [en línea]. Finlandia, 2011. <http://www.outotec.com/epibrowser/Technology/2_Products%20and%20services/Copper%20technologies/low_res%20Outotec%20Ausmelt%20Brochure.pdf>.
- [11]. Warczok A., Riveros G., Vargas J., Saez R., Tapia A., “Continuous converting of copper matte in packed bed reactor”. Proceeding of The International Peirce- Smith Converting Centennial Symposium, The Minerals, Metals & Materials Society, 2009.
- [12]. Kunii, D y Levenspiel, O. "Fluidization Engineering" Ed. Butterworth-Heinemann, 2 ed., Boston, 1991.
- [13]. Wilkes, J.O. Fluid Mechanics for Chemical Engineers, Prentice Hall, 1999.
- [14]. Koo S., Sangani A., “Numerical simulation of gas – liquid flow in a fixed bed”. Department of Chemical Engineering and Material Science. Syracuse University, New York. October 2000.
- [15]. Iliuta I., Larachi F., “Modelling of the hydrodynamics of gas – liquid packed beds via slits models: A review”. International Journal of chemical reactor engineering, vol. 3, 2005.
- [16]. Mansilla F., Voisin L., “Modeling of the Reduction Stage During the Continuous Refining of Copper in a Packed Bed Reactor”, Advanced Mining Technology Center, Department of Mining Engineering University of Chile. 2012.
- [17]. Deville-Cavellin C., Cheze A., “A Heat Transfer Model for Ugitech’s Continuous Casting Machine”, 2008.
- [18]. Marín T. “Solidification of a Liquid Metal Droplet Impinging on a Cold Surface”, 2006.
- [19]. Buscaglia G., Bombardelli F., Garcia M., “Numerical modeling of large-scale bubble plumes accounting for mass transfer effects”. 2001.

- [20]. Warczok A., Riveros G., Marín T., Wastavino G., Puga C., “Kinetics of Copper Oxidation and Reduction in Packed Bed Reactors”. Proceeding of The Carlos Diaz symposium on pyrometallurgy, 2007, Vol. III, pp. 701-714.
- [21]. Fukunaka Y., Nishikawa K., Sohn H.S., Asaki Z., “Desulfurization Kinetics of Molten Copper by Gas Bubbling”, Metallurgical Transactions B, Volume 22B, February 1991.
- [22]. Schnittert S., Winz R., VON Lieres E., “Development of a 3D Model for Packed Bed Liquid Chromatography in Micro-columns”, EMS Third UKSim European Symposium on Computer Modeling and Simulation, pp 193-197, 2009.
- [23]. Moelwyn-Hughes E.A., Physical Chemistry, 2nd Edition, corrected printing, Macmill, New York, 1964.
- [24]. Wilke C.R., Chem. Eng. Prog., 45, 218-224, 1949; C. R. Wilke and P. Chang, AIChE Journal, 1, 264-270, 1955.
- [25]. Sieder F.N. and Tate G.E., Ind. Eng. Chem., 28, 1429 (1936).
- [26]. Hsu Y.Y. and Westwater J.W., A.I.Ch.E. J., 4, 59 (1958).
- [27]. Bird B., Stewart W., Lightfoot E., Transport Phenomena, 2nd Edition, Chemical Engineering Department, University of Wisconsin-Madison, 2002.
- [28]. Welty J., Wicks C., Wilson R., Rorrer G., Fundamentals of Momentum, Heat, and Mass Transfer, 5th Edition, Chemical Engineering Department, Oregon State University, 2000.
- [29]. HCS Chemistry Software. <<http://www.hsc-chemistry.net/>>.
- [30]. Bizarro M., Introducción a la Ciencia de Materiales, UNAM. <<http://www.iim.unam.mx/mbizarro/4-Empaquetamiento%202013-1.pdf>>.
- [31]. Olsson E. and Kreiss G., “A Conservative Level Set Method for Two Phase Flow,” *J. Comput. Phys.*, vol. 210, pp. 225–246, 2005.
- [32]. Harrison D.A., Yan D., Blairs S., “The Surface Tension of Liquid Copper”, The Journal of Chemical Thermodynamics, Volume 9, Issue 12, pp. 1111-1119, December 1977.
- [33]. Convective Heat Transfer, The Engineering Tool Box, web page: <http://www.engineeringtoolbox.com/convective-heat-transfer-d_430.html>.
- [34]. Riveros G., Warczok A., Voisin L., Díaz J. “Continuous converting of copper matte in packed bed reactor”. Laboratorio de Pirometalurgia, Universidad de Chile. 2010.
- [35]. Davenport W.G., King M., Schlesinger M., Biswas A.K., Extractive Metallurgy of Copper, 4th Edition, Elsevier Science Ltd, 2002.
- [36]. Nield D. and Bejan A., *Convection in Porous Media*, 3rd ed., Springer, 2006.
- [37]. Le Bars M. and Worster M.G., “Interfacial Conditions Between a Pure Fluid and a Porous Medium: Implications for Binary Alloy Solidification,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 550, pp. 149–173, 2006.

ANEXO A: Detalles de cálculo y modelo JP

Detalle de las propiedades físicas de los fluidos en *COMSOL Multiphysics*

Cobre líquido

$$\rho \left[\frac{kg}{m^3} \right] = 8938.719 - 0.7367 \cdot T$$

$$\mu [Pa \cdot s] = 0.02795433 - 2.813626 \times 10^{-5} \cdot T + 7.916142 \times 10^{-9} \cdot T^2$$

$$C_p \left[\frac{J}{kgK} \right] = 516.1615$$

$$k \left[\frac{W}{mK} \right] = 45.32857 + 0.1504997 \cdot T - 5.704651 \times 10^{-5} \cdot T^2 + 9.576806 \times 10^{-9} \cdot T^3 \\ - 8.501398 \times 10^{-13} \cdot T^4 + 3.056993 \times 10^{-17} \cdot T^5$$

Aire

$$\rho \left[\frac{kg}{m^3} \right] = \frac{\partial}{\partial p} \left(\frac{0.02897 \cdot p}{8.314 \cdot T} \right) + \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{0.02897 \cdot p}{8.314 \cdot T} \right)$$

$$\mu [Pa \cdot s] = -8.38278 \times 10^{-7} + 8.35717342 \times 10^{-8} \cdot T - 7.69429583 \times 10^{-11} \cdot T^2 \\ + 4.6437266 \times 10^{-14} \cdot T^3 - 1.06585607 \times 10^{-17} \cdot T^4$$

$$C_p \left[\frac{J}{kgK} \right] = 1047.63657 - 0.372589265 \cdot T + 9.45304214 \times 10^{-4} \cdot T^2 - 6.02409443 \times 10^{-7} \cdot T^3 \\ + 1.2858961 \times 10^{-10} \cdot T^4$$

$$k \left[\frac{W}{mK} \right] = -0.00227583562 + 1.15480022 \times 10^{-4} \cdot T - 7.90252856 \times 10^{-8} \cdot T^2 \\ + 4.11702505 \times 10^{-11} \cdot T^3 - 7.43864331 \times 10^{-15} \cdot T^4$$

Detalle de las condiciones iniciales de cada simulación

Tabla 8: Detalle de cálculo de las distintas simulaciones realizadas

Modelo	Dimensión y Estado	Porosidad [%]	A/P o V/A [m]	Altura de Lecho [m]	Velocidad Inicial Cobre [m/s]	Velocidad Inicial Aire [m/s]	Temperatura		Concentración Inicial S		Entalpía Reacción Total [W]
							Inicial Cobre [K]	Inicial Aire [K]	Cobre [mol/m ³]	S Aire [mol/m ³]	
J1 WC 21% O	2D Estacionario	15.1	0.0011	0.1	0.08	-	1473.15	-	49375	-	-
J1 WC 30% O	2D Estacionario	15.1	0.0011	0.1	0.08	-	1473.15	-	49375	-	-
J1 WC 40% O	2D Estacionario	15.1	0.0011	0.1	0.08	-	1473.15	-	49375	-	-
J1 NE 21% O	2D Estacionario	15.1	0.0011	0.1	0.08	-	1473.15	-	49375	-	-
J1 NE 30% O	2D Estacionario	15.1	0.0011	0.1	0.08	-	1473.15	-	49375	-	-
J1 NE 40% O	2D Estacionario	15.1	0.0011	0.1	0.08	-	1473.15	-	49375	-	-
J2 WC 21% O	2D Estacionario	41.9	0.0104	0.47	0.05	-	1473.15	-	49375	-	-
J2 WC 30% O	2D Estacionario	41.9	0.0104	0.47	0.05	-	1473.15	-	49375	-	-
J2 WC 40% O	2D Estacionario	41.9	0.0104	0.47	0.05	-	1473.15	-	49375	-	-
J2 NE 21% O	2D Estacionario	41.9	0.0104	0.47	0.05	-	1473.15	-	49375	-	-
J2 NE 30% O	2D Estacionario	41.9	0.0104	0.47	0.05	-	1473.15	-	49375	-	-
J2 NE 40% O	2D Estacionario	41.9	0.0104	0.47	0.05	-	1473.15	-	49375	-	-
J1 NE 40% O	2D Estacionario	100	0.05	0.1	0.15	-	1473.15	-	49375	-	-21.57
J1 NE 40% O	2D Estacionario	90	0.0401	0.1	0.15	-	1473.15	-	49375	-	-19.41
J1 NE 40% O	2D Estacionario	80	0.0252	0.1	0.15	-	1473.15	-	49375	-	-17.26
J1 NE 40% O	2D Estacionario	70	0.01803	0.1	0.15	-	1473.15	-	49375	-	-15.1
J1 NE 40% O	2D Estacionario	60	0.0133	0.1	0.15	-	1473.15	-	49375	-	-12.94
J1 NE 40% O	2D Estacionario	50	0.0099	0.1	0.15	-	1473.15	-	49375	-	-10.78
J1 NE 40% O	2D Estacionario	40	0.0065	0.1	0.15	-	1473.15	-	49375	-	-8.63
J1 NE 40% O	2D Estacionario	30	0.0033	0.1	0.15	-	1473.15	-	49375	-	-6.47
J1 NE 40% O	2D Estacionario	20	0.0016	0.1	0.15	-	1473.15	-	49375	-	-4.31
J1 NE 40% O	2D Estacionario	15	0.00103	0.1	0.15	-	1473.15	-	49375	-	-3.23
J2 NE 40% O	2D Estacionario	50	0.0214	0.47	0.62	-	1473.15	-	49375	-	-3.37
J2 NE 40% O	2D Estacionario	40	0.0126	0.47	0.62	-	1473.15	-	49375	-	-2.74
J2 NE 40% O	2D Estacionario	30	0.0071	0.47	0.62	-	1473.15	-	49375	-	-2.02
J2 NE 40% O	2D Estacionario	20	0.0037	0.47	0.62	-	1473.15	-	49375	-	-1.35
J2 NE 40% O	2D Estacionario	15.6	0.0025	0.47	0.62	-	1473.15	-	49375	-	-1.05
J2 NE 40% O	2D Estacionario	15.6	0.0025	0.47	0.62	-	1473.15	-	49375	-	-1.05
J2 NE 40% O	2D Estacionario	15.6	0.0025	0.47	0	-	1473.15	-	49375	-	-1.05
J2 NE 40% O	2D Estacionario	15.6	0.0025	0.47	0.3	-	1473.15	-	49375	-	-1.05
J2 NE 40% O	2D Estacionario	15.6	0.0025	0.47	0.15	-	1473.15	-	49375	-	-1.05
J2 NE 40% O	2D Estacionario	15.6	0.0025	0.47	0.07	-	1473.15	-	49375	-	-1.05
J2 NE 40% O	2D Estacionario	15.6	0.0025	0.47	0.03	-	1473.15	-	49375	-	-1.05
J2 NE 40% O	2D Estacionario	15.6	0.0025	0.47	0.015	-	1473.15	-	49375	-	-1.05

Modelo	Dimensión y Estado	Porosidad [%]	A/P o V/A [m]	Altura de Lecho [m]	Velocidad Inicial Cobre [m/s]	Velocidad Inicial Aire [m/s]	Temperatura Inicial Cobre [K]	Temperatura Inicial Aire [K]	Concentración Inicial S Cobre [mol/m ³]	Concentración Inicial S Aire [mol/m ³]	Entalpía Reacción Total [W]
J2 NE 40% O	2D Estacionario	15.6	0.0025	0.47	0.005	-	1473.15	-	49375	-	-1.05
J2 NE 40% O	2D Estacionario	20	0.0038	0.47	0.0075	-	1473.15	-	49375	-	-1.35
J2 NE 40% O	2D Estacionario	30	0.0071	0.47	0.009	-	1473.15	-	49375	-	-2.02
J2 NE 40% O	2D Estacionario	40	0.0126	0.47	0.012	-	1473.15	-	49375	-	-2.74
J2 NE 40% O	2D Estacionario	50	0.0214	0.47	0.019	-	1473.15	-	49375	-	-3.37
J3 NE 40% O	2D Estacionario	41	0.0129	1.95	0.05	-	1473.15	-	49375	-	-10.97
J3 NE 40% O	2D Estacionario	41	0.0315	1	0.03	-	1473.15	-	49375	-	-5.54
J3 NE 40% O	2D Estacionario	41	0.0853	0.24	0.045	-	1473.15	-	49375	-	-1.39
J3 NE 40% O	2D Estacionario	31	0.00628	1.97	0.025	-	1473.15	-	49375	-	-8.4
J3 NE 40% O	2D Estacionario	31	0.0203	0.98	0.025	-	1473.15	-	49375	-	-4.13
J3 NE 40% O	2D Estacionario	31	0.0223	0.25	0.02	-	1473.15	-	49375	-	-1.1
J3D NE 40% O	3D Estacionario	39	0.00548	0.132	0.001	-	1473.15	-	49375	-	-164.75
CS NE 40% O	3D Transiente	47.6	0.0076	0.1	0	0.02	1473.15	298.15	49375	0	-4.45
BCC NE 40% O	3D Transiente	45.3	0.0069	0.1077	0	0.02	1473.15	298.15	49375	0	-4.45
FCC NE 40% O	3D Transiente	56.6	0.0109	0.1207	0	0.02	1473.15	298.15	49375	0	-4.45
HCP NE 40% O	3D Transiente	42.6	0.006	0.132	0	0.02	1473.15	298.15	49375	0	-4.45
2D NE 40% O	2D Transiente	42.8	0.0092	0.1	0	0.02	1473.15	298.15	49375	0	-4.45
2D NE 40% O	2D Transiente	42.8	0.0092	0.1	0	0	1473.15	298.15	49375	0	-4.45
2D NE 40% O	2D Transiente	42.8	0.0092	0.1	0	0.01	1473.15	298.15	49375	0	-4.45
2D NE 40% O	2D Transiente	42.8	0.0092	0.1	0	0.03	1473.15	298.15	49375	0	-4.45
2D NE 40% O	2D Transiente	42.8	0.0092	0.1	0	0.04	1473.15	298.15	49375	0	-4.45
2D NE 40% O	2D Transiente	42.8	0.0092	0.1	0	0.05	1473.15	298.15	49375	0	-4.45

Modelo JP: Simulación por flujo en medios porosos

Al mismo tiempo que las simulaciones mostradas, se realizó una simulación mediante flujo en medios porosos con el fin de averiguar si este método entregaría resultados similares a los de los modelos J1, J2 o J3 con un gasto computacional y en tiempo considerablemente menor.

Las ecuaciones que describen este modelo en general son las mismas enunciadas para los modelos J1, J2 y J3, con la excepción de que el movimiento del fluido esta descrito por las ecuaciones de *Navier-Stokes – Brinkman* ^[23, 24]:

$$\frac{\rho}{\varepsilon} \left(\frac{\partial u}{\partial t} + (u \cdot \nabla) \frac{u}{\varepsilon} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \left(\frac{1}{\varepsilon} \left[\mu(\nabla u + (\nabla u)^T) - \frac{2}{3} \mu(\nabla \cdot u)I \right] \right) - \left(\frac{\mu}{k} + Q \right) u + F \quad (\text{Ec. 7.1})$$

$$\frac{\partial(\varepsilon\rho)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u) = Q \quad (\text{Ec. 7.2})$$

Donde ε es la porosidad del sistema, k la permeabilidad y Q el flujo másico de éste.

Se asumió una porosidad idéntica a la calculada para sus respectivos modelos homólogos y una permeabilidad de roca muy fracturada, es decir, del orden de los 0.001 [cm²].

Los resultados de la simulación muestran una diferencia considerable para la concentración de azufre en el sistema (variable más importante) entre los modelos con una geometría dada (J1, J2) y en donde se asume un medio con una geometría equivalente por medio de la porosidad y la permeabilidad (gráficos X e Y), por lo tanto, el modelamiento mediante estas ecuaciones fue descartado.

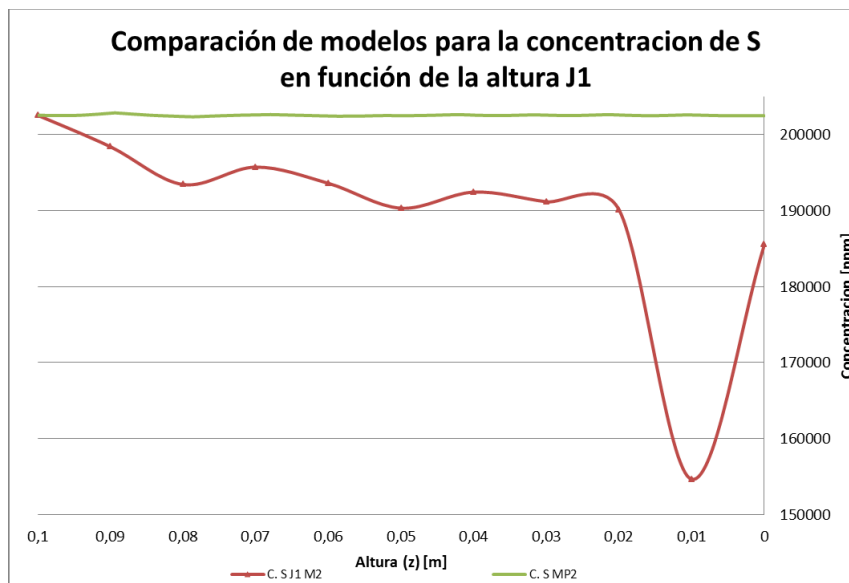


Gráfico 57: Comparación de modelos para la concentración de azufre en función de la altura - En verde medios porosos y en rojo mediante geometría establecida – Modelo J1

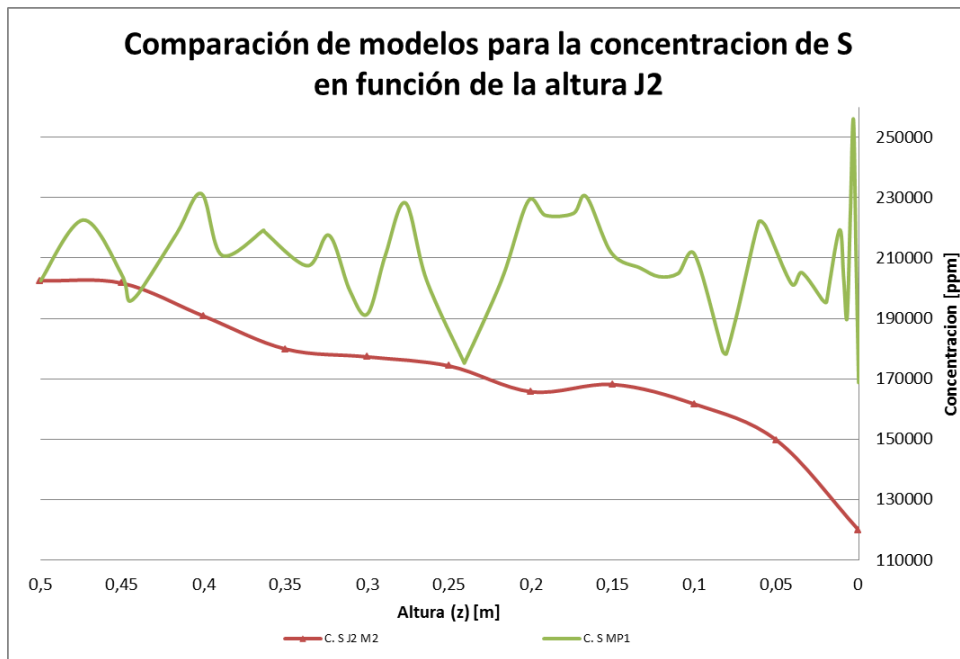


Gráfico 58: Comparación de modelos para la concentración de azufre en función de la altura - En verde medios porosos y en rojo mediante geometría establecida – Modelo J2

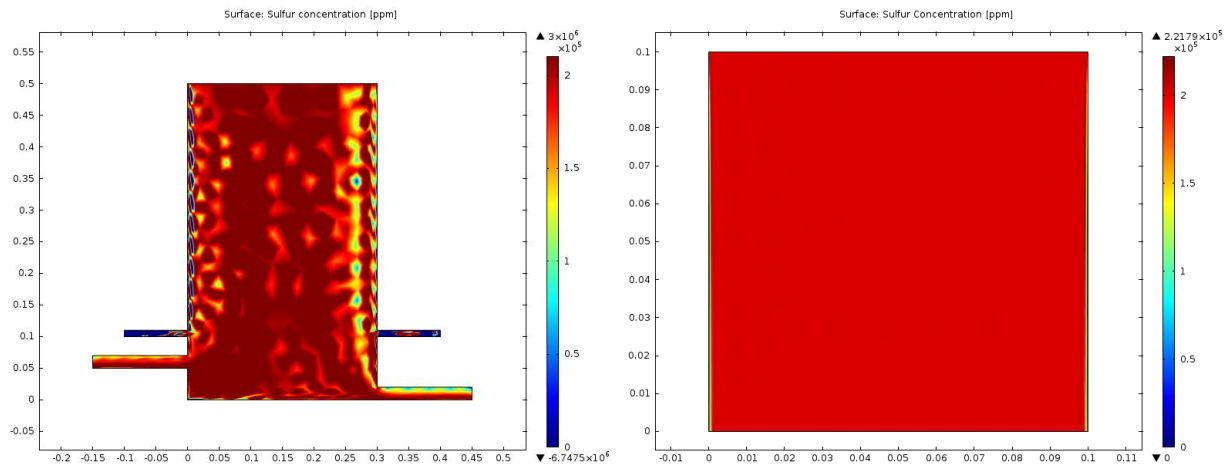


Figura 56: Perfiles de concentración de azufre mediante medios porosos - Modelo J1 (derecha) y modelo J2 (izquierda)

ANEXO B: Detalles de resultados de simulación en *COMSOL Multiphysics*

Modelo J1: Efecto de oxígeno inyectado y modelo de difusividad

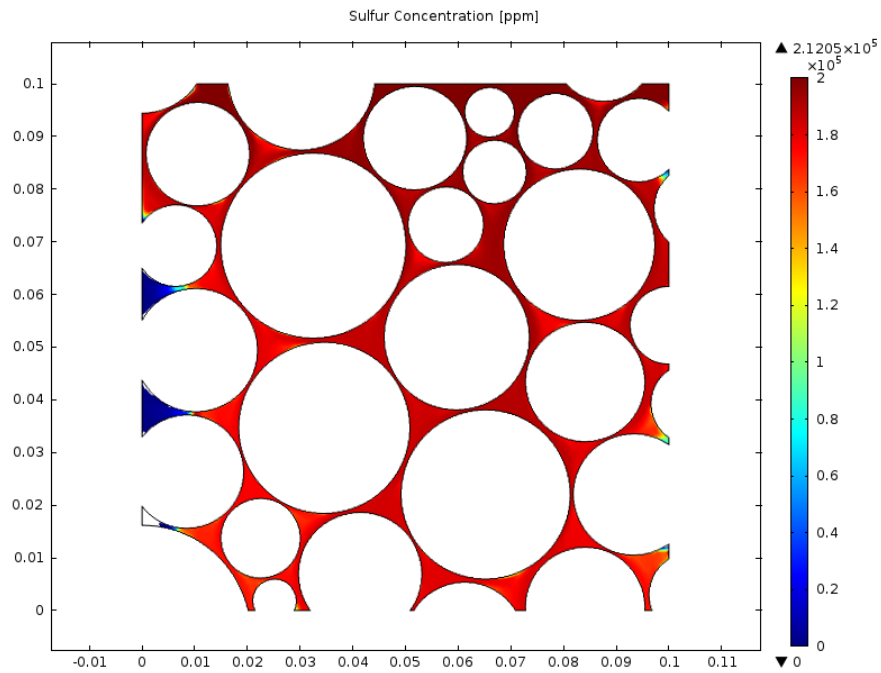


Figura 57: Perfil de concentración de azufre del Modelo J1 para una concentración de oxígeno de 21% y modelo de difusividad de Wilke-Chang

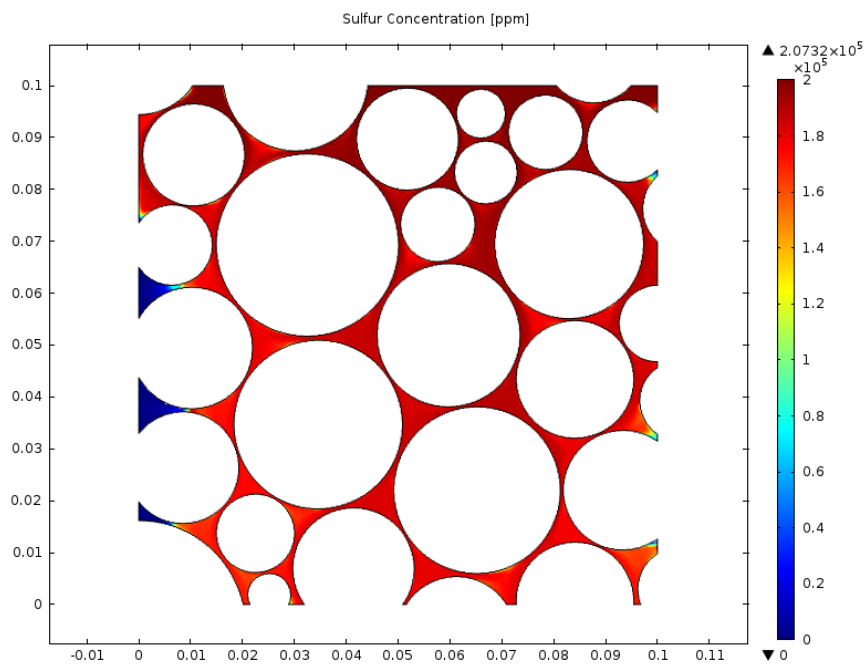


Figura 58: Perfil de concentración de azufre del Modelo J1 para una concentración de oxígeno de 30% y modelo de difusividad de Wilke-Chang

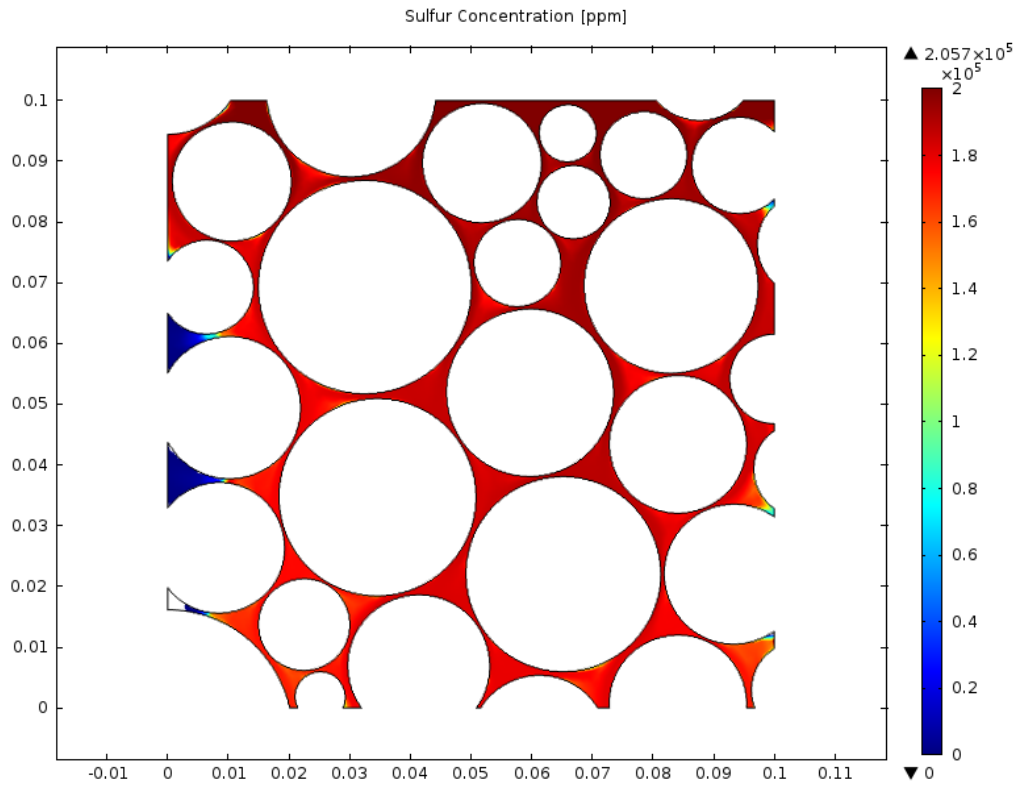


Figura 59: Perfil de concentración de azufre del Modelo J1 para una concentración de oxígeno de 40% y modelo de difusividad de Wilke-Chang

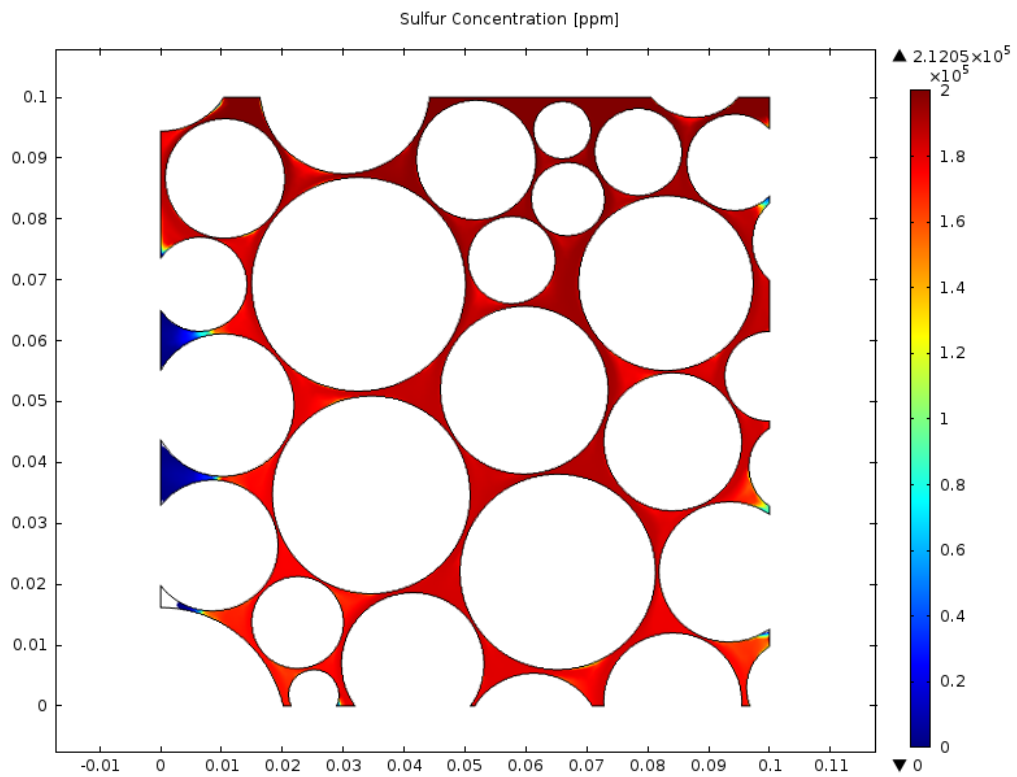


Figura 60: Perfil de concentración de azufre del Modelo J1 para una concentración de oxígeno de 21% y modelo de difusividad de Nernst-Einstein

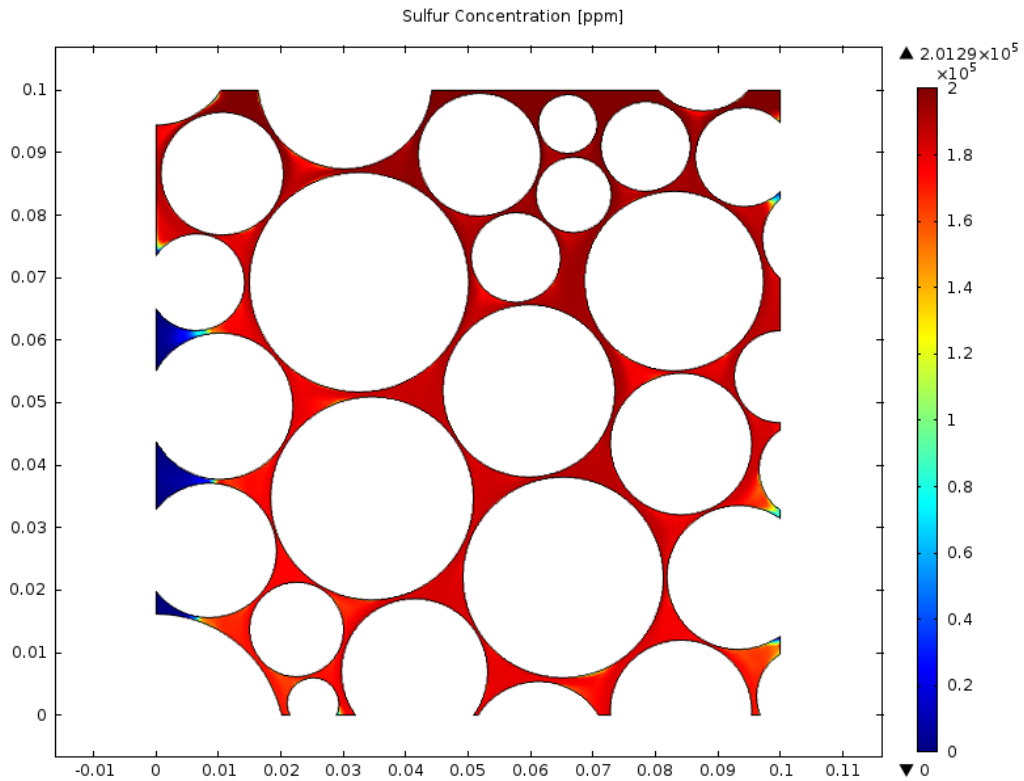


Figura 61: Perfil de concentración de azufre del Modelo J1 para una concentración de oxígeno de 30% y modelo de difusividad de Nernst-Einstein

Modelo J2: Efecto de oxígeno inyectado y modelo de difusividad

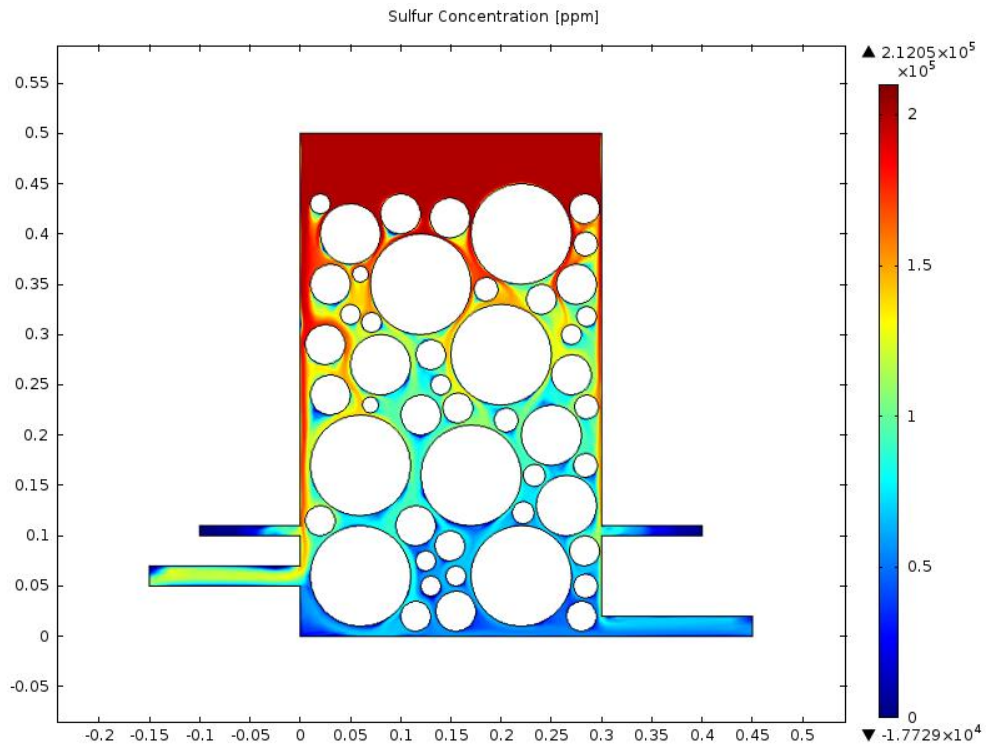


Figura 62: Perfil de concentración de azufre del Modelo J2 para una concentración de oxígeno de 21% y modelo de difusividad de Wilke-Chang

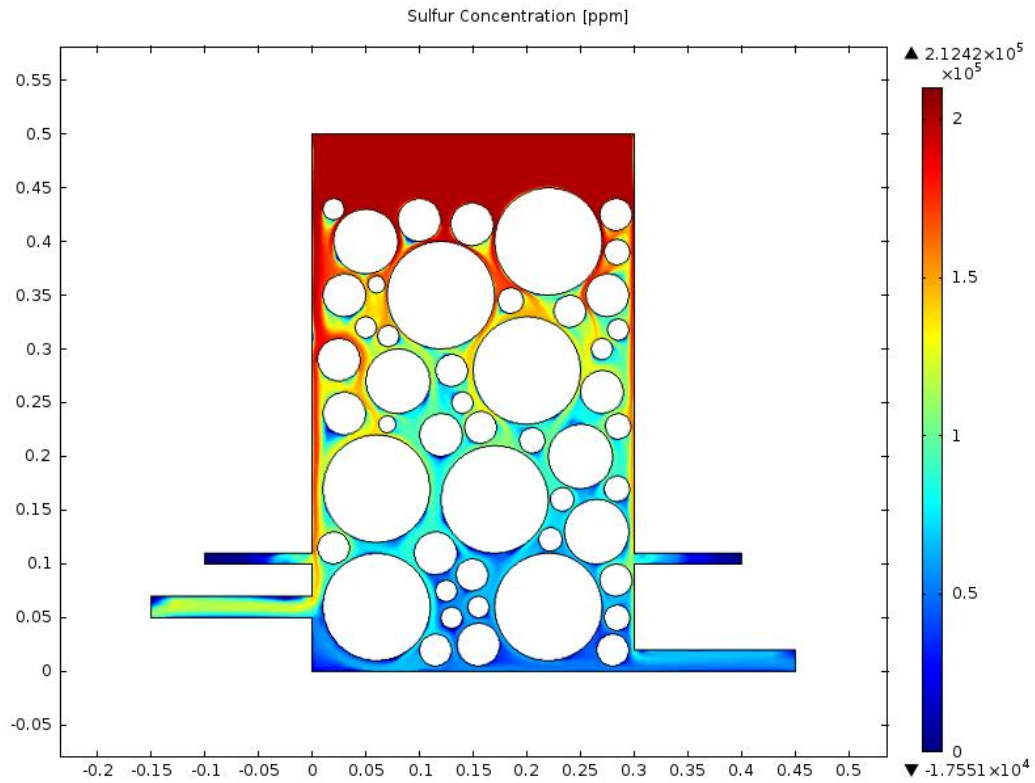


Figura 63: Perfil de concentración de azufre del Modelo J2 para una concentración de oxígeno de 30% y modelo de difusividad de Wilke-Chang

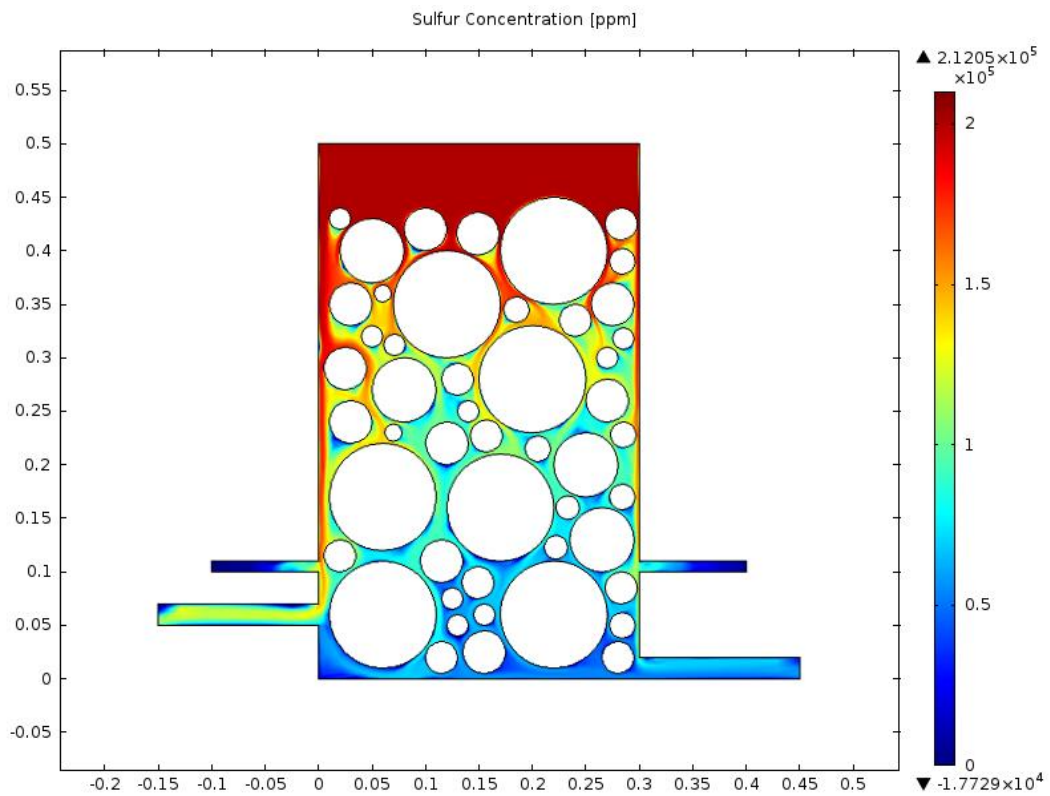


Figura 64: Perfil de concentración de azufre del Modelo J2 para una concentración de oxígeno de 21% y modelo de difusividad de Nernst-Einstein

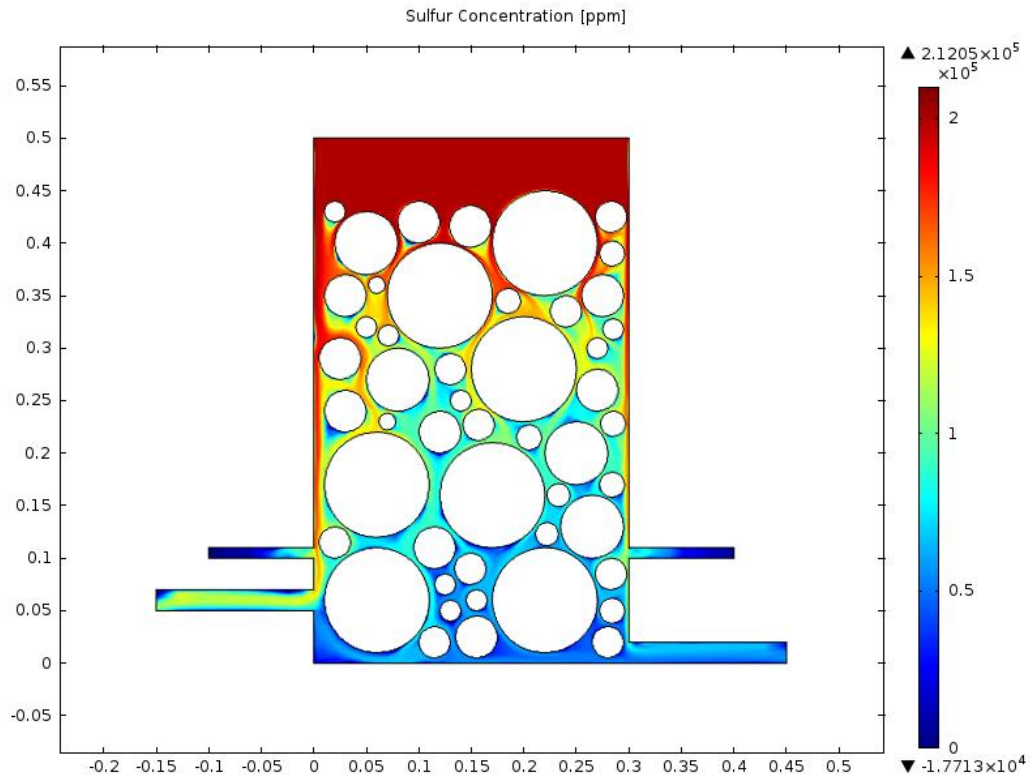


Figura 65: Perfil de concentración de azufre del Modelo J2 para una concentración de oxígeno de 30% y modelo de difusividad de Nernst-Einstein

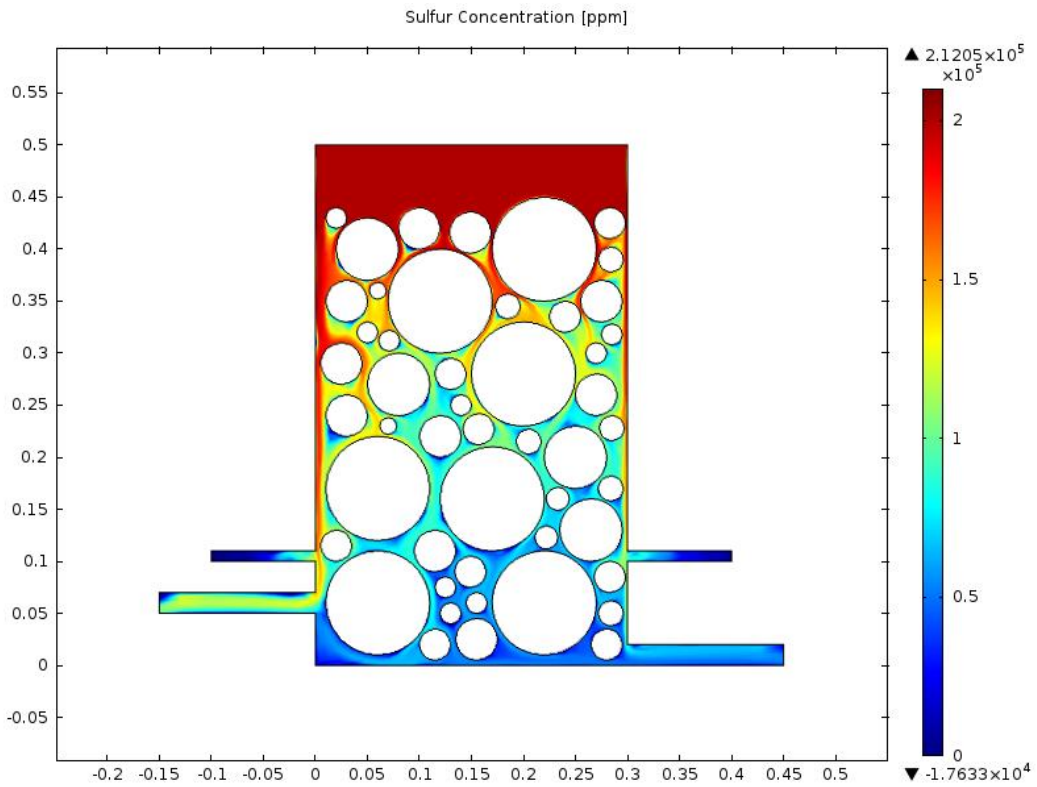


Figura 66: Perfil de concentración de azufre del Modelo J2 para una concentración de oxígeno de 40% y modelo de difusividad de Nernst-Einstein

Modelo J1: Efecto de la porosidad y área de mata versus perímetro de reacción

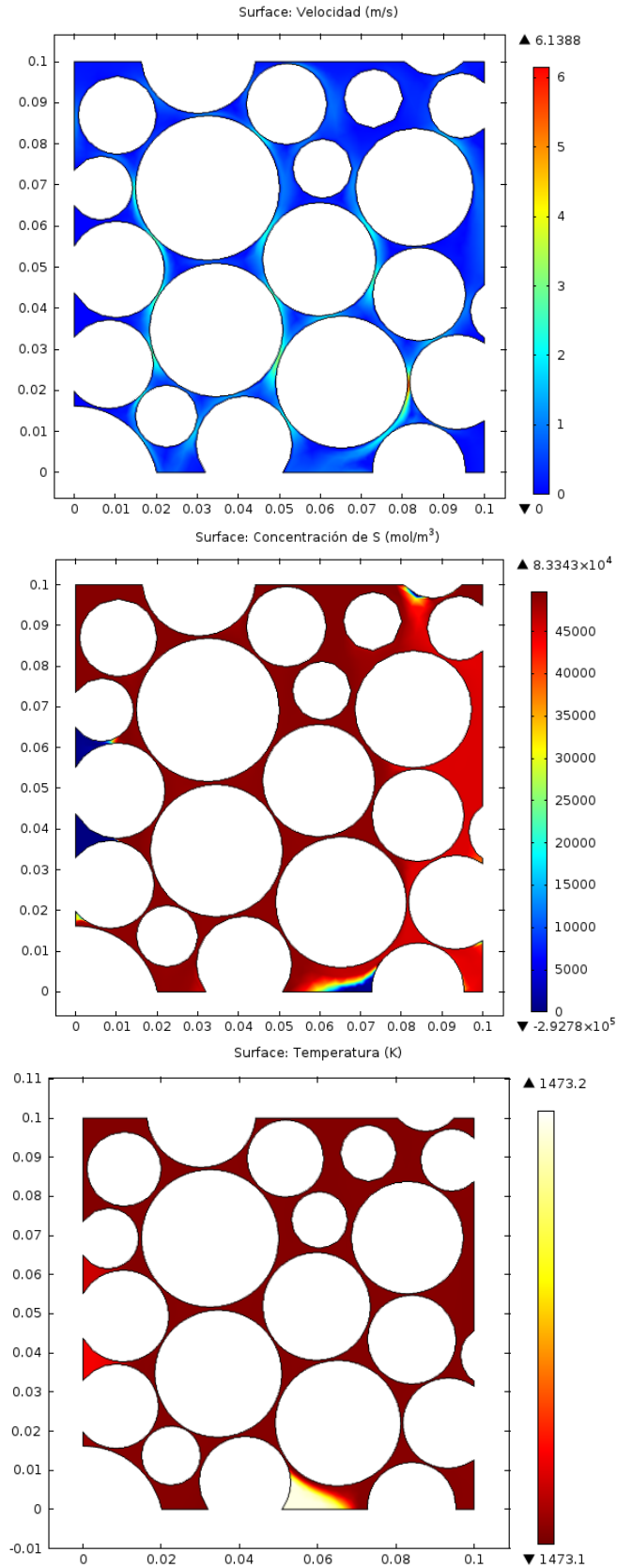


Figura 67: Perfiles de velocidad, concentración de azufre y temperatura para una porosidad de 20% Modelo J1

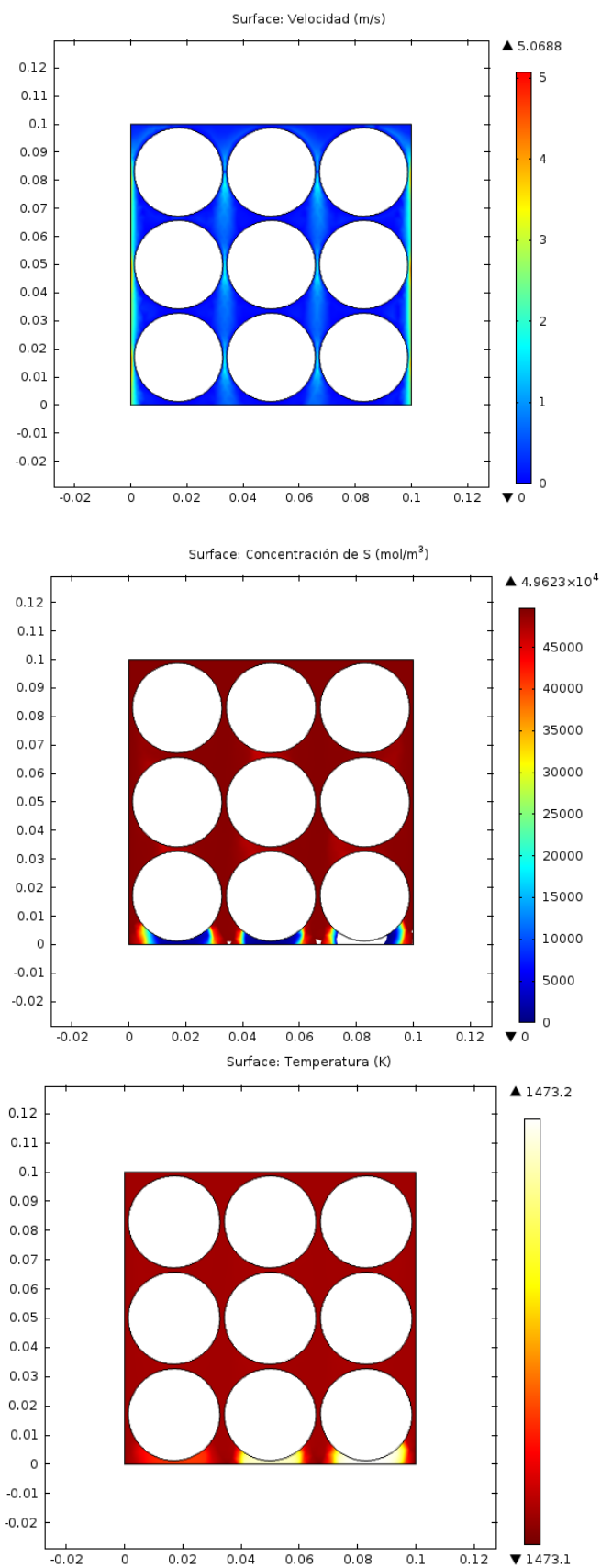


Figura 68: Perfiles de velocidad, concentración de azufre y temperatura para una porosidad de 30% Modelo J1

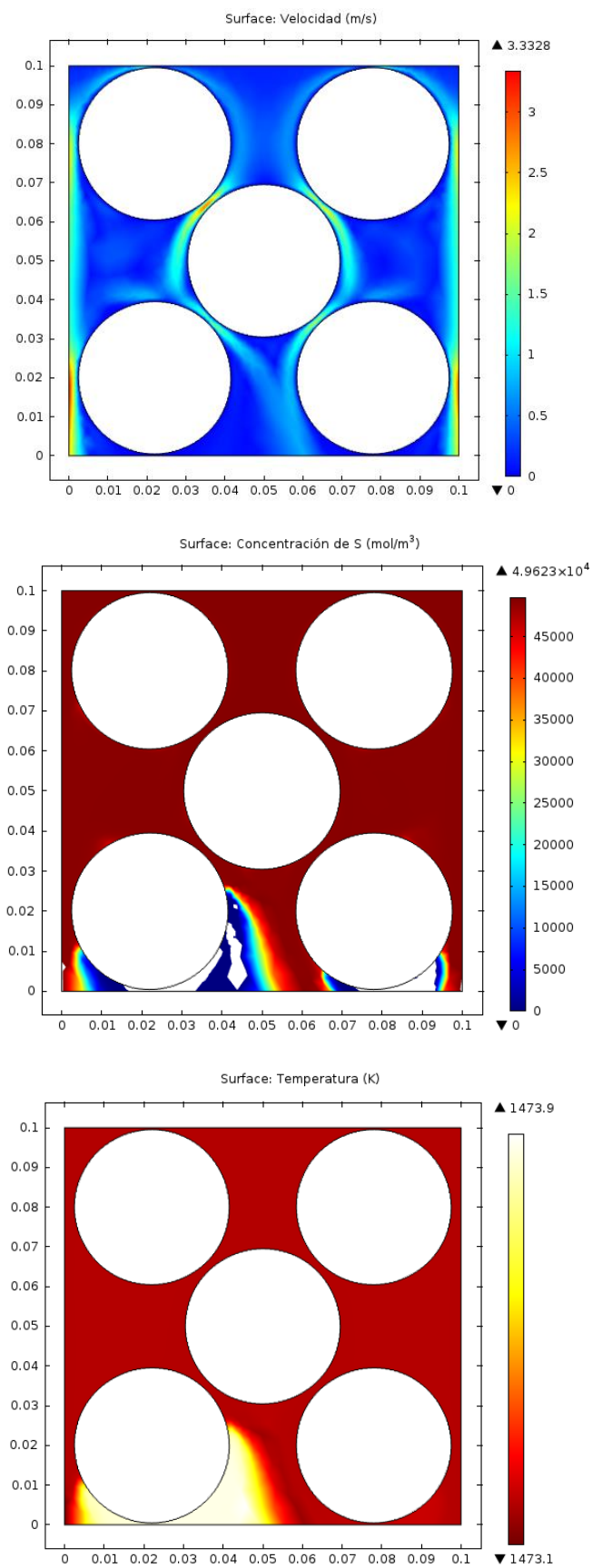


Figura 69: Perfiles de velocidad, concentración de azufre y temperatura para una porosidad de 40% Modelo J1

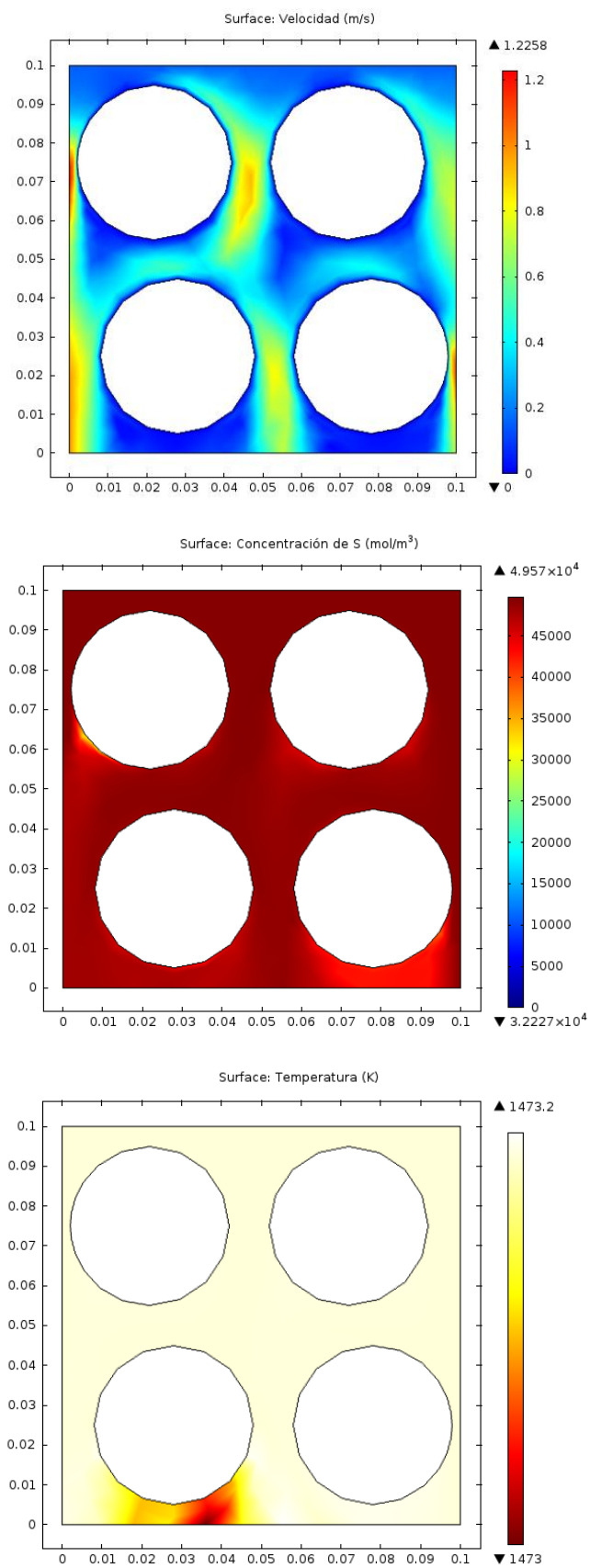


Figura 70: Perfiles de velocidad, concentración de azufre y temperatura para una porosidad de 50% Modelo J1

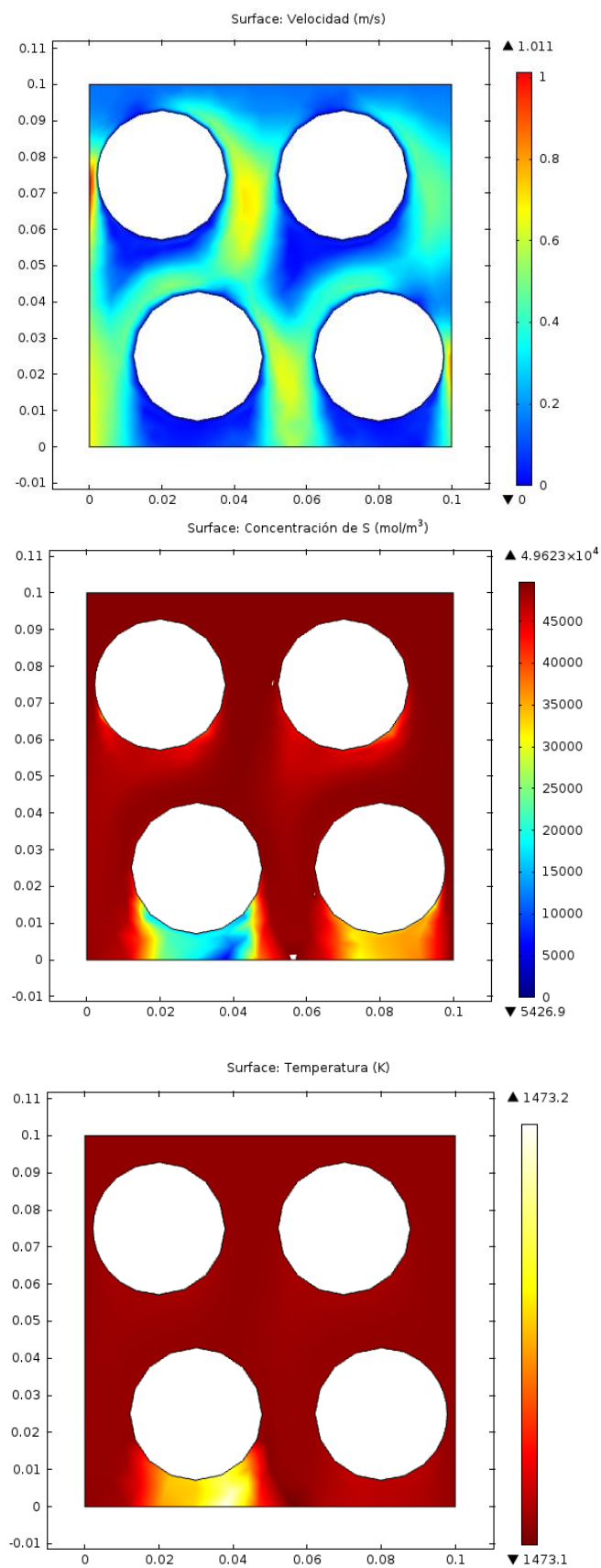


Figura 71: Perfiles de velocidad, concentración de azufre y temperatura para una porosidad de 60% Modelo J1

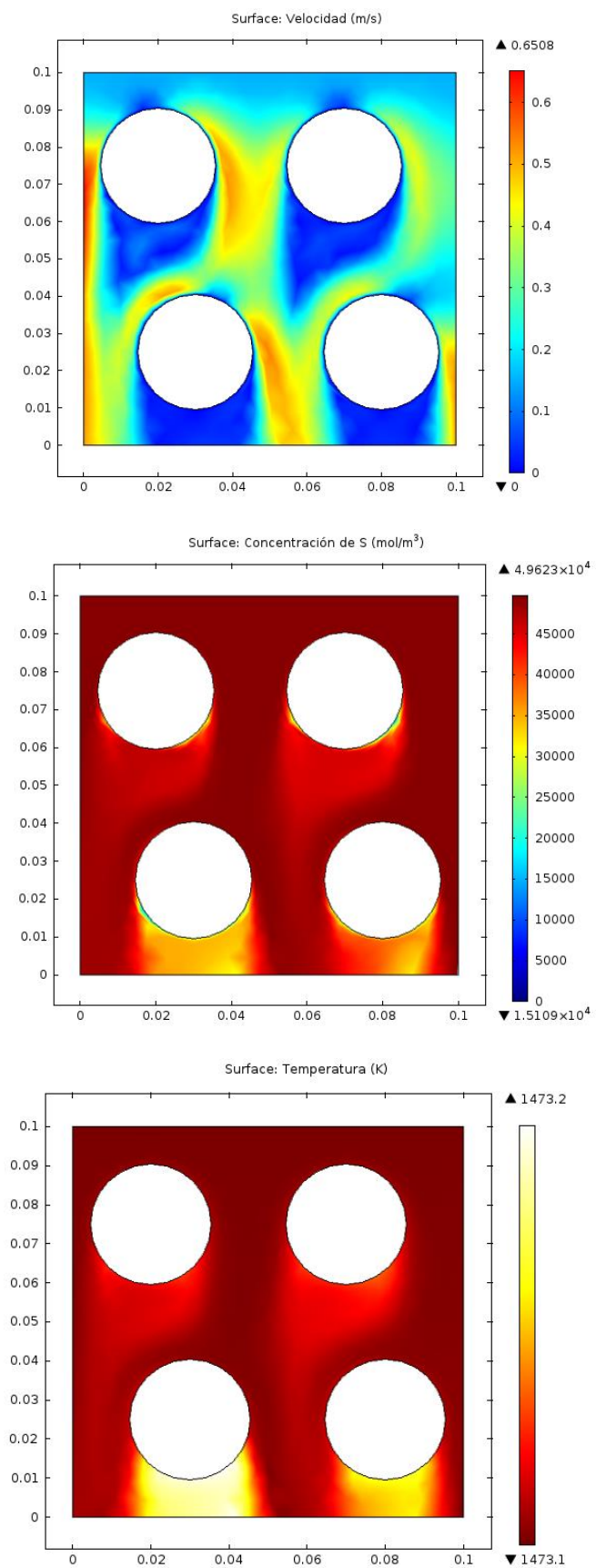


Figura 72: Perfiles de velocidad, concentración de azufre y temperatura para una porosidad de 70% Modelo J1

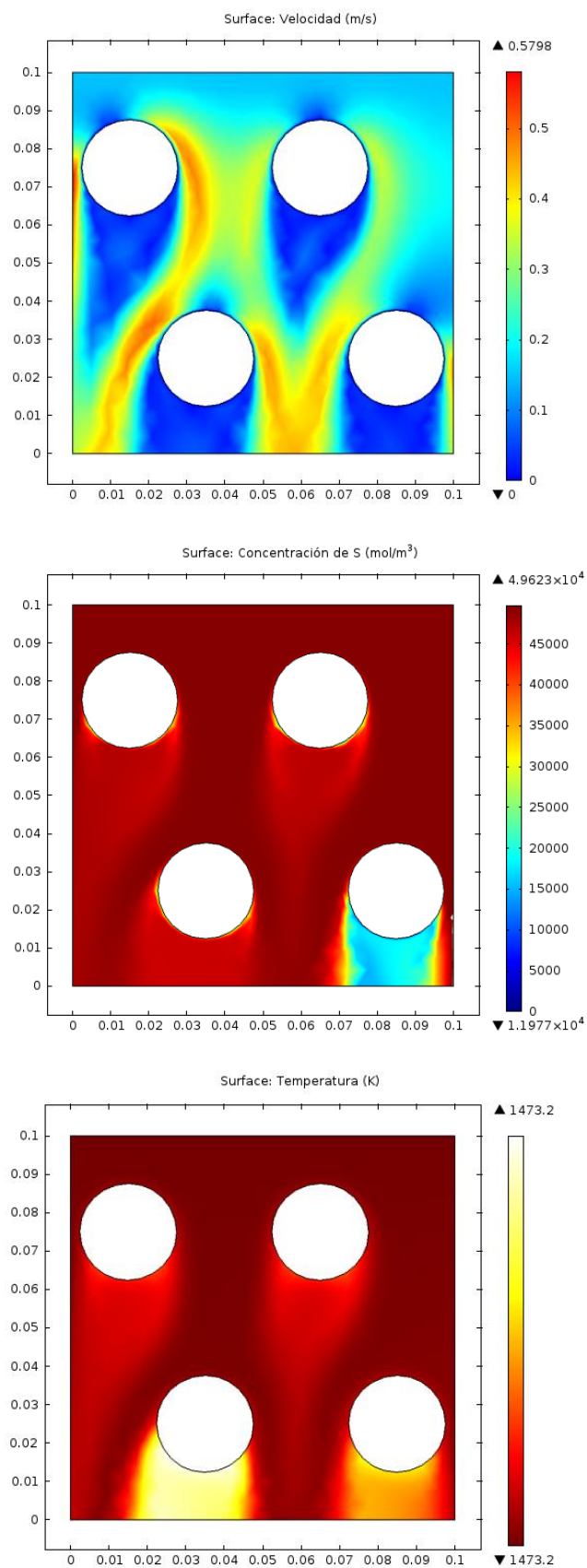


Figura 73: Perfiles de velocidad, concentración de azufre y temperatura para una porosidad de 80% Modelo J1

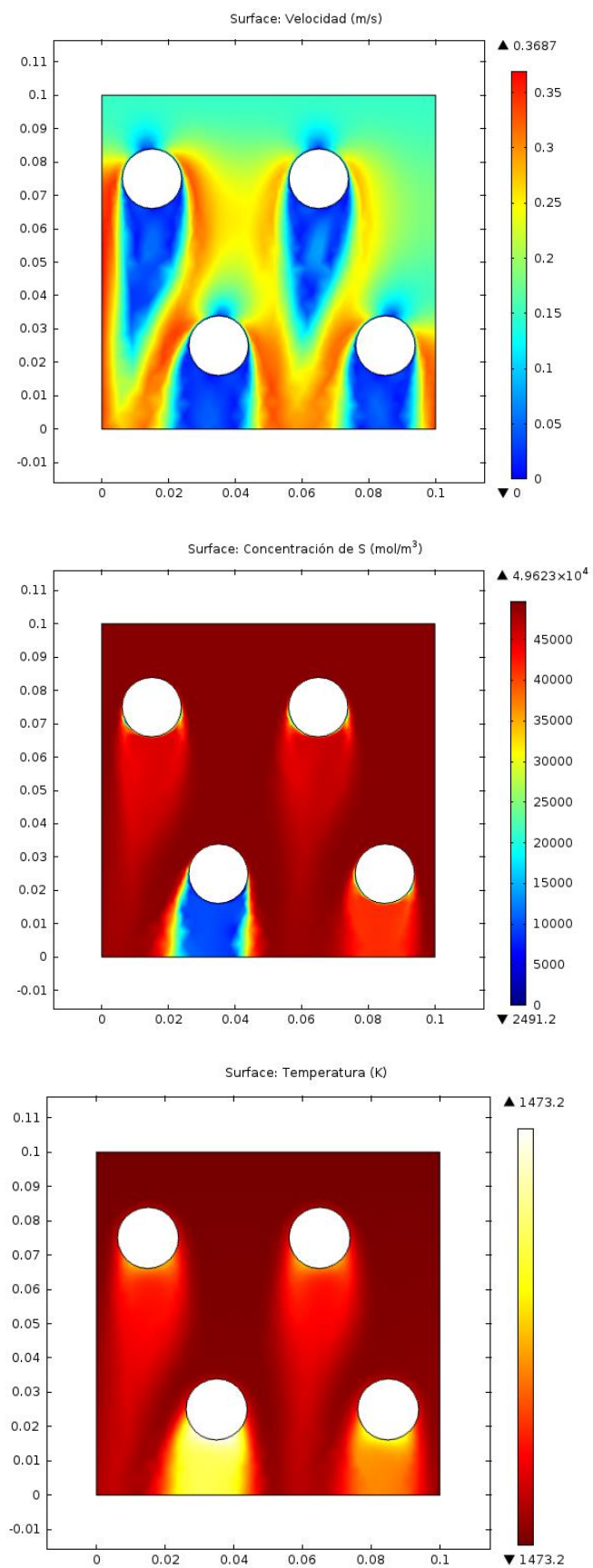


Figura 74: Perfiles de velocidad, concentración de azufre y temperatura para una porosidad de 90% Modelo J1

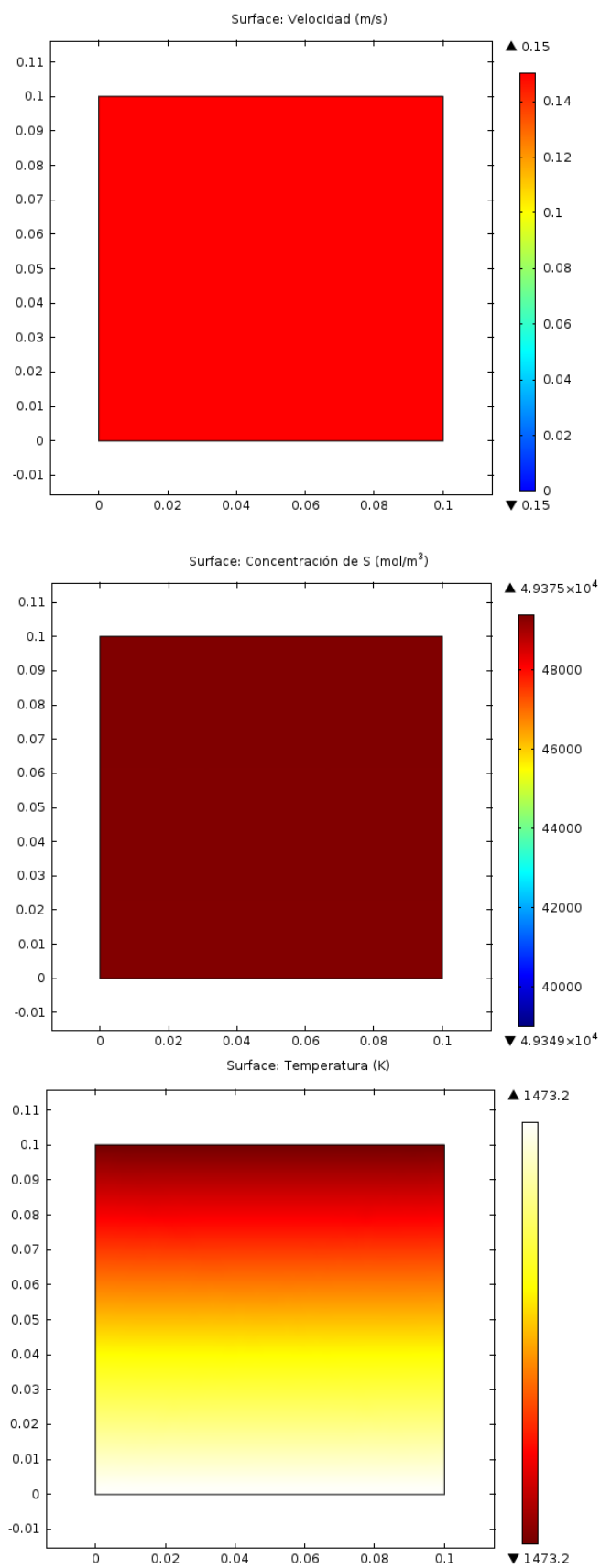


Figura 75: Perfiles de velocidad, concentración de azufre y temperatura para una porosidad de 100% Modelo J1

Modelo J2: Efecto de la porosidad y área de mata versus perímetro de reacción

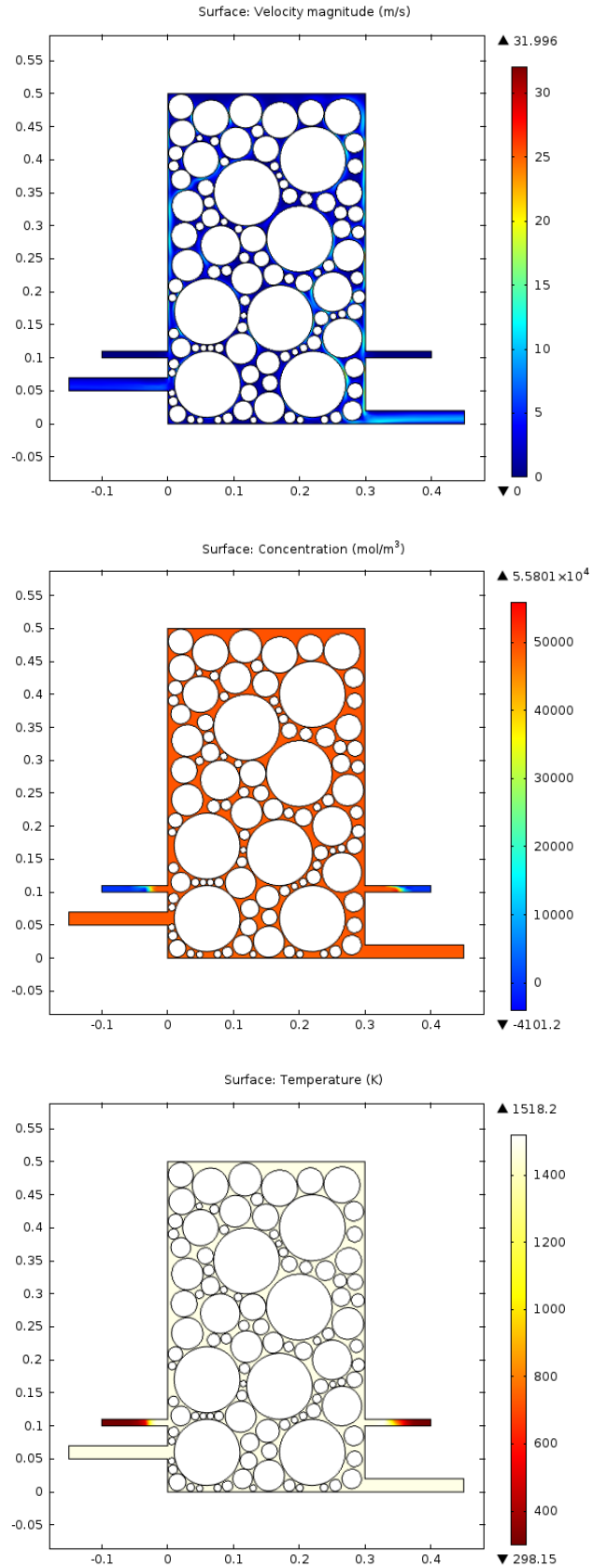


Figura 76: Perfiles de velocidad, concentración de azufre y temperatura para una porosidad de 20% Modelo J2

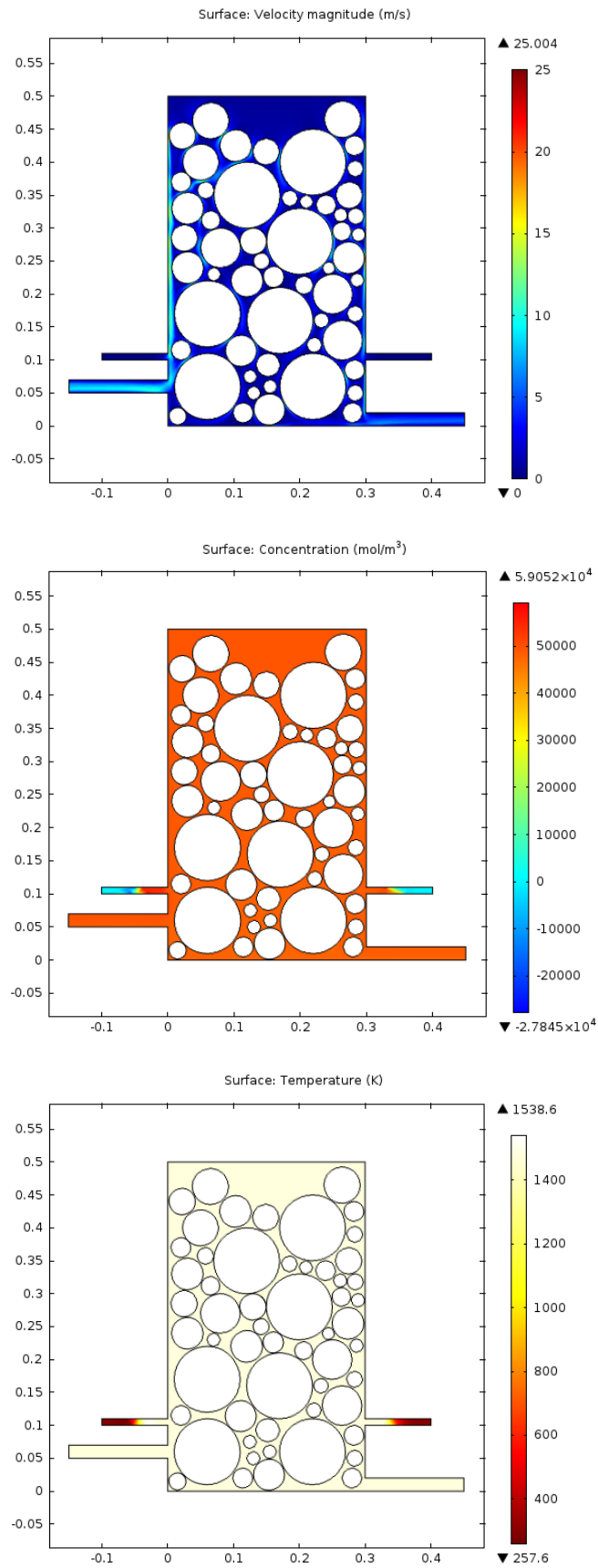


Figura 77: Perfiles de velocidad, concentración de azufre y temperatura para una porosidad de 30% Modelo J2

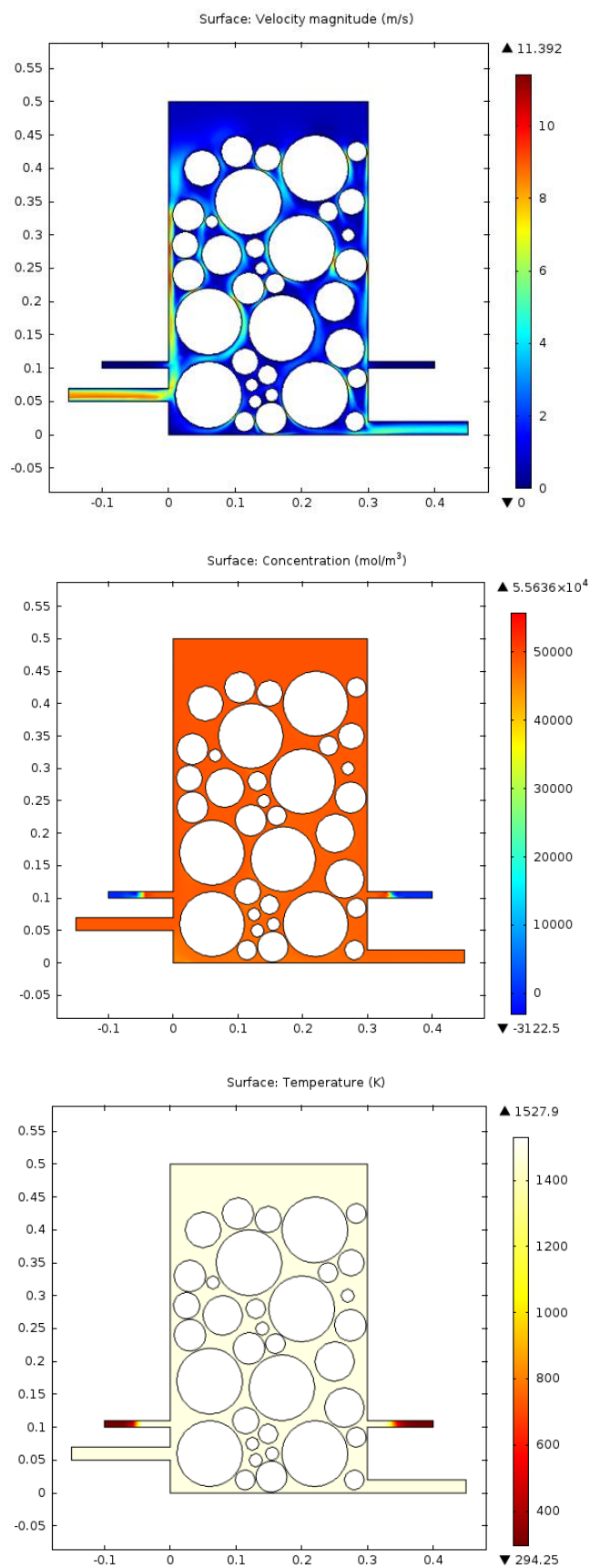


Figura 78: Perfiles de velocidad, concentración de azufre y temperatura para una porosidad de 40% Modelo J2

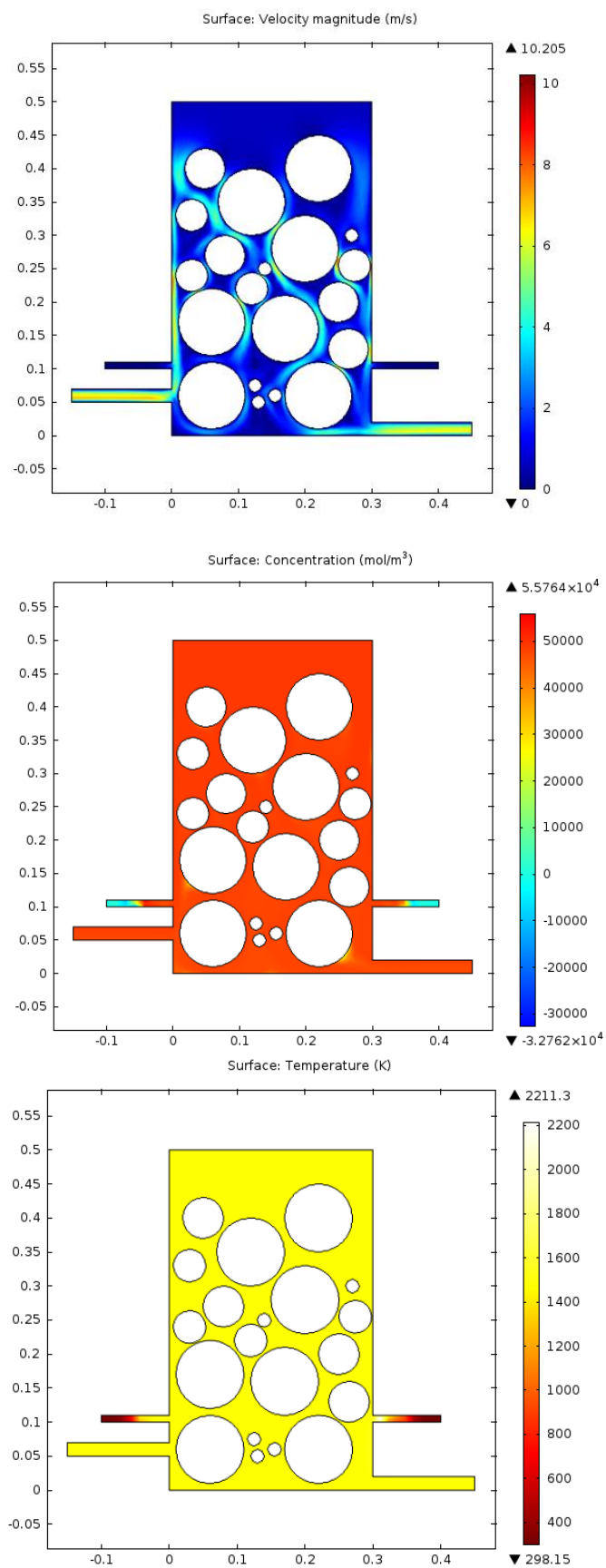


Figura 79: Perfiles de velocidad, concentración de azufre y temperatura para una porosidad de 50% Modelo J2

Modelo J2: Efecto de la velocidad inicial

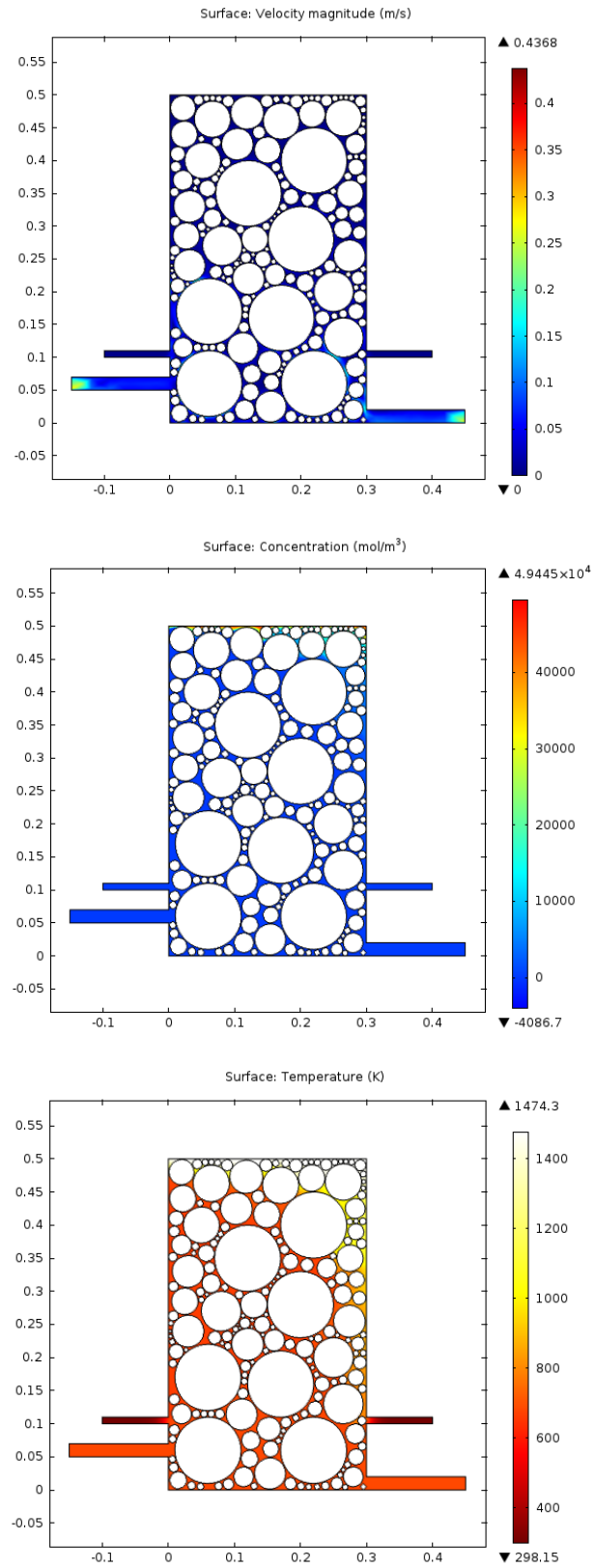


Figura 80: Perfiles de velocidad, concentración de azufre y temperatura Modelo J2 para una porosidad del 15% y velocidad inicial 0 [m/s]

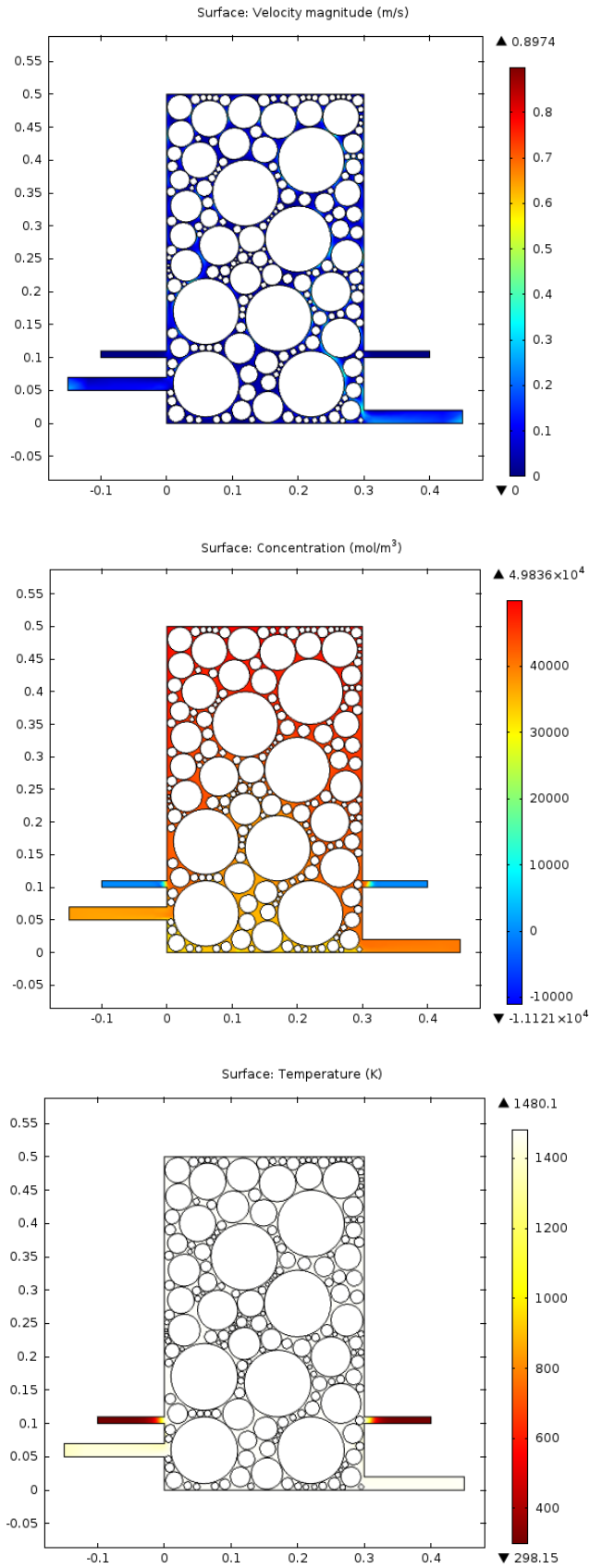


Figura 81: Perfiles de velocidad, concentración de azufre y temperatura Modelo J2 para una porosidad del 15% y velocidad inicial 0.015 [m/s]

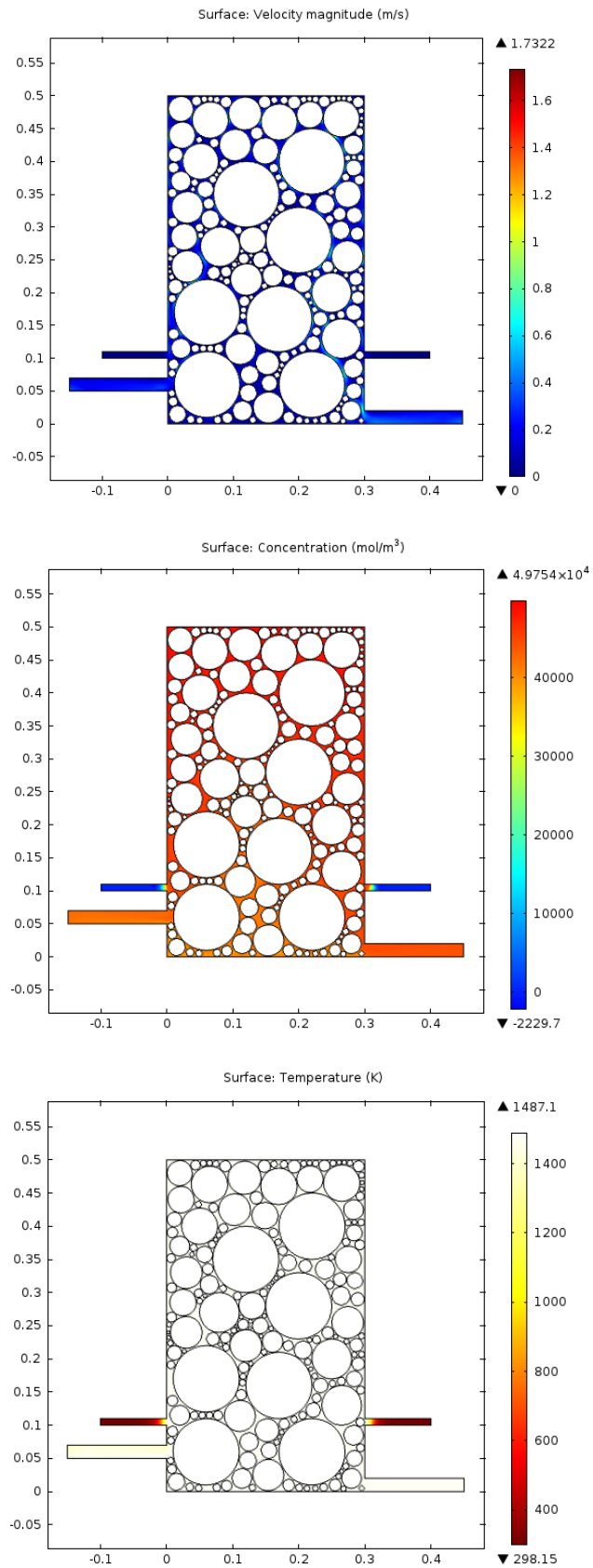


Figura 82: Perfiles de velocidad, concentración de azufre y temperatura Modelo J2 para una porosidad del 15% y velocidad inicial 0.03 [m/s]

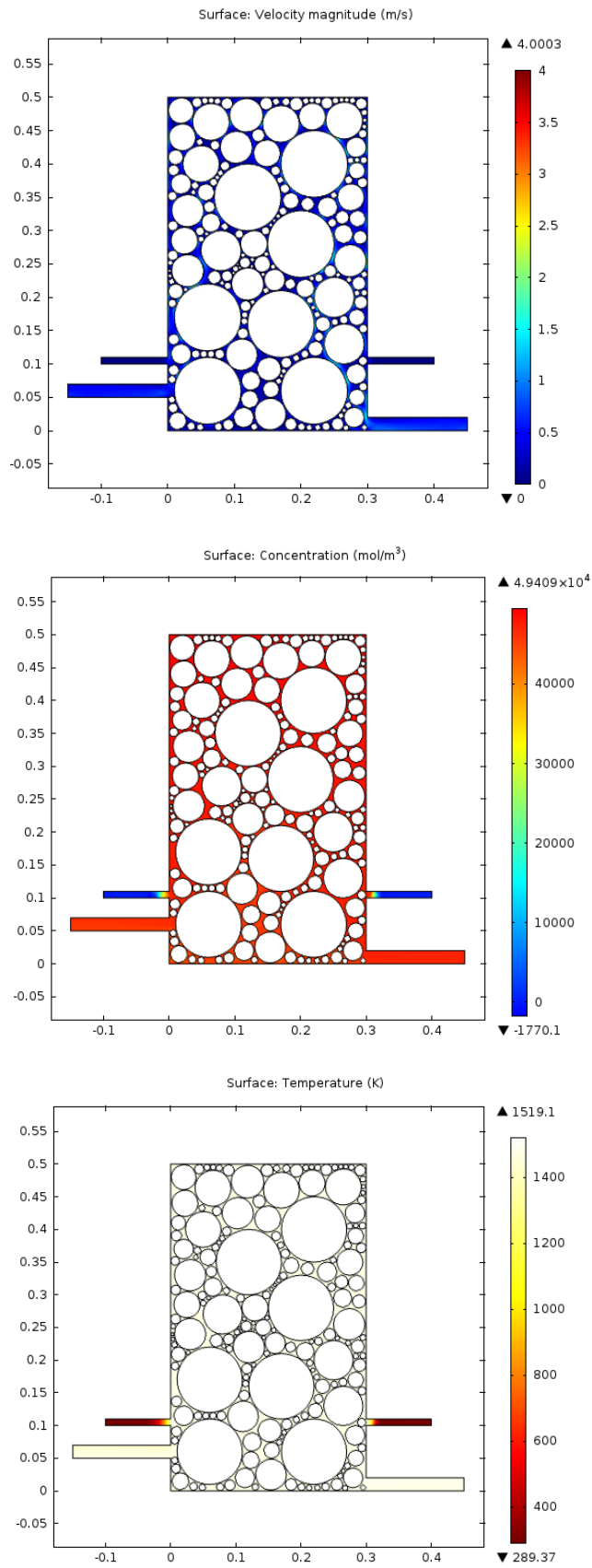


Figura 83: Perfiles de velocidad, concentración de azufre y temperatura Modelo J2 para una porosidad del 15% y velocidad inicial 0.07 [m/s]

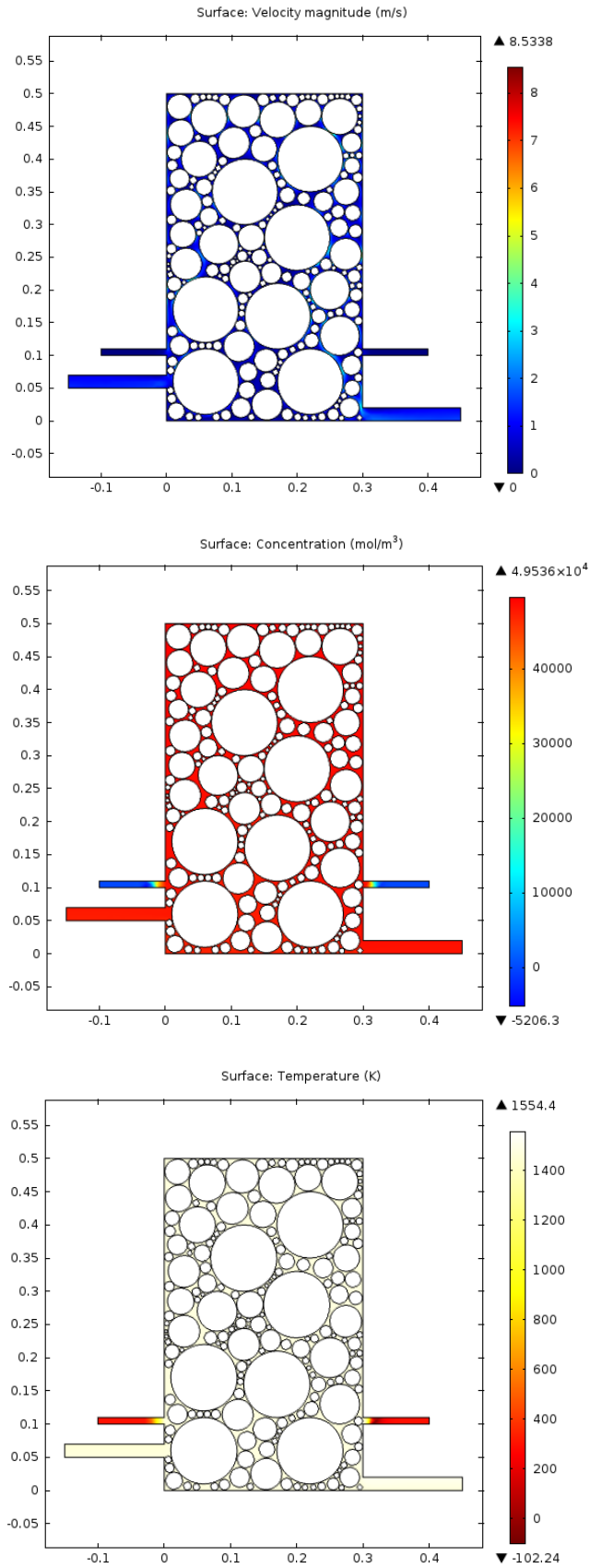


Figura 84: Perfiles de velocidad, concentración de azufre y temperatura Modelo J2 para una porosidad del 15% y velocidad inicial 0.15 [m/s]

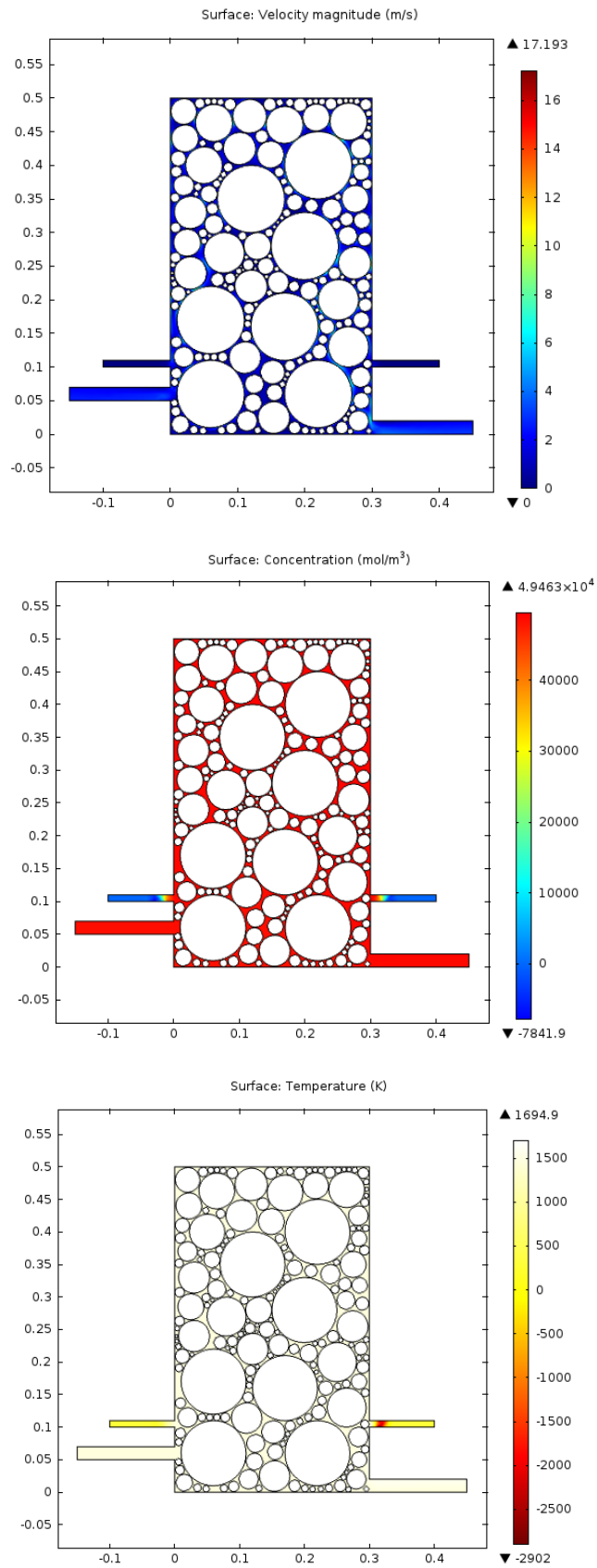


Figura 85: Perfiles de velocidad, concentración de azufre y temperatura Modelo J2 para una porosidad del 15% y velocidad inicial 0.3 [m/s]