



UNIVERSIDAD DE CHILE
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA Y BIOTECNOLOGÍA

INTEGRACIÓN Y OPTIMIZACIÓN DEL PROCESO QUÍMICO Y BACTERIOLÓGICO PARA LA RECUPERACIÓN DE FÓSFORO A PARTIR DE RESIDUOS MINERALES

MEMORIA PARA OPTAR AL TÍTULO DE
INGENIERA CIVIL QUÍMICA E
INGENIERA CIVIL EN BIOTECNOLOGÍA

MARÍA FERNANDA GODOY LEÓN

PROFESOR GUÍA:
TOMÁS VARGAS VALERO

MIEMBROS DE LA COMISIÓN:
J. CRISTIAN SALGADO HERRERA
BLANCA ESCOBAR MIGUEL

SANTIAGO DE CHILE
ABRIL DEL 2013

Resumen.

En el presente informe se detalla el estudio desarrollado como trabajo de título, denominado "Integración y Optimización del Proceso Químico y Bacteriológico para la Recuperación de Fósforo a partir de Residuos Minerales", el cual se enmarca en el proyecto "Recovery of phosphorous from Vale phosphate ore tailings applying bioleaching with autotrophic microorganisms".

Se plantea un sistema compuesto por dos reactores, un reactor de biolixiviación de azufre en el cual se produce ácido sulfúrico por acción de la bacteria *Acidithiobacillus thiooxidans*, y un reactor de lixiviación de relave mineral en el cual se realiza la lixiviación química del relave por acción de dicho ácido sulfúrico. Ambos operan en conjunto en ciclo cerrado. La base de diseño son 100 ton/día de relave mineral. En base a este sistema se desarrolla un modelo matemático con el fin de simular la extracción de fósforo. Para desarrollar el modelo se plantean los balances de masa de cada especie implicada de cada reactor, así como las ecuaciones estequiométricas de producción y consumo de cada una de ellas. Se selecciona el modelo del núcleo sin reaccionar para modelar la lixiviación de fósforo, debido a lo cual es necesario ajustar manualmente curvas experimentales provenientes de publicaciones externas al proyecto, con el fin de determinar la etapa controlante de la lixiviación. También se selecciona la expresión cinética bacteriana a utilizar en la biolixiviación de azufre, escogiendo una que depende únicamente del pH del reactor. Se utilizan 17 parámetros, de los cuales 3 son variables: el pH del reactor de lixiviación cuyo valor varía entre 1 y 5; el parámetro $p_{sólido/sol}$ (masa sólido dividida por masa de la solución del reactor de lixiviación) cuyo valor es 0,1-0,25-0,4; y el parámetro ε (volumen de azufre dividido por volumen del reactor de biolixiviación) cuyo valor es 0,01-0,05-0,1.

Se obtuvo que lo óptimo es trabajar con un valor de porcentaje p/p de sólido versus solución (en el reactor de lixiviación química) de 25%; con un valor de volumen de azufre versus volumen del reactor de biolixiviación de 0,05 (equivalente a 10% de p/p de azufre versus solución del reactor), y de pH de operación del reactor de lixiviación química entre 1,4 y 1,5; con lo cual se obtiene un pH de operación del reactor de biolixiviación entre 1,1 y 1,2; un volumen para el reactor de lixiviación de 5 [m³], y un volumen para el reactor de biolixiviación de 17 [m³] aproximadamente. Los tiempos de residencia obtenidos para cada reactor son de aproximadamente 33 [min] y 21 [min], respectivamente.

Agradecimientos.

A mi familia: mis papás Ana María y Gabriel; mis hermanos Carolina, Gabriel y Monserrat; mi sobrina Valentina; mis tíos Celia y Luis; mis primos Rodrigo y Álvaro; y mi perrita Lua, por todo el apoyo y cariño que me han entregado durante estos 6 años... en realidad durante estos 25 años.

A todos mis profesores que de alguna u otra forma me marcaron durante mis años de enseñanza. En especial al profesor Cristian Salgado, sin el cual esta tesis no se habría podido encauzar; y al profesor Jorge Castillo que siempre tuvo un momento para mí.

Al apoyo entregado por el proyecto gracia al cual se pudo realizar este trabajo.

Al profesor Tomás Vargas por corregir mis errores.

A mis amigos y compañeros del departamento, en especial a Waldo que siempre tuvo un momento para escucharme y ayudarme (sin ti este trabajo no habría empezado ni terminado).

A mis amigos mechones, que pasaron conmigo los años más duros de Beauchef.

A mi alma mater, por ser todo lo que esperaba y más, por darme un lugar para ser yo.

A José Luis, por ser mi pilar, mi amigo, mi oyente, mi profesor, por estar ahí siempre... vales mucho más que un billón de hamburguesas.

Tabla de Contenido

1.	Introducción.....	10
2.	Antecedentes.....	11
2.1	El fósforo.....	11
2.2	La industria del ácido fosfórico.....	12
2.3	La industria del ácido sulfúrico.....	16
2.4	Lixiviación y biolixiviación.....	18
2.5	Modelamiento de la Biolixiviación del Azufre.....	19
2.6	Modelo del Núcleo Sin Reaccionar.....	22
3.	Objetivos y Limitaciones.....	26
3.1	Objetivo General.....	26
3.2	Objetivos Específicos.....	26
3.3	Limitaciones.....	26
4.	Desarrollo del Modelo Computacional.....	28
4.1	Planteamiento del Sistema.....	28
4.2	Metodología para el Desarrollo del Modelo.....	29
4.3	Supuestos utilizados.....	31
4.4	Ecuaciones.....	35
4.4.1	Balances de Masa.....	35
4.4.2	Ecuaciones estequiométricas.....	42
4.5	Cinética de Lixiviación de Fósforo.....	44
4.6	Cinética de Biolixiviación de Azufre.....	46
4.7	Grados de Libertad.....	48
4.8	Parámetros del modelo.....	49
4.9	Variables de salida.....	50
4.10	Sistema de Ecuaciones a Resolver.....	51
5.	Resultados.....	54
5.1	Dimensionamiento del Reactor Biológico.....	54
5.2	Dimensionamiento del Reactor de Lixiviación.....	59
5.3	Dimensionamiento del Sistema Completo.....	62

6.	Discusión.	67
6.1	Dimensionamiento del Reactor Biológico.	67
6.2	Dimensionamiento del Reactor de Lixiviación.	71
6.3	Dimensionamiento del Sistema Completo.	72
6.4	Incidencia de los Supuestos en los Resultados de la Simulación.	75
7.	Conclusiones.	82
8.	Nomenclatura.	84
9.	Bibliografía.	88
10.	Anexos.	93
	Anexo A . Antecedentes.	93
	A.1 Información adicional sobre el fósforo.	93
	A.2 Purificación alternativa del ácido fosfórico.	96
	A.3 Datos de las especies.	98
	Anexo B . Ecuaciones.	99
	B.1 Balances de Masa.	99
	B.2 Cálculos auxiliares.	105
	Anexo C . Algoritmo.	108
	C.1 Cálculo de variables de salida del reactor de lixiviación.	108
	C.2 Cálculo de variables de salida del reactor biológico.	111
	Anexo D . Códigos en Matlab.	115
	D.1 Algoritmo para la obtención del volumen del reactor biológico y los flujos de cada especie para ambos reactores.	115
	D.2 Gráficos de resultados asociados al reactor biológico.	121
	D.3 Exportación de tablas a excel.	124
	D.4 Conversión de la fosforita y cálculo del volumen del reactor de lixiviación.	129
	Anexo E . Tablas.	132
	E.1 Resultados Reactor Biológico.	132
	E.2 Resultados Reactor de Lixiviación.	138
	E.3 Resultados Sistema Completo.	140
	E.4 Tablas de Balances de Masa.	143

Anexo F. Gráficos.....	155
------------------------	-----

Índice de Tablas.

Tabla 1: Características de la bacteria <i>Acidithiobacillus thiooxidans</i>	19
Tabla 2: Ecuaciones para la cinética de crecimiento.	20
Tabla 3: Valor para μ , K_{eq} e Y_a en diversos sustratos para la bacteria <i>Acidithiobacillus thiooxidans</i>	22
Tabla 4: Especies químicas y biológicas involucradas en el sistema.	32
Tabla 5: Parámetros utilizados en la extracción de fósforo.	44
Tabla 6: Valores de D_E y K_R para cada par de puntos (tiempo, conversión)...	44
Tabla 7: Tiempo cuando controla la reacción, la difusión o ambas etapas.....	45
Tabla 8: Parámetros de cada reactor para llevar a cabo la simulación.....	50
Tabla 9: Valor de los parámetros del modelo.....	54
Tabla 10: Volumen del reactor biológico [m^3] para los diferentes valores de pHl, psólido/sol y de ϵ	57
Tabla 11: Tiempo de residencia en el reactor biológico [min] para los diferentes valores de pHl, del psólido/sol y de ϵ	57
Tabla 12: Volumen del reactor de lixiviación [m^3] para los diferentes valores de pHl y del psólido/sol.....	61
Tabla 13: Tiempo de residencia del reactor de lixiviación [hr].....	61
Tabla 14: Volumen del sistema completo [m^3] para los diferentes valores de psólido/sol y de ϵ	66
Tabla 15: Nombre y fórmula de los minerales de fosfato.....	93
Tabla 16: Ácidos del fósforo	95
Tabla 17: Solvente utilizados en una escala alta de producción.....	96
Tabla 18: Tabla de masa molar y densidad de las especies.	98
Tabla 19: Equivalencia entre ϵ y razón p/p de azufre versus solución.	132
Tabla 20: Tasa específica de crecimiento (μ) [1/día].	132
Tabla 21: Volumen del reactor biológico [m^3].	133
Tabla 22: Tiempo de residencia en el reactor biológico [min].	135

Tabla 23: pH de operación del reactor biológico.....	137
Tabla 24: Masa de azufre al interior del reactor biológico [ton].....	137
Tabla 25: Volumen del reactor de lixiviación [m ³].	138
Tabla 26: Tiempo de residencia del reactor de lixiviación [hr].....	139
Tabla 27: Masa de mineral al interior del reactor de lixiviación [ton].	140
Tabla 28: Volumen total del sistema [m ³].	140
Tabla 29: Valor de la razón entre la masa de mineral al interior del reactor de lixiviación y la masa de azufre al interior del reactor biológico.	142
Tabla 30: Flujo másico de entrada y salida de mineral.....	143
Tabla 31: Flujo másico de entrada y salida de fosforita.....	144
Tabla 32: Flujo másico de entrada y salida de azufre.	144
Tabla 33: Flujo másico de entrada y salida de oxígeno.	144
Tabla 34: Flujo másico de entrada y salida de dióxido de carbono.....	145
Tabla 35: Flujo másico de entrada y salida de ácido fosfórico.	145
Tabla 36: Flujo másico de entrada y salida de yeso dihidratado.	146
Tabla 37: Flujo másico de entrada y salida de ácido fluorhídrico.	146
Tabla 38: Flujo másico de entrada y salida de biomasa.....	146
Tabla 39: Flujo másicos de entrada y salida de debris celular.	147
Tabla 40: Flujo másico de entrada y salida de ácido sulfúrico [kg/día].....	147
Tabla 41: Porcentaje de variación entre los flujos de entrada y salida de ácido sulfúrico para cada par de valores de pH.	149
Tabla 42. Flujo másico de entrada y salida de agua al reactor de lixiviación [ton/día].....	150
Tabla 43: Flujo másico de entrada y salida de agua al reactor biológico [ton/día].....	151
Tabla 44: Consumo de agua en cada reactor.....	152
Tabla 45: Concentración de células en suspensión al interior del reactor biológico [cel/m ³].	153
Tabla 46: N° de células adheridas a las partículas de azufre al interior del reactor biológico [cel/m ²].	153
Tabla 47: Flujo másico de entrada y salida de masa total y de solución en el reactor de lixiviación [ton/día].....	154

Tabla 48: Flujo másico de entrada y salida de masa total y solución en el reactor biológico [ton/día].	154
--	-----

Índice de Figuras.

Figura 1: Estadística mundial de producción y consumo.....	12
Figura 2: Diagrama de bloques del proceso de producción de ácido fosfórico.	15
Figura 3: Diagrama de fases de Lehrecke de sulfato cálcico en ácido fosfórico.	16
Figura 4: Mecanismos de biolixiviación.	19
Figura 5: Representación de las etapas y de las concentraciones de los reactantes y productos en el caso de una partícula que no cambia de tamaño.	23
Figura 6: Esquema del modelo del núcleo sin reaccionar.....	24
Figura 7: Esquema inicial del sistema.	29
Figura 8: Diagrama de bloques del proceso.....	35
Figura 9: Principales yacimientos de roca fosfórica.....	95
Figura 10: Primera etapa de la purificación de ácido fosfórico por separación líquido-líquido.	97
Figura 11: Remoción de los iones de Fe por lavado en contracorriente en el sistema $C_5H_{11}OH-H_3PO_4-H_2O$	97

Índice de Gráficos.

Gráfico 1: Conversión de fósforo versus tiempo.	46
Gráfico 2: Tasa específica de crecimiento versus pH.....	47
Gráfico 3: pH del reactor biológico versus pH del reactor de lixiviación para los distintos valores de <i>psólido/sol</i>	55

Gráfico 4: Volumen del reactor biológico versus pH del reactor de lixiviación para los diferentes valores de $psólido/sol$ y de ε	56
Gráfico 5: Volumen del reactor biológico versus pH del reactor biológico para los diferentes valores de $psólido/sol$ y de ε	58
Gráfico 6: Conversión de fosforita versus tiempo de residencia en las primeras dos horas de lixiviación para diferentes valores de pH.	59
Gráfico 7: Volumen del reactor de lixiviación en función del pH de operación del reactor de lixiviación para a los diferentes valores del $psólido/sol$	60
Gráfico 8: Volumen total del sistema versus pH del reactor de lixiviación para los diferentes valores de $psólido/sol$ y de ε	63
Gráfico 9: pH versus razón $masa_{min}/masa_S$ para los diferentes valores de $psólido/sol$	64
Gráfico 10: Volumen total del sistema versus razón $masa_{min}/masa_S$ para los diferentes valores de $psólido/sol$ y de ε	65
Gráfico 11: Conversión de la fosforita en el tiempo para distintos pH de operación.	155
Gráfico 12: Volumen del reactor de lixiviación en función del pH de operación.	156
Gráfico 13: Razón $masa_{min}/masa_S$ versus pHl y pHb	157

1. Introducción.

Desde hace algunos años, existe una creciente preocupación por las reservas de fósforo que quedan en el planeta. Por una parte se espera que para las próximas décadas o siglos, las reservas de este elemento sean de baja calidad, debido tanto a su bajo contenido de fósforo como a la presencia de metales nocivos para los seres humanos. Además el acceso a estas reservas es cada día más difícil, debido a la profundidad en que se encuentran, y por último, se pronostica un aumento en la demanda del fósforo debido al crecimiento de la población mundial. [3]

Dado que el principal uso del fósforo es la producción de fertilizantes, impacta directamente en la producción agrícola. Por otra parte este elemento no posee sustituto ni se puede fabricar de manera artificial. [3]

Debido a estas razones es que se hace necesario buscar fuentes alternativas para su extracción, como por ejemplo relaves mineros.

En conjunto con lo anterior, desde hace ya varias décadas, se viene investigando la aplicación de la biolixiviación, con el fin de establecerla como una alternativa competitiva frente a la lixiviación química del fósforo, principalmente debido a que esta última genera un alto impacto ambiental, además de altos costos de producción [15]. Una de las bacterias más estudiadas es la *Acidithiobacillus thiooxidans*. Esta bacteria posee la ventaja de crecer a pH bajos, llegando incluso a tolerar 0,5 de pH. [19]

El presente trabajo está enmarcado en el proyecto "Recovery of phosphorous from Vale phosphate ore tailings applying bioleaching with autotrophic microorganisms", en el área de la bio-hidrometalurgia, específicamente en la lixiviación bacteriana de azufre y en la lixiviación química de minerales fosfatados, y tiene como principal objetivo establecer un modelo que permita simular el proceso de biolixiviación y de lixiviación en distintos escenarios.

2. Antecedentes.

2.1 El fósforo.

El fósforo (P) es un elemento no metal multivalente del grupo de los nitrogenoides (grupo 15). Debido a que es altamente reactivo no se encuentra en la naturaleza como un elemento libre sino que combinado en fosfatos inorgánicos y también en organismos vivos. Es un elemento esencial para la vida debido a que es uno de los macronutrientes más importante para el crecimiento y desarrollo biológico. Especial importancia tiene en la agricultura, ya que es uno de los tres principales nutrientes (fósforo, nitrógeno y potasio) ^[1], necesario para el crecimiento de las plantas. Su principal fuente de extracción son las minas de rocas de fosfato, que afloran en superficies como expresión de viejos fondos marino (ver Distribución en Figura 9, Anexo A.1).^[2] Si bien el fósforo es uno de los elementos más abundantes en la corteza terrestre, sólo una pequeña fracción está presente en altas concentraciones como para ser utilizado por el ser humano. Además, gran parte de la roca fosfórica con concentraciones suficientemente altas, no son físicamente accesibles o contienen contaminantes como el cadmio. Todo esto limita la disponibilidad del fósforo. ^[3]

El fósforo se presenta en un sin número de especies minerales (ver Tabla 15, Anexo A.1), dentro de las cuales la más conocida es la apatita. Esta especie mineral es una de las principales fuentes de fósforo y fosfato del mundo. ^[4]

Los usos que se le dan al fósforo son 2 principalmente. El 90% se utiliza para la producción de comida: un 82% en la producción de fertilizante, un 8% en la producción de aditivos para alimento animal. El 10% restante se utiliza en aplicaciones industriales, como son los detergentes y el tratamiento de metales. ^[3]

En la Figura 1 se muestra la producción mundial de fósforo y el consumo mundial de fertilizantes fosfatados hacia el año 2010.

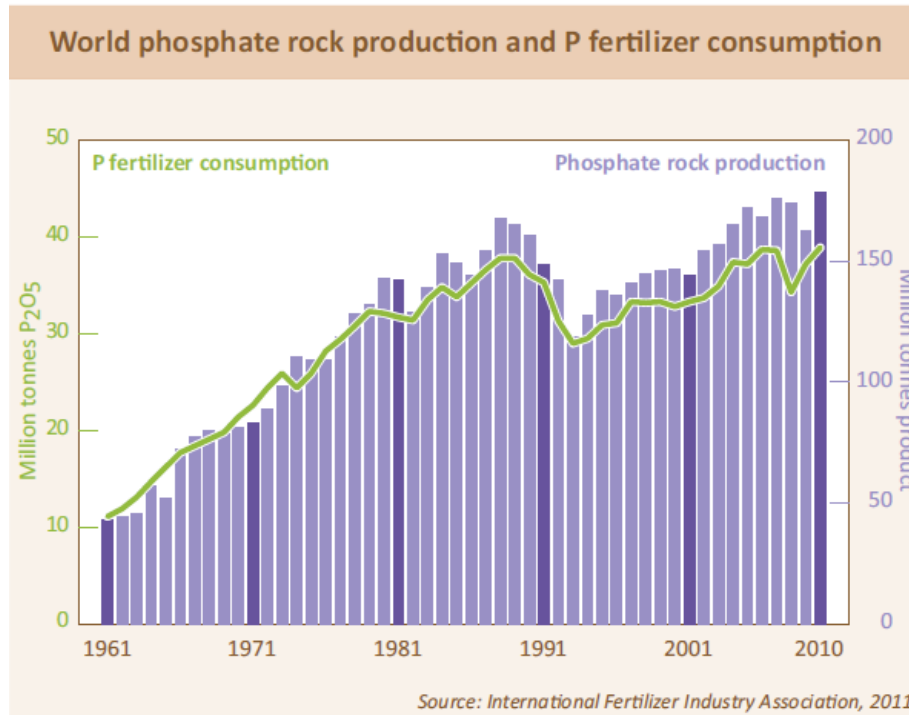


Figura 1: Estadística mundial de producción y consumo. ^[5]

Son 4 países los que consumen alrededor del 65% del total mundial: China, India, Estados Unidos y Brasil. Este último utiliza el fertilizante principalmente en los cultivos de soja, caña de azúcar y maicena. ^[3]

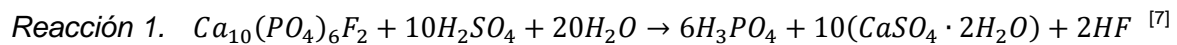
La demanda de fósforo depende directamente del tamaño de la población y de los requerimientos alimenticios. Se espera que debido al aumento de la población, el consumo de fósforo alcance un peak en el 2035, lo que podría llegar a provocar una crisis mundial. Esto se debe a que no existen sustitutos para el fósforo en el crecimiento de cultivos, y además no puede ser sintetizado de manera artificial. ^[3]

2.2 La industria del ácido fosfórico.

La fosforita es una variedad amorfa de los apatitos, cuya composición responde a la fórmula $Ca_5(PO_4)_3X$, pudiendo ser X: F⁻, Cl⁻ ó OH⁻. El calcio suele estar parcialmente sustituido por magnesio, hierro o aluminio. También posee

impurezas como materia orgánica, arcillas, caliza y sílice principalmente. Su riqueza se expresa mediante el contenido de P_2O_5 en porcentaje en peso.

Existen diferentes métodos para procesar la roca fosfórica: acidulación, reducción en hornos eléctricos, calcinación, entre otros; siendo la acidulación el más utilizado. De esta última se obtiene ácido fosfórico, el cual se produce por “vía húmeda” a través del ataque directo de la roca con ácido sulfúrico, clorhídrico o nítrico. Normalmente se utiliza ácido sulfúrico, ya que el sulfato de calcio ($CaSO_4$) que se produce en la reacción es más insoluble, y por consiguiente, más fácil de separar. En la mayoría de las plantas de producción de ácido fosfórico se utiliza el proceso dihidrato, el cual se realiza según la Reacción 1. ^[6]



El proceso dihidrato consta de 3 etapas: ^[6]

1. Reacción: En esta etapa las impurezas contenidas en la roca se transfieren a la solución junto al ácido fosfórico producido, quedando con una gran cantidad de materia sólida en suspensión y de coloración negra. Esta etapa se realiza en continuo en uno o varios tanques agitados.
2. Purificación.

De esta etapa se extrae ácido fosfórico al 30%.

- 2.1 Eliminación de la materia orgánica procedente de la roca y de los aditivos antiespumantes que a veces hay que añadir en las cubas de ataque. El método más utilizado consiste en la floculación con agentes floculantes activos en medios fuertemente ácidos, y posterior decantación. ^[6] Los lodos obtenidos se reciclan a la corriente de alimentación del filtro para minimizar las pérdidas de P_2O_5 .

2.2 Remoción de los sulfatos presentes debido al exceso de ácido sulfúrico en la reacción. Para ello se utiliza roca fosfórica finamente molida que, además de producir yeso, proporciona núcleos de cristalización al yeso y a determinados fosfatos en estado metaestable de solución.

2.3 Eliminación del ácido fluorhídrico disuelto (en caso de estar presente), para lo que se adiciona sílice, formándose SiF_4 gaseoso, que se puede arrastrar con aire. Contenidos muy bajos de flúor exigen la adición de pequeñas cantidades de sosa, para precipitar el $\text{Na}_2\text{Si}_4\text{F}_6$.

2.4 Separación de los sólidos mediante centrifugas decantadoras, obteniéndose un ácido verde limpio.

En el Anexo A.2 se detalla el proceso de purificación de ácido fosfórico a través de extracción por solvente.

3. Concentración: En caso de requerir una concentración entre el 42 – 50% se utilizan evaporadores flash.

Este proceso se realiza entre 70-80°C, con partículas de tamaño entre 60-70 μm .

^[8] La reacción posee una eficiencia del 95% respecto al ácido fosfórico, además el ácido producido por este método es más barato ya que resulta bastante impuro por lo que se usa principalmente en la fabricación de fertilizantes y en aquellos productos químicos donde la pureza no es importante.^[9] En la siguiente figura se muestra el diagrama de bloques del proceso.

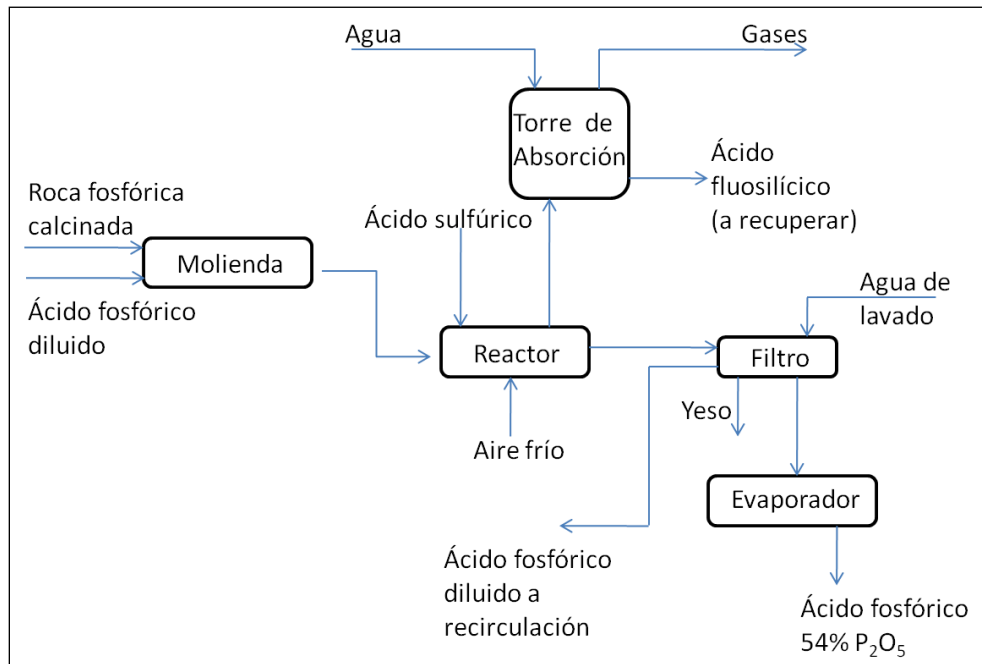


Figura 2: Diagrama de bloques del proceso de producción de ácido fosfórico. ^[9]

El sulfato de calcio o yeso generado puede precipitar en función tanto de la temperatura de operación como de la concentración de ácido fosfórico en forma de dihidrato (yeso) ($\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$), hemihidrato ($\text{CaSO}_4 \cdot 1/2\text{H}_2\text{O}$) o anhidrita (CaSO_4) como se observa en la Figura 3.

El ácido fosfórico (H_3PO_4) corresponde a pentóxido de fósforo (P_2O_5) trihidratado, por lo que su concentración se expresa en % de P_2O_5 . Generalmente se comercializa con el 52% - 54% de P_2O_5 con la designación de ácido “concentrado” y, más raramente, con el 70% P_2O_5 como “ácido superfosfórico” (SPA). ^[6]

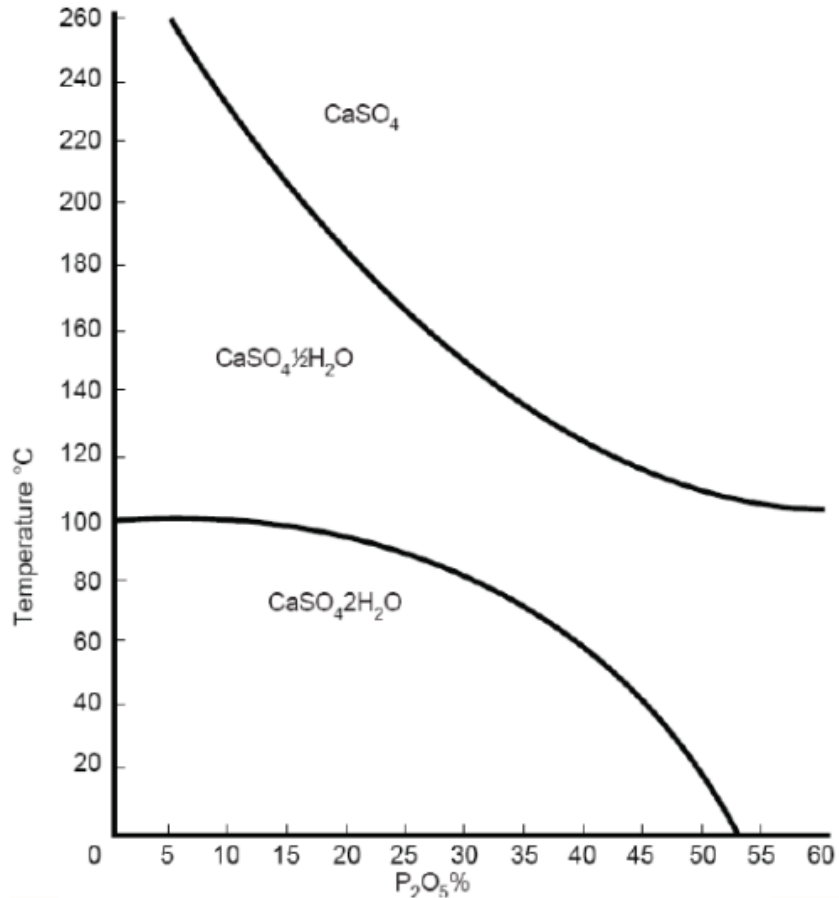


Figura 3: Diagrama de fases de Lehrecke de sulfato cálcico en ácido fosfórico.
 (Dependencia cristalina del CaSO₄ en función de la concentración de P₂O₅ y la temperatura).
 [6]

2.3 La industria del ácido sulfúrico.

El azufre (S) es una de las materias primas más importantes a nivel mundial. Se encuentra en la naturaleza en su forma libre, como azufre elemental (S⁰), y combinado con otros elementos en forma de minerales como son la pirita (FeS₂), esfalerita (ZnS), calcopirita (CuFeS₂), entre otros. También forma parte del petróleo y del gas natural como ácido sulfhídrico (H₂S).^[10] Su principal forma comercial es el ácido sulfúrico, el cual se usa en una variedad de procesos industriales: producción de ácido fosfórico y fertilizantes (32%), en la industria de pigmentos y aceites (58%), en la extracción, refinamiento y procesamiento de metales (2%), y en otras industrias como la de la pulpa y el papel (7%).^[11]

El método convencional de producción de ácido sulfúrico consta de tres etapas: ^[12]

1) Producción de dióxido de azufre (SO₂).

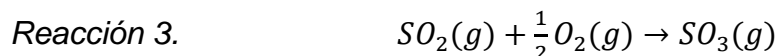
La reacción es como se observa a continuación:



El azufre se funde a 140°C. Luego es filtrado para remover cualquier impureza, normalmente hierro o compuestos orgánicos.

2) Conversión a trióxido de azufre (SO₃).

El dióxido de azufre se convierte en trióxido de azufre reaccionado con oxígeno sobre un catalizador, según la siguiente reacción:



El catalizador que se utiliza es pentóxido de vanadio (V₂O₅) y sulfato de potasio en una base de sílice.

3) Absorción del trióxido de azufre.

El gas de trióxido de azufre se absorbe en una torre empacada, donde reacciona con el agua según la siguiente ecuación, formando ácido sulfúrico (H₂SO₄):



Como alternativa al proceso señalado, en los últimos años se ha desarrollado el uso de microorganismos para la oxidación de azufre o compuestos sulfatados para la producción de ácido sulfúrico. Sin embargo este sistema tiene limitaciones, tales como bajas velocidades de reacción y cultivos celulares de baja concentración, entre otras. Por ello es una tecnología que aún está en investigación.

2.4 Lixiviación y biolixiviación.

La lixiviación es el proceso de extracción de un componente a partir de un sólido por efecto de un solvente líquido. En particular, los minerales son lixiviados con ácido o con álcali, siendo más efectiva la lixiviación con ácido.^[13]

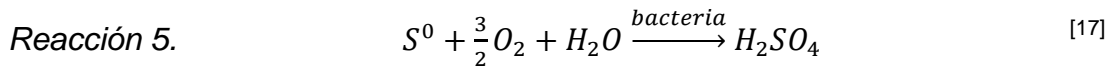
El proceso de lixiviación se puede dividir en dos categorías principales: lixiviación de lecho fijo (o por percolación), y lixiviación por agitación. Cuál se utilice, depende de las condiciones de concentración del mineral (concentrado, mineral de alta ley o mineral de baja ley), y de sus características químicas y mineralógicas (sulfuros, óxidos o mixtos). En particular, la lixiviación por agitación sólo se aplica a material finamente molido, ya sean lamas, relaves, concentrados o calcinas de tostación, y se realiza utilizando reactores agitados y aireados. Con este método la velocidad de extracción es mucho mayor que la lograda mediante el proceso de lixiviación de lecho fijo, aunque es un proceso de mayor costo, ya que incluye los costos de la molienda del mineral.^[14]

Como alternativa a la lixiviación del fósforo, desde hace algunas décadas se viene desarrollando la biolixiviación, principalmente debido a los costos y al impacto medioambiental a los que está asociada la lixiviación química^[15]. La biolixiviación corresponde a la lixiviación mediada por bacterias de manera directa o indirecta. El mecanismo directo o por contacto es aquel en que el propio microorganismo lixivía el mineral al estar en contacto con él, catalizando enzimáticamente la reacción; el mecanismo indirecto es aquel en donde no hay contacto físico entre el mineral y el microorganismo, aunque este último si genera reactivos químicos que forman parte del proceso de lixiviación (ver Figura 4)^[16].



Figura 4: Mecanismos de biolixiviación.
a) Mecanismo Indirecto. b) Mecanismo Directo. ^[16]

Un ejemplo de biolixiviación directa es la producción de ácido sulfúrico a partir de bacterias oxidantes del azufre y algún compuesto sulfurado (normalmente piritita), como se muestra en la siguiente reacción:



Existen diversas bacterias o arqueas oxidantes del azufre: *Acidithiobacillus ferrooxidans*, *Acidithiobacillus thiooxidans*, *Acidithiobacillus thioparus*, *Sulfolobus*, entre otras. En particular la bacteria *Acidithiobacillus thiooxidans* corresponde a una especie acidofílica, autotrófica obligada, que obtiene su energía oxidando compuestos de azufre reducidos o parcialmente reducidos. El carbono lo obtiene fijando dióxido de carbono (CO₂) de la atmosfera. Estas bacterias se han usado de manera amplia en la hidrometalurgia, en particular en la lixiviación de metales a partir de minerales y en la desulfurización microbiana del carbón en conjunto con la especie *Acidithiobacillus ferrooxidans*.^[18] En la Tabla 1 se detallan algunas características importantes de esta bacteria:

Tabla 1: Características de la bacteria *Acidithiobacillus thiooxidans*. ^{[19][20][21]}

T° min [°C]	T°max [°C]	T° óptima [°C]	pH min	pH max	pH óptimo
10	40	25-30	0,5	4,3	2-2,8

2.5 Modelamiento de la Biolixiviación del Azufre.

Normalmente en el modelamiento de la biolixiviación de azufre se utiliza la ecuación de la isoterma de equilibrio de adsorción de Langmuir, la cual relaciona

las células en suspensión (X_L) con las células adheridas a la superficie de azufre (X_A) [22].

$$X_A = \frac{K_{eq} \cdot X_{max} \cdot X_L}{1 + K_{eq} \cdot X_L} \quad \text{Ec.1)}$$

X_A : N° de bacterias adheridas al azufre por área superficial de azufre [cel/m²].

X_L : N° de bacterias en suspensión [cel/m³].

K_{eq} : Constante de equilibrio entre células adheridas y células en suspensión [m³/cel].

X_{max} : N° máximo de células adheridas que pueden haber por área superficial de azufre [cel/m²].

Esto es necesario para posteriormente desarrollar los balances de biomasa al interior del reactor.

Con respecto a la cinética de crecimiento de las bacterias, existen diversas formas de abordarla, como se observa en la siguiente tabla:

Tabla 2: Ecuaciones para la cinética de crecimiento.

Ecuación	Parámetros	Ref.
Ec.2)	μ : Tasa específica de crecimiento celular [1/día].	
$\mu = \frac{\mu_{max}}{1 + K_i \cdot (C_{SO_4^{2-}} - C_i)}$	<i>si</i> $C_{SO_4^{2-}} \geq C_i$	[22]
$\mu = \mu_{max}$	<i>si</i> $C_{SO_4^{2-}} < C_i$	
	μ_{max} : Tasa específica máxima de crecimiento celular [1/día].	
	K_i : Constante de inhibición [m ³ /kg].	

		<p>$C_{SO_4^{2-}}$: Concentración de de sulfato en la solución [kg/m³].</p> <p>C_i: Concentración de inhibición de sulfato en solución [kg/m³].</p>
Ec.3)	$\mu = \frac{\mu_{max} \cdot C_S}{K_S + C_S + \frac{C_S^2}{K_i}}$	<p>C_S: Concentración de azufre [g/L].</p> <p>K_S: Constante de semisaturación del azufre [g/L].</p> <p>K_i: Constante de inhibición [g/L].</p> <p>[17]</p>
Ec.4)	$\mu_{max} = z_1 \cdot (pH - pH_{min}) \cdot (1 - \exp(z_2 \cdot (pH - pH_{max})))$	<p>z_1 y z_2: Coeficientes de regresión.</p> <p>pH_{min}: pH por debajo del cual no hay crecimiento bacteriano.</p> <p>pH_{max}: pH por sobre cual no hay crecimiento bacteriano.</p> <p>[23]</p>

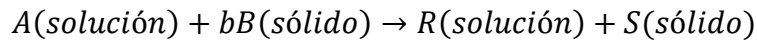
Como se observa en la Tabla 3, se ha publicado el valor de varios de los parámetros asociados a la cinética de oxidación de azufre de estas bacterias. En particular en la publicación “Kinetic model of elemental sulfur oxidation by *Acidithiobacillus thiooxidans* in batch slurry reactors” [22] se encuentran resumidos varios valores de la tasa específica de crecimiento (μ), de la constante de equilibrio de la ecuación de Langmuir (K_{eq}), y del rendimiento célula/azufre (Y_a) en distintos sustratos.

Tabla 3: Valor para μ , K_{eq} e Y_a en diversos sustratos para la bacteria *Acidithiobacillus thiooxidans*.^[22]

Sustrato	μ [1/día]	K_{eq} [m ³ /cel]	X_{max} [10^{12} cel/m ²]	Y_a
CuS	2,9 a 35°C	-	-	0,35 [g cel/g CuS]
FeS₂	2,5 a 30°C	$4,68 \cdot 10^{-15}$	-	$3,3 \cdot 10^{14}$ [cel/kg]
ZnS	4,8 a 7,2 a 28°C	-	0,7 – 2	-
S	1 a 30°C	$2 \cdot 10^{-15}$	1	$4,9 \cdot 10^{14}$ [cel/kg]

2.6 Modelo del Núcleo Sin Reaccionar.

La cinética de lixiviación de minerales se describe usualmente en base al modelo del núcleo sin reaccionar.^[41] La nomenclatura a utilizar considera la cinética de una reacción de lixiviación general:



Se sabe que:

$$-\frac{dN_a}{dt} = -\frac{1}{b} \cdot \frac{dN_b}{dt} = \frac{dN_r}{dt} = \frac{dN_s}{dt} \quad \text{Ec.5)}$$

En este caso $\frac{dN_a}{dt}$ corresponde al consumo molar de ácido sulfúrico (H₂SO₄), $\frac{dN_b}{dt}$ al consumo de mineral, y $\frac{dN_r}{dt}$ a la producción de ácido fosfórico (H₃PO₄).^[26]

Como se observa en la Figura 5, las etapas del proceso son:

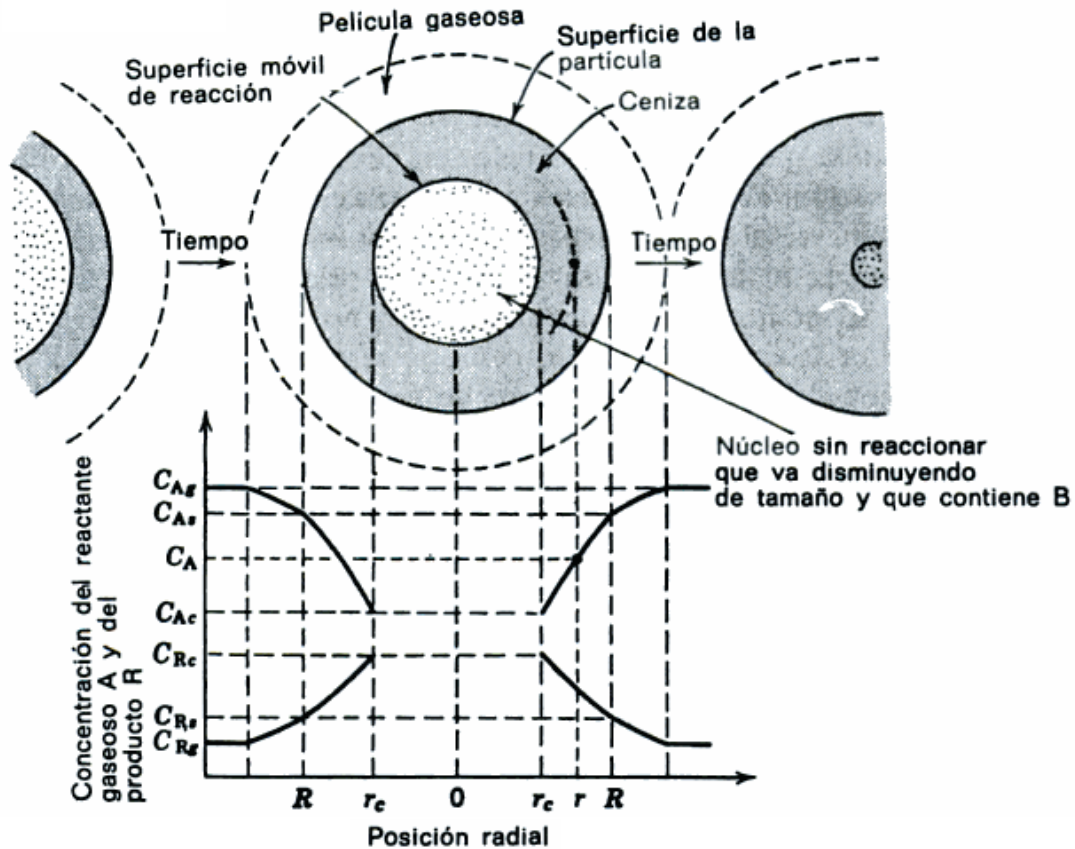


Figura 5: Representación de las etapas y de las concentraciones de los reactantes y productos en el caso de una partícula que no cambia de tamaño. ^[26]

- 1) Reactivo lixivante (ácido) difunde a través de capa límite hacia la superficie de la partícula.
- 2) Reactivo lixivante difunde en el interior de la partícula hacia la zona de reacción.
- 3) Ocurre la reacción química, se forman productos de la reacción.
- 4) Productos solubles de la reacción difunden en el interior de la partícula hacia la superficie de ésta.

5) Productos solubles difunden a través de la capa límite hacia el seno de la solución. ^[26]

Normalmente la velocidad de lixiviación es inicialmente alta ya que el reactivo ataca directamente a las especies presentes en la superficie de la partícula. Con el tiempo la velocidad de lixiviación decae debido a que la superficie de reacción está cada vez más alejada de la superficie de la partícula y entonces los reactivos toman más tiempo en desplazarse al interior de la partícula. ^[20] Esto se esquematiza en la siguiente figura:

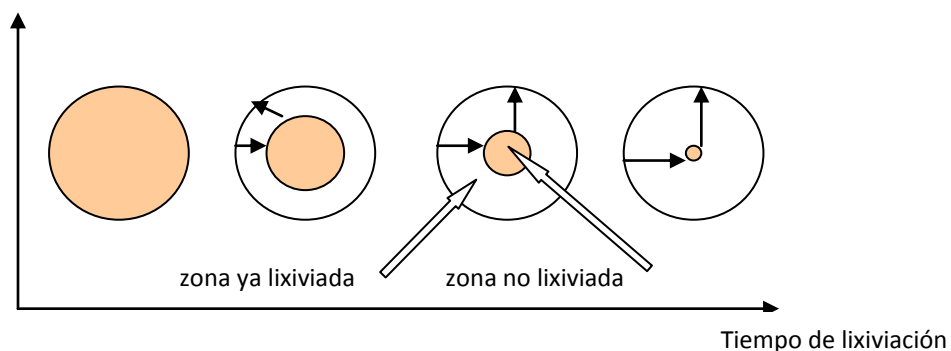


Figura 6: Esquema del modelo del núcleo sin reaccionar. ^[20]

En el caso de la lixiviación mineral, por lo general controlan las etapas 2) y/o 3). ^[26]

Si controla la etapa de difusión (etapa 2) se utiliza la siguiente ecuación para calcular el tiempo de reacción en función de la conversión:

$$t = \frac{\rho_b \cdot R^2}{6 \cdot b \cdot D_E \cdot C_a} (1 - 3 \cdot (1 - \alpha)^{2/3} + 2 \cdot (1 - \alpha)) \quad [26] \quad \text{Ec.6}$$

Si la controla la reacción (etapa 3), se utiliza:

$$t = \frac{\rho_b \cdot R}{b \cdot K_R \cdot C_a} (1 - (1 - \alpha)^{1/3}) \quad [26] \quad \text{Ec.7}$$

Ahora bien, en el caso en que tanto la etapa de difusión como la reacción controlen, se tiene la siguiente ecuación ^[27]:

$$\frac{d\alpha}{dt} = \frac{3 \cdot (1 - \alpha)^{2/3}}{6 \cdot \tau_D \cdot ((1 - \alpha)^{1/3} - (1 - \alpha)^{2/3}) + \tau_R} \quad \text{Ec.8)}$$

$$\tau_D = \frac{\rho_b \cdot R^2}{6 \cdot b \cdot C_a \cdot D_E} \quad , \quad \tau_R = \frac{\rho_b \cdot R}{b \cdot C_a \cdot K_R} \quad \text{Ec.9)}$$

Donde:

- α : Conversión del mineral [].
- t: Tiempo [día].
- τ_D : Tiempo de conversión completa cuando controla la difusión al interior de la partícula [día].
- τ_R : Tiempo de conversión completa cuando controla la reacción [día].
- b: Coeficiente estequiométrico del mineral [].
- ρ_b : Densidad molar del mineral [kmol/m³].
- R: Radio inicial de la partícula de mineral [m].
- C_a : Concentración de ácido sulfúrico en la solución [kmol/m³].
- D_E : Constante de difusión [m²/min].
- K_R : Constante cinética de reacción [m/día].

3. Objetivos y Limitaciones.

3.1 Objetivo General.

Desarrollar un modelo matemático de un proceso de recuperación de fósforo. El fin del modelo es estudiar el efecto del pH en el dimensionamiento del sistema que contempla dos reactores: uno de biolixiviación de azufre en el cual se genera ácido sulfúrico; y otro de lixiviación química, en el cual dicho ácido provoca la recuperación del fósforo en forma de ácido fosfórico.

3.2 Objetivos Específicos.

- Determinar una expresión matemática de la cinética de lixiviación del mineral en base al modelo del núcleo sin reaccionar.
- Determinar una expresión matemática de la cinética de biolixiviación de azufre.
- Desarrollar los balances de masa del proceso integrando las respectivas ecuaciones cinéticas de lixiviación y biolixiviación.
- Obtener los volúmenes y tiempos de residencia de los reactores de biolixiviación y de lixiviación en función del pH de ambos reactores.

3.3 Limitaciones.

El proyecto presenta diversas limitaciones. Entre ellas se encuentran:

- Trabajar con datos experimentales de estudios anteriores, tanto para la cinética de bacterias, como para calcular parámetros y constantes relacionadas a la cinética de lixiviación de mineral fosfatado.

- Estudiar la cinética de una especie de microorganismos en particular, la bacteria *Acidithiobacillus thiooxidans*.

- No considera cómo afecta al modelo los cambios de temperatura, si no que se trabajará con una temperatura dada (30°C). El modelo tampoco considera la lixiviación de todos los elementos que podría contener el relave.

- No considera el efecto del tamaño de partícula a lixiviar. Según bibliografía, se sabe que esto afecta el pH de la solución ^[13], pero en este caso es posible despreciar su efecto ya que el modelo se desarrollará a pH constante.

- No se realizan pruebas experimentales para corroborar el modelo, debido a que no se contó a tiempo con las muestras minerales provenientes de Brasil. Debido a esto último, tampoco se conoce la caracterización de dicho mineral.

4. Desarrollo del Modelo Computacional.

A continuación se detallan la estructura, los supuestos y la metodología utilizada para obtener el modelo computacional y la posterior simulación.

4.1 Planteamiento del Sistema.

Como se observa en la Figura 7 las características del sistema son:

- Sistema compuesto por dos reactores, un reactor de biolixiviación de azufre (denominado desde ahora reactor biológico), y un reactor de lixiviación de relave mineral (denominado desde ahora reactor de lixiviación).
- Ambos reactores corresponden a reactores continuos CSTR.
- Los reactores operan en ciclo cerrado, con el fin de reutilizar el agua y disminuir su demanda. Del sistema se purga parte del ácido fosfórico producido y los productos secundarios de la reacción (ver Reacción 1).
- En el reactor biológico se produce ácido sulfúrico a partir de azufre puro por acción de la bacteria oxidante del azufre *Acidithiobacillus thiooxidans*.
- En el reactor de lixiviación se realiza la lixiviación química del relave mineral por acción del ácido sulfúrico producido en el reactor biológico.
- Ambos reactores operan de manera isotérmica a 30°C.

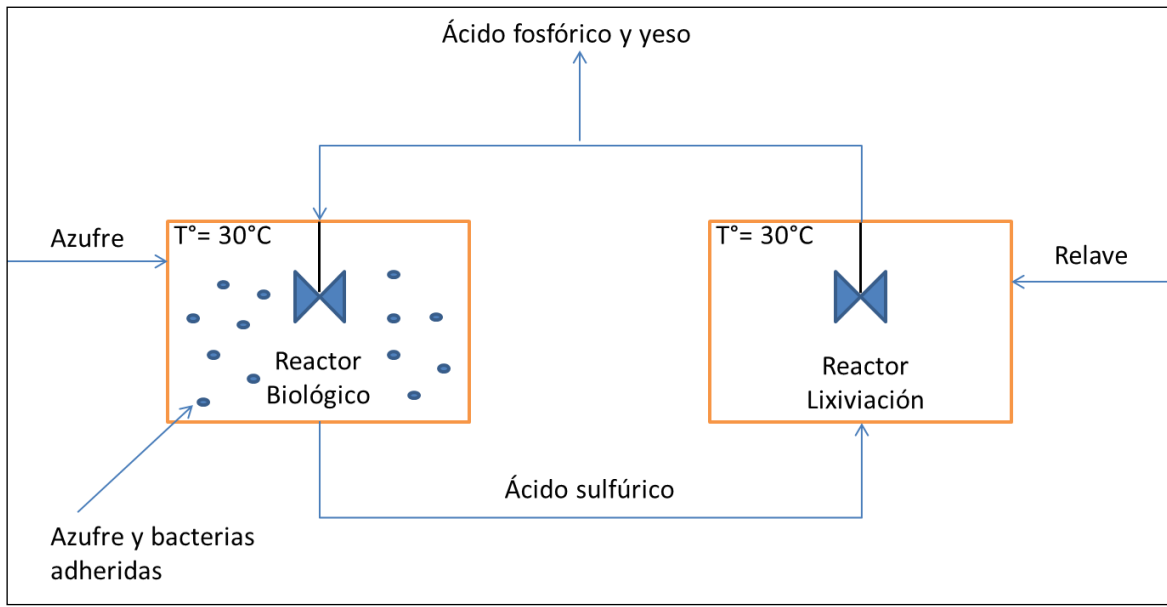


Figura 7: Esquema inicial del sistema.

4.2 Metodología para el Desarrollo del Modelo.

Una vez establecido el sistema a abordar, se sigue el siguiente procedimiento para el desarrollo del modelo.

1) Desarrollar los balances de masa para cada especie involucrada (de acuerdo a la Reacción 1 y a la Reacción 5) en cada reactor (ver sección 4.4.1).

2) Plantear las ecuaciones de consumo y producción estequiométricos (ver sección 4.4.2).

3) Evaluar diversos escenarios aislando el reactor biológico del reactor de lixiviación, comenzando por el caso más sencillo hasta alcanzar el caso más complejo que se desea abordar:

- Caso más sencillo para el reactor biológico: Entrada de azufre, agua y oxígeno, sin recirculación, ausencia de bacterias. Salida de agua y ácido sulfúrico.

Luego se agregan de a una las siguientes variables en el orden en que se muestran:

- Concentración fija de bacterias adheridas, μ constante.
- μ dependiente del pH.
- Concentración de bacterias en suspensión. Uso de la ecuación de isoterma de equilibrio de Langmuir.
- Recirculación de agua y ácido sulfúrico.

- Caso más sencillo para el reactor de lixiviación. Entrada de fosforita pura, agua y ácido sulfúrico.

Luego se agregan de a una las siguientes variables en el orden en que se muestran:

- Entrada de bacterias en suspensión y recirculación de ácido fosfórico.
- Entrada de mineral con porcentaje de fosforita.

Una vez desarrollado cada caso se prosigue a juntar el caso más complejo para el reactor de lixiviación con el del reactor biológico, para así integrar ambos procesos.

Con esto se desarrolla el algoritmo para dimensionar el reactor biológico y para obtener los flujos másicos de cada especie en cada reactor.

4) Ajustar manualmente curvas experimentales provenientes de publicaciones externas al proyecto, con el fin de determinar la etapa controlante en la lixiviación de fósforo y los parámetros D_E y/o K_R .

5) Determinar el tiempo de residencia para la conversión esperada.

6) Calcular el volumen del reactor de lixiviación en función del tiempo de residencia:

$$V_l = Qe_{tot}^l \cdot \tau_l \quad \text{Ec.10)}$$

Donde:

V_l : Volumen del reactor de lixiviación [m^3].

Qe_{tot}^l : Flujo volumétrico de entrada de masa total al reactor de lixiviación [$m^3/día$].

τ_l : Tiempo de residencia del reactor de lixiviación [día].

4.3 Supuestos utilizados.

En la presente sección se detallan los supuestos utilizados. La nomenclatura utilizada es:

E_j^i : Flujo másico de entrada al reactor i de la especie j , con $i=b$ para el reactor biológico o $i=l$ para el reactor de lixiviación, [kg/día].

S_j^i : Flujo másico de salida del reactor i de la especie j , con $i=b$ para el reactor biológico o $i=l$ para el reactor de lixiviación, [kg/día].

D_j^i : Consumo en el reactor i de la especie j , con $i=b$ para el reactor biológico o $i=l$ para el reactor de lixiviación, [kg/día].

P_j^i : Producción en el reactor i de la especie j , con $i=b$ para el reactor biológico o $i=l$ para el reactor de lixiviación, [kg/día].

M_j^i : Muerte celular en el reactor i, de las células j, con $i=b$ para el reactor biológico o $i=l$ para el reactor de lixiviación, [kg/día]; y j: \bar{X}_A o X_L [cel/m³ · día].

Para más detalles ver sección 8. Nomenclatura y tabla de especies en la Tabla 4.

Tabla 4: Especies químicas y biológicas involucradas en el sistema.

Especie	Reactor Biológico	Reactor de Lixiviación
Azufre (S)	SI	NO
Agua	SI	SI
Células adheridas a la superficie del mineral (X_A)	SI	NO
Células en suspensión en la solución (X_L)	SI	SI
Ácido Sulfúrico (H_2SO_4)	SI	SI
Ácido Fosfórico (H_3PO_4)	SI	SI
Oxígeno molecular (O_2)	SI	NO
Dióxido de Carbono (CO_2)	SI	NO
Mineral (Min)	NO	SI
Fosforita (Fos)	NO	SI
Yeso ($CaSO_4$)	NO	SI
Ácido Fluorhídrico (HF)	NO	SI
Debris celular (debris)	NO	SI

En base al desarrollo de los balances de masa para cada especie (ver sección 4.4.1), se proponen los siguientes supuestos a utilizar.

- 1) El sistema se encuentra en estado estacionario.
- 2) Se consume todo el azufre que entra al reactor biológico (el flujo de salida de azufre es cero, $S_S^b = 0$).

3) La incorporación de azufre por parte de la bacteria es despreciable, luego la conversión de azufre a ácido sulfúrico es de un 100% (según bibliografía alrededor de un 5% del azufre es incorporado al microorganismo ^{[28][29]}).

4) El consumo de oxígeno en el reactor biológico sólo se debe a la reacción de producción de ácido sulfúrico, es decir, no se considera el oxígeno que consume la bacteria para su crecimiento y mantención.

5) No hay salida de oxígeno en el reactor biológico ($S_{O_2}^b = 0$).

6) No hay salida de dióxido de carbono en el reactor biológico ($S_{CO_2}^b = 0$).

7) El mineral alimentado posee un 1% de fósforo. ^[15]

8) El ácido sulfúrico en el reactor de lixiviación se utiliza exclusivamente para lixiviar la fosforita presente en el mineral (es decir no se lixivian otros compuestos).

9) La conversión en el reactor de lixiviación de la fosforita a ácido fosfórico es de un 95%. ^[9]

10) Se desprecia la muerte celular de las bacterias adheridas del reactor biológico ($M_{XA}^b = 0$).

11) Se desprecia la muerte celular de las bacterias en suspensión del reactor biológico ($M_{XL}^b = 0$).

12) Se extrae del sistema un 90% de ácido fosfórico (con respecto al flujo de salida del reactor de lixiviación), recirculándose un 10% hacia el reactor biológico.

13) La concentración de salida de ácido fosfórico del sistema corresponde a un 50% de P_2O_5 .^[6]

14) No hay consumo de ácido fosfórico en el reactor biológico ($D_{H_3PO_4}^b = 0$), y este no inhibe el crecimiento celular.

15) No hay entrada de células en suspensión al reactor biológico ($E_{X_L}^b = 0$).

16) No hay entrada ni salida de células adheridas en el reactor biológico ($E_{X_A}^b = S_{X_A}^b = 0$).

17) No hay salida de biomasa en el reactor de lixiviación ($S_{X_L}^l = 0 \rightarrow E_{X_L}^l = S_{debris}^l$).

18) Se suponen consumos estequiométricos de las especies involucradas en cada reacción (ver Reacción 1 y Reacción 5).

19) No se purga ácido sulfúrico ($E_{H_2SO_4}^b = S_{H_2SO_4}^l$).

20) Se purga el 100% del yeso, del debris celular y del residuo mineral.

21) Se retira el 100% del ácido fluorhídrico producido.

22) Se asume que la densidad de las células es igual a la densidad del agua, y que la densidad y masa molar del mineral (dado que se desconoce su composición) son iguales a los de la fosforita.

23) Se considera que la masa de una célula corresponde a 10^{-15} [kg/cel], que corresponde a la masa de la bacteria *Escherichia coli*.^[30]

En base a los supuestos señalados, se esquematiza el proceso en el siguiente diagrama de bloques.

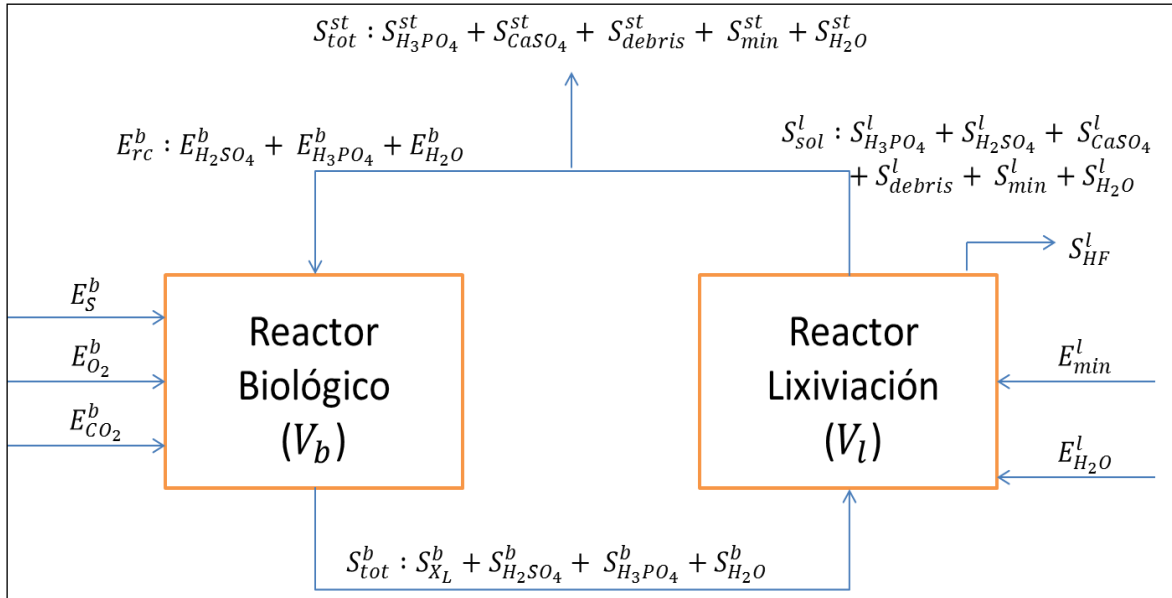


Figura 8: Diagrama de bloques del proceso.
(*rc: recirculación, tot: total, sol: en solución, st: sistema*)

4.4 Ecuaciones.

En esta sección se detallan los balances de masa para cada especie y de la masa total en ambos reactores, y las ecuaciones de producción y consumo de estas.

4.4.1 Balances de Masa.

- Reactor Biológico.

- Masa Global.

Ec.11)

$$\frac{dm_{tot}^b}{dt} = E_{X_L}^b + E_{\bar{X}_A}^b + E_S^b + E_{H_2O}^b + E_{H_2SO_4}^b + E_{H_3PO_4}^b + E_{O_2}^b + E_{CO_2}^b - S_{X_L}^b - S_{\bar{X}_A}^b - S_S^b - S_{H_2O}^b - S_{H_2SO_4}^b - S_{H_3PO_4}^b - S_{O_2}^b - S_{CO_2}^b$$

- Azufre.

$$\frac{dm_S^b}{dt} = E_S^b - S_S^b - D_S^b \quad \text{Ec.12)}$$

- Agua.

$$\frac{dm_{H_2O}^b}{dt} = E_{H_2O}^b - S_{H_2O}^b - D_{H_2O}^b \quad \text{Ec.13)}$$

-Oxígeno.

$$\frac{dm_{O_2}^b}{dt} = E_{O_2}^b - S_{O_2}^b - D_{O_2}^b \quad \text{Ec.14)}$$

- Dióxido de Carbono.

$$\frac{dm_{CO_2}^b}{dt} = E_{CO_2}^b - S_{CO_2}^b - D_{CO_2}^b \quad \text{Ec.15)}$$

- Ácido sulfúrico.

$$\frac{dm_{H_2SO_4}^b}{dt} = E_{H_2SO_4}^b - S_{H_2SO_4}^b + P_{H_2SO_4}^b \quad \text{Ec.16)}$$

- Biomasa.

En el caso de la biomasa se deben diferenciar las células suspendidas (X_L) y las células adheridas a la superficie de las partículas de azufre (X_A). Luego la concentración másica de células totales (X_T) al interior del reactor es:

$$X_T = \frac{A_S}{V_b} X_A + X_L \quad \text{Ec.17)}$$

Donde:

X_T : Concentración total de bacterias al interior del reactor biológico [cel/m³].

A_S : Área superficial de las partículas de azufre total al interior del reactor [m²].

V_b : Volumen del reactor biológico [m³].

X_A : N° de bacterias adheridas al azufre por área superficial de azufre [cel/m²].

X_L : N° de bacterias en suspensión [cel/m³].

Haciendo el siguiente cambio de variable:

$$\widetilde{X}_A = \frac{A_S}{V_b} \cdot X_A \quad \text{Ec.18)}$$

Se obtiene:

$$X_T = \widetilde{X}_A + X_L \quad \text{Ec.19)}$$

El balance de masa, asumiendo que no hay entrada de células es (a volumen constante):

$$\frac{d(V_b \cdot (\bar{X}_A + X_L))}{dt} = V_b \cdot N_{\bar{X}_A} + V_b \cdot N_{X_L} - V_b \cdot M_{\bar{X}_A}^b - V_b \cdot M_{X_L}^b + \frac{E_{X_L}^b + E_{\bar{X}_A}^b - S_{X_L}^b - S_{\bar{X}_A}^b}{m_x} \quad \text{Ec.20}$$

Considerando que no hay crecimiento de las células en suspensión:

$$\frac{d(V_b \cdot (\bar{X}_A + X_L))}{dt} = V_b \cdot N_{\bar{X}_A} - V_b \cdot M_{\bar{X}_A}^b - V_b \cdot M_{X_L}^b + \frac{E_{X_L}^b + E_{\bar{X}_A}^b - S_{X_L}^b - S_{\bar{X}_A}^b}{m_x}$$

$$\frac{dX_L}{dt} = N_{\bar{X}_A} - M_{\bar{X}_A}^b - M_{X_L}^b + \left(\frac{E_{X_L}^b + E_{\bar{X}_A}^b - S_{X_L}^b - S_{\bar{X}_A}^b}{V_b \cdot m_x} \right) - \frac{d\bar{X}_A}{dt} \quad \text{Ec.21}$$

Para relacionar las células adheridas con las células en suspensión se utiliza la ecuación de isoterma de equilibrio de adsorción de Langmuir:

$$X_A = \frac{K_{eq} \cdot X_{max} \cdot X_L}{1 + K_{eq} \cdot X_L} \quad \text{Ec.22}$$

Multiplicando por el área total de la superficie de las partículas de azufre (A_S) y dividiendo por el volumen del reactor (V_b) a ambos lados de la ecuación:

$$\frac{A_S}{V_b} \cdot X_A = \frac{A_S}{V_b} \cdot \frac{K_{eq} \cdot X_{max} \cdot X_L}{1 + K_{eq} \cdot X_L}$$

$$\bar{X}_A = \frac{A_S}{V_b} \cdot \frac{K_{eq} \cdot X_{max} \cdot X_L}{1 + K_{eq} \cdot X_L} \quad \text{Ec.23}$$

Derivando la Ec.22 en función del tiempo:

$$\frac{dX_A}{dt} = \frac{K_{eq} \cdot X_{max}}{(1 + K_{eq} \cdot X_L)^2} \frac{dX_L}{dt} \quad \text{Ec.24)}$$

Derivando la Ec.23 en función de X_A :

$$\frac{d\widetilde{X}_A}{dX_A} = \frac{A_S}{V_b} \frac{dX_A}{dX_A} = \frac{A_S}{V_b} \quad \text{Ec.25)}$$

Matemáticamente se tiene:

$$\frac{dX_A}{dt} = \frac{dX_A}{d\widetilde{X}_A} \cdot \frac{d\widetilde{X}_A}{dt} = \frac{V_b}{A_S} \cdot \frac{d\widetilde{X}_A}{dt} \quad \text{Ec.26)}$$

Remplazando la Ec.24 en la ecuación anterior:

$$\frac{d\widetilde{X}_A}{dt} = \frac{A_S}{V_b} \cdot \frac{K_{eq} \cdot X_{max}}{(1 + K_{eq} \cdot X_L)^2} \frac{dX_L}{dt} \quad \text{Ec.27)}$$

Definiendo el crecimiento de \widetilde{X}_A y X_A como:

$$N_{\widetilde{X}_A} = \mu \cdot \widetilde{X}_A \quad \text{Ec.28)}$$

$$N_{X_A} = \mu \cdot X_A \quad \text{Ec.29)}$$

Remplazando las Ec.23, Ec.27 y Ec.28 en la Ec.21:

$$\frac{dX_L}{dt} = N_{\bar{X}_A} - M_{\bar{X}_A}^b - M_{X_L}^b + \left(\frac{E_{X_L}^b + E_{\bar{X}_A}^b - S_{X_L}^b - S_{\bar{X}_A}^b}{V_b \cdot m_x} \right) - \frac{A_S}{V_b} \cdot \frac{K_{eq} \cdot X_{max}}{(1 + K_{eq} \cdot X_L)^2} \frac{dX_L}{dt} \quad \text{Ec.30)}$$

$$\frac{dX_L}{dt} = \mu \cdot \left(\frac{A_S}{V_b} \cdot \frac{K_{eq} \cdot X_{max} \cdot X_L}{1 + K_{eq} \cdot X_L} \right) - M_{\bar{X}_A}^b - M_{X_L}^b + \left(\frac{E_{X_L}^b + E_{\bar{X}_A}^b - S_{X_L}^b - S_{\bar{X}_A}^b}{V_b \cdot m_x} \right) - \frac{A_S}{V_b} \cdot \frac{K_{eq} \cdot X_{max}}{(1 + K_{eq} \cdot X_L)^2} \frac{dX_L}{dt} \quad \text{Ec.31)}$$

$$\frac{dX_L}{dt} = \frac{\mu \cdot \left(\frac{A_S}{V_b} \cdot \frac{K_{eq} \cdot X_{max} \cdot X_L}{1 + K_{eq} \cdot X_L} \right) - M_{\bar{X}_A}^b - M_{X_L}^b + \left(\frac{E_{X_L}^b + E_{\bar{X}_A}^b - S_{X_L}^b - S_{\bar{X}_A}^b}{V_b \cdot m_x} \right)}{\left(1 + \frac{A_S}{V_b} \cdot \frac{K_{eq} \cdot X_{max}}{(1 + K_{eq} \cdot X_L)^2} \right)} \quad \text{Ec.32)}$$

Finalmente se asume que el consumo de azufre es proporcional al crecimiento bacteriano de las células adheridas:

$$D_S^b = \frac{A_S}{Y_A} \cdot N_{X_A} \quad \text{Ec.33)}$$

- Ácido fosfórico.

$$\frac{dm_{H_3PO_4}^b}{dt} = E_{H_3PO_4}^b - S_{H_3PO_4}^b - D_{H_3PO_4}^b \quad \text{Ec.34)}$$

- Reactor de Lixiviación.

- Masa Global.

Ec.35)

$$\frac{dm_{tot}^l}{dt} = E_S^l + E_{min}^l + E_{H_2O}^l + E_{H_2SO_4}^l + E_{H_3PO_4}^l + E_{X_L}^l + E_{X_A}^l - S_S^l - S_{min}^l - S_{H_2O}^l - S_{H_2SO_4}^l - S_{H_3PO_4}^l - S_{X_L}^l - S_{X_A}^l - S_{CaSO_4}^l - S_{HF}^l$$

- Mineral.

$$\frac{dm_{min}^l}{dt} = E_{min}^l - S_{min}^l - D_{min}^l \quad \text{Ec.36)}$$

- Fosforita.

$$\frac{dm_{fos}^l}{dt} = E_{fos}^l - S_{fos}^l - D_{fos}^l \quad \text{Ec.37)}$$

- Agua.

$$\frac{dm_{H_2O}^l}{dt} = E_{H_2O}^l - S_{H_2O}^l - D_{H_2O}^l \quad \text{Ec.38)}$$

- Biomasa.

$$\frac{dX_L}{dt} = \frac{E_{X_L}^l - S_{X_L}^l}{V_l \cdot m_x} - M_{X_L}^l \quad \text{Ec.39)}$$

- Ácido sulfúrico.

$$\frac{dm_{H_2SO_4}^l}{dt} = E_{H_2SO_4}^l - S_{H_2SO_4}^l - D_{H_2SO_4}^l \quad \text{Ec.40)}$$

- Ácido fosfórico.

$$\frac{dm_{H_3PO_4}^l}{dt} = E_{H_3PO_4}^l - S_{H_3PO_4}^l + P_{H_3PO_4}^l \quad \text{Ec.41)}$$

- Yeso.

$$\frac{dm_{CaSO_4}^l}{dt} = -S_{CaSO_4}^l + P_{CaSO_4}^l \quad \text{Ec.42)}$$

- Ácido fluorhídrico.

$$\frac{dm_{HF}^l}{dt} = -S_{HF}^l + P_{HF}^l \quad \text{Ec.43)}$$

4.4.2 Ecuaciones estequiométricas.

Además por estequiometria se tiene:

- Consumo de azufre en función del consumo de fosforita.

$$D_S^b = 10 \cdot \frac{PM_S}{PM_{fos}} \cdot D_{fos}^l \quad \text{Ec.44)}$$

- Consumo de oxígeno en función del consumo de azufre.

$$D_{O_2}^b = \frac{3}{2} \cdot \frac{PM_{O_2}}{PM_S} \cdot D_S^b \quad \text{Ec.45)}$$

- Consumo de agua en función del consumo de azufre.

$$D_{H_2O}^b = \frac{PM_{agua}}{PM_S} \cdot D_S^b \quad \text{Ec.46)}$$

- Producción de ácido sulfúrico en función del consumo de azufre.

$$P_{H_2SO_4}^b = \frac{PM_{H_2SO_4}}{PM_S} \cdot D_S^b \quad \text{Ec.47)}$$

- Consumo de agua en función del consumo de fosforita.

$$D_{H_2O}^l = 20 \cdot \frac{PM_{agua}}{PM_{fos}} \cdot D_{fos}^l \quad \text{Ec.48)}$$

- Consumo de ácido sulfúrico en función del consumo de fosforita.

$$D_{H_2SO_4}^l = 10 \cdot \frac{PM_{H_2SO_4}}{PM_{fos}} \cdot D_{fos}^l \quad \text{Ec.49)}$$

- Producción de ácido fosfórico en función del consumo de fosforita.

$$P_{H_3PO_4}^l = 6 \cdot \frac{PM_{H_3PO_4}}{PM_{fos}} \cdot D_{fos}^l \quad \text{Ec.50)}$$

- Producción de yeso dihidratado en función del consumo de fosforita.

$$P_{CaSO_4}^l = 10 \cdot \frac{PM_{CaSO_4}}{PM_{fos}} \cdot D_{fos}^l \quad \text{Ec.51)}$$

- Producción de ácido fluorhídrico en función del consumo de fosforita.

$$P_{HF}^l = 2 \cdot \frac{PM_{HF}}{PM_{fos}} \cdot D_{fos}^l \quad \text{Ec.52)}$$

4.5 Cinética de Lixiviación de Fósforo.

Como se mencionó en la sección 2.6 el modelo utilizado para la cinética de lixiviación del mineral fosfatado es el modelo del núcleo sin reaccionar. Con el fin de determinar la tapa controlante y consecuentemente, la expresión cinética a utilizar (Ec.6, Ec.7 o Ec.8) se realiza un ajuste a la curva experimental de extracción de fósforo de la publicación “Leaching of phosphorus from incinerated sewage sludge ash by means of acid extraction followed by adsorption on orange waste gel”^[39], la cual se obtuvo bajo los siguientes parámetros:

Tabla 5: Parámetros utilizados en la extracción de fósforo.^[39]

Radio de la partícula [m]	pH
$1,5 \cdot 10^{-4}$	1,3

Primero se calculan los parámetros D_E y K_R con las Ec.7 y Ec.8, respectivamente, en función de cada par de valores (tiempo, conversión) obtenidos en la publicación:

Tabla 6: Valores de D_E y K_R para cada par de puntos (tiempo, conversión).

D_E [m ² /min]	K_R [m/min]
2,96E-09	6,44E-04
2,34E-08	1,39E-03
1,49E-08	7,94E-04
1,30E-08	6,20E-04
1,27E-08	5,47E-04
1,23E-08	4,96E-04
1,16E-08	4,49E-04
1,08E-08	4,09E-04
1,09E-08	3,97E-04

1,14E-08	4,07E-04
1,26E-08	5,03E-04
Promedio	Promedio
1,24E-08	6,05E-04

Con el valor promedio de cada parámetro se calcula el tiempo para el caso en que controla la reacción, el caso en que controla la difusión, y el caso en que controlan ambas etapas, y se calcula el error con respecto al tiempo experimental (t_{exp}).

Tabla 7: Tiempo cuando controla la reacción, la difusión o ambas etapas.

α	t_{exp} [min]	t control reacción [min]	t control difusión [min]	t control reacción y difusión [min]	% error control reacción	% error control difusión	% error control reacción y difusión
0	0	0	0	0	-	-	-
0,18	5	5	1	7	6	76	30
0,62	10	23	19	42	129	89	318
0,68	20	26	24	50	31	20	151
0,75	30	31	31	62	3	4	107
0,82	40	36	41	77	10	2	93
0,87	50	41	50	91	18	1	81
0,90	60	45	56	101	26	7	68
0,92	70	47	61	108	32	13	55
0,95	80	53	70	123	34	12	53
0,98	90	61	83	144	33	8	59
1,00	100	83	101	184	17	1	84

Se observa que el menor error se presenta cuando controla la difusión. Por lo tanto se determina que la etapa controlante es la difusión del reactante al interior de la partícula de mineral, con un valor del coeficiente de difusión (D_E) de $1,24 \cdot 10^{-8}$ [m²/min], con lo cual la expresión cinética a utilizar es la Ec.6. En el Gráfico 1 se observa la curva experimental y la curva ajustada mediante el modelo del núcleo sin reaccionar cuando esta etapa controla.

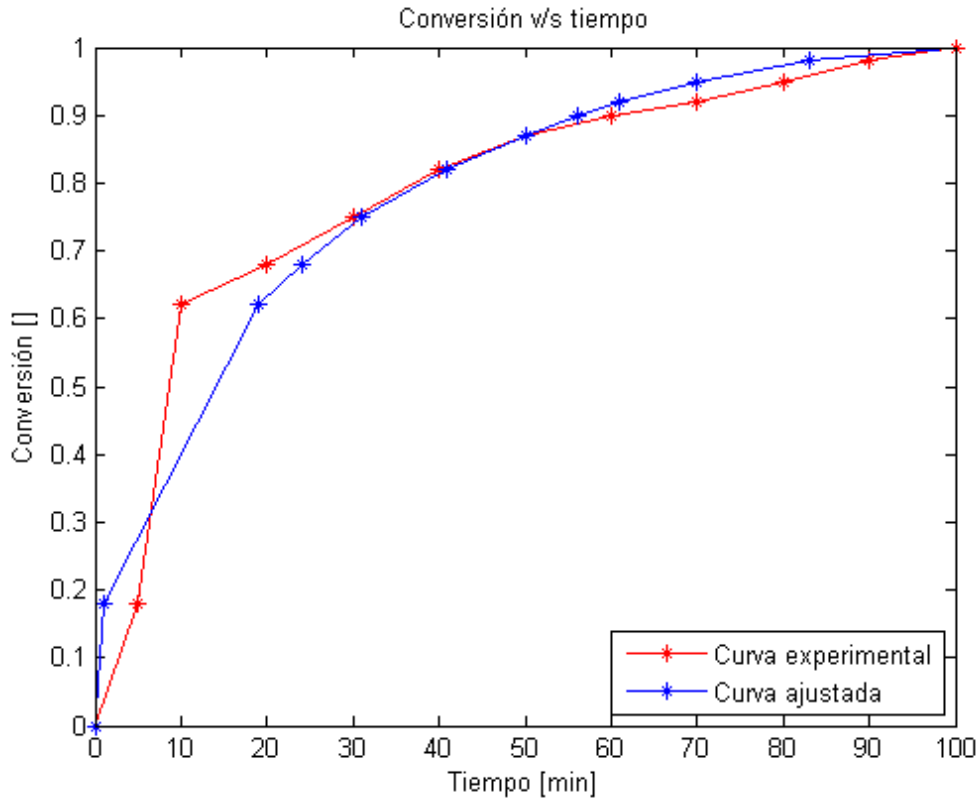


Gráfico 1: Conversión de fósforo versus tiempo.

4.6 Cinética de Biolixiviación de Azufre.

Según lo expuesto en la sección 2.5 existen diversas expresiones para modelar la cinética bacteriana de oxidación del azufre. Para efectos de este estudio se utiliza la expresión dada por la Ec.4 de manera de estudiar únicamente el efecto del pH en el crecimiento de las bacterias y no redundar con el parámetro de inhibición del que depende μ en las Ec.2 y Ec.3 (el cual también depende de la concentración de ácido sulfúrico al interior del reactor). Debido a lo anterior es que se asume que la tasa específica de crecimiento (μ) es igual a la tasa específica máxima de crecimiento (μ_{max}), la cual a su vez corresponde a la expresión de la Ec.4:

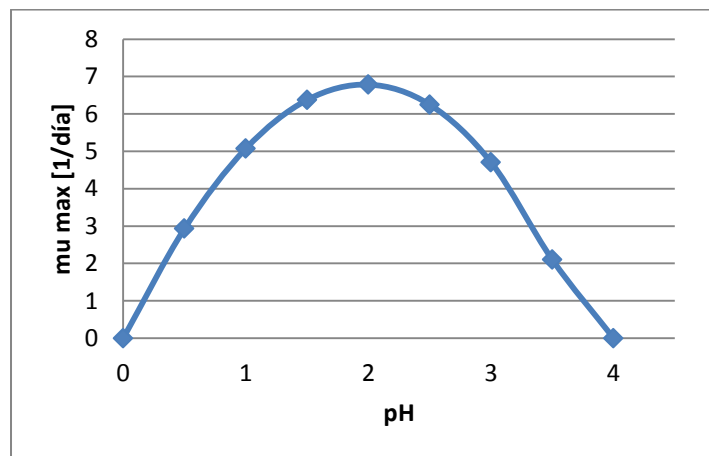
$$\mu_{max} = z_1 \cdot (pH - pH_{min}) \cdot (1 - \exp(z_2 \cdot (pH - pH_{max})))$$

Dado que fuera del rango de pH de crecimiento de la bacteria μ_{max} alcanza valores negativos, se asume que en ese caso μ es igual a cero.

Por otra parte, dado que el ácido sulfúrico es un ácido fuerte en su primera disociación ($Ka_1=10^3$, $Ka_2=10^{-2}$)^[25] el pH en función de la concentración de ácido sulfúrico se asume como:

$$pH = -\log(C_{H_2SO_4}) \quad \text{Ec.53)}$$

Como se mencionó en la Tabla 2, z_1 y z_2 corresponden a los coeficientes de regresión de la ecuación que relaciona el pH con la tasa específica máxima de crecimiento (μ_{max}). Pese a que se desconoce el valor de estos coeficientes para la bacteria *Acidithiobacillus thiooxidans*, se supuso que el valor de z_1 es de 25 [1/día] y z_2 de 0,0814 (este último corresponde al valor que posee este coeficiente para la bacteria *Lactobacillus curvatus*^[23]), dado que se tienen nociones de los valores que puede alcanzar μ (según lo visto en la Tabla 3). Con ello y la Ec.4 se construyó el siguiente gráfico.



**Gráfico 2: Tasa específica de crecimiento versus pH.
(Elaboración propia)**

4.7 Grados de Libertad.

Para calcular los grados de libertad del sistema (N_d) se utilizan las siguientes ecuaciones: ^[24]

$$N_d = N_v - N_r \quad \text{Ec.54)}$$

$$N_v = N_c \cdot (N_{sp} + 2) \quad \text{Ec.55)}$$

$$N_r = BM + E_{est} + BE + T + P + C_{zero} + F_c \quad \text{Ec.56)}$$

Con respecto al N° de variables (N_v) se tiene que:

$$N_c \text{ (N° de corrientes)} = 10$$

$$N_{sp} \text{ (N° de especies)} = 13 \text{ (ver Tabla 4).}$$

Luego:

$$N_v = 10 \cdot (13 + 2) = 150$$

Con respecto al N° de restricciones (N_r) se tiene:

BM (*Balances de masa independientes*) = 11. Considera el balance de azufre (S), oxígeno (O₂), dióxido de carbono (CO₂), agua (H₂O), relave mineral (min), fosforita (fos), biomasa, ácido sulfúrico (H₂SO₄), ácido fosfórico (H₃PO₄), yeso (CaSO₄) y ácido fluorhídrico (HF).

E_{est} (*Ecuaciones estequimétricas independientes*) = 7. Se consideraron las Ec.45, Ec.46, Ec.47, Ec.48, Ec.50, Ec.51, y Ec.52.

BE (*Balance de energía*) = 0. En el proceso no se considera el balance de energía.

$T = 9$. La temperatura de todas las corrientes es la misma.

$P = 9$. La presión de todas las corrientes es la misma.

C_{zero} (*Composición cero*) = 97. Dado que ninguna composición es conocida, se calcula para cada corriente como el N° total de especies menos el N° de especies de dicha corrientes, por ejemplo

E_S^b : 11 composiciones cero (12 especies menos el azufre)

Además dentro de las restricciones se debe considerar la ecuación de isoterma de equilibrio de Langmuir que relaciona dos de las variables consideradas.

Luego:

$$N_r = 11 + 7 + 0 + 9 + 9 + 97 + 1 = 134$$

Finalmente

$$N_d = 150 - 134 = 16 \text{ variables de restricción.}$$

4.8 Parámetros del modelo.

A continuación se detallan los parámetros de cada reactor necesarios para llevar a cabo la simulación.

Tabla 8: Parámetros de cada reactor para llevar a cabo la simulación.

Reactor	Parámetros
Biológico	Razón volumen total de azufre al interior del reactor versus volumen del reactor biológico (ε) (ver Anexo B.2).
	Radio promedio de la partícula de azufre al interior del reactor biológico (R_b).
	Parámetros para el cálculo de μ_{max} como función del pH del reactor biológico (z_1 y z_2).
	Parámetros biológicos: X_{max} y K_{eq} para la ecuación de Langmuir, Y_a para el balance de biomasa.
Lixiviación	Flujo másico de entrada de mineral (E_{min}^l) al reactor de lixiviación.
	pH de operación del reactor de lixiviación (pH_l).
	% p/p de sólidos versus solución de salida del reactor de lixiviación ($p_{sólido/sol}$).
	Porcentaje que se retira de ácido fosfórico del sistema completo (q).
	% p/p de salida del sistema de pentóxido de fósforo (P_2O_5) versus la solución total de salida ($p_{P_2O_5/sol}$).
	Radio inicial de la partícula de mineral (R).
	Parámetros para el cálculo de la conversión versus tiempo (D_E).
	Porcentaje de fosforita en el mineral.
Conversión de la fosforita.	

Cabe señalar que consecuentemente con los grados de libertad obtenidos en la sección 4.7, se requiere fijar 16 parámetros para poder resolver el sistema.

4.9 Variables de salida.

A continuación se detallan las variables de salida que entrega la simulación. Estas son las variables calculadas mediante la simulación, que dependen de los parámetros vistos en la sección anterior.

1) Flujos másicos y volumétricos, de entrada y salida, de cada especie y del total para cada reactor.

2) pH del reactor biológico (pH_b), y concentración de ácido sulfúrico al interior de cada reactor ($C_{H_2SO_4}^b$, $C_{H_2SO_4}^l$).

3) Concentración de células en suspensión y adheridas a las partículas de azufre del reactor biológico (X_L , X_A).

4) Tasa específica de crecimiento de las bacterias adheridas (μ).

5) Volumen del reactor biológico y del reactor de lixiviación (V_b , V_l).

6) Tiempo de residencia en el reactor biológico y en el reactor de lixiviación (τ_b , τ_l).

El algoritmo para resolver el sistema y obtener el valor de las variables de salida se encuentra en el Anexo C.

4.10 Sistema de Ecuaciones a Resolver.

El sistema de ecuaciones a resolver es el siguiente:

$$S_{CaSO_4}^l = 10 \cdot \frac{PM_{CaSO_4}}{PM_{fos}} \cdot 0,095 \cdot E_{min}^l \quad \text{Ec.57)}$$

$$S_{min}^l = 0,905 \cdot E_{min}^l \quad \text{Ec.58)}$$

$$S_{H_3PO_4}^l = \frac{6 \cdot \frac{PM_{H_3PO_4}}{PM_{min}} \cdot 0,095 \cdot E_{min}^l}{q} \quad \text{Ec.59)}$$

$$S_{HF}^l = 2 \cdot \frac{PM_{HF}}{PM_{fos}} \cdot 0,095 \cdot E_{min}^l \quad \text{Ec.60)}$$

Ec.61)

$$E_{H_2SO_4}^l = \frac{S_{CaSO_4}^l + S_{min}^l}{p_{\text{sólido/sol}} \cdot (w_{H_2O}^l \cdot \rho_{H_2O}^l + w_{H_2SO_4}^l \cdot \rho_{H_2SO_4}^l + w_{H_3SO_4}^l \cdot \rho_{H_3SO_4}^l + w_{X_L}^l \cdot \rho_{X_L}^l)} \cdot 10^{-pH_l} \\ \cdot PM_{H_2SO_4} + \frac{PM_{H_2SO_4}}{PM_{fos}} \cdot 0,95 \cdot D_{min}^l$$

Ec.62)

$$E_{H_2O}^l = \frac{S_{CaSO_4}^l + S_{min}^l}{p_{\text{sólido/sol}}} - S_{CaSO_4}^l - S_{H_3PO_4}^l - E_{CO_2}^b - S_{min}^l \\ - \frac{S_{CaSO_4}^l + S_{min}^l}{p_{\text{sólido/sol}} \cdot (w_{H_2O}^b \cdot \rho_{H_2O}^b + w_{H_2SO_4}^b \cdot \rho_{H_2SO_4}^b + w_{H_3SO_4}^b \cdot \rho_{H_3SO_4}^b + w_{X_L}^b \cdot \rho_{X_L}^b)} \cdot 10^{-pH_l} \\ \cdot PM_{H_2SO_4} + 20 \cdot \frac{PM_{agua}}{PM_{min}} \cdot 0,095 \cdot E_{min}^l$$

$$t = \frac{\rho_b \cdot R^2}{6 \cdot b \cdot D_E \cdot C_a} (1 - 3 \cdot (1 - \alpha)^{2/3} + 2 \cdot (1 - \alpha)) \quad \text{Ec.63)}$$

$$V_l = (E_{min}^l \cdot \rho_{min}^l + E_{H_2O}^l \cdot \rho_{H_2O}^l + E_{H_2SO_4}^l \cdot \rho_{H_2SO_4}^l + E_{H_3PO_4}^l \cdot \rho_{H_3PO_4}^l + E_{X_L}^l \cdot \rho_{X_L}^l) \cdot \tau_l \quad \text{Ec.64)}$$

Ec.65)

$$S_{H_2O}^b = \left(\frac{S_{CaSO_4}^l + S_{min}^l}{p_{\text{sólido/sol}}} - S_{CaSO_4}^l - S_{H_3PO_4}^l - E_{CO_2}^b - S_{min}^l \right) \\ - \frac{S_{CaSO_4}^l + S_{min}^l}{p_{\text{sólido/sol}} \cdot (w_{H_2O}^l \cdot \rho_{H_2O}^l + w_{H_2SO_4}^l \cdot \rho_{H_2SO_4}^l + w_{H_3SO_4}^l \cdot \rho_{H_3SO_4}^l + w_{X_L}^l \cdot \rho_{X_L}^l)} \cdot 10^{-pH_l} \\ \cdot PM_{H_2SO_4} - \left(q \cdot S_{H_3PO_4}^l \cdot \left(\frac{1}{\frac{S_{H_3SO_4}^{st}}{S_{H_3SO_4}^{st} + S_{H_2O}^{st}}} \right) - 1 \right) - \frac{PM_{agua}}{PM_{fos}} \cdot 0,95 \cdot E_{min}^l$$

$$E_{O_2}^b = \frac{3}{2} \cdot \frac{PM_{O_2}}{PM_{fos}} \cdot 0,95 \cdot E_{min}^l \quad \text{Ec.66)}$$

$$S_{X_L}^b = E_{CO_2}^b \quad \text{Ec.67)}$$

$$E_{H_2SO_4}^b = \frac{S_{CaSO_4}^l + S_{min}^l}{p_{\frac{sólido}{sol}} \cdot (w_{H_2O}^l \cdot \rho_{H_2O}^l + w_{H_2SO_4}^l \cdot \rho_{H_2SO_4}^l + w_{H_3PO_4}^l \cdot \rho_{H_3PO_4}^l + w_{X_L}^l \cdot \rho_{X_L}^l)} \cdot 10^{-pH_l} \cdot PM_{H_2SO_4} \quad \text{Ec.68)}$$

$$E_{H_3PO_4}^b = (1 - q) \cdot S_{H_3PO_4}^l \quad \text{Ec.69)}$$

$$pH_b = -\log\left(\frac{E_{H_2SO_4}^l}{(S_{H_2O}^b \cdot \rho_{H_2O}^b + E_{H_2SO_4}^l \cdot \rho_{H_2SO_4}^b + E_{H_3PO_4}^b \cdot \rho_{H_3PO_4}^b + S_{X_L}^b \cdot \rho_{X_L}^b) \cdot PM_{H_2SO_4}}\right) \quad \text{Ec.70)}$$

$$\text{Ec.71)}$$

$$V_b = \frac{\frac{PM_S}{PM_{fos}} \cdot 0,95 \cdot E_{min}^l \cdot Y_a}{z_1 \cdot (pH - pH_{min}) \cdot (1 - \exp(z_2 \cdot (pH - pH_{max}))) \cdot \frac{3 \cdot \varepsilon}{R_b} \cdot \frac{K_{eq} \cdot X_{max} \cdot \frac{S_{X_L}^b}{S_{H_2O}^b \cdot \rho_{H_2O}^b + E_{H_2SO_4}^l \cdot \rho_{H_2SO_4}^b + E_{H_3PO_4}^b \cdot \rho_{H_3PO_4}^b + S_{X_L}^b \cdot \rho_{X_L}^b}}{1 + K_{eq} \cdot \frac{S_{X_L}^b}{S_{H_2O}^b \cdot \rho_{H_2O}^b + E_{H_2SO_4}^l \cdot \rho_{H_2SO_4}^b + E_{H_3PO_4}^b \cdot \rho_{H_3PO_4}^b + S_{X_L}^b \cdot \rho_{X_L}^b}}}$$

$$\tau_b = \frac{V_b}{E_S^b \cdot \rho_S^b + E_{H_2O}^b \cdot \rho_{H_2O}^b + E_{O_2}^b \cdot \rho_{O_2}^b + E_{CO_2}^b \cdot \rho_{CO_2}^b + E_{H_2SO_4}^b \cdot \rho_{H_2SO_4}^b + E_{H_3PO_4}^b \cdot \rho_{H_3PO_4}^b} \quad \text{Ec.72)}$$

Cabe señalar que consecuentemente con los grados de libertad obtenidos en la sección 4.7, el sistema se resuelve con 16 ecuaciones linealmente independientes.

5. Resultados.

En la presente sección se detallan los resultados obtenidos en la simulación realizada con el modelo computacional desarrollado.

La simulación se realizó resolviendo el set de ecuaciones presentado en la sección 4.10. En los escenarios estudiados se varía el valor del pH del reactor de lixiviación (pH_l), del parámetro $p_{sólido/sol}$, y del parámetro ε . Luego, estos tres son los parámetros variables del sistema. Los valores de todos los parámetros utilizados se encuentran en la siguiente tabla.

Tabla 9: Valor de los parámetros del modelo.

Reactor	Parámetro	Valor	Condición	Ref.
Lixiviación	E_{min}^l	100 [ton/día]	Fija	*
	pH_l	Desde 1 hasta 5,0 (cada 0,1)	Variable	*
	$p_{sólido/sol}$	0,10 – 0,25 – 0,40	Variable	*
	q	0,9 []	Fija	[35]
	$p_{P_2O_5/sol}$	0,5 []	Fija	[6]
	R	$6,5 \cdot 10^{-5}$ [m]	Fija	[9]
	%fosforita	1%	Fija	[15]
	% conversión	95%	Fija	[9]
Biológico	ε	0,01 – 0,05 – 0,1	Variable	*
	R_b	$3 \cdot 10^{-5}$ [m]	Fija	[22]
	z_1	25 [1/día]	Fija	*
	z_2	0,0814	Fija	[23]
	K_{eq}	$2 \cdot 10^{-15}$ [m ³ /cel]	Fija	[22]
	X_{max}	10^{12} [cel/m ²]	Fija	[22]
	Y_a	$4,9 \cdot 10^{14}$ [cel/kg]	Fija	[22]

* Parámetros establecidos para el estudio.

5.1 Dimensionamiento del Reactor Biológico.

De la simulación se obtienen los Gráfico 3 y Gráfico 4. El Gráfico 3 presenta la variación del pH de operación en el reactor biológico (pH_b) en función del pH de operación del reactor de lixiviación (pH_l), para los diferentes valores de $p_{sólido/sol}$.

Se observa que a medida que aumenta pH_l también aumenta pH_b , y que la variación de este último posee una tendencia polinómica, exhibiendo que a mayor valor de $p_{sólido/sol}$ la variación de pH_b es más amortiguada, volviéndose asintótica a menor pH_l . Además, el gráfico presenta que a mayor valor de $p_{sólido/sol}$ para un mismo valor de pH_l , menor es el valor de pH_b ; y que independiente del valor de $p_{sólido/sol}$ la acidez siempre es mayor en el reactor biológico que en el reactor de lixiviación.

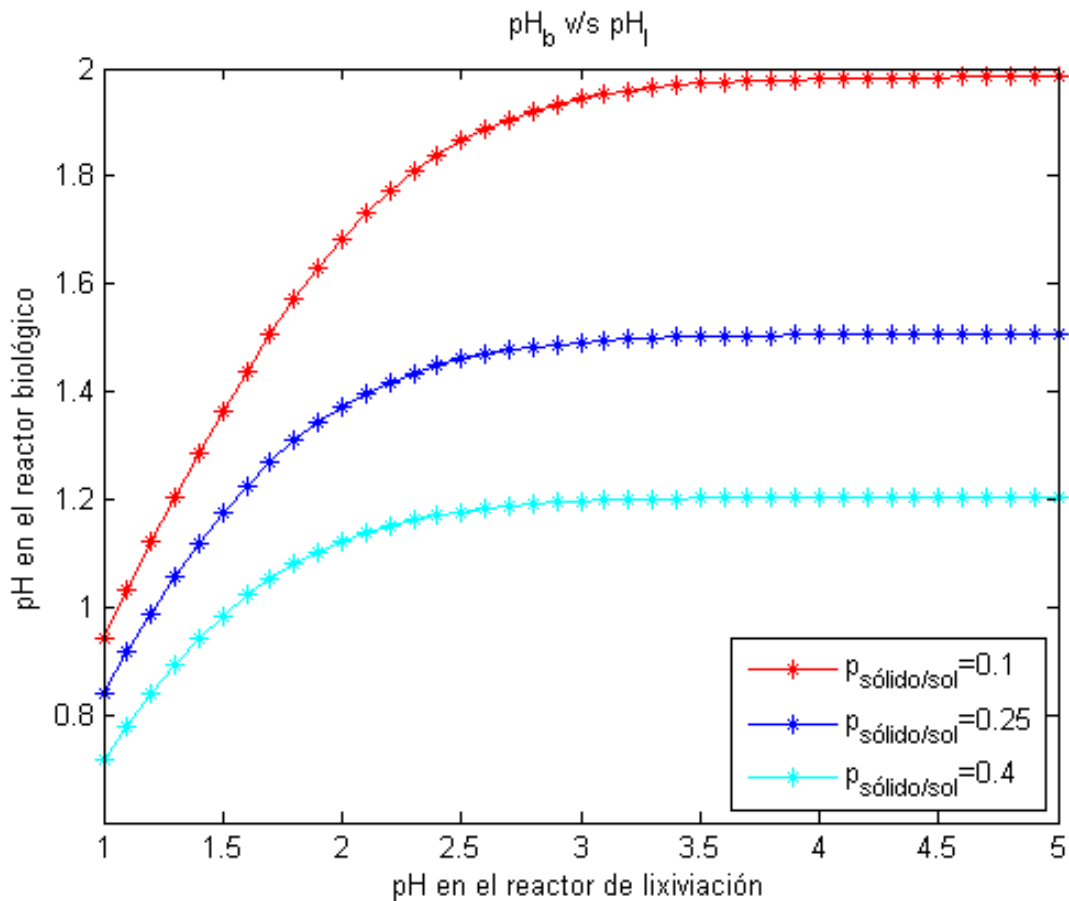


Gráfico 3: pH del reactor biológico versus pH del reactor de lixiviación para los distintos valores de $p_{sólido/sol}$.

El Gráfico 4 exhibe la variación del volumen del reactor biológico en función del pH de operación del reactor de lixiviación (pH_l) para los diferentes valores de $p_{sólido/sol}$ y de ε . Se observa que independiente de los valores de $p_{sólido/sol}$ y de ε al aumentar el valor del pH disminuye el volumen del reactor biológico. También se observa que a mayor $p_{sólido/sol}$ menor es el volumen del reactor para un mismo

valor de pH_l y de ε , y que a mayor ε menor es el volumen del reactor para un mismo valor de pH_l y de $p_{sólido/sol}$.

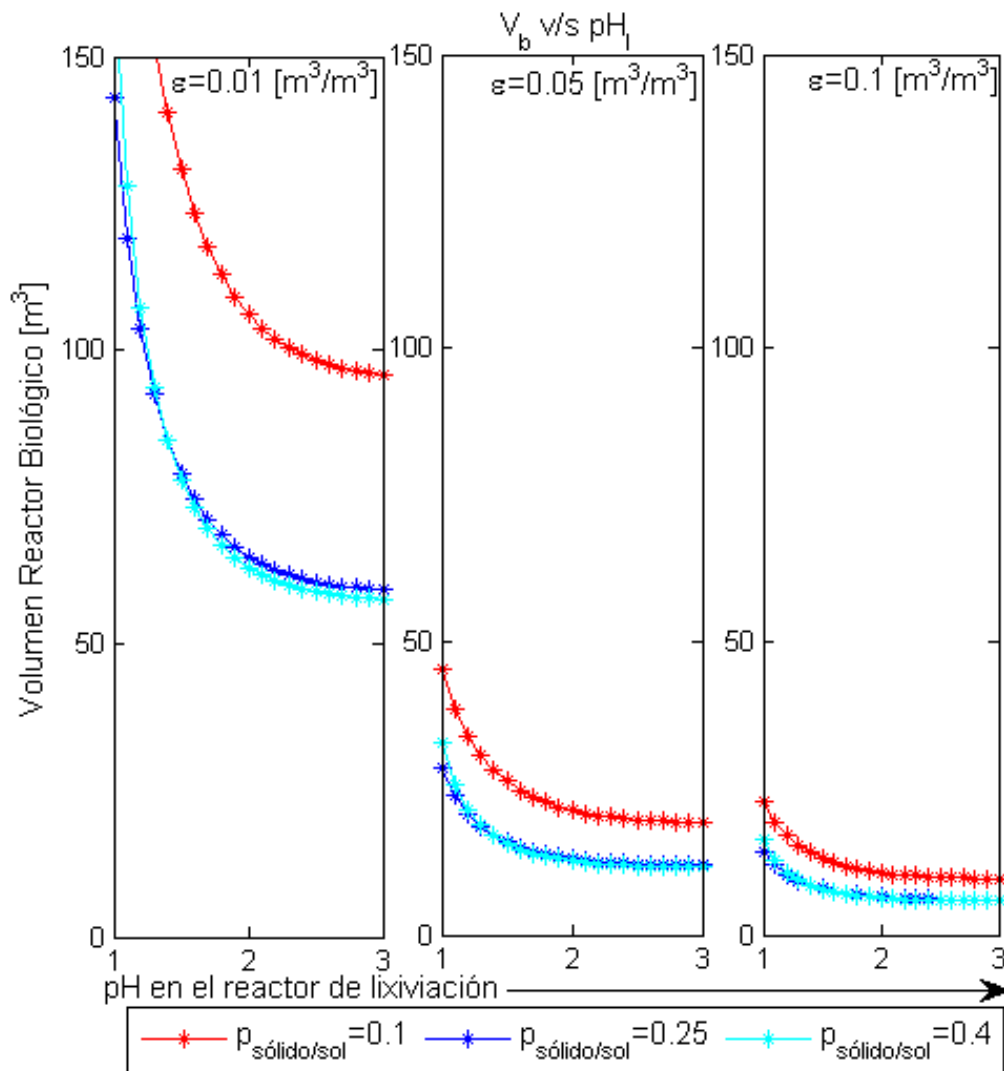


Gráfico 4: Volumen del reactor biológico versus pH del reactor de lixiviación para los diferentes valores de $p_{sólido/sol}$ y de ε .

Complementario al gráfico anterior, en la Tabla 10 se detalla el volumen del reactor biológico para 9 valores particulares de pH_l frente a los diferentes valores del $p_{sólido/sol}$ y de ε , con el fin de distinguir de mejor forma la variación del volumen en cada caso.

Tabla 10: Volumen del reactor biológico [m³] para los diferentes valores de pH_l , $p_{sólido/sol}$ y de ε .

ε [m ³ /m ³]	0,01			0,05			0,1		
$p_{sólido/sol} \rightarrow$ $pH_l \downarrow$	0,10	0,25	0,40	0,10	0,25	0,40	0,10	0,25	0,40
1,0	227	143	164	45,3	28,6	32,8	22,7	14,3	16,4
1,5	131	79,0	77,9	26,2	15,8	15,6	13,1	7,90	7,79
2,0	106	64,7	63,0	21,2	12,9	12,6	10,6	6,47	6,30
2,5	98,2	60,4	58,8	19,6	12,1	11,8	9,82	6,04	5,88
3,0	95,7	59,1	57,5	19,1	11,8	11,5	9,57	5,91	5,75
3,5	94,9	58,7	57,1	19,0	11,7	11,4	9,49	5,87	5,71
4,0	94,7	58,5	57,0	18,9	11,7	11,4	9,47	5,85	5,70
4,5	94,6	58,5	57,0	18,9	11,7	11,4	9,46	5,85	5,70
5,0	94,6	58,5	56,9	18,9	11,7	11,4	9,46	5,85	5,69

En la Tabla 11 se presenta el tiempo de residencia del reactor biológico en función del pH de operación del reactor de lixiviación, frente a los diferentes valores del $p_{sólido/sol}$ y de ε . Se observa que independiente de los valores de $p_{sólido/sol}$ y de ε al aumentar el valor del pH disminuye el tiempo de residencia en el reactor biológico. También se observa que a mayor $p_{sólido/sol}$ mayor es el tiempo de residencia para un mismo valor de pH_l y de ε , y que a mayor ε menor es el tiempo de residencia para un mismo valor de pH_l y de $p_{sólido/sol}$.

Tabla 11: Tiempo de residencia en el reactor biológico [min] para los diferentes valores de pH_l , del $p_{sólido/sol}$ y de ε .

ε [m ³ /m ³]	0,01			0,05			0,1		
$p_{sólido/sol} \rightarrow$ $pH_l \downarrow$	0,10	0,25	0,40	0,10	0,25	0,40	0,10	0,25	0,40
1,0	243	280	404	48,7	56,0	80,8	24,3	28,0	40,4
1,5	140	154	192	28,1	30,9	38,4	14,0	15,4	19,2
2,0	114	126	155	22,8	25,3	31,0	11,4	12,6	15,5
2,5	105	118	145	22,8	25,3	31,0	10,5	11,8	14,5
3,0	103	115	142	20,5	23,1	28,3	10,3	11,5	14,2
3,5	102	115	141	20,3	22,9	28,1	10,2	11,5	14,1
4,0	101	114	140	20,3	22,9	28,0	10,1	11,4	14,0
4,5	101	114	140	20,3	22,9	28,0	10,1	11,4	14,0
5,0	101	114	140	20,3	22,8	28,0	10,1	11,4	14,0

Finalmente el Gráfico 5 exhibe la variación del volumen del reactor biológico en función del pH de operación del reactor biológico (pH_b) para los diferentes valores de $p_{sólido/sol}$ y de ε . Se observa que independiente de los valores de $p_{sólido/sol}$ y de ε al aumentar el valor del pH disminuye el volumen del reactor biológico. Además se observa que a mayor $p_{sólido/sol}$ menor es el volumen del reactor para un mismo valor de pH_b y de ε , y que a mayor ε menor es el volumen del reactor para un mismo valor de pH_b y de $p_{sólido/sol}$.

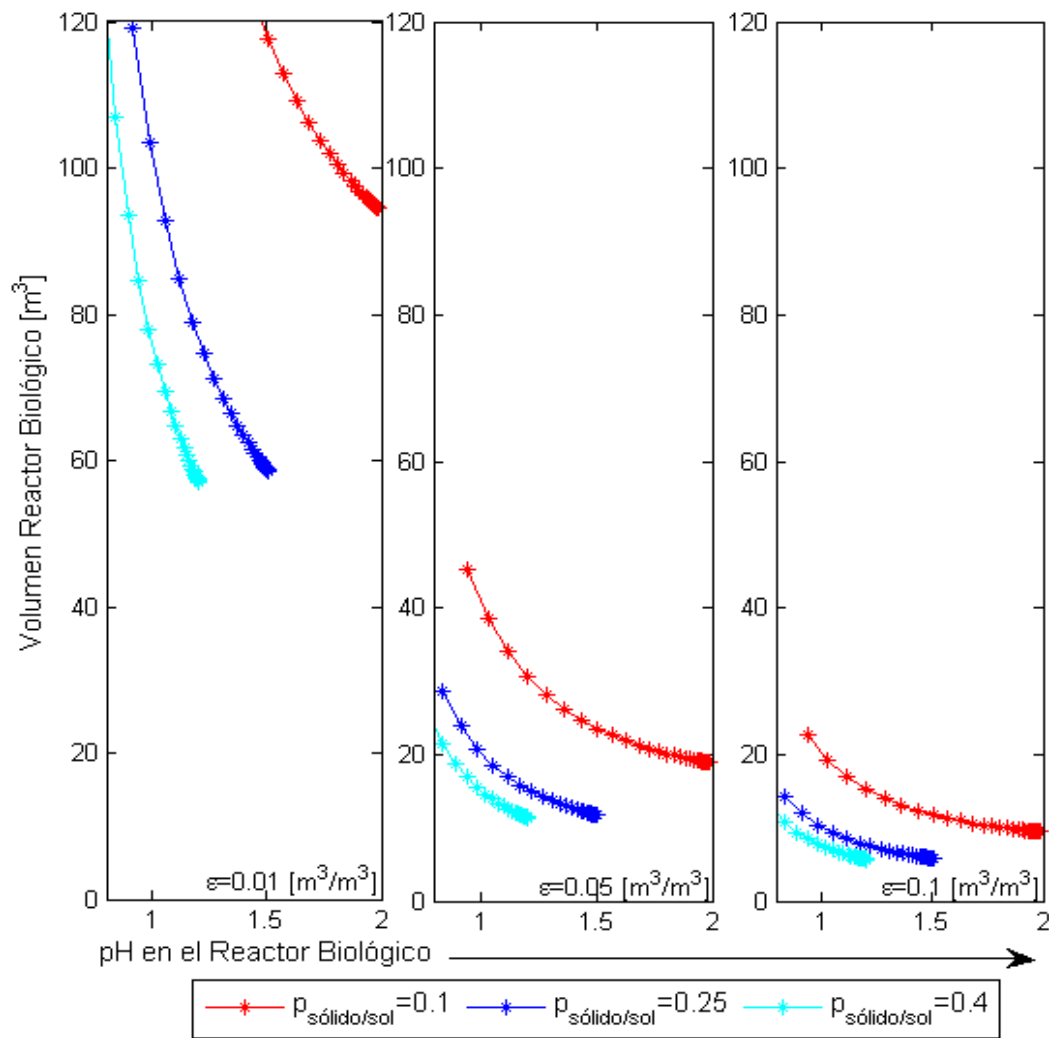


Gráfico 5: Volumen del reactor biológico versus pH del reactor biológico para los diferentes valores de $p_{sólido/sol}$ y de ε .

5.2 Dimensionamiento del Reactor de Lixiviación.

Como se presentó en la sección 4.5, se determinó que la etapa controlante en la lixiviación es la difusión del reactante al interior de la partícula, y que el valor del coeficiente de difusión es de $1,24 \cdot 10^{-8}$ [m²/min]. Con ello se obtiene el Gráfico 6, el cual exhibe la conversión de la fosforita en el tiempo frente a diversos valores de pH de operación del reactor de lixiviación en las primeras dos horas del proceso. En el Anexo F se encuentra el Gráfico 11 para el tiempo completo requerido. En este gráfico se observa que a mayor pH_l mayor es el tiempo necesario para alcanzar una misma conversión.

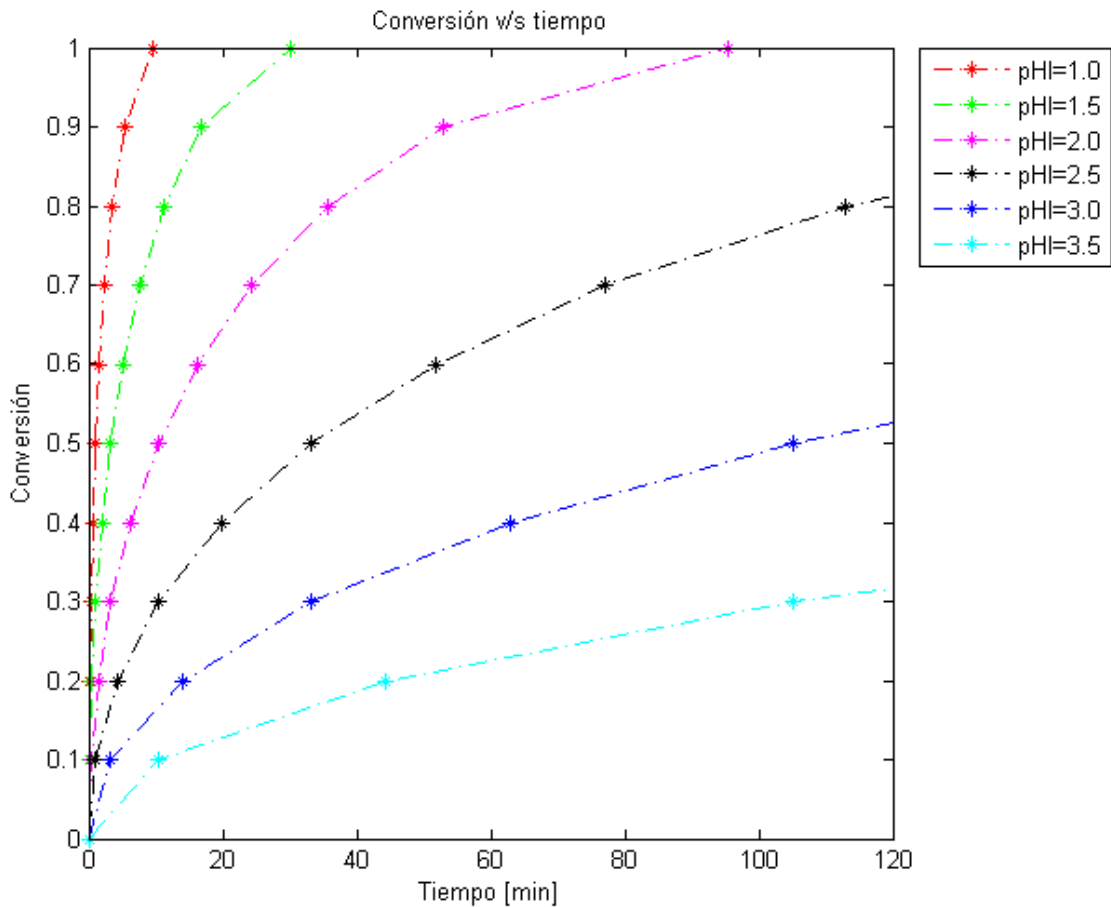


Gráfico 6: Conversión de fosforita versus tiempo de residencia en las primeras dos horas de lixiviación para diferentes valores de pH.

En el Gráfico 7 se presenta la variación del volumen del reactor de lixiviación en función del pH de operación de éste en el rango 1,0 – 3,0, frente a los diferentes valores de $p_{sólido/sol}$. En este gráfico se observan dos fenómenos. El primero es que a mayor valor de $p_{sólido/sol}$ para un mismo valor de pH_l , menor es el volumen del reactor de lixiviación. El segundo fenómeno, es que a mayor pH_l para un mismo valor de $p_{sólido/sol}$, mayor es el volumen del reactor de lixiviación. En el Anexo F se presenta el Gráfico 12, en el cual se exhibe la variación del volumen del reactor de lixiviación en función del rango de pH completo de estudio (1,0 – 5,0).

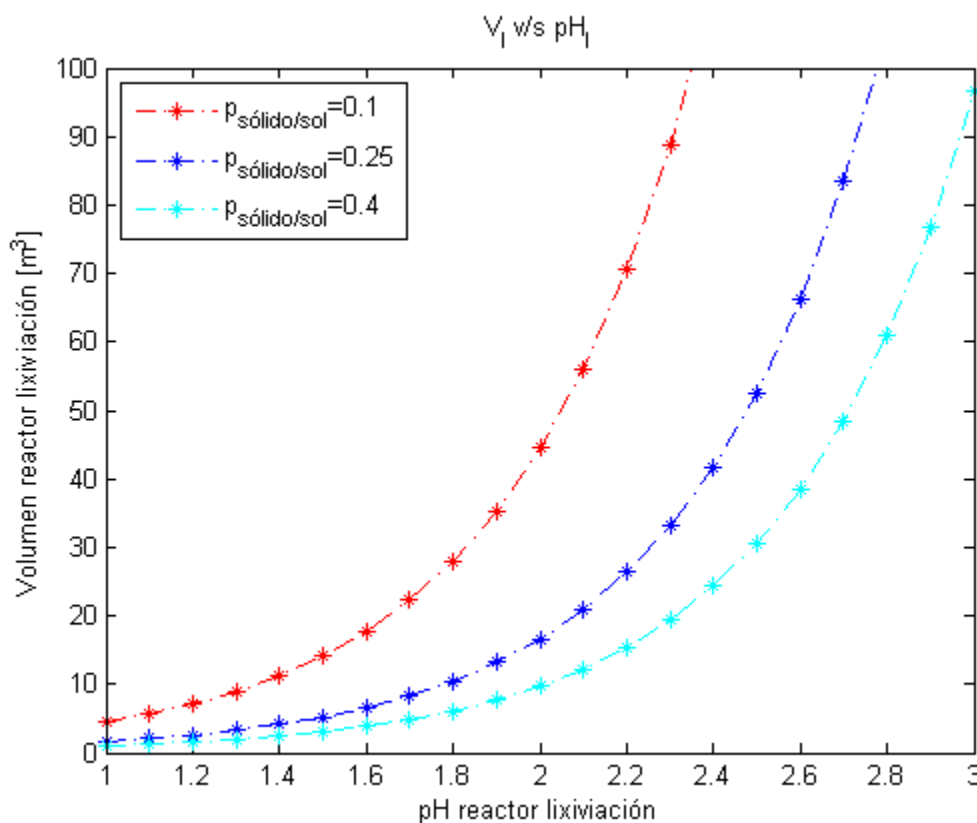


Gráfico 7: Volumen del reactor de lixiviación en función del pH de operación del reactor de lixiviación para a los diferentes valores del $p_{sólido/sol}$.

Complementario al gráfico anterior, en la Tabla 12 se detalla el volumen del reactor de lixiviación para 9 valores particulares de pH_l , con el fin de distinguir de mejor forma la variación del volumen en cada caso. Se puede observar que con una variación de 1 unidad de pH el volumen del reactor de lixiviación aumenta en un orden de magnitud.

Tabla 12: Volumen del reactor de lixiviación [m^3] para los diferentes valores de pH_l y del $P_{sólido/sol}$

$P_{sólido/sol} \rightarrow$ $pH_l \downarrow$	0,10	0,25	0,40
1,0	4,43	1,66	9,64E-01
1,5	14,1	5,26	3,06
2,0	44,5	16,6	9,67
2,5	141	52,6	30,6
3,0	445	166	96,8
3,5	1,41E+03	526	306
4,0	4,45E+03	1,66E+03	968
4,5	1,41E+04	5,26E+03	3,06E+03
5,0	4,45E+04	1,66E+04	9,68E+03

Finalmente en la Tabla 13 se presenta el tiempo de residencia del reactor de lixiviación en función del pH de operación del mismo para obtener un 95 % de conversión de fosforita. Se observa que a mayor valor de pH_l mayor es el tiempo de residencia.

Tabla 13: Tiempo de residencia del reactor de lixiviación [hr].

pH_l	Tiempo residencia [hr]
1,0	1,10E-01 (6,6 min)
1,5	3,48E-01 (21 min)
2,0	1,10
2,5	3,48
3,0	11,0
3,5	34,8
4,0	110
4,5	348
5,0	1,10E+03

En el Anexo E.4 se presentan las tablas con los balances de masa de cada especie para cada reactor.

5.3 Dimensionamiento del Sistema Completo.

Complementaria a las secciones 5.1 y 5.2 se presenta esta sección, cuyo fin es estudiar el comportamiento global del sistema. En ésta se exhiben los resultados del sistema completo en base al volumen total, el cual corresponde a la suma del volumen del reactor de lixiviación y el volumen del reactor biológico,

El Gráfico 8 exhibe la variación del volumen total del sistema (V_l más V_b) en función del pH de operación del reactor de lixiviación (pH_l) para los diferentes valores de $p_{sólido/sol}$ y de ε . Se observa que a mayor $p_{sólido/sol}$ menor es el volumen total para un mismo valor de pH_l y de ε , y que a mayor ε menor es el volumen total para un mismo valor de pH_l y de $p_{sólido/sol}$.

En los tres subgráficos y para cada valor de $p_{sólido/sol}$, se observa que existe un volumen mínimo óptimo, el cual para todos los casos se obtiene con un pH_l entre 1 y 2. Cuando ε es 0,01 el volumen óptimo varía entre 70 y 140 [m³], cuando ε es 0,05 el volumen óptimo varía entre 20 y 40 [m³], y cuando ε es 0,1, el volumen óptimo varía entre 15 y 30 [m³] aproximadamente, para los distintos valores de $p_{sólido/sol}$.

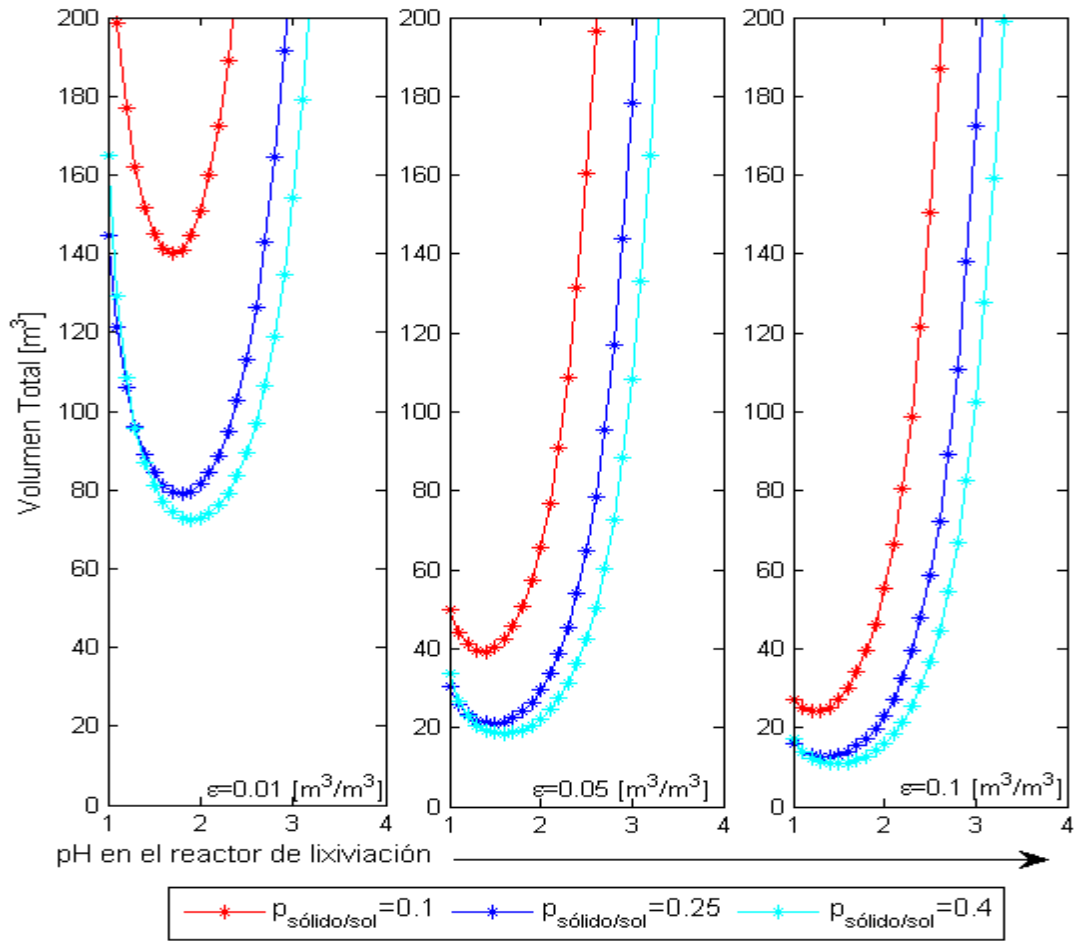


Gráfico 8: Volumen total del sistema versus pH del reactor de lixiviación para los diferentes valores de $p_{\text{sólido/sol}}$ y de ε .

El Gráfico 9 exhibe la variación de pH_l y pH_b en función de la razón $\text{masa}_{\text{min}}/\text{masa}_S$ para los diferentes valores de $p_{\text{sólido/sol}}$. Esta razón relaciona la masa de mineral al interior del reactor de lixiviación con la masa de azufre al interior del reactor biológico. Se observa que a mayor $p_{\text{sólido/sol}}$ menor es el pH para un mismo valor de $\text{masa}_{\text{min}}/\text{masa}_S$, y que para un mismo valor de $p_{\text{sólido/sol}}$ el valor del pH aumenta al aumentar el valor de $\text{masa}_{\text{min}}/\text{masa}_S$.

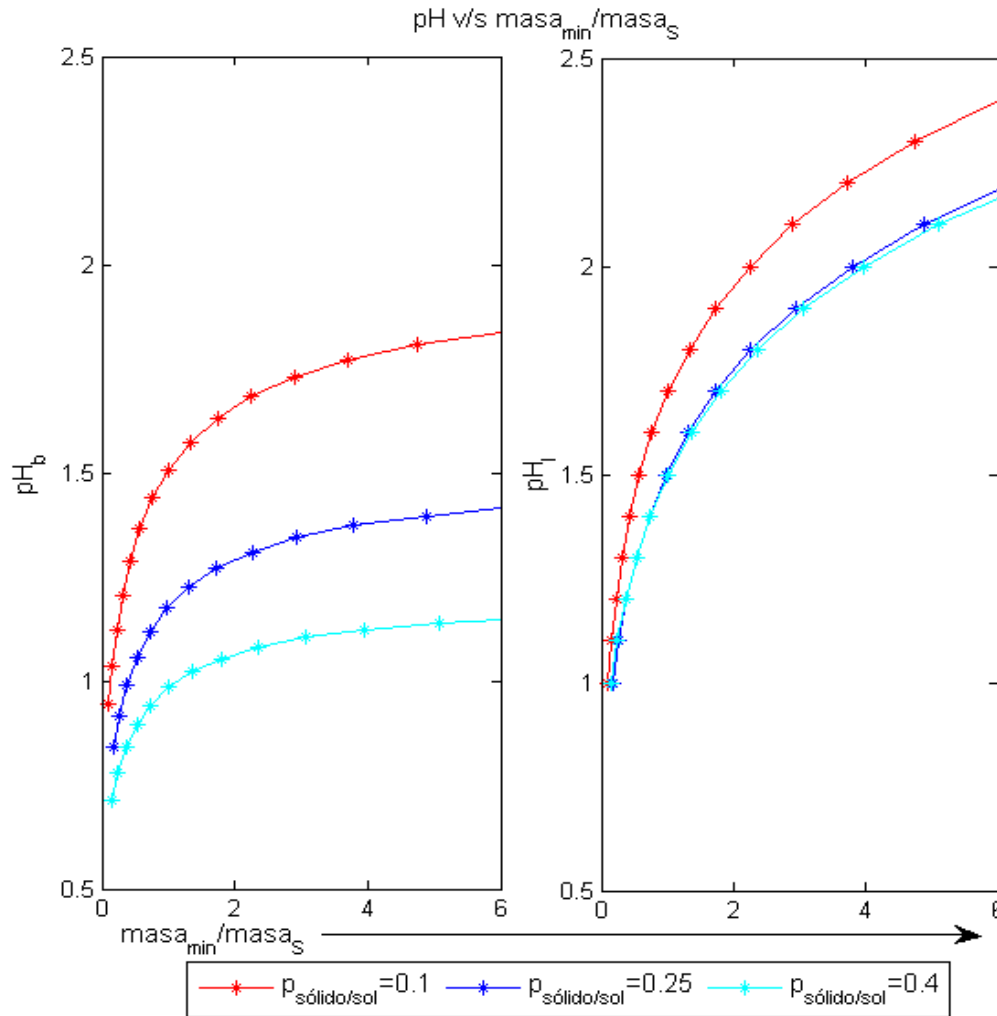


Gráfico 9: pH versus razón $masa_{min}/masa_S$ para los diferentes valores de $p_{sólido/sol}$.

El Gráfico 10 exhibe la variación del volumen total del sistema en función de la razón $masa_{min}/masa_S$ para los diferentes valores de $p_{sólido/sol}$ y de ϵ . Se observa que a mayor $p_{sólido/sol}$ menor es el volumen del reactor para un mismo valor de $masa_{min}/masa_S$ y de ϵ , y que a mayor ϵ menor es el volumen del reactor para un mismo valor de $masa_{min}/masa_S$ y de $p_{sólido/sol}$.

En los tres subgráficos y para cada valor de $p_{sólido/sol}$, se observa que existe un volumen mínimo óptimo. Cuando ϵ es 0,01 el volumen óptimo varía entre 70 y 140 $[m^3]$, cuando ϵ es 0,05 el volumen óptimo varía entre 20 y 40 $[m^3]$, y cuando ϵ es 0,1, el volumen óptimo varía entre 15 y 30 $[m^3]$ aproximadamente, para los distintos valores de $p_{sólido/sol}$.

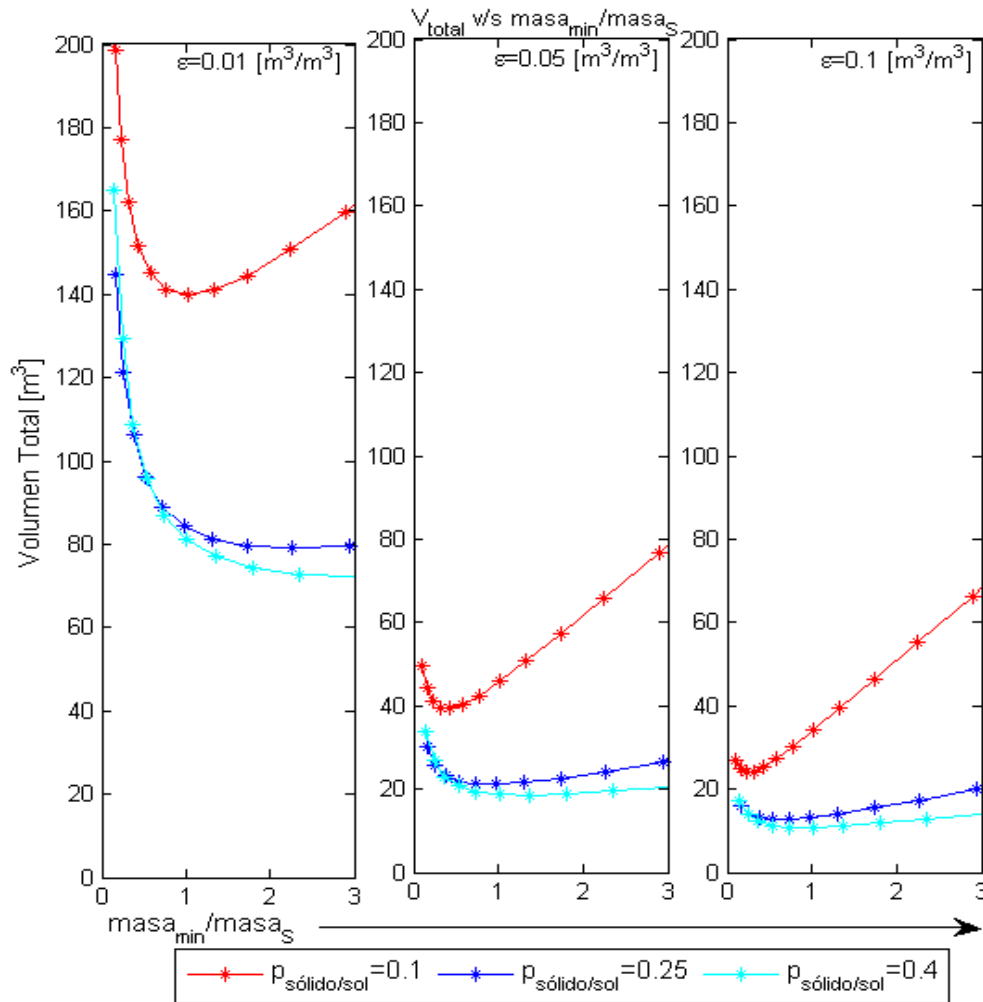


Gráfico 10: Volumen total del sistema versus razón masa_{min}/masa_S para los diferentes valores de p_{sólido/sol} y de ε.

En la Tabla 14 se presenta el volumen total óptimo, el volumen y pH de cada reactor y el valor de la razón masa_{min}/masa_S al cual éste se obtiene, para los diferentes valores de p_{sólido/sol} y de ε. Se observa que el rango óptimo de pH_l es entre 1,2 y 1,9; y que el rango óptimo de pH_b es entre 1,0 y 1,5. Esta tabla presenta de manera condensada lo observado en el Gráfico 8: una disminución en el volumen a media que p_{sólido/sol} aumenta y ε se mantiene fijo, y una disminución en el volumen a media que ε aumenta y p_{sólido/sol} se mantiene fijo.

Tabla 14: Volumen del sistema completo [m³] para los diferentes valores de $p_{sólido/sol}$ y de ε .

ε [m ³ /m ³]	$p_{sólido/sol}$ [kg/kg]	pH_l <i>opt</i>	pH_b <i>opt</i>	V_l <i>opt</i> [m ³]	V_b <i>opt</i> [m ³]	$masa_{min}/masa_s$	V_t <i>opt</i> [m ³]
0,01	0,10	1,7	1,5	22,3	118	1,02	140
	0,25	1,8	1,3	10,5	68,5	2,26	78,9
	0,40	1,9	1,1	7,68	64,6	3,07	72,3
0,05	0,10	1,4	1,3	11,2	28,1	4,26E-01	39,3
	0,25	1,4	1,1	4,17	17,0	7,28E-01	21,1
		1,5	1,2	5,26	15,8	9,84E-01	
	0,40	1,6	1,0	3,85	14,6	1,36	18,5
0,1	0,10	1,2	1,1	7,04	17,0	2,23E-01	24,0
	0,25	1,3	1,1	3,31	9,27	5,29E-01	12,6
	0,40	1,5	1,0	3,06	7,79	1,01	10,8

6. Discusión.

6.1 Dimensionamiento del Reactor Biológico.

Del Gráfico 3 se observa que a medida que aumenta el pH en el reactor de lixiviación (pH_l), también aumenta el pH del reactor biológico (pH_b). Esto es coherente con lo esperado ya que a mayor pH_l , menor es la concentración de ácido sulfúrico en el reactor de lixiviación. Para un valor fijo de $p_{sólido/sol}$, al ser el consumo (y la producción) de ácido sulfúrico independiente de los parámetros variables del sistema (ver Anexo E.4), los flujos másicos de entrada y salida de ambos reactores de ácido sulfúrico disminuyen al aumentar pH_l (ver Tabla 40). Por otra parte se observa que los flujos de entrada y salida de solución son independientes del valor de pH_l (ver Anexo E.4, Tabla 47 y Tabla 48), por lo que la concentración de ácido sulfúrico efectivamente será menor en ambos reactores al ser mayor el valor de pH_l .

En este gráfico también se observa que la variación de pH_b posee una tendencia polinómica, exhibiendo que a mayor valor de $p_{sólido/sol}$, la variación de pH_b es más amortiguada, volviéndose asintótica a menor pH_l . Cabe esperar que al aumentar $p_{sólido/sol}$, y dado que los flujos de salida de mineral y yeso (sólidos) no dependen de los parámetros variables del sistema, el flujo de salida en fase líquida del reactor de lixiviación disminuya. Además dado que el flujo de salida de ácido fosfórico tampoco depende de los parámetros variables del sistema, lo que realmente disminuye de la fase líquida son los flujos de salida de agua y ácido sulfúrico. Efectivamente como se observa en las Tabla 47 y Tabla 48, los flujos de entrada y salida de solución de los reactores de lixiviación y biológico son independientes del valor de pH_l , pero la tasa de variación del flujo de entrada de ácido sulfúrico al reactor de lixiviación (que corresponde al flujo de salida del reactor biológico) disminuye al aumentar pH_l para un mismo valor de $p_{sólido/sol}$, lo que genera la tendencia polinómica y no una tendencia lineal (ver Tabla 41). Por otra parte esta tasa también disminuye al aumentar $p_{sólido/sol}$, para dos valores consecutivos de pH_l . Es decir, el flujo de salida de ácido sulfúrico del reactor biológico disminuye a menor tasa a medida que aumenta $p_{sólido/sol}$, y al mantenerse el flujo de salida de solución constante, la concentración de ácido sulfúrico disminuye de manera más amortiguada. Desde un punto de vista matemático esto se debe a cómo está planteado el sistema, en el cual

efectivamente las concentraciones de ácido sulfúrico de cada reactor se relacionan a través de un polinomio, que además posee un término de potencia en base 10 debido al carácter logarítmico del pH.

Otro fenómeno que se observa en el Gráfico 3 es que a mayor valor de $p_{sólido/sol}$ para un mismo valor de pH_l , menor es el valor de pH_b . Esto se debe a que si bien al aumentar el valor de $p_{sólido/sol}$ disminuye el flujo de salida de ácido sulfúrico del reactor biológico, también disminuye el flujo de salida de solución de este reactor en un porcentaje mayor al porcentaje de disminución del ácido, lo que genera que la concentración de éste al interior del reactor biológico sea mayor, provocando un pH más bajo.

Por último en el Gráfico 3 se aprecia que el pH en el reactor biológico siempre es más bajo que el pH en el reactor de lixiviación, es decir, su acidez es mayor. Esto es lógico ya que en el reactor biológico se genera el ácido y en el reactor de lixiviación se consume.

El Gráfico 4 presenta la variación del volumen del reactor biológico en función de pH_l para los diferentes valores de $p_{sólido/sol}$ y de ε . Se observa que independiente de los valores de $p_{sólido/sol}$ y de ε al aumentar el valor de pH_l disminuye el volumen del reactor biológico. Esto se debe a que al ser mayor el valor de pH_l también es mayor el valor de pH_b . Por otra parte como se observa en el Gráfico 2, el valor de μ_{max} alcanza su máximo para un valor de pH_b entre 2,0 y 2,5. Por lo tanto, dado que el pH de operación del reactor biológico incide directamente en el valor de la tasa específica de crecimiento de las bacterias, de la cual a su vez, depende el volumen del reactor, es de esperar que en el rango 0,5-2,0 de pH_b el volumen del reactor disminuya; que en el rango 2,0-2,5, que corresponde al rango óptimo de pH de las bacterias, se obtenga el valor de volumen óptimo para el reactor biológico; y que en el rango 2,5-4,3 el volumen del reactor vuelva a aumentar. Luego, dado que el rango de pH_l del gráfico es desde 1,0 a 3,0 el cual corresponde a un rango de pH_b de 0,7 a 2,0; es correcto que el volumen del reactor disminuya al aumentar pH_l . Cabe señalar que, como se observa en el Gráfico 3, pH_b nunca alcanza valores mayores a 2 para ninguno de los valores de $p_{sólido/sol}$ estudiados, por lo que el volumen del reactor biológico no alcanzará su óptimo.

En el Gráfico 4 también se observan otros dos fenómenos. El primero de ellos es que a mayor $p_{sólido/sol}$ menor es el volumen del reactor para un mismo valor de pH_l y de ε , lo cual se debe a que a medida que aumenta este parámetro, disminuyen los flujos de entrada y salida de agua y ácido sulfúrico de ambos reactores, como se explicó anteriormente, por lo que se requiere un menor volumen de reactor. El segundo fenómeno es que a mayor ε menor es el volumen del reactor para un mismo valor de pH_l y de $p_{sólido/sol}$. Recordando, el parámetro ε representa la relación entre el volumen de azufre versus el volumen del reactor biológico, lo cual es análogo a comparar la masa de azufre con la de solución (ver Anexo E.1, Tabla 19). Como se observa en el Anexo E.1 Tabla 24, la masa de azufre al interior del reactor biológico no depende del parámetro ε . Luego, para un valor fijo de pH_l y de $p_{sólido/sol}$ la masa de azufre al interior del reactor es la misma independiente del valor de ε , con lo cual si éste aumenta la masa y el volumen de la fase líquida necesariamente debe disminuir, por lo que el volumen del reactor biológico también decrece.

Complementario al Gráfico 4, en la Tabla 10 se detalla el volumen del reactor biológico para 9 valores particulares de pH_l frente a los diferentes valores del $p_{sólido/sol}$ y de ε , en la cual se aprecia numéricamente la influencia de los valores de pH_l , $p_{sólido/sol}$ y ε .

En la Tabla 11 se presenta el tiempo de residencia del reactor biológico en función de pH_l , frente a los diferentes valores del $p_{sólido/sol}$ y de ε . Se observa que independiente de los valores de $p_{sólido/sol}$ y de ε al aumentar el valor de pH_l disminuye el tiempo de residencia en el reactor biológico. Esto se debe a que al aumentar el valor de pH_l disminuye el valor del volumen del reactor biológico pero se mantiene constante el caudal total de entrada del reactor biológico, con lo cual el tiempo de residencia necesariamente también disminuye. También se observa que a mayor $p_{sólido/sol}$ mayor es el tiempo de residencia para un mismo valor de pH_l y de ε , y que a mayor ε menor es el tiempo de residencia para un mismo valor de pH_l y de $p_{sólido/sol}$. El primer fenómeno se debe a que si bien al aumentar el valor de $p_{sólido/sol}$ disminuye el volumen del reactor, también disminuye el flujo total de entrada al reactor en un mayor porcentaje que la disminución del volumen, lo que genera que el tiempo de residencia sea mayor. El segundo fenómeno se debe a que el parámetro ε no incide en el flujo de entrada total al reactor biológico pero sí es inversamente proporcional al volumen del reactor, por lo que al aumentar el valor de ε menor es el tiempo de residencia en este.

El Gráfico 5 exhibe la variación del volumen del reactor biológico en función del pH de operación del reactor biológico (pH_b) para los diferentes valores de $p_{sólido/sol}$ y de ε . Se observa que independiente de los valores de $p_{sólido/sol}$ y de ε al aumentar el valor del pH disminuye el volumen del reactor biológico. Además se observa que a mayor $p_{sólido/sol}$ menor es el volumen del reactor para un mismo valor de pH_l y de ε , y que a mayor ε menor es el volumen del reactor para un mismo valor de pH_l y de $p_{sólido/sol}$. Luego, se presenta un comportamiento similar al observado en el Gráfico 4, lo cual es lógico ya que pH_b es directamente proporcional a pH_l , por lo que se aplica el mismo análisis elaborado para ese gráfico. Como se explicó anteriormente, es de esperar que en el rango 0,5-2,0 de pH_b el volumen del reactor disminuya, y que en el rango 2,0-2,5, que corresponde al rango óptimo de pH de las bacterias, se obtenga el valor de volumen óptimo. Por lo tanto dado que el rango que alcanza pH_b en los casos estudiados es 0,7-2,0 debe presentarse que al aumentar pH_b el volumen disminuya. Cabe señalar que si el valor de pH_b fuera menor a 0,5 o mayor a 4,3; el volumen del reactor biológico debería dar infinito, ya que en estos casos se asume que μ es igual a cero. Lo anterior se debe a que para efectos de este estudio se considera que la tasa específica de crecimiento (μ) es igual a la tasa específica máxima de crecimiento (μ_{max}), y que esta última corresponde a la expresión de la Ec.4 para así sólo estudiar el efecto del pH en el crecimiento de las bacterias y no redundar con el parámetro de inhibición del que depende μ en las Ec.2 y Ec.3. (el cual también depende de la concentración de ácido sulfúrico al interior del reactor). Dado que fuera del rango de pH de crecimiento de la bacteria μ_{max} alcanza valores negativos, se asume que en este caso μ es igual a cero. Cabe señalar que los resultados obtenidos en la simulación dependen de las ecuaciones que integran el modelo, por lo que de usarse otra ecuación para la cinética bacteriana, estos podrían verse modificados. Su validez se debe determinar de manera experimental, lo que queda fuera de los alcances de este estudio. Por otra parte, así como las ecuaciones del modelo inciden directamente en los resultados de la simulación, también lo hace el valor de los parámetros utilizados. Por lo tanto los valores de K_{eq} , Y_a y X_{max} inciden en el cálculo del volumen del reactor biológico, por lo que es importante determinar el valor experimental de estos parámetros para este caso en particular.

6.2 Dimensionamiento del Reactor de Lixiviación.

En el Gráfico 6 se presenta la conversión de fosforita en el tiempo para las dos primeras horas de reacción. Se observa que a mayor pH_l mayor es el tiempo necesario para alcanzar una misma conversión. Esto se debe a que en tal caso, menor es la concentración de ácido sulfúrico presente en el reactor de lixiviación. Para los valores de pH_l entre 1 y 2, que como se verá más adelante, son los valores en que se obtiene el volumen óptimo para el sistema completo, se tiene que para alcanzar un 95% de conversión se requieren entre 10 a 95 minutos de tiempo de residencia aproximadamente. Lo anterior es concordante con el modelo del núcleo sin reaccionar, en el cual el tiempo es inversamente proporcional a la concentración de ácido y se relaciona de manera polinómica con la conversión. Al ser mayor la concentración de ácido, se tiene una mayor masa de éste disponible para provocar la lixiviación del mineral, por lo cual es coherente que a mayor concentración se requiera de un tiempo menor.

En el Gráfico 7 se presenta la variación del volumen del reactor de lixiviación en función del pH de operación de este, frente a los diferentes valores de $p_{sólido/sol}$. En este gráfico se observan dos fenómenos. El primero es que a mayor valor de $p_{sólido/sol}$ para un mismo valor de pH_l , menor es el volumen del reactor de lixiviación. Esto se debe, al igual que en el caso del reactor biológico, a que a mayor $p_{sólido/sol}$, menor es la masa de la fase líquida al interior del reactor, por lo que se requiere de una menor cantidad de agua y un menor volumen de reactor. El segundo fenómeno, es que a mayor pH_l para un mismo valor de $p_{sólido/sol}$, mayor es el volumen del reactor de lixiviación. Esto se debe a que a medida que aumenta pH_l disminuye la concentración de ácido, lo que genera que aumente el tiempo de residencia para alcanzar una misma conversión, ya que como se mencionó en el análisis del gráfico anterior, ambas variables son inversamente proporcionales. Como se observa en la Ec.10, el volumen es proporcional al tiempo de residencia, luego si el tiempo aumenta y el flujo total de entrada se mantiene constante, también aumenta el volumen del reactor; por lo tanto a mayor pH_l mayor es el volumen. Complementario a este gráfico, en la Tabla 12 se presenta el valor del volumen del reactor de lixiviación para 9 valores de pH_l , en función de los tres valores de $p_{sólido/sol}$, con el fin de distinguir de mejor forma la variación del volumen en cada caso. Se puede observar que con una variación de 1 unidad de pH el volumen del reactor de lixiviación aumenta en un orden de magnitud, lo que es coherente con el carácter logarítmico del pH. Finalmente en la

Tabla 13 se presenta el tiempo de residencia para obtener un 95% de conversión de la fosforita. Como se dijo anteriormente, a mayor valor de pH_l mayor es volumen de reactor, y mayor es el tiempo de residencia.

6.3 Dimensionamiento del Sistema Completo.

El Gráfico 8 exhibe la variación del volumen total del sistema (V_l más V_b) en función del pH de operación del reactor de lixiviación (pH_l) para los diferentes valores de $p_{sólido/sol}$ y de ε . Se observa que a mayor $p_{sólido/sol}$ menor es el volumen total para un mismo valor de pH_l y de ε , y que a mayor ε menor es el volumen total para un mismo valor de pH_l y de $p_{sólido/sol}$; lo cual concuerda con el comportamiento presentado por los volúmenes del reactor de lixiviación y del reactor biológico.

De este gráfico destaca que en los tres subgráficos y para cada valor de $p_{sólido/sol}$, se observa que existe un volumen total mínimo (óptimo), el cual para todos los casos se obtiene con un pH_l entre 1 y 2. Se distingue que cuando ε es 0,01 el volumen óptimo varía entre 70 y 140 [m³], cuando ε es 0,05 el volumen óptimo varía entre 20 y 40 [m³], y cuando ε es 0,1, el volumen óptimo varía entre 15 y 30 [m³] aproximadamente, para los distintos valores de $p_{sólido/sol}$. Cabe recordar que en el caso del reactor biológico el volumen disminuye al aumentar pH_l y que en caso del reactor de lixiviación el volumen aumenta al aumentar pH_l . Luego, tiene sentido que al sumar ambos volúmenes se obtenga un óptimo que minimice el volumen total del sistema. Llama la atención que el óptimo se obtenga para un valor de pH_b menor al rango de pH óptimo para el crecimiento de las bacterias. De esto se puede desprender que al trabajar a valores de pH más altos el aumento en el volumen del reactor de lixiviación es mucho mayor a la disminución en el volumen del reactor biológico. Por lo tanto, dadas las características del sistema es más conveniente trabajar a un pH menor al óptimo bacteriano con el fin de minimizar el volumen total del sistema, aunque con esto no se obtenga el volumen mínimo para el reactor biológico.

El Gráfico 9 exhibe la variación de pH_l y pH_b en función de la razón $masa_{min}/masa_S$ para los diferentes valores de $p_{sólido/sol}$. Esta razón relaciona la masa de mineral al interior del reactor de lixiviación con la masa de azufre al

interior del reactor biológico. Se observa que a mayor $p_{sólido/sol}$ menor es el pH para un mismo valor de $masa_{min}/masa_S$, y que para un mismo valor de $p_{sólido/sol}$ el valor del pH aumenta al aumentar el valor de $masa_{min}/masa_S$. En el algoritmo (ver Anexo C) se observa que la masa de azufre y de mineral dependen de los volúmenes de los reactores biológico y de lixiviación respectivamente. Esto se debe a que la masa se calcula a partir de las concentraciones de cada especie al interior de estos. Por esta razón es que la variación de la masa en función del valor de pH_l es similar al comportamiento presentado por el volumen de cada reactor, es decir, al aumentar pH_l la masa de azufre disminuye y la masa de mineral aumenta. Por lo tanto, la razón entre la masa de mineral y la masa de azufre aumenta al aumentar el valor de pH_l (como se observa en el Gráfico 13 del anexo F) y viceversa. Además, dado que pH_b es directamente proporcional a pH_l , también se tiene que al aumentar pH_b aumenta el valor de $masa_{min}/masa_S$ y viceversa.

El Gráfico 10 exhibe la variación del volumen total del sistema en función de la razón $masa_{min}/masa_S$ para los diferentes valores de $p_{sólido/sol}$ y de ε . Se observa que a mayor $p_{sólido/sol}$ menor es el volumen del reactor para un mismo valor de $masa_{min}/masa_S$ y de ε , y que a mayor ε menor es el volumen del reactor para un mismo valor de $masa_{min}/masa_S$ y de $p_{sólido/sol}$.

Al igual que en el gráfico anterior en los tres subgráficos y para cada valor de $p_{sólido/sol}$, se observa que existe un volumen mínimo óptimo. Cuando ε es 0,01 el volumen óptimo varía entre 70 y 140 [m³], cuando ε es 0,05 el volumen óptimo varía entre 20 y 40 [m³], y cuando ε es 0,1, el volumen óptimo varía entre 15 y 30 [m³] aproximadamente, para los distintos valores de $p_{sólido/sol}$. Como se señaló en el gráfico anterior la razón $masa_{min}/masa_S$ y pH_l son directamente proporcionales, por lo tanto es consecuente que en los Gráfico 8 y el Gráfico 10 se presente un comportamiento similar.

Finalmente en la Tabla 14 se presenta el volumen total óptimo, el volumen y pH de cada reactor y el valor de la razón $masa_{min}/masa_S$ al cual éste se obtiene, para los diferentes valores de $p_{sólido/sol}$ y de ε . Se observa que el rango óptimo de pH_l es entre 1,2 y 1,9; y que el rango óptimo de pH_b es entre 1,0 y 1,5. Esta tabla presenta de manera condensada lo observado en los Gráfico 8 y Gráfico 10: una disminución en el volumen a media que $p_{sólido/sol}$ aumenta y ε se mantiene fijo, y

una disminución en el volumen a media que ε aumenta y $p_{sólido/sol}$ se mantiene fijo.

Para determinar el caso óptimo se deben tener varias consideraciones. Como se señaló anteriormente trabajar con valores altos de $p_{sólido/sol}$ suscita que el volumen requerido del reactor (tanto del biológico como del de lixiviación) sea menor, lo cual es una ventaja desde el punto de vista operativo y económico. En contraste a esto hay que tener en cuenta que a mayor valor de $p_{sólido/sol}$ mayor dificultad presenta el bombeo y manejo general de la solución del proceso, y por esta misma razón no se trabajó con valores superiores al 50%, dado que es el valor crítico por sobre el cual se requiere, por ejemplo, la utilización de bombas más sofisticadas.^[40] Por otra parte, si bien a mayor valor de ε menor es el volumen del reactor biológico, tampoco es posible trabajar con valores de ε mayores a 0,1; debido a que como se observa en la Tabla 19, sobrepasando este valor se estaría trabajando con un porcentaje p/p de sólido versus solución mayor al 20%, lo cual es perjudicial para las bacterias.^[41] Por lo tanto, se determina que de los casos estudiados, lo óptimo es trabajar con un valor de $p_{sólido/sol}$ de 0,25, de ε de 0,05 (equivalente a % $p_{S/sol}$ del 10%, ver Anexo E.1), y de pH_l entre 1,4 y 1,5; con lo cual se obtiene un pH_b entre 1,1 y 1,2; un volumen para el reactor de lixiviación de 5 [m³], y un volumen para el reactor de biolixiviación de 17 [m³] aproximadamente, lo que genera un volumen total de 21,1 [m³]. Los tiempos de residencia obtenidos para cada reactor son de aproximadamente 33 [min] y 21 [min], respectivamente. Si se considera un factor de seguridad del 20%, los volúmenes serían 6 [m³] para el reactor biológico y 20,4 [m³] para el reactor de lixiviación, y los tiempos de residencia de 40 [min] y 25 [min] respectivamente.

También cabe decir que los valores de $p_{sólido/sol}$ y ε podrían ser menores al mínimo utilizado en el estudio (0,1 y 0,01 respectivamente) pero no 0, ya que eso implicaría que no hay sólidos al interior del reactor, lo cual no es posible dado el sistema en estudio. Por lo tanto, y según lo visto en el párrafo anterior, el rango de validez del trabajo de $p_{sólido/sol}$ y ε es de [$>0 - 0,5$] y [$>0 - 0,1$], ya que por como está planteado el sistema, este no capta las dificultades que podrían generar valores superiores a estos (que además podrían contraponerse con algunos de los supuestos utilizados), como por ejemplo problemas de agitación, bombeo, alta tasa de muerte en las bacterias, entre otros.

6.4 Incidencia de los Supuestos en los Resultados de la Simulación.

En esta sección se analiza la validez de cada supuesto y su incidencia en los resultados de la simulación. Primero se abordarán los supuestos que se piensa, tienen una menor incidencia.

El supuesto 2 (se consume todo el azufre que entra al reactor biológico) apunta a una consideración en el diseño, ya que será necesario que a la salida del reactor biológico haya un filtro o malla que capte las partículas de azufre, o bien, que la salida del reactor se encuentre a cierta altura, tal que la propia gravedad genere que las partículas no logren alcanzarla. Este supuesto da pie al supuesto 16 (no hay entrada ni salida de células adheridas en el reactor biológico), ya que si no hay salida de partículas de azufre, tampoco habrá salida de células adheridas del reactor biológico.

El supuesto 3 (la incorporación de azufre por parte de la bacteria es despreciable), tiene una base bibliográfica, e incide en que se pueda suponer que, dado que no hay salida de azufre, este se convierte en un 100% a ácido sulfúrico.

Los supuestos 9, 12 y 13 resultan de los datos encontrados en la búsqueda bibliográfica. Con respecto al supuesto 9 (la conversión a ácido fosfórico es de un 95%), se sabe que la conversión de fosforita a ácido fosfórico puede ser de un 95%, aunque cabe señalar que se tiene constancia de esto al operar entre 70 y 80°C y que en el caso de estudio se considera una temperatura de 30°C. De todas maneras el grado de conversión no debería verse afectado por la temperatura, si no que el tiempo para alcanzar dicha conversión. Referente al supuesto 12 (se extrae del sistema un 90% de ácido fosfórico), como se menciona en el anexo B.2, el rendimiento de extracción de ácido fosfórico (al menos mediante extracción por solvente) puede llegar a ser de un 95% o más. Con respecto al supuesto 13 (la concentración de salida del sistema de ácido fosfórico corresponde a un 50% de P_2O_5), como se vio en la sección 2.2, el ácido fosfórico se suele concentrar a porcentajes entre 50 y 60% de P_2O_5 .

Para que el supuesto 15 (no hay entrada de células en suspensión al reactor biológico) sea válido se deben cumplir dos condiciones: la corriente de entrada del azufre debe ser estéril, y la biomasa que entra al reactor de lixiviación debe morir, de tal forma que no se recircule al reactor biológico (en su defecto se debe extraer junto con el residuo mineral y el yeso). Lo anterior se relaciona con el supuesto 17 (no hay salida de biomasa en el reactor de lixiviación), donde se asume que la biomasa que entra al reactor de lixiviación muere y se descompone en su interior. El argumento de este supuesto es que en el reactor de lixiviación las bacterias no tendrán fuente de carbono (dióxido de carbono) ni de energía (azufre) para crecer ni mantenerse.

El supuesto 23 (se considera que la masa de una célula corresponde a 10^{-15} [kg/cel]) es una aproximación a partir de los datos bibliográficos, y se espera que el dato utilizado se encuentre dentro de los órdenes de magnitud de la masa de una bacteria.

Con respecto a los supuestos, que se cree tienen una mayor incidencia en los resultados se tiene:

Supuesto 1: El sistema se encuentra en estado estacionario. Este supuesto es más bien una condición del sistema que se impone según lo requerido por el estudio. Se considera importante porque entrega la base del sistema a abordar.

En el caso estudiado no interesa el estado transiente razón por la cual no se aborda, aunque esto tiene ciertas consecuencias. Al no considerar la dinámica del proceso no se repara en las condiciones iniciales del sistema (por ejemplo se desconoce la masa inicial de azufre y de bacterias al interior del reactor biológico), con lo cual se desconoce el tiempo que este tarda en llegar al estado estacionario, así como el impacto de las variables sobre el sistema, posibles puntos de inestabilidad del proceso y su comportamiento frente a perturbaciones. Por lo tanto se ignora si el diseño final del sistema será capaz de contener el estado transiente.

Supuesto 4: El consumo de oxígeno en el reactor biológico sólo se debe a la reacción de producción de ácido sulfúrico. Este supuesto tiene dos efectos directos en el sistema. Por una parte al no considerar el oxígeno que consumen

las bacterias, el flujo de entrada al reactor biológico es menor al necesario a si se considerara. Del algoritmo (ver Anexo C.2) se observa que el volumen del reactor biológico no depende del flujo de entrada de oxígeno. Sí se vería afectado el tiempo de residencia del reactor, ya que el flujo volumétrico de entrada aumentaría, y al mantenerse constante el volumen, el tiempo de residencia debería disminuir.

Por otra parte, la expresión utilizada en la cinética bacteriana podría depender de la concentración de oxígeno ya que este es un sustrato limitante para el crecimiento bacteriano. Ahora bien, de la búsqueda bibliográfica, al menos en lo que respecta a la biolixiviación de azufre por acción de *Acidithiobacillus thiooxidans*, no se tienen antecedentes de que la concentración de oxígeno sea una variable a considerar en la expresión cinética, más bien se suele expresar en función de la concentración de azufre o ácido sulfúrico. Al menos desde esta perspectiva, el supuesto tiene validez dado que se suele utilizar en este tipo de estudios.

Supuesto 5: No hay salida de oxígeno en el reactor biológico. Este es un supuesto fuerte, utilizado como una primera aproximación, ya que la salida de oxígeno del sistema dependerá de la solubilidad de este en la solución del reactor. Considerando que la temperatura de operación es de 30°C y la presencia de mineral, la concentración de oxígeno disuelto será baja ^[31], por lo que efectivamente habrá salida de oxígeno del reactor en forma de gas. Para aumentar la solubilidad y disminuir este efecto sería necesario bajar la temperatura de operación con lo cual disminuiría el crecimiento bacteriano y aumentaría el volumen del reactor. Luego, se requiere estudiar la magnitud del impacto que tiene la alimentación de oxígeno en el sistema, tanto de manera teórica como de manera experimental para poder validar, o no, este supuesto.

Supuesto 6: No hay salida de dióxido de carbono en el reactor biológico. Este supuesto es fuerte ya que en contraste con el oxígeno, la solubilidad de este compuesto en agua es mucho mayor ^{[42][44]}, formándose ácido carbónico e iones carbonato. Debido a esto, no habrá completa disponibilidad de dióxido carbónico para el crecimiento bacteriano, con lo que la concentración celular será menor, generando un aumento en el volumen del reactor biológico. Si se deseara mantener la concentración celular obtenida en la simulación, sería necesario aumentar el flujo de entrada de dióxido de carbono al reactor biológico, con lo cual de todas maneras aumentaría el volumen del reactor.

Supuesto 7: El mineral alimentado posee un 1% de fósforo. Se utilizó un dato bibliográfico para fijar el % de fósforo en el mineral. El valor utilizado no corresponde al que posee un mineral de relave, si no que un mineral rico en hierro con bajas concentraciones de fósforo. Por lo tanto es sólo una aproximación, dado que no se cuenta con la caracterización del mineral al cual se aplicaría el modelo desarrollado. De ser menor el porcentaje se requeriría un menor volumen para el reactor biológico, ya que la producción necesaria de ácido sulfúrico disminuiría, y viceversa.

Supuesto 8: El ácido sulfúrico en el reactor de lixiviación se utiliza exclusivamente para lixiviar la fosforita. Como se dijo anteriormente, se desconoce la caracterización del mineral al cual se desea aplicar el modelo. Debido a esto no se tiene información sobre las especies minerales que contiene el relave que podrían ser lixiviadas por efecto del ácido sulfúrico. Es muy posible que cuando se realicen las pruebas experimentales se determine que este supuesto no es válido, y que por lo mismo, se requiere una mayor cantidad de ácido sulfúrico para tratar el mineral. De ser así se requerirá un mayor flujo de entrada de azufre al reactor biológico, provocando que el volumen de este deba ser mayor al obtenido por la simulación.

Supuestos 10 y 11: Se desprecia la muerte celular de las bacterias adheridas y en suspensión. De considerar la muerte de las células adheridas y de las células en suspensión, la concentración de ambas sería menor, con el cual el volumen del reactor debería aumentar. Cabe señalar que despreciar la muerte de las bacterias adheridas normalmente es una buena aproximación, dado que estas poseen una fuente de energía para crecer y mantenerse, y lo que se asume es que la tasa de muerte es muy pequeña con respecto a la tasa de crecimiento. Puede no ser del todo válido en el caso de las bacterias en suspensión, las cuales no poseen una fuente de energía para crecer, pero dado que estas se eliminan del reactor biológico, se puede argumentar que en su salida está implícita la tasa de muerte bacteriana. Además ambos supuestos afectan al flujo de entrada de dióxido de carbono al reactor biológico. Al observar el balance de masa se tiene que si se considerará la muerte celular, la salida de bacterias en suspensión sería menor, con lo cual se requeriría un menor flujo de entrada de dióxido de carbono al reactor biológico.

Supuesto 14: No hay consumo de ácido fosfórico en el reactor biológico, y no inhibe el crecimiento celular. No se tienen antecedentes de que la bacteria

Acidithiobacillus thiooxidans metabolice de alguna manera el ácido fosfórico, o que su metabolismo sea vea inhibido frente a este compuesto. De todas maneras se deberían realizar estudios experimentales para corroborarlo, lo que se sale de los alcances de este estudio. Si hubiera algún efecto inhibitorio, se requeriría un volumen de reactor más grande para generar la misma producción de ácido sulfúrico, ya que se necesitaría una mayor concentración de bacterias en su interior.

Supuesto 18: Se suponen consumos estequiométricos. Esto no es del todo válido, ya que como se vio en el análisis de los Supuesto 5 y 6, probablemente se requiera un exceso de oxígeno y de dióxido de carbono debido a la solubilidad de ambos. Es posible que también se requiera exceso de alguno de las otras materias primas, lo cual se debe determinar de forma experimental. De ser así el volumen de los reactores se podría ver afectado y ser mayor al que se determina con la simulación.

Supuesto 19: No se purga ácido sulfúrico. Este supuesto depende de la eficiencia de separación de las etapas de purificación del ácido fosfórico, luego de la cuales se recircula el ácido sulfúrico agotado. Es un supuesto fuerte que se recircule el 100% del ácido, pero dado que se desconoce esta eficiencia se utiliza como una primera aproximación. De recircularse menos ácido sulfúrico, se espera que el perfil de pH del gráfico varíe, no en la forma de las curvas, pero sí en el valor numérico de los puntos que la componen.

Supuesto 20: Se purga el 100% del yeso, del debris celular y del residuo mineral. Al igual que para el supuesto 19, este depende de la eficiencia de separación de las etapas de purificación. Luego, este valor se utiliza como una primera aproximación. De no ser válido, el rendimiento de las bacterias podría verse afectado principalmente por los componentes del residuo mineral los cuales podrían afectar de alguna manera el metabolismo de la bacteria. Dado que se desconoce la caracterización del relave, no es posible predecir posibles efectos.

Supuesto 21: Se retira el 100% del ácido fluorhídrico producido. El ácido fluorhídrico que se genera se encuentra en estado gaseoso, pudiendo solubilizar en la solución del reactor de lixiviación (alta solubilización en agua ^[45]), y recircularse junto con el ácido sulfúrico agotado al reactor biológico. De ser así el metabolismo de las bacterias se vería inhibido ^{[46][47]}, con lo cual se requeriría un

volumen mayor para este reactor. Para evitar esto se requiere de una etapa de purificación en la cual se elimine el ácido fluorhídrico como se señala en la sección 2.2.

Supuesto 22: Se asume que la densidad de las células es igual a la densidad del agua, y que la densidad y masa molar del mineral son iguales a los de la fosforita. Normalmente se asume que la densidad de las células es igual a la del agua (debido a que el agua es el mayor componente de los microorganismos), con lo cual es válido este supuesto. Con respecto al mineral, se utiliza esta primera aproximación debido a que se desconoce la caracterización del relave, pero es de esperar que tanto la densidad como el peso molecular sean diferentes al de la fosforita, lo cual modificará los volúmenes de ambos reactores obtenidos de la simulación (el peso molecular incide en el cálculo del tiempo de residencia del reactor de lixiviación, y la densidad incide en el cálculo de los flujos volumétricos).

También cabe referirse a la cinética bacteriana adoptada en el modelo. Se supone que si μ_{max} es mayor a cero μ toma el valor de μ_{max} , de lo contrario μ se considera 0. Uno de los principales supuestos del modelo, ya que el valor de μ incide directamente en el volumen del reactor biológico. Como se señala en la Tabla 2, la expresión para la cinética bacteriana puede abordarse de diferentes formas, y se pueden considerar diversos sustratos limitantes. Para el estudio se escogió un caso sencillo, minimizando la cantidad de componentes en la expresión, donde sólo se estudia el efecto del pH sin considerar la concentración de otros compuestos que podrían hacer variar el valor de μ . Para validarlo es necesario realizar pruebas experimentales para determinar qué tan próximo a la realidad es el modelo utilizado, aunque se espera que sea una buena aproximación ya que la expresión interioriza la inhibición generada por el ácido al igual que las otras expresiones. Con respecto a los parámetros z_1 y z_2 , estos poseen directa incidencia en el valor de μ , y por lo tanto en el volumen del reactor biológico. El parámetro que tiene mayor importancia es z_1 , ya que según sea su valor μ puede tomar valores con órdenes de magnitud distintos al utilizado en este estudio (10^1). Para determinar el valor real de z_1 , son necesarias pruebas experimentales. Dado que este tipo de ensayos se salen del alcance del trabajo de tesis, estas y las pruebas anteriormente recomendadas deberían realizarse en estudios paralelos a este.

Finalmente cabe referirse a una de las características del planteamiento el sistema: la utilización de reactores continuos CSTR. Según lo visto en la sección 2, la lixiviación de minerales fosfatados y de relaves normalmente se realiza en tanques agitados, debido a ello, para efectos del modelo se utilizó un reactor de lixiviación tipo CSTR. Se supuso el mismo tipo de reactor para la biolixiviación de azufre, pese a que según la búsqueda bibliográfica su aplicación hasta el momento sólo se ha realizado en escala de laboratorio en columnas o tanques agitados tipo batch. Esto podría generar que el sistema en continuo presente dificultades o problemas que no se consideraron en el modelo, tales como no idealidades: volúmenes muertos, cortocircuitos, además de que habrá que poner especial atención a la agitación del reactor, de tal forma que las bacterias la puedan tolerar.

7. Conclusiones.

Del estudio realizado se concluye que el pH de operación del reactor de lixiviación (pH_l) tiene directa incidencia en el pH de operación del reactor biológico (pH_b), observándose que a medida que aumenta pH_l también aumenta pH_b , y que siempre pH_b es menor a pH_l . Además se observa que la variación de pH_b posee una tendencia polinómica, exhibiendo que a mayor valor de $p_{sólido/sol}$, la variación de pH_b es más amortiguada, volviéndose asintótica a menor pH_l .

Con respecto al volumen del reactor biológico se observa que independiente de los valores de $p_{sólido/sol}$ y de ε al aumentar el valor de pH_l disminuye el volumen del reactor biológico, lo cual se debe a que el rango de pH del reactor biológico es entre 0,7 a 2,0; que a mayor $p_{sólido/sol}$ menor es el volumen del reactor para un mismo valor de pH_l y de ε ; y que a mayor ε menor es el volumen del reactor para un mismo valor de pH_l y de $p_{sólido/sol}$.

En relación al reactor de lixiviación, se determina que la etapa controlante es la difusión del reactante al interior de la partícula, y que el valor del coeficiente de difusión es de $1,24 \cdot 10^{-8}$ [m^2/min]. Además se observa que a mayor pH_l mayor es el tiempo necesario para alcanzar una misma conversión.

Se concluye que a mayor valor de $p_{sólido/sol}$ para un mismo valor de pH_l , menor es el volumen del reactor de lixiviación, y a mayor pH_l para un mismo valor de $p_{sólido/sol}$, mayor es el volumen del reactor de lixiviación, observándose que con una variación de una unidad de pH el volumen del reactor de lixiviación aumenta en un orden de magnitud

Con respecto al sistema global, existe un volumen total óptimo que se obtiene para un rango de pH_l entre 1,2 y 1,9; y un rango de pH_b entre 1,0 y 1,5.

Finalmente se recomienda trabajar con un valor de $p_{sólido/sol}$ de 0,25; de ε de 0,05 (equivalente a % $p_{S/sol}$ del 10%), y de pH_l entre 1,4 y 1,5; con lo cual se obtiene un pH_b entre 1,1 y 1,2; un volumen para el reactor de lixiviación de 5 [m^3], y un volumen para el reactor de biolixiviación de 17 [m^3] aproximadamente. Los

tiempos de residencia obtenidos para cada reactor son de aproximadamente 33 [min] y 21 [min], respectivamente. Si se considera un factor de seguridad del 20%, los volúmenes serían 6 [m³] para el reactor biológico y 20,4 [m³] para el reactor de lixiviación, y los tiempo de residencia de 40 [min] y 25 [min] respectivamente.

Del análisis de los supuestos se concluye que se deben hacer pruebas experimentales para corroborar varios de ellos, y que en general su incidencia principal es aumentar el valor de los volúmenes de los reactores. En particular se recomienda realizar de manera experimental:

- Medición de oxígeno disuelto a la salida del reactor biológico.
- Medición de ácido carbónico e iones bicarbonato a la salida del reactor biológico.
- Caracterización del mineral de relave, con el fin de determinar el porcentaje fosfato del relave, así como otras especies minerales que puedan ser lixiviadas por efecto del ácido sulfúrico.
- Estudio del efecto del ácido fosfórico en las bacterias
- Estudio del efecto del pH en la tasa específica de crecimiento bacteriana con el fin de obtener los parámetros z_1 y z_2 .

Cabe señalar que la metodología utilizada para desarrollar el estudio es aplicable a otros procesos. Por ejemplo a biolixiviación que utilice otras especies bacterianas, o a procesos de lixiviación de otras especies minerales, entre otros.

8. Nomenclatura.

X_A :	Nº de bacterias adheridas al azufre por área superficial de azufre [cel/m ²].
X_L :	Nº de bacterias en suspensión [cel/m ³].
X_T :	Concentración total de bacterias al interior del reactor biológico [cel/m ³].
\widetilde{X}_A :	Nº de bacterias adheridas al azufre por volumen del solución [cel/m ³].
K_{eq} :	Constante de equilibrio entre células adheridas y células en suspensión [m ³ /cel].
X_{max} :	Nº máximo de células adheridas que pueden haber por área superficial de azufre [cel/m ²].
μ :	Tasa específica de crecimiento celular [1/día].
μ_{max} :	Tasa específica máxima de crecimiento celular [1/día].
K_i :	Constante de inhibición [m ³ /kg] ([g/L]).
$C_{SO_4^{2-}}$:	Concentración de sulfato en solución [kg/m ³].
C_i :	Concentración de inhibición de sulfato en solución [kg/m ³].
C_S :	Concentración de azufre [g/L].
K_S :	Constante de semisaturación del azufre [g/L].
z_1 :	Coefficiente de regresión [1/día].
z_2 :	Coefficiente de regresión [].
pH_{min} :	pH por debajo del cual no hay crecimiento bacteriano.
pH_{max} :	pH por sobre cual no hay crecimiento bacteriano.
Ka_1 y Ka_2 :	Constante de la primera y segunda disociación, respectivamente [mol/L].
$C_{H_2SO_4}$:	Concentración de ácido sulfúrico [mol/L].

Y_a :	Rendimiento célula/azufre [cel/kg azufre].
b :	Coefficiente estequiométrico del mineral [].
t :	Tiempo [día].
ρ_{min} :	Densidad molar del mineral [kmol/m ³].
R :	Radio inicial de la partícula de mineral [m].
C_a :	Concentración de ácido sulfúrico en la solución [kmol/m ³].
D_E :	Constante de difusión [m ² /min].
α :	Conversión del mineral [].
K_R :	Constante cinética de reacción [m/día].
τ_D :	Tiempo de conversión completa cuando controla la difusión al interior de la partícula [día].
τ_R :	Tiempo de conversión completa cuando controla la reacción [día].
m_j^i :	Masa de la especie j en el reactor i , con i : reactor biológico (b) o reactor de lixiviación (l) [kg].
E_j^i :	Flujo másico de entrada al reactor i de la especie j , con i : reactor biológico (b) o reactor de lixiviación (l) [kg/día].
S_j^i :	Flujo másico de salida al reactor i de la especie j , con i : reactor biológico (b) o reactor de lixiviación (l) [kg/día].
D_j^i :	Consumo en el reactor i de la especie j , con i : reactor biológico (b) o reactor de lixiviación (l) [kg/día].
P_j^i :	Producción en el reactor i de la especie j , con i : reactor biológico (b) o reactor de lixiviación (l) [kg/día].
PM_j :	Masa molar de la especie j [kg/kmol].
N_j :	Crecimiento de la concentración celular j , con j : \bar{X}_A o X_L [cel/m ³ · día].
V_i :	Volumen del reactor i , con i : reactor biológico (b) o reactor de lixiviación (l) [m ³].

m_x :	Masa de una célula [kg/cel].
A_S :	Área superficial de las partículas de azufre total al interior del reactor [m ²].
M_j^i :	Muerte en el reactor i, de la concentración celular j, con i: reactor biológico (b) o reactor de lixiviación (l), y j: \widetilde{X}_A o X_L [cel/m ³ · día].
pH_i :	pH de operación del reactor i, con i: reactor biológico (b) o reactor de lixiviación (l) [].
$p_{sólido/sol}$:	Razón p/p entre sólidos y solución de salida del reactor de lixiviación [kg/kg].
q :	Porcentaje que se retira de ácido fosfórico del sistema completo [].
$p_{P_2O_5/sol}$:	Razón p/p de salida del sistema de pentóxido de fósforo (P_2O_5) y la solución total de salida [kg/kg].
ε :	Razón entre el volumen total de azufre al interior del reactor y el volumen del reactor biológico [m ³ /m ³].
R_b :	Radio promedio de la partícula de azufre al interior del reactor biológico [m].
V_S :	Volumen de las partículas de azufre total al interior del reactor [m ³].
C_j^i :	Concentración en el reactor i de la especie j, con i: reactor biológico (b) o reactor de lixiviación (l) [kg/m ³].
τ_i :	Tiempo de residencia del reactor i, con i: reactor biológico (b) o reactor de lixiviación (l) [día].
n :	Nº de partículas de azufre al interior del reactor [].
ρ_j^i :	Densidad en el reactor i de la especie j, con i: reactor biológico (b) o reactor de lixiviación (l) [kg/m ³].
Qe_j^i :	Flujo volumétrico de entrada al reactor i de la especie j, con i: reactor biológico (b) o reactor de lixiviación (l) [m ³ /día].
Qs_j^i :	Flujo volumétrico de salida al reactor i de la especie j, con i: reactor biológico (b) o reactor de lixiviación (l) [m ³ /día].

w_j^i :	Fracción másica en el reactor i de la especie j, con i: reactor biológico (b) o reactor de lixiviación (l).
$p_{S/sol}$:	Razón p/p entre azufre y solución de salida del reactor biológico [kg/kg].
N_d :	Nº de grados de libertad del sistema.
N_v :	Nº de variables del sistema.
N_r :	Nº de restricciones del sistema.
N_c :	Nº de corrientes del sistema.
N_{sp} :	Nº de especies del sistema.
BM :	Nº de balances de masa independientes.
E_{est} :	Nº de ecuaciones estequiométricas independientes.
BE :	Nº de balances de energía.
T :	Temperatura de cada corriente.
P :	Presión en cada corriente.
C_{zero} :	Composición cero.
$masa_{min}/masa_S$:	Razón entre la masa de mineral al interior del reactor de lixiviación y la masa de azufre al interior del reactor biológico [].

Además se tienen las siguientes abreviaciones: **sol**: solución, **rc**: recirculación, **tot**: total, **st**: sistema.

9. Bibliografía.

- [1] BOTANICAL. Nutrientes de las plantas [en línea] <www.botanical-online.com/nutrientesplantas.htm> Última consulta: 05/02/2013
- [2] DERY P., ANDERSON, B., Peak phosphorous. EnergyBulletin.2007 [en línea] <www.energybulletin.net/node/33164> Última consulta: 24/06/2012
- [3] Sustainable Use of Phosphorus por J.J. Schröder, D. Cordell, A.L. Smit y S. Rosemarin. Plant Research International, SEI. Report 357, 2010 [en línea] <http://ec.europa.eu/environment/natres/pdf/sustainable_use_phosphorus.pdf> Última consulta: 09/12/2012
- [4] FERNIGRINI P., CÁMARA, O.R., OLIVA F.Y. Biomaterial. Síntesis y caracterización de distintas apatitas. Su utilización como biomaterial. En: 2° Encuentro de Jóvenes Investigadores en Ciencia y Tecnología de Materiales (Posadas – Misiones, 16-17 Octubre 2008). Córdoba, Argentina. Universidad Nacional de Córdoba.
- [5] Feeding the Earth. París, Francia, 2011. [en línea] <www.fertilizer.org/ifa/HomePage/LIBRARY/Publication-database.html/Global-Phosphate-Rock-Production-Trends-from-1961-to-2010.-Reasons-for-the-Temporary-Set-Back-in-1988-1994.html> Última consulta: 09/12/2012
- [6] UNIVERSIDAD POLITECNICA DE MADRID, DIQUIMA: Grupo de Tecnología Química [en línea] <www.diquima.upm.es/docencia/tqindustrial/docs/cap4_fosforico.pdf> Última visita: 24/06/2012
- [7] Fathi Habashi. A Textbook of Hydrometallurgy, 2nd edition. Quebec City, Canada: Métallurgie Extractive Québec, 1999.
- [8] ZEOLITAS AFL LTDA. Contrato de Consultoría N°1364 con el Departamento del Huila, Colombia [en línea] <www.huila.gov.co/documentos/E/estudio_roca_fosforica.pdf> Última consulta: 28/08/2012
- [9] SOTO BUBERT, Andrés Roberto. Obtención de fertilizantes fosfatados (S.F.T.) a partir de roca fosfórica importada y Ácido sulfúrico nacional,

anteproyecto de una factibilidad técnico económica. Memoria para optar al título de Ingeniero Civil Químico. Santiago, Chile. Universidad de Chile, Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas, 2000.

- [10] AUSTIN G.T., Shreves's Chemical Process Industries. Chapter 4: Sulfur and Sulfuric Acid. 138 p. McGraw-Hill.
- [11] National Industrial Chemicals Notification and Assessment Scheme, Australian Government. Existing Chemicals Information Sheet. 2003 [en línea]<www.nicnas.gov.au/publications/information_sheets/existing_chemical_information_sheets/ecis_h2so4_pdf.pdf> Última consulta: 09/12/2012
- [12] New Zealand Institute of Chemistry. THE MANUFACTURE OF SULFURIC ACID AND SUPERPHOSPHATE [en línea] <<http://nzic.org.nz/ChemProcesses/production/1B.pdf>> Última consulta: 09/12/2012
- [13] REMOVAL of phosphorus from iron ores by chemical leaching por JIN Yong-shi, JIANG Tao, YANG Yong-bin, LI Qian, LI Guang-hui, GUO Yu-feng. Journal of Central South University of Technology, 13(6): 673-677, 2006.
- [14] MERUANE Naranjo, Gabriel Eduardo. Criterios de Diseño del Circuito de Soluciones en la Lixiviación Bacteriana de Sulfuros de Cobre en Pilas. Memoria para optar al título de Ingeniero Civil Químico. Santiago, Chile. Universidad de Chile, Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas, 1999.
- [15] EFFECT of ore solid concentration on the bioleaching of phosphorus from high-phosphorus iron ores using indigenous sulfur-oxidizing bacteria from municipal wastewater por Jincuo Wang, ShaoboShena, Jihong Kang, Hongxu Li, ZhanchengGuo. ProcessBiochemistry, 45: 1624-1631, 2010.
- [16] Crundwell, F. K. How do bacteria interact with minerals? Hydrometallurgy, 71(1-2): 75-81, 2003.
- [17] Mechanism and Kinetics of Elemental Sulfur Oxidation by *Thiobacillus thiooxidans* in Batch Fermenter por Y. C. Cheng, R. Y. Peng, C. C. Su y D. Y. Lo. Environmental Technology, 20(9): 933-942, 1999.

- [18] JIN, S. M., YAN, W. M., & WANG, Z. N. Acidophilic *Thiobacillus thiooxidans* Transfer of IncP Plasmids to Extremely Acidophilic *Thiobacillus thiooxidans*. Applied and Environmental Microbiology, 58(1): 429-431, 1992.
- [19] TODAR K., PhD. Nutrition and Growth of Bacteria [en línea] <http://textbookofbacteriology.net/nutgro_4.html> Última consulta: 09/12/2012
- [20] VARGAS T., Centro de Hidrometalurgia/Electrometalurgia, Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas, Universidad de Chile. Apunte del curso Procesos Hidro-Electro Metalúrgicos.
- [21] Virginia Polytechnic Institute and State University. BIOGEOCHEMICAL CYCLES [en línea] <http://filebox.vt.edu/users/chagedor/biol_4684/Cycles/Soxidat.html> Última consulta: 09/12/2012
- [22] GOURDON, R., & FUNTOWICZ, N. Kinetic model of elemental sulfur oxidation by *Thiobacillus thiooxidans* in batch slurry reactors. Bioprocess Engineering, 18(4): 241-249. 1998.
- [23] Modelling Bacterial Growth of *Lactobacillus curvatus* as a Function of Acidity and Temperature por T. Wijtzes, J.C. de Wit, J.H. Huis, K. Van't Riet y M.H. Zwietering. Applied and Environmental Microbiology, 61(7): 2533-2539. 1995.
- [24] HIMMELBLAU, D. Principios Básicos y Cálculos en Ingeniería Química. 6° Edición, Mexico. PRENTICE-HALL HISPANOAMERICANA, S. A., 1997. 749 p.
- [25] Harvard University, Chemistry and Chemical Biology. pKa's of Inorganic and Oxo-Acids [en línea] <http://evans.harvard.edu/pdf/evans_pka_table.pdf> Última consulta: 09/12/2012
- [26] LEVENSPIEL, O. Ingeniería de las Reacciones Químicas. 2° Edición, España. Reverté S.A., 1987. 634 p.
- [27] LUFIN Correa, Luis Alejandro. Desarrollo de un Modelo Computacional para el Proceso de Lixiviación de Sulfuros de Cobre en Pilas. Tesis para optar al grado de Magister en Ciencias de la Ingeniería Mención Química. Memoria

para optar al título de Ingeniero Civil Químico. Santiago, Chile. Universidad de Chile, Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas, 2007.

- [28] SHIVVERS, D. W., & BROCK, T. D. Oxidation of elemental sulfur by *Sulfolobus acidocaldarius*. Journal of bacteriology, 114(2): 706-710. 1973.
- [29] Universidad de Puerto Rico, Recinto Universitario de Mayaguez [en línea] <www.uprm.edu/biology/profs/massol/manual/p3-azufre.pdf> Última consulta: 09/12/2012
- [30] Universidad de Granada, Microbiología [en línea] <www.ugr.es/~eianez/Microbiologia/03forma.htm> Última consulta: 09/12/2012
- [31] STATE WATER RESOURCES CONTROL BOARD. Water issues [en línea] <www.swrcb.ca.gov/water_issues/programs/swamp/docs/cwt/guidance/3110sp.pdf> Última consulta: 10/01/2013
- [32] Phosphorus K-edge XANES spectroscopy of mineral standards por Ingall, E. D., Brandes, J. a, Diaz, J. M., de Jonge, M. D., Paterson, D., McNulty, I., y Elliott, W. C. Journal of synchrotron radiation, 18(Pt 2): 189-197. International Union of Crystallography. 2011.
- [33] VAN KAUWENBERGH, S. World Phosphate Rock Reserves and Resources. En: Center for Strategic and International Studies (September 2010). IFDC. [en línea] <http://csis.org/files/attachments/100922_Kauwenbergh_Presentation_0.pdf> Última consulta: 09/12/2012
- [34] POURBAIX, Marcel, Atlas of Electrochemical Equilibria in Aqueous Solutions. 2° ed. Texas, NACE International, 1974. 644 p.
- [35] HARNISCH, H. LIQUID-LIQUID TECHNIQUES IN PHOSPHORUS CHEMISTRY. Pure & Appl. Chem., 52: 809-824. 1980.
- [36] PERRY, J. Chemical Engineer's Handbook. 4ª ed. Tokyo, Japón. McGraw-Hill. 1963.
- [37] GRUPO MACCIO, Hoja de Seguridad del Producto [en línea] <http://maccio.com.uy/maccio/hojas/hoja_fosforita.htm> Última consulta: 10/12/2012

- [38] ECURED, Sulfato de Calcio [en línea] <www.ecured.cu/index.php/Sulfato_de_calcio> Última consulta: 10/12/2012
- [39] Leaching of phosphorus from incinerated sewage sludge ash by means of acid extraction followed by adsorption on orange waste gel por Biswas, B. K., Inoue, K., Harada, H., Ohto, K., & Kawakita, H. Journal of Environmental Sciences, 21(12): 1753-1760. 2009.
- [40] Comunicación personal con el profesor Jorge Castillo, profesor a cargo del Laboratorio de Fluidodinámica, Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas, Universidad de Chile.
- [41] Comunicación personal con el profesor Tomas Vargas, profesor de la Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas, Universidad de Chile.
- [42] REITEC, Servicios de Ingeniería. Oxígeno Disuelto [en línea] <www.reitec.es/V2/Pdf/agua03.pdf> Última consulta: 19/12/2012
- [43] Universidad de Puerto Rico, Recinto Universitario de Mayaguez [en línea] <www.uprm.edu/biology/profs/massol/manual/p3-oxigeno.pdf> Última consulta: 19/12/2012
- [44] Universidad de Granada [en línea] <www.ugr.es/~mota/Parte2-Tema06.pdf> Última consulta: 19/12/2012
- [45] HONEYWELL, Hydrofluoric acid [en línea] <<http://www51.honeywell.com/sm/hfacid/prod-applications-sub/hf-49.html>> Última consulta: 19/12/2012
- [46] SEO, H. S., & NAHM, M. H. Lipoprotein lipase and hydrofluoric acid deactivate both bacterial lipoproteins and lipoteichoic acids, but platelet-activating factor-acetylhydrolase degrades only lipoteichoic acids. Clinical and vaccine immunology, 16(8): 1187-1195. 2009
- [47] BARBOZA-SILVA, E., CASTRO, C. D., & MARQUIS, R. E. Mechanisms of inhibition by fluoride of urease activities of cell suspensions and biofilms of *Staphylococcus epidermidis*, *Streptococcus salivarius*, *Actinomyces naeslundii* and of dental plaque. Oral microbiology and immunology, 20(6): 323-332. 2005

10. Anexos.

Anexo A. Antecedentes.

A.1 Información adicional sobre el fósforo.

A continuación se detallan los minerales que poseen fósforo como componente (Tabla 15), la ubicación de los principales yacimientos de roca fosfórica (Figura 9) y los ácidos que existen del fósforo y algunas de sus características (Tabla 16).

Tabla 15: Nombre y fórmula de los minerales de fosfato. ^[31]

Grupo	Mineral	Fórmula ideal
Minerales del grupo Apatita	Apatite	$\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3(\text{OH},\text{F})$
	Carbonate apatite	$\text{Ca}_5(\text{PO}_4,\text{CO}_3)_3(\text{OH},\text{F})$
	Carbonate fluorapatite	$\text{Ca}_5(\text{PO}_4,\text{CO}_3)_3(\text{F})$
	Carbonate hydroxylapatitefluorian	$\text{Ca}_5(\text{PO}_4,\text{CO}_3)_3(\text{OH},\text{F})$
	Fluorapatite	$\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{F}$
	Hydroxylapatitechlorian	$\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3(\text{OH},\text{Cl})$
Minerales de fosfato de calcio no-apatita	Anapaite	$\text{Ca}_2\text{Fe}(\text{PO}_4)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$
	Herderite	$\text{CaBe}(\text{PO}_4)\text{F}$
	Messelite	$\text{Ca}_2(\text{Mn},\text{Fe}^{2+})(\text{PO}_4)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$
	Monetite	CaHPO_4
	Scholzite	$\text{CaZn}_2(\text{PO}_4)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$
	Whiteite	$(\text{Ca},\text{Fe},\text{Mg})_2\text{Al}_2(\text{PO}_4)_4(\text{OH})_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$
Minerales de fosfato de aluminio	Augelite	$\text{Al}_2(\text{PO}_4)(\text{OH})_3$
	Brazilianite	$\text{NaAl}_3(\text{PO}_4)_2(\text{OH})_4$
	Childrenitemanganoan	$(\text{Mn},\text{Fe})\text{Al}(\text{PO}_4)(\text{OH})_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$
	Eosphorite	$\text{MnAl}(\text{PO}_4)(\text{OH})_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$
	Lazulite	$(\text{Mg},\text{Fe})\text{Al}_2(\text{PO}_4)_2(\text{OH})_2$
	Montebrasite	$(\text{Li},\text{Na})\text{Al}(\text{PO}_4)(\text{OH},\text{F})$
	Turquoise	$\text{CuAl}_6(\text{PO}_4)_4(\text{OH})_8 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$

Minerales de fosfato de hierro y manganeso ([Fe(II), Mn(II)])	Variscite	$\text{AlPO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$
	Wardite	$\text{NaAl}_3(\text{PO}_4)_2(\text{OH})_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$
	Wavellite	$\text{Al}_3(\text{PO}_4)_2(\text{OH},\text{F})_3 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$
	Whiteite	$(\text{Ca},\text{Mn},\text{Mg})_2\text{Al}_2(\text{PO}_4)_4(\text{OH})_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$
	Anapaite	$\text{Ca}_2\text{Fe}(\text{PO}_4)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$
	Childrenitemanganoan 1	$(\text{Mn},\text{Fe})\text{Al}(\text{PO}_4)(\text{OH})_2$
	Eosphorite	$\text{MnAl}(\text{PO}_4)(\text{OH})_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$
	Hureaulite	$\text{Mn}_5(\text{PO}_3\text{OH})_2(\text{PO}_4)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$
	Lazulite	$(\text{Mg},\text{Fe})\text{Al}_2(\text{PO}_4)_2(\text{OH})_2$
	Ludlamite	$(\text{Fe},\text{Mg},\text{Mn})_3(\text{PO}_4)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$
Minerales de fosfato de hierro y manganeso ([Fe(III), Mn(III)])	Messelite	$\text{Ca}_2(\text{Mn},\text{Fe})(\text{PO}_4)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$
	Triphylite	$\text{Li}(\text{Fe}, \text{Mn})\text{PO}_4$
	Zwieselite	$(\text{Fe},\text{Mn})_2(\text{PO}_4)\text{F}$
	Heterosite	$\text{Fe}(\text{PO}_4)$
	Heterositewith Mn	$(\text{Fe},\text{Mn})(\text{PO}_4)$
	Phosphosiderite	$\text{FePO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ (monoclinic)
	Strengite	$\text{FePO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ (orthorhombic)



Figura 9: Principales yacimientos de roca fosfórica. [33]

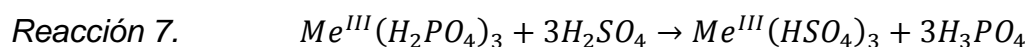
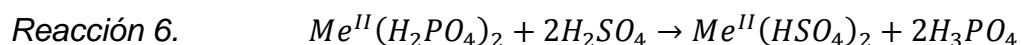
Tabla 16: Ácidos del fósforo. [34]

Nombre	Formula	Estado de Oxidación	Nº de protones que genera
Ácido hipofosforoso	H_3PO_2	+1	1
Ácido ortofosforoso	H_3PO_3	+3	2
Ácido metafosforoso	HPO_2	+3	1
Ácido pirofosforoso	$H_4P_2O_5$	+3	-
Ácido hipofosfórico	$H_4P_2O_5$	+4	4
Ácido ortofosfórico	H_3PO_4	+5	3
Ácido metafosfórico	$(HPO_3)_n$	+5	n
Ácido pirofosfórico	$H_4P_2O_7$	+5	4
Ácido trifosfórico	$H_5P_3O_{10}$	+5	-
Ácido tetrafosfórico	$H_6P_4O_{13}$	+5	-
Ácido perfosfórico	$H_4P_2O_8$	+6	-
Ácido monoperfosfórico	H_3PO_5	+7	-

A.2 Purificación alternativa del ácido fosfórico.

Otra forma de purificar el ácido fosfórico es a través de la extracción por solvente [35]. Para ello se requieren tres etapas principales:

1. Extracción líquido-líquido con un solvente apolar (ver Tabla 17 y Figura 10). El ácido se transfiere a la fase orgánica quedando las impurezas catiónicas en la fase acuosa. Si esta etapa se realiza en contracorriente y se agrega ácido sulfúrico, una gran parte del fosfato de hidrogeno se convierte en sulfato de hidrogeno, con la consecuente liberación de una mayor cantidad de ácido fosfórico, como se muestra en las siguientes reacciones.



El rendimiento de extracción puede aumentar a un 95% o más (ver Figura 10).

Tabla 17: Solvente utilizados en una escala alta de producción. [35]

Solventes apolares
Isopropanol
N-Butanol
Pentanol (mezcla de isómeros)
Metilisobutilcetona
Tributilfosfato disuelto en querosén
Diisopropileter

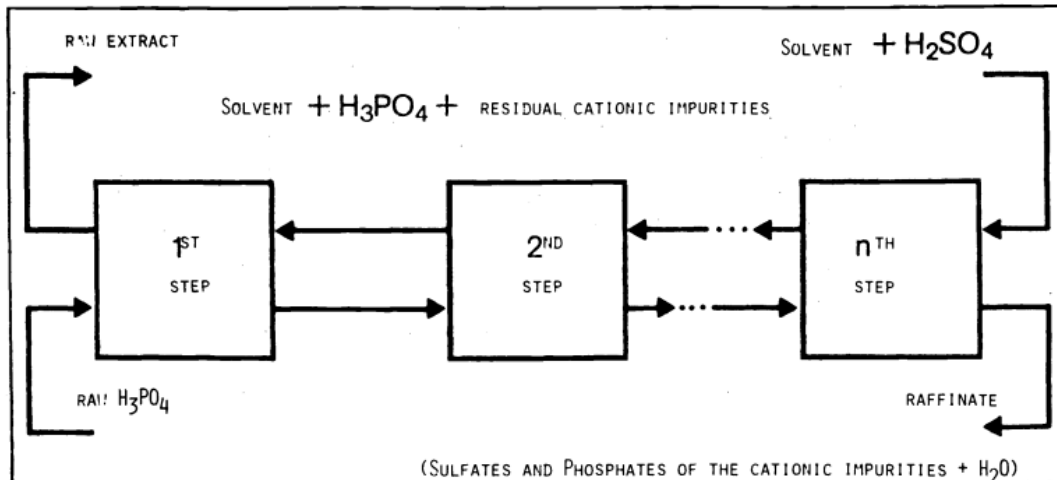


Figura 10: Primera etapa de la purificación de ácido fosfórico por separación líquido-líquido.^[35]

2. Extracción líquido-líquido con agua. Las impurezas catiónicas como los iones de hierro se remueven con un lavado con agua o ácido fosfórico en contracorriente. En la Figura 11 se muestra la eficiencia de esta etapa para el hierro, donde se utiliza alcohol amílico como fase orgánica.

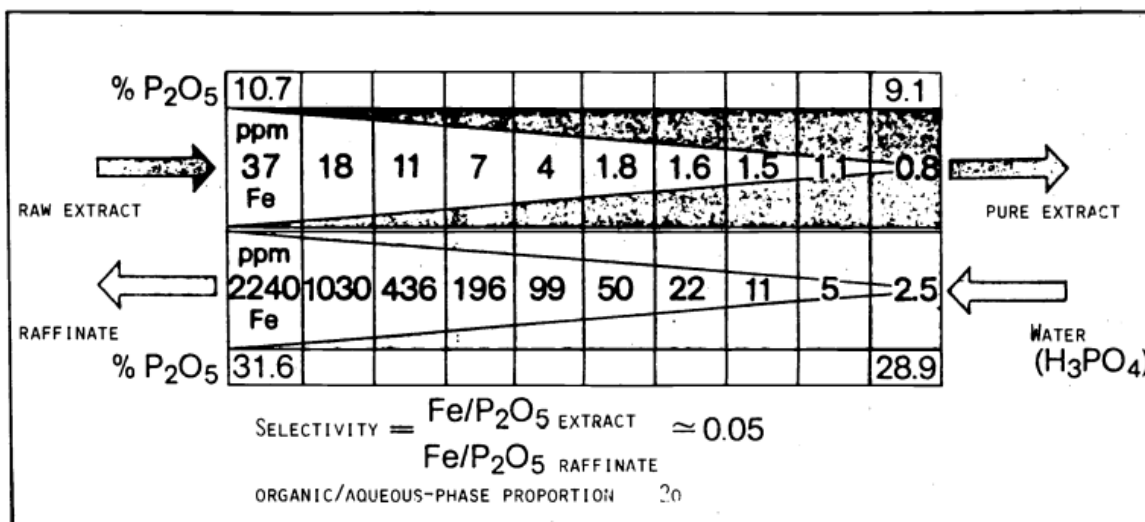


Figura 11: Remoción de los iones de Fe por lavado en contracorriente en el sistema C₅H₁₁OH-H₃PO₄-H₂O.^[35]

3. Extracción líquido-líquido con agua. El ácido fosfórico contenido en la fase orgánica se extrae en contracorriente con agua.

Otros pasos que se deben llevar a cabo son: la conversión del refinado de la primera etapa en un producto que se pueda disponer en vertederos, recuperación del solvente a través de stripping, y concentrar el ácido fosfórico purificado al 55-60% P_2O_5 .

A.3 Datos de las especies.

Tabla 18: Tabla de masa molar y densidad de las especies.

Especie	Masa molar [kg/kmol]	Densidad [kg/m ³] (30°C)	Referencia
Azufre (S)	32,07	1.960	[22]
Agua	18,02	994,7	[36]
Biomasa y debris celular	-	995,7	-
Ácido Sulfúrico (H₂SO₄)	98,08	1.821	[36]
Ácido Fosfórico (H₃PO₄)	98,00	1.862	[36]
Oxígeno molecular (O₂)	32,00	1,287	(*)
Dióxido de carbono (CO₂)	44,01	1,774	(*)
Mineral (Min)	1.009	1.700	-
Fosforita (Fos)	1.009	1.700	[37]
Yeso dihidratado (CaSO₄·2H₂O)	172,2	2.320	[38]
Ácido Fluorhídrico (HF)	20,00	1.001	[36]

(*) Cálculo de densidad a través de ecuación de gases ideales.

Anexo B. Ecuaciones.

B.1 Balances de Masa.

Según los supuestos señalados en la sección 4.3 se plantea el siguiente sistema de ecuaciones a resolver:

- Reactor Biológico.

- Azufre.

En estado estacionario, y sin flujo másico de salida (supuestos 1 y 2):

$$D_S^b = E_S^b \quad \text{Ec.73)}$$

- Agua.

En estado estacionario (supuesto 1):

$$E_{H_2O}^b = S_{H_2O}^b + D_{H_2O}^b \quad \text{Ec.74)}$$

Reemplazando las Ec.46 y Ec.73:

$$E_{H_2O}^b = S_{H_2O}^b + \frac{PM_{agua}}{PM_S} \cdot E_S^b \quad \text{Ec.75)}$$

- Oxígeno.

En estado estacionario, y sin flujo másico de salida (supuestos 1 y 5):

$$E_{O_2}^b = D_{O_2}^b \quad \text{Ec.76)}$$

Reemplazando las Ec.45 y Ec.73:

$$E_{O_2}^b = \frac{3}{2} \cdot \frac{PM_{O_2}}{PM_S} \cdot E_S^b \quad \text{Ec.77)}$$

-Dióxido de Carbono.

En estado estacionario, y sin flujo másico de salida (supuestos 1 y 6):

$$E_{CO_2}^b = D_{CO_2}^b \quad \text{Ec.78)}$$

- Ácido sulfúrico.

En estado estacionario:

$$P_{H_2SO_4}^b = S_{H_2SO_4}^b - E_{H_2SO_4}^b \quad \text{Ec.79)}$$

Reemplazando las Ec.47 y Ec.73:

$$\frac{PM_{H_2SO_4}}{PM_S} \cdot E_S^b = S_{H_2SO_4}^b - E_{H_2SO_4}^b \quad \text{Ec.80)}$$

- Biomasa.

A partir de la Ec.30 y dados los supuestos 1, 3, 4, 10, 11, 15 y 16:

$$N_{\tilde{X}_A} = \frac{S_{X_L}^b}{V_b \cdot m_x} \quad \text{Ec.81)}$$

Luego:

$$\mu \cdot A_S \cdot X_A \cdot m_x = S_{X_L}^b \quad \text{Ec.82)}$$

A partir de las Ec.33 y Ec.73:

$$E_S^b = \mu \cdot \frac{V_b}{Y_A} \cdot \tilde{X}_A \quad \text{Ec.83)}$$

- Ácido fosfórico.

En estado estacionario y sin consumo (supuesto 1 y 14):

$$S_{H_3PO_4}^b = E_{H_3PO_4}^b \quad \text{Ec.84)}$$

- Masa total.

El balance de masa total en estado estacionario es:

$$E_S^b + E_{H_2O}^b + E_{H_2SO_4}^b + E_{H_3PO_4}^b + E_{O_2}^b + E_{CO_2}^b - S_{X_L}^b - S_{H_2O}^b - S_{H_2SO_4}^b - S_{H_3PO_4}^b = 0 \quad \text{Ec.85)}$$

Reemplazando las Ec.73, Ec.75, Ec.77, Ec.78 y Ec.80:

$$S_{X_L}^b = E_S^b + \frac{PM_{agua}}{PM_S} \cdot E_S^b + \frac{3}{2} \cdot \frac{PM_{O_2}}{PM_S} \cdot E_S^b - \frac{PM_{H_2SO_4}}{PM_S} \cdot E_S^b + E_{CO_2}^b \quad \text{Ec.86)}$$

$$S_{X_L}^b = E_S^b \cdot \left(1 + \frac{PM_{agua}}{PM_S} + \frac{3}{2} \cdot \frac{PM_{O_2}}{PM_S} - \frac{PM_{H_2SO_4}}{PM_S}\right) + E_{CO_2}^b \quad \text{Ec.87)}$$

Reemplazando los valores de los pesos moleculares se obtiene (ver Anexo A.3):

$$S_{X_L}^b = E_{CO_2}^b \quad \text{Ec.88)}$$

- Reactor de Lixiviación.

- Mineral y fosforita.

En estado estacionario (supuesto 1):

$$E_{min}^l - S_{min}^l = D_{min}^l \quad \text{Ec.89)}$$

Considerando que el mineral alimentado posee un 1% de fosforita, y una conversión del 95%, y que no se lixivia ningún otro componente (supuestos 7, 8 y 9):

$$E_{fos}^l - S_{fos}^l = D_{fos}^l \quad \text{Ec.90)}$$

$$0,1 \cdot E_{min}^l \cdot 0,95 = D_{fos}^l \rightarrow 0,095 \cdot E_{min}^l = D_{fos}^l \quad \text{Ec.91)}$$

$$0,95 \cdot E_{fos}^l = D_{min}^l \quad \text{Ec.92)}$$

- Agua.

En estado estacionario (supuesto 1):

$$E_{H_2O}^l = S_{H_2O}^l + D_{H_2O}^l \quad \text{Ec.93)}$$

Reemplazando las Ec.48 y Ec.91:

$$E_{H_2O}^l = S_{H_2O}^l + 20 \cdot \frac{PM_{agua}}{PM_{min}} \cdot 0,095 \cdot E_{min}^l \quad \text{Ec.94)}$$

- Biomasa.

En estado estacionario, y sin flujo másico de salida (supuestos 1 y 17):

$$\frac{E_{XL}^l}{V_l \cdot m_x} = M_{XL}^l \quad \text{Ec.95)}$$

- Ácido sulfúrico.

En estado estacionario (supuesto 1):

$$D_{H_2SO_4}^l = E_{H_2SO_4}^l - S_{H_2SO_4}^l \quad \text{Ec.96)}$$

Dado que $E_{H_2SO_4}^l = S_{H_2SO_4}^b$ y $E_{H_2SO_4}^b = S_{H_2SO_4}^l$ (supuesto 19):

$$D_{H_2SO_4}^l = S_{H_2SO_4}^b - E_{H_2SO_4}^b = P_{H_2SO_4}^b \quad \text{Ec.97)}$$

- Ácido fosfórico.

En estado estacionario y purgando un 90% de ácido fosfórico del sistema (supuestos 1 y 12):

$$P_{H_3PO_4}^l = 0,9 \cdot S_{H_3PO_4}^l \quad \text{Ec.98)}$$

Reemplazando las Ec.50 y Ec.91:

$$6 \cdot \frac{PM_{H_3PO_4}}{PM_{min}} \cdot 0,095 \cdot E_{min}^l = 0,9 \cdot S_{H_3PO_4}^l \quad \text{Ec.99)}$$

- Yeso.

En estado estacionario, y sin flujo másico de entrada (supuestos 1 y 20):

$$P_{CaSO_4}^l = S_{CaSO_4}^l \quad \text{Ec.100)}$$

Reemplazando las Ec.52 y Ec.91:

$$10 \cdot \frac{PM_{CaSO_4}}{PM_{min}} \cdot 0,095 \cdot E_{min}^l = S_{CaSO_4}^l \quad \text{Ec.101)}$$

- Ácido fluorhídrico.

En estado estacionario, y sin flujo másico de entrada (supuestos 1 y 21):

$$P_{HF}^l = S_{HF}^l \quad \text{Ec.102)}$$

Reemplazando las Ec.52 y Ec.91:

$$2 \cdot \frac{PM_{HF}}{PM_{min}} \cdot 0,095 \cdot E_{min}^l = S_{HF}^l \quad \text{Ec.103)}$$

- Masa total.

En estado estacionario se obtiene:

$$E_{min}^l + E_{H_2O}^l + E_{H_2SO_4}^l + E_{H_3PO_4}^l + E_{X_L}^l - S_{min}^l - S_{H_2O}^l - S_{H_2SO_4}^l - S_{H_3PO_4}^l - S_{CaSO_4}^l - S_{HF}^l - S_{debris}^l = 0 \quad \text{Ec.104)}$$

Reemplazando las ecuaciones anteriores se obtiene que el balance sea 0.

B.2 Cálculos auxiliares.

1) Cálculo del valor del área superficial total de las partículas de azufre al interior del reactor biológico (As). Para ello suponer un radio promedio y una fracción de volumen de las partículas de azufre con respecto al volumen total del reactor (ϵ), ya que:

$$A_S = 4 \cdot \pi \cdot R_b^2 \cdot n \quad \text{Ec.105)}$$

Siendo n el N° total de partículas de azufre al interior del reactor biológico.

Ahora n se puede despejar en función del volumen de las partículas de azufre totales al interior del reactor biológico:

$$V_S = \frac{4}{3} \cdot \pi \cdot R_b^3 \cdot n \quad \text{Ec.106)}$$

$$\varepsilon = \frac{V_S}{V_b} = \frac{\frac{4}{3} \cdot \pi \cdot R_b^3 \cdot n}{V_b} \rightarrow n = \frac{\varepsilon \cdot V_b}{\frac{4}{3} \cdot \pi \cdot R_b^3} \quad \text{Ec.107)}$$

Luego A_s :

$$A_s = \frac{3 \cdot \varepsilon \cdot V_b}{R_b} \quad \text{Ec.108)}$$

2) Cálculo del flujo de salida de solución del reactor de lixiviación.

$$S_{sol}^l = \frac{S_{CaSO_4}^l + S_{min}^l}{p_{sólido/sol}} \quad \text{Ec.109)}$$

Donde S_{sol}^l se define como:

$$S_{sol}^l = S_{H_2O}^l + S_{CaSO_4}^l + S_{H_3PO_4}^l + S_{H_2SO_4}^l + S_{debris}^l + S_{min}^l \quad \text{Ec.110)}$$

3) Cálculo de la densidad de la solución de salida del reactor de lixiviación y del reactor biológico. Esta se calcula como la ponderación de la fracción másica de cada especie de la salida por su densidad.

$$S_{sol}^l = S_{H_2O}^l + S_{CaSO_4}^l + S_{H_3PO_4}^l + S_{H_2SO_4}^l + S_{debris}^l + S_{min}^l \quad \text{Ec.111)}$$

$$\rho_{sol}^l = w_{H_2O}^l \cdot \rho_{H_2O}^l + w_{H_2SO_4}^l \cdot \rho_{H_2SO_4}^l + w_{H_3SO_4}^l \cdot \rho_{H_3SO_4}^l + w_{CaSO_4}^l \cdot \rho_{CaSO_4}^l \quad \text{Ec.112)}$$

$$\rho_{sol}^b = w_{H_2O}^b \cdot \rho_{H_2O}^b + w_{H_2SO_4}^b \cdot \rho_{H_2SO_4}^b + w_{H_3SO_4}^b \cdot \rho_{H_3SO_4}^b + w_{X_L}^b \cdot \rho_{X_L}^b \quad \text{Ec.113)}$$

4) Cálculo de la salida de agua del sistema. Se calcula a partir del parámetro $p_{P_2O_5/sol}$.

$$p_{P_2O_5/sol} = \frac{S_{H_3SO_4}^{st}}{S_{H_3SO_4}^{st} + S_{H_2O}^{st}} \quad \text{Ec.114)}$$

Anexo C. Algoritmo.

Con las ecuaciones presentadas en la sección anterior se genera el siguiente algoritmo para resolver el sistema. Con él se obtiene el sistema de ecuaciones presentado en la sección 4.10.

C.1 Cálculo de variables de salida del reactor de lixiviación.

1.1) Fijar valor de las variables de entrada.

1.2) Dado un pH de operación del reactor de lixiviación (pH_l) y la Ec.53, calcular la concentración de ácido sulfúrico al interior del reactor de lixiviación ($C_{H_2SO_4}^l$).

1.3) Dado un flujo de entrada de mineral al reactor de lixiviación (E_{min}^l), y el porcentaje de fosforita en el mineral, obtener el flujo másico de entrada de fosforita al reactor de lixiviación (E_{fos}^l).

1.4) Con el flujo másico de entrada de fosforita al reactor de lixiviación (E_{fos}^l), la conversión esperada y la Ec.92, obtener el consumo de mineral y fosforita ($D_{min}^l = D_{fos}^l$).

1.5) Con el consumo de fosforita (D_{fos}^l) obtener por estequiometria (Ec.44, Ec.48, Ec.49, Ec.50, Ec.51, y Ec.52) las tasas másicas de:

- Consumo de azufre en el reactor biológico (D_S^b).
- Consumo de agua del reactor de lixiviación ($D_{H_2O}^l$).
- Consumo de ácido sulfúrico del reactor de lixiviación ($D_{H_2SO_4}^l$).
- Producción de ácido fosfórico del reactor de lixiviación ($P_{H_3PO_4}^l$).
- Producción de yeso dihidratado del reactor de lixiviación ($P_{CaSO_4}^l$).
- Producción de ácido fluorhídrico del reactor de lixiviación (P_{HF}^l).

1.6) Dado un valor para q (porcentaje que se retira de ácido fosfórico del sistema completo), y con el cálculo de las tasas de $P_{H_3PO_4}^l, P_{CaSO_4}^l$ y P_{HF}^l , y las Ec.57, Ec.59 y Ec.60, obtener los flujos másicos de salida del reactor de lixiviación de:

- Ácido fosfórico ($S_{H_3PO_4}^l$).
- Yeso dihidratado ($S_{CaSO_4}^l$)
- Ácido fluorhídrico (S_{HF}^l).

1.7) Dado un flujo de entrada de dióxido de carbono ($E_{CO_2}^b$) y la Ec.67, obtener el flujo de salida de células en suspensión del reactor biológico ($S_{X_L}^b$), que también corresponde al flujo de entrada de biomasa al reactor de lixiviación ($E_{X_L}^l$).

1.8) Con el flujo de entrada de biomasa al reactor de lixiviación ($E_{X_L}^l$) y el supuesto 17) obtener el flujo de salida de debris celular del reactor de lixiviación (S_{debris}^l).

1.9) Con el flujo de entrada de mineral al reactor de lixiviación (E_{min}^l), el consumo de mineral (D_{min}^l), y la Ec.58 se calcula el flujo de salida de mineral del reactor de lixiviación (S_{min}^l).

1.10) Dado un valor de $p_{sólido/sol}$, con el flujo másico de salida de yeso dihidratado del reactor de lixiviación ($S_{CaSO_4}^l$), el flujo de salida de mineral del reactor de lixiviación (S_{min}^l) y la Ec.109, obtener el flujo de salida de solución del reactor de lixiviación (S_{sol}^l).

1.11) Se aproxima el valor de la densidad de la solución de salida del reactor de lixiviación al valor de la densidad del agua.

1.12) Se calcula el valor del flujo volumétrico de salida de solución del reactor de lixiviación ($Q_{S_{sol}^l}$), con la densidad aproximada y el flujo de salida de solución del reactor de lixiviación (S_{sol}^l).

1.13) Con el flujo volumétrico de salida de solución del reactor de lixiviación (Q_{sol}^l) y la concentración de ácido sulfúrico al interior del reactor de lixiviación ($C_{H_2SO_4}^l$) se calcula el flujo de salida de ácido sulfúrico del reactor de lixiviación ($S_{H_2SO_4}^l$).

1.14) Se despeja el valor del flujo de salida de agua del reactor de lixiviación ($S_{H_2O}^l$) a partir de la Ec.110.

1.15) Con el flujo de salida de agua del reactor de lixiviación ($S_{H_2O}^l$), el consumo de agua del reactor de lixiviación ($D_{H_2O}^l$) y la Ec.94, obtener el flujo másico de entrada de agua al reactor de lixiviación ($E_{H_2O}^l$).

1.16) Se calcula la densidad de la solución de salida con la Ec.111.

1.17) Se calcula el error con respecto a la densidad aproximada del punto 1.11. Si el error es mayor al 5% se repiten los pasos 1.11 al 1.16, igualando la densidad aproximada a la densidad calculada con la Ec.112.

1.18) Con el flujo de salida de ácido fosfórico del reactor de lixiviación ($S_{H_3PO_4}^l$) se calcula el flujo de salida de ácido fosfórico del sistema ($S_{H_3PO_4}^{st}$) y el flujo que se recircula al reactor biológico, que corresponde al flujo de entrada y salida de ácido fosfórico del reactor biológico ($E_{H_3PO_4}^b, S_{H_3PO_4}^b$) y al flujo de entrada de ácido fosfórico al reactor de lixiviación ($E_{H_3PO_4}^l$).

1.19) Con el flujo de salida de ácido fosfórico del sistema ($S_{H_3PO_4}^{st}$), el valor de $p_{P_2O_5/sol}$, y la Ec.113 se obtiene el flujo de salida de agua del sistema ($S_{H_2O}^{st}$).

1.20) Con el flujo de salida de agua del reactor de lixiviación ($S_{H_2O}^l$) y el flujo de salida de agua del sistema ($S_{H_2O}^{st}$) se obtiene el flujo de agua que se recircula, que corresponde al flujo de entrada de agua al reactor biológico ($E_{H_2O}^b$).

1.21) A partir de los flujos másicos de entrada y la densidad de cada especie, se calculan los flujos volumétricos para cada una. Luego se suman para obtener el flujo volumétrico total de entrada (Qe_{tot}^l).

1.22) Para corroborar que el balance de masa total sea cero, se calcula el flujo total de entrada y salida al reactor de lixiviación (E_{tot}^l, S_{tot}^l) y se restan.

1.23) Dado el ajuste de las curvas experimentales para de extracción de fósforo, obtener la etapa controlante, y el valor de los parámetros D_E y /o K_R .

1.24) Con el o los parámetros obtenidos en el punto anterior, la concentración de ácido sulfúrico del reactor de lixiviación ($C_{H_2SO_4}^l$), y las Ec.6, Ec.7 o Ec.8 (según sea la etapa controlante), resolver y graficar en función del tiempo la conversión de la fosforita. Con ello se obtiene el tiempo de residencia del mineral para una conversión dada.

1.25) Con tiempo de residencia (τ_l) y el flujo volumétrico de entrada total al reactor de lixiviación (Qe_{tot}^l), y la Ec.10, obtener el volumen del reactor de lixiviación (V_l).

1.26) Con el flujo másico de salida de mineral del reactor de lixiviación (S_{min}^l), el flujo volumétrico de salida de solución del reactor de lixiviación (Qs_{sol}^l) y el volumen del reactor de lixiviación (V_l) se calcula la masa de mineral al interior del reactor.

C.2 Cálculo de variables de salida del reactor biológico.

2.1) Fijar valor de las variables de entrada.

2.2) Dado la tasa de consumo de azufre calculada en el punto 1.5), y la Ec.73, obtener el flujo de entrada de azufre al reactor biológico (E_S^b).

2.3) Dado el flujo másico de entrada de azufre al reactor biológico (E_S^b), obtener por estequiometria (Ec.45, Ec.46 y Ec.47) las tasas másicas de:

- Consumo de oxígeno del reactor biológico ($D_{O_2}^b$).
- Consumo de agua del reactor biológico ($D_{H_2O}^b$).
- Producción de ácido sulfúrico del reactor biológico ($P_{H_2SO_4}^b$).

2.4) Con el cálculo de las tasas de $D_{O_2}^b$ y $P_{H_2SO_4}^b$, el supuesto 19 y las Ec.66 y Ec.68, obtener los flujos másicos de:

- Entrada de oxígeno al reactor biológico ($E_{O_2}^b$).
- Entrada y salida del reactor biológico de ácido sulfúrico ($E_{H_2SO_4}^b, S_{H_2SO_4}^b$).

2.5) Con el flujo de entrada de ácido fosfórico al reactor biológico ($E_{H_3PO_4}^b$) obtenido en el punto 1.18 y la Ec.84 se obtiene el flujo de salida de ácido fosfórico del reactor biológico ($S_{H_3PO_4}^b$).

2.6) Con el flujo de entrada de agua al reactor biológico ($E_{H_2O}^b$) obtenido en el punto 1.20, la tasa de consumo de agua ($D_{O_2}^b$) y la Ec.75 se obtiene el flujo de salida de agua del reactor biológico ($S_{H_2O}^b$).

2.7) A partir de los flujos másicos de entrada y la densidad de cada especie, se calculan los flujos volumétricos para cada una. Luego se suman para obtener el flujo volumétrico total de entrada (Qe_{tot}^b).

2.8) A partir de los flujos másicos de salida y la densidad de cada especie, se calculan los flujos volumétricos para cada una. Luego se suman para obtener el flujo volumétrico total de salida (Qs_{tot}^b).

2.9) Dado el flujo másico de salida de ácido sulfúrico del reactor biológico ($S_{H_2SO_4}^b$) y el flujo volumétrico total de salida ($Q_{S_{tot}}^b$), obtener la concentración de ácido sulfúrico del reactor biológico ($C_{H_2SO_4}^b$).

2.10) Dada la concentración de ácido sulfúrico al interior del reactor biológico ($C_{H_2SO_4}^b$) y la Ec.53, calcular el pH del reactor biológico (pH_b).

2.11) Para corroborar que el balance de masa total sea cero, se calcula el flujo total de entrada y salida al reactor de lixiviación (E_{tot}^b, S_{tot}^b) y se restan.

2.12) Se calcula la densidad de la solución de salida con la Ec.113.

2.13) Con el flujo de salida de células en suspensión del reactor biológico ($S_{X_L}^b$) y el flujo volumétrico total de salida ($Q_{S_{tot}}^b$) se calcula la concentración másica de células en suspensión al interior del reactor biológico ($C_{X_L}^b$).

2.14) Con la concentración másica de células en suspensión al interior del reactor biológico ($C_{X_L}^b$) y la masa de una célula (m_x), se calcula concentración de células en suspensión al interior del reactor biológico (X_L).

2.15) Con la concentración de células en suspensión (X_L) y la Ec.1, calcular el N° de células adheridas (X_A).

2.16) Dado el valor de ε , el radio promedio de las partículas de azufre al interior del reactor biológico (R_b), el N° de células por área superficial de azufre (X_A), y las Ec.23 y Ec.108, obtener la concentración de células adheridas (\tilde{X}_A).

2.17) A partir del pH del reactor biológico (pH_b) y la Ec.4 se obtiene el valor de la tasa específica de crecimiento (μ_{max}).

2.18) Si μ_{max} es mayor a cero μ toma el valor de μ_{max} . De lo contrario μ se considera 0.

2.19) Dado el flujo másico de entrada de azufre al reactor biológico (E_S^b), el rendimiento celular con respecto al azufre (Y_a), la tasa de crecimiento (μ), la concentración de células adheridas (\tilde{X}_A), y la Ec.83, calcular el volumen del reactor biológico (V_b).

2.20) Dada la tasa de crecimiento (μ), la concentración de células adheridas (\tilde{X}_A), el volumen del reactor biológico (V_b), la masa de una célula (m_x) y la Ec.82 se calcula el valor del flujo de salida de células en suspensión del reactor biológico ($S_{X_L}^b$).

2.21) Se compara el valor obtenido del flujo de salida de células en suspensión del reactor biológico obtenido en el punto 2.20 con el obtenido en el punto 1.7. De no corresponder, se iguala el valor del flujo de entrada de dióxido de carbono al valor del flujo de salida de células en suspensión del reactor biológico obtenido en el punto 2.20, y se vuelven a repetir los pasos 1.1 al 2.21.

2.22) Con el volumen del reactor biológico (V_b), el flujo volumétrico de entrada total al reactor biológico (Qe_{tot}^b), y la Ec.10, calcular el tiempo de residencia del reactor biológico (τ_b).

2.23) A partir del valor de ε , de la densidad del azufre y de la densidad de la solución de salida se calcula el porcentaje p/p de azufre con respecto a la solución al interior del reactor (de manera aproximada ya que la salida no considera el azufre).

2.24) Con el parámetro ε , la densidad del azufre y el volumen del reactor biológico (V_b), se calcula la masa de azufre al interior del reactor biológico.

2.25) Con la masa de mineral calculada en el punto 1.26) y la masa de azufre calculada en el punto anterior, se obtiene la razón entre ambas ($masa_{min}/masa_S$).

Anexo D. Códigos en Matlab.

D.1 Algoritmo para la obtención del volumen del reactor biológico y los flujos de cada especie para ambos reactores.

Nombre del archivo: solve_Vb

```
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% Algoritmo para determinar:
% - Los flujos máxicos de entrada y salida de cada componente del sistema
% para ambos reactores, el biológico y el de lixiviación.
% - Volumen y pH del reactor biológico.
% - Tiempo de residencia para el reactor biológico.
% - Tasa de crecimiento bacteriana y concentraciones de bacterias.
%
% v1.0          María Fernanda Godoy      margodoy@ug.uchile.cl
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
clc
%clear all
close all

global Qerltot pHl psolido_sol V_l

%% Datos

PMH = 1.00794;          % Masa molar del hidrogeno [kg/kmol]
PMO = 15.99            % Masa molar del oxígeno [kg/kmol]
PMCa = 40.078;         % Masa molar del calcio [kg/kmol]
PMS = 32.065;          % Masa molar del azufre [kg/kmol]
PMP = 30.97376;        % Masa molar del fosforo [kg/kmol]
PMF = 18.9984;         % Masa molar del flúor [kg/kmol]

PMaf = 3*PMH+PMP+4*PMO; % Masa molar del ácido fosfórico
[kg/kmol]
PMmin = 10*PMCa+6*PMP+24*PMO+2*PMF; % Masa molar del mineral (fosforita)
[kg/kmol]
PMY = PMCa+PMS+4*PMO+4*PMH+2*PMO; % Masa molar del yeso dihidratado
[kg/kmol]
PMas = 2*PMH+PMS+4*PMO; % Masa molar del ácido sulfúrico
[kg/kmol]
PMagua = 2*PMH+PMO; % Masa molar del agua
[kg/kmol]
PMO2 = 2*PMO; % Masa molar del O2
[kg/kmol]
PMHF = PMH+PMF; % Masa molar del ácido fluorhídrico
[kg/kmol]

ds = 1960; % Densidad del azufre [kg/m^3]
dagua = 995; % Densidad del agua [kg/m^3]
```

```

das = 1821;      % Densidad del ácido sulfúrico      [kg/m^3]
daf = 1862;      % Densidad del ácido fosfórico      [kg/m^3]
dy = 2320;      % Densidad del yeso dihidratado      [kg/m^3]
dO2 = 1.287;    % Densidad del O2                    [kg/m^3]
dCO2 = 1.774;   % Densidad del CO2                  [kg/m^3]
dmin = 1700;    % Densidad del mineral (fosforita)   [kg/m^3]
dHF = 1001;    % Densidad del ácido fluorhídrico    [kg/m^3]

YA = 4.9*10^14; % Rendimiento celular                [cel/kg azufre]
mx = 10^-15;    % Masa celular (Escherichia coli)     [kg/cel]
pHmin = 0.5;    % pH mínimo al cual crece la célula    []
pHmax = 4.3     % pH máximo al cual crece la célula    []
Keq = 2*10^(-15); % Constante de equilibrio                [m^3/cel]
Xmax = 10^12;   % Concentración máxima de células adheridas [cel/m^2]

%% Input

% Reactor Lixiviación
pHl = 1:0.1:5;      % pH reactor de lixiviación []
%pHl=[1 1.5 2 2.5 3 3.5]; % se utiliza para obtener el gráfico de
conversión en el tiempo
psolido_sol = [0.1 0.25 0.4]; % Porcentaje peso/peso de sólido en
solución de salida [kg sólido/kg solución]
q = 0.9;            % Porcentaje que se retira del sistema de
ácido fosfórico []
pP2O5_sol = 0.5;    % Porcentaje peso/peso del P2O5 en solución de
salida del sistema [kg P2O5/kg solución]
El_min = 10^5;      % Flujo másico de entrada de mineral al
reactor de lixiviación [kg/día]
cfos_min = 0.01;    % Porcentaje de contenido de fosforita en el
mineral [kg/kg]
El_fos = El_min*cfos_min; % Flujo másico de entrada de fosforita al
reactor de lixiviación [kg/día]
alfa = 0.95;        % Conversión esperada de la fosforita []

% Reactor Biológico

E = [0.01 0.05 0.1]; % Fracción vol azufre total/vol reactor []
rb = 3*10^-5;        % Radio partícula de azufre [m]
z1 = 25;             % Parámetro cálculo mumax=f(pH) para 30°C [1/día]
z2 = 0.0814;        % Parámetro cálculo mumax=f(pH) para 30°C []
Eb_CO2 = 148;        % Flujo másico de entrada de CO2 al reactor
biológico [kg/día]

%% Output

% Reactor Lixiviación

for i = 1:1:length(pHl) % Variar parámetro pHl
    for k = 1:1:length(psolido_sol) % Variar parámetro psolido_sol
        for w = 1:1:length(E) % Variar parámetro E

```

```

Clas(i) = 10.^(-pHl(i))*PMas; % Concentración másica de ácido sulfúrico
en el reactor de lixiviación [kg/m^3]

Dl_fos=alfa*El_fos; % Consumo másico de fosforita en el
reactor de lixiviación [kg/día]

Pl_af = 6*Dl_fos*PMaf/PMmin; % Producción másica de ácido fosfórico en
el reactor de lixiviación [kg/día]
Pl_y = 10*Dl_fos*PMY/PMmin; % Producción másica de yeso dihidratado
en el reactor de lixiviación [kg/día]
Pl_HF = 2*Dl_fos*PMHF/PMmin; % Producción másica de ácido fluorhídrico
en el reactor de lixiviación [kg/día]
Dl_agua = 20*PMagua*Dl_fos/PMmin; % Consumo másico de agua en el
reactor de lixiviación [kg/día]
Dl_as = 10*PMas*Dl_fos/PMmin; % Consumo másico de ácido sulfúrico
en el reactor de lixiviación [kg/día]

Sl_af = Pl_af/q; % Flujo másico de salida de ácido fosfórico del
reactor de lixiviación [kg/día]
Sl_y = Pl_y; % Flujo másico de salida de yeso dihidratado del
reactor de lixiviación [kg/día]
Sl_HF = Pl_HF; % Flujo másico de salida de ácido fluorhídrico del
reactor de lixiviación [kg/día]

El_Xl = Eb_CO2; % Flujo másico de salida de células en suspensión del
reactor biológico [kg/día]
Sl_debris = El_Xl; % Flujo másico de salida de debris celular del
reactor de lixiviación [kg/día]

Dl_min = Dl_fos; % Consumo másico de mineral en el reactor de
lixiviación [kg/día]
Sl_min = El_min-Dl_min; % Flujo másico de salida de mineral del reactor
de lixiviación [kg/día]

Sl_sol(k) = (Sl_y+Sl_min)./psolido_sol(k); % Flujo de salida de solución
del reactor de lixiviación [kg/día]
dsaprox(i,k) = dagua; % Suponiendo un valor
aproximado de la densidad de la solución
Qsl_sol(i,k) = Sl_sol(k)./dsaprox(i,k); % Flujo volumétrico de salida
de solución del reactor de lixiviación [m^3/día]

Sl_as(i,k) = Qsl_sol(i,k).*Clas(i); % Flujo másico de salida de ácido
sulfúrico del reactor de lixiviación [kg/día]
Sl_agua(i,k) = Sl_sol(k)-Sl_y-Sl_af-Sl_debris-Sl_min-Sl_as(i,k);
% Flujo másico de salida de agua del reactor de lixiviación [kg/día]

dsol_l(i,k) =
(Sl_agua(i,k).*dagua+Sl_af*daf+Sl_y*dy+Sl_debris*dagua+Sl_min*dmin+Sl_as(
i,k).*das)./Sl_sol(k);
% Densidad de la solución de salida del reactor de lixiviación [kg/m^3]

error(i,k) = abs(dsol_l(i,k)-dsaprox(i,k)).*100./dsaprox(i,k);
% Error entre la densidad aproximada y la densidad calculada

while error(i,k)>0.05 % Iteración de la densidad de la solución de salida

```

```

dsaprox(i,k) = dsol_l(i,k);
Qsl_sol(i,k) = Sl_sol(k)./dsaprox(i,k);

Sl_as(i,k) = Qsl_sol(i,k).*Clas(i);
El_as(i,k) = Sl_as(i,k)+Dl_as; % Flujo másico de entrada de ácido
sulfúrico al reactor de lixiviación [kg/día]

Sl_agua(i,k) = Sl_sol(k)-Sl_y-Sl_af-Sl_debris-Sl_min-Sl_as(i,k);
El_agua(i,k) = Dl_agua+Sl_agua(i,k); % Flujo másico de entrada de
agua al reactor de lixiviación [kg/día]

dsol_l(i,k) =
(Sl_agua(i,k).*dagua+Sl_af*daf+Sl_y*dy+Sl_debris*dagua+Sl_min*dmin+Sl_as(
i,k).*das)./Sl_sol(k);

error(i,k) = abs(dsol_l(i,k)-dsaprox(i,k)).*100./dsaprox(i,k);

end

Sst_af = q*Sl_af; % Flujo másico de salida de ácido fosfórico del
sistema (lo que se recupera) [kg/día]
Sst_agua = (Sst_af/pP2O5_sol)-Sst_af; % Flujo másico de salida de agua
del sistema [kg/día]

Frc_af = (1-q)*Sl_af; % Flujo másico de ácido fosfórico que se
recircula [kg/día]
El_af = Frc_af; % Flujo másico de entrada de ácido fosfórico al
reactor de lixiviación [kg/día]
Frc_agua(i,k) = Sl_agua(i,k)-Sst_agua; % Flujo másico de agua que se
recircula [kg/día]

Sl_tot(i,k) = Sl_min+Sl_debris+Sl_as(i,k)+Sl_agua(i,k)+Sl_y+Sl_HF+Sl_af;
% Flujo másico de salida total al reactor de lixiviación [kg/día]

El_tot(i,k) = El_min+El_Xl+El_as(i,k)+El_af+El_agua(i,k);
% Flujo másico de entrada total del reactor de lixiviación [kg/día]

Bml(i,k) = El_tot(i,k)-Sl_tot(i,k); % Corroborar que el balance de masa
es cero

Qel_min = El_min./dmin; % Flujo volumétrico de entrada de
mineral al reactor de lixiviación [m^3/día]
Qel_agua(i,k) = El_agua(i,k)./dagua; % Flujo volumétrico de entrada de
agua al reactor de lixiviación [m^3/día]
Qel_as(i,k) = El_as(i,k)./das; % Flujo volumétrico de entrada de
ácido sulfúrico al reactor de lixiviación [m^3/día]
Qel_af = El_af./daf; % Flujo volumétrico de entrada de
ácido fosfórico al reactor de lixiviación [m^3/día]
Qel_Xl = El_Xl./dagua; % Flujo volumétrico de entrada de
células en suspensión al reactor de lixiviación [m^3/día]

Qelrtot(i,k)=Qel_min+Qel_agua(i,k)+Qel_as(i,k)+Qel_af+Qel_Xl;

```

```

% Flujo volumétrico de entrada total al reactor de lixiviación [m^3/día]

El_sol(i,k) = El_Xl+El_as(i,k)+El_af+El_agua(i,k); % Flujo másico de
entrada de solución del reactor de lixiviación [kg/día]

% Reactor Biológico

Eb_s = 10*Dl_fos*PMS/PMmin; % Flujo másico de entrada de azufre al
reactor biológico [kg/día]

Pb_as = Eb_s*PMas/PMS; % Producción másica de ácido sulfúrico en
el reactor biológico [kg/día]
Db_agua = Eb_s*PMagua/PMS; % Consumo másico de agua en el reactor
biológico [kg/día]
Db_O2 = (3/2)*Eb_s*PMO2/PMS; % Consumo másico de O2 en el reactor
biológico [kg/día]

Eb_O2 = Db_O2; % Flujo másico de entrada de O2 al reactor
biológico [kg/día]
Eb_as(i,k) = Sl_as(i,k); % Flujo másico de entrada de ácido
sulfúrico al reactor biológico [kg/día]
Sb_as(i,k) = Eb_as(i,k)+Pb_as; % Flujo másico de salida de ácido
sulfúrico del reactor biológico [kg/día]
Sb_Xl = Eb_CO2; % Flujo másico de salida de células en suspensión del
reactor biológico [kg/día]

Eb_agua(i,k) = Frc_agua(i,k); % Flujo másico de entrada de agua al
reactor biológico (proveniente de la recirculación) [kg/día]
Sb_agua(i,k) = Eb_agua(i,k)-Db_agua; % Flujo másico de salida de agua del
reactor biológico [kg/día]

Eb_af = Frc_af; % Flujo másico de entrada de ácido fosfórico al
reactor biológico [kg/día]
Sb_af = Eb_af; % Flujo másico de salida de ácido fosfórico del
reactor biológico [kg/día]

Qeb_s = Eb_s/ds; % Flujo volumétrico de entrada de
azufre al reactor biológico [m^3/día]
Qeb_agua(i,k) = Eb_agua(i,k)./dagua; % Flujo volumétrico de entrada de
agua al reactor biológico [m^3/día]
Qeb_O2 = Eb_O2/dO2; % Flujo volumétrico de entrada de O2
al reactor biológico [m^3/día]
Qeb_CO2 = Eb_CO2/dCO2; % Flujo volumétrico de entrada de
CO2 al reactor biológico [m^3/día]
Qeb_as(i,k) = Eb_as(i,k)./das; % Flujo volumétrico de entrada de
ácido sulfúrico al reactor biológico [m^3/día]
Qeb_af = Eb_af/daf; % Flujo volumétrico de entrada de
ácido fosfórico al reactor biológico [m^3/día]
Qsb_agua(i,k) = Sb_agua(i,k)./dagua; % Flujo volumétrico de salida de
agua del reactor biológico [m^3/día]
Qsb_as(i,k) = Sb_as(i,k)./das; % Flujo volumétrico de salida de
ácido sulfúrico del reactor biológico [m^3/día]
Qsb_af = Sb_af/daf; % Flujo volumétrico de salida de
ácido fosfórico del reactor biológico [m^3/día]

```

```

Qsb_X1 = Sb_X1/dagua; % Flujo volumétrico de salida de
células en suspensión del reactor biológico [m^3/día]

Qeb_tot(i,k) = Qeb_s+Qeb_agua(i,k)+Qeb_O2+Qeb_CO2+Qeb_as(i,k)+Qeb_af;
% Flujo volumétrico de entrada total al reactor biológico [m^3/día]

Qsb_tot(i,k) = Qsb_agua(i,k)+Qsb_as(i,k)+Qsb_af+Qsb_X1;
% Flujo volumétrico de salida total del reactor biológico [m^3/día]

Cbas(i,k) = Sb_as(i,k)/Qsb_tot(i,k); % Concentración de ácido sulfúrico
al interior del reactor biológico [kg/m^3]
pHb(i,k) = -log(Cbas(i,k)./PMas); % pH de operación del reactor
biológico []

Eb_tot(i,k) = Eb_s+Eb_O2+Eb_CO2+Eb_as(i,k)+Eb_af+Eb_agua(i,k);
% Flujo másico de entrada total al reactor biológico [kg/día]

Sb_tot(i,k) = Sb_agua(i,k)+Sb_as(i,k)+Sb_af+Sb_X1;
% Flujo másico de salida total del reactor biológico [kg/día]

BMb(i,k) = Eb_tot(i,k)-Sb_tot(i,k); % Corroborar que el balance de masa
es cero

Eb_sol(i,k) = Eb_as(i,k)+Eb_af+Eb_agua(i,k); % Flujo másico de
entrada de solución al reactor biológico [kg/día]

Sb_sol(i,k) = Sb_agua(i,k)+Sb_as(i,k)+Sb_af+Sb_X1; % Flujo másico de
salida de solución del reactor biológico [kg/día]

dsol_b(i,k) =
(Sb_agua(i,k).*dagua+Sb_as(i,k).*das+Sb_X1*dagua+Sb_af*daf)./Sb_tot(i,k);
% Densidad de la solución del reactor biológico [kg/m^3]

pS_sol(i,k,w) = E(w)*ds./dsol_b(i,k); % Cálculo del % p/p de azufre
versus solución [kg/kg]

CbX1(i,k) = Sb_X1./Qsb_tot(i,k); % Concentración másica de
células en suspensión [kg/m^3]
X1(i,k) = CbX1(i,k)./mx; % Concentración de
células en suspensión [cel/m^3]
Xa(i,k) = Keq.*Xmax.*X1(i,k)./(1+Keq.*X1(i,k)); % N° de células adheridas
por unidad de área superficial de las partículas de azufre [cel/m^2]
Xa_barra(i,k,w) = (3.*E(w)./rb). *Xa(i,k); % Concentración de
células adheridas por unidad de volumen del reactor biológico [cel/m^3]

mumax(i,k) = z1*(pHb(i,k)-pHmin)*(1-exp(z2*(pHb(i,k)-pHmax)));
% Tasa específica máxima de crecimiento de las células adheridas [1/día]

if mumax(i,k)>0
mu(i,k) = mumax(i,k);

```



```

else
    mu(i,k) = 0;      % Tasa específica de crecimiento de las células
                    adheridas [1/día]
end

Vb(i,k,w) = Eb_s*YA./(mu(i,k).*Xa_barra(i,k,w)); % Volumen del reactor
biológico [m^3]

Sb_Xl_c(i,k,w) = mu(i,k)*Xa_barra(i,k,w)*Vb(i,k,w)*mx; % Cálculo del
flujo másico de salida de células en suspensión del reactor biológico
[kg/día]

T(i,k,w) = Vb(i,k,w)*24./Qeb_tot(i,k); % Tiempo de residencia del
reactor biológico [hr]

mb_S(i,k,w) = E(w).*Vb(i,k,w).*ds;      % Masa de azufre [kg]

ml_min(i,k) = (Sl_min./Qsl_sol(i,k)).*Vl(i,k); % Masa de mineral [kg]

masamin_masaS(i,k,w) = ml_min(i,k)./mb_S(i,k,w); % Razón entre masa de
mineral y masa de azufre []

Vt(i,k,w) = Vb(i,k,w)+Vl(i,k);          % Volumen total del sistema [m3]

    end
end
end

%% Gráficos
graficos_solve_Vb

%% Exportación de Tablas

exp_Vb
exp_flujos
exp_final

```

D.2 Gráficos de resultados asociados al reactor biológico.

Nombre del archivo: graficos_solve_Vb

```

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% Generación de gráficos de:
% - Volumen del reactor biológico v/s pH de operación del reactor de
% lixiviación.
% - pH de operación del reactor biológico v/s pH de operación del reactor

```

```

% de lixiviación.
% - Volumen del reactor biológico v/s pH de operación del reactor de
% biológico.
% - pH versus razón masamin_masaS.
% - Volumen total versus pH de operación del reactor de lixiviación.
% - Volumen total versus razón masamin_masaS.
% - Razón masamin_masaS versus pH.
%
%
% v2.0                María Fernanda Godoy        margodoy@ug.uchile.cl
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

close all

figure(1)

subplot(1,3,1), plot(pHl,Vb(:,1,1), 'r*-',pHl,Vb(:,2,1), 'b*-
',pHl,Vb(:,3,1), 'c*-');
xlim ([1 2.3]);
ylim ([0 200]);
ylabel('Volumen Reactor Biológico [m^3]');
xlabel('pH en el reactor de lixiviación');
legend('p_s_ó_l_i_d_o/_s_o_l=0.1','p_s_ó_l_i_d_o/_s_o_l=0.25','p_s_ó_l_
i_d_o/_s_o_l=0.4','Location','NorthWest');
title({'V_b v/s pH_l';'con \epsilon=0.01 [m^3/m^3]'});

subplot(1,3,2), plot(pHl,Vb(:,1,2), 'r*-',pHl,Vb(:,2,2), 'b*-
',pHl,Vb(:,3,2), 'c*-');
xlim ([1 2.3]);
ylim ([0 200]);
title('\epsilon=0.05 [m^3/m^3]');

subplot(1,3,3), plot(pHl,Vb(:,1,3), 'r*-',pHl,Vb(:,2,3), 'b*-
',pHl,Vb(:,3,3), 'c*-');
xlim ([1 2.3]);
ylim ([0 200]);
title('\epsilon=0.1 [m^3/m^3]');

figure(2)

plot(pHl,pHb(:,1), 'r*-',pHl,pHb(:,2), 'b*-',pHl,pHb(:,3), 'c*-');
ylabel('pH en el reactor biológico');
xlabel('pH en el reactor de lixiviación');
legend('p_s_ó_l_i_d_o/_s_o_l=0.1','p_s_ó_l_i_d_o/_s_o_l=0.25','p_s_ó_l_
i_d_o/_s_o_l=0.4','Location','NorthWest');
title('pH_b v/s pH_l');

figure(3)
subplot(1,3,1), plot(pHb(:,1),Vb(:,1,1), 'r*-',pHb(:,2),Vb(:,2,1), 'b*-
',pHb(:,3),Vb(:,3,1), 'c*-');
%       xlim ([0.8 2]);
%       ylim ([0 120]);
ylabel('Volumen Reactor Biológico [m^3]');

```

```

xlabel('pH en el Reactor Biológico');
legend('p_s_ó_l_i_d_o/_s_o_l=0.1','p_s_ó_l_i_d_o/_s_o_l=0.25','p_s_ó_l_i_d_o/_s_o_l=0.4','Location','NorthWest');
title({'V_b v/s pH_b';'con \epsilon=0.01 [m^3/m^3]'});

subplot(1,3,2), plot(pHb(:,1),Vb(:,1,2),'r*-',pHb(:,2),Vb(:,2,2),'b*-','pHb(:,3),Vb(:,3,2),'c*-');
%     xlim ([0.8 2]);
%     ylim ([0 120]);
title('\epsilon=0.05 [m^3/m^3]');

subplot(1,3,3), plot(pHb(:,1),Vb(:,1,3),'r*-',pHb(:,2),Vb(:,2,3),'b*-','pHb(:,3),Vb(:,3,3),'c*-');
%     xlim ([0.8 2]);
%     ylim ([0 120]);
title('\epsilon=0.1 [m^3/m^3]');

figure(4)
subplot(1,2,1), plot(masamin_masaS(:,1,1),pHb(:,1),'r*-', masamin_masaS(:,2,1),pHb(:,2),'b*-', masamin_masaS(:,3,1),pHb(:,3),'c*-');
%     xlim ([0 6]);
%     ylim ([0.5 2.5]);
ylabel('pH_b');
xlabel('masa_m_i_n/masa_S');
legend('p_s_ó_l_i_d_o/_s_o_l=0.1','p_s_ó_l_i_d_o/_s_o_l=0.25','p_s_ó_l_i_d_o/_s_o_l=0.4','Location','NorthWest');
title('pH v/s masa_m_i_n/masa_S');

subplot(1,2,2), plot(masamin_masaS(:,1,1),pHl,'r*-', masamin_masaS(:,2,1),pHl,'b*-', masamin_masaS(:,3,1),pHl,'c*-');
ylabel('pH_l');
%     xlim ([0 6]);
%     ylim ([0.5 2.5]);

figure(5)
subplot(1,3,1), plot(pHl,Vt(:,1,1),'r*-',pHl,Vt(:,2,1),'b*-','pHl,Vt(:,3,1),'c*-');
xlim ([1 4]);
ylim ([0 200]);
ylabel('Volumen Total [m^3]');
xlabel('pH en el reactor de lixiviación');
legend('p_s_ó_l_i_d_o/_s_o_l=0.1','p_s_ó_l_i_d_o/_s_o_l=0.25','p_s_ó_l_i_d_o/_s_o_l=0.4','Location','NorthWest');
title({'V_b v/s pH_l';'con \epsilon=0.01 [m^3/m^3]'});

subplot(1,3,2), plot(pHl,Vt(:,1,2),'r*-',pHl,Vt(:,2,2),'b*-','pHl,Vt(:,3,2),'c*-');
xlim ([1 4]);
ylim ([0 200]);
title('\epsilon=0.05 [m^3/m^3]');

subplot(1,3,3), plot(pHl,Vt(:,1,3),'r*-',pHl,Vt(:,2,3),'b*-','pHl,Vt(:,3,3),'c*-');

```

```

xlim ([1 4]);
ylim ([0 200]);
title('\epsilon=0.1 [m^3/m^3]');

figure(6)
subplot(1,3,1), plot(masamin_masaS (:,1,1),Vt(:,1,1), 'r*-', masamin_masaS
(:,2,1),Vt(:,2,1), 'b*-', masamin_masaS (:,3,1),Vt(:,3,1), 'c*-');
xlim ([0 3]);
ylim ([0 200]);
ylabel('Volumen Total [m^3]');
xlabel('masa_m_i_n/masa_S');
legend('p_s_ó_l_i_d_o/_s_o_l=0.1','p_s_ó_l_i_d_o/_s_o_l=0.25','p_s_ó_l_
i_d_o/_s_o_l=0.4','Location','NorthWest');
title({'V_t_o_t_a_l v/s masa_m_i_n/masa_S';'con \epsilon=0.01
[m^3/m^3]});

subplot(1,3,2), plot(masamin_masaS (:,1,2),Vt(:,1,2), 'r*-', masamin_masaS
(:,2,2),Vt(:,2,2), 'b*-', masamin_masaS (:,3,2),Vt(:,3,2), 'c*-');
xlim ([0 3]);
ylim ([0 200]);
title('\epsilon=0.05 [m^3/m^3]');

subplot(1,3,3), plot(masamin_masaS (:,1,3),Vt(:,1,3), 'r*-', masamin_masaS
(:,2,3),Vt(:,2,3), 'b*-', masamin_masaS (:,3,3),Vt(:,3,3), 'c*-');
xlim ([0 3]);
ylim ([0 200]);
title('\epsilon=0.1 [m^3/m^3]');

figure(7)

subplot(1,2,1), plot(pHb(:,1), masamin_masaS (:,1,1), 'r*-', pHb(:,2),
masamin_masaS (:,2,1), 'b*-', pHb(:,3), masamin_masaS (:,3,1), 'c*-');
xlim ([0.7 3]);
ylim ([0 5]);
ylabel('masa_m_i_n/masa_S');
xlabel('pH_b');
legend('p_s_ó_l_i_d_o/_s_o_l=0.1','p_s_ó_l_i_d_o/_s_o_l=0.25','p_s_ó_l_
i_d_o/_s_o_l=0.4','Location','NorthWest');
title('masa_m_i_n/masa_S v/s pH');

subplot(1,2,2), plot(pHl, masamin_masaS (:,1,1), 'r*-', pHl, masamin_masaS
(:,2,1), 'b*-', pHl, masamin_masaS (:,3,1), 'c*-');
xlabel('pH_l');
xlim ([1 3]);
ylim ([0 5]);

```

D.3 Exportación de tablas a excel.

Nombre de los archivos: exp_Vb, exp_flujos, exp_final

```

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% Generación de tablas en excel con los valores de:
% - Volumen del reactor biológico.
% - pH del reactor biológico.
% - Tasa específica de crecimiento bacteriano.
% - Tiempo de residencia para el reactor biológico.
%
%
% v1.0                María Fernanda Godoy        margodoy@ug.uchile.cl
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

%% Generación de tablas en excel del volumen del reactor biológico

xlswrite('ResultadosVb.xlsx',Vb(:,1,1),'Vb,psolido_sol=0,1','C2');
xlswrite('ResultadosVb.xlsx',Vb(:,1,2),'Vb,psolido_sol=0,1','C28');
xlswrite('ResultadosVb.xlsx',Vb(:,1,3),'Vb,psolido_sol=0,1','C54');

xlswrite('ResultadosVb.xlsx',Vb(:,2,1),'Vb,psolido_sol=0,25','C2');
xlswrite('ResultadosVb.xlsx',Vb(:,2,2),'Vb,psolido_sol=0,25','C28');
xlswrite('ResultadosVb.xlsx',Vb(:,2,3),'Vb,psolido_sol=0,25','C54');

xlswrite('ResultadosVb.xlsx',Vb(:,3,1),'Vb,psolido_sol=0,4','C2');
xlswrite('ResultadosVb.xlsx',Vb(:,3,2),'Vb,psolido_sol=0,4','C28');
xlswrite('ResultadosVb.xlsx',Vb(:,3,3),'Vb,psolido_sol=0,4','C54');

%% Generación de tablas en excel del pH del reactor biológico

xlswrite('ResultadosVb.xlsx',pHb,'pHb','B3');

%% Generación de tablas en excel de mu del reactor biológico

xlswrite('ResultadosVb.xlsx',mu,'mu','B3');

%% Generación de tablas en excel del tiempo de residencia del reactor
biológico

xlswrite('ResultadosVb.xlsx',T(:,,1),'T,f=0,01 ','B3');
xlswrite('ResultadosVb.xlsx',T(:,,2),'T,f=0,05 ','B3');
xlswrite('ResultadosVb.xlsx',T(:,,3),'T,f=0,1 ','B3');

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% Generación de tablas en excel para el resultado de los balances de masa
% de:
% - Ácido sulfúrico en el reactor biológico y de lixiviación.
% - Agua en el reactor biológico y de lixiviación.
% - Masa total en el reactor biológico y de lixiviación.
% - Bacterias en suspensión en el reactor biológico.
% - Bacterias en adheridas en el reactor biológico.
%
%
% v1.0                María Fernanda Godoy        margodoy@ug.uchile.cl

```

```
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
```

```
% Generación de tablas en excel de flujos del reactor biológico
```

```
xlswrite('Resultadosrb_final.xlsx',Eb_as(:,1),'Eb_as,psolido_sol=0,1','C3');  
xlswrite('Resultadosrb_final.xlsx',Eb_as(:,2),'Eb_as,psolido_sol=0,25','C3');  
xlswrite('Resultadosrb_final.xlsx',Eb_as(:,3),'Eb_as,psolido_sol=0,4','C3');
```

```
xlswrite('Resultadosrb_final.xlsx',Sb_as(:,1),'Sb_as,psolido_sol=0,1','C3');  
xlswrite('Resultadosrb_final.xlsx',Sb_as(:,2),'Sb_as,psolido_sol=0,25','C3');  
xlswrite('Resultadosrb_final.xlsx',Sb_as(:,3),'Sb_as,psolido_sol=0,4','C3');
```

```
xlswrite('Resultadosrb_final.xlsx',Eb_agua(:,1)./1000,'Eb_agua,psolido_sol=0,1','C3');  
xlswrite('Resultadosrb_final.xlsx',Eb_agua(:,2)./1000,'Eb_agua,psolido_sol=0,25','C3');  
xlswrite('Resultadosrb_final.xlsx',Eb_agua(:,3)./1000,'Eb_agua,psolido_sol=0,4','C3');
```

```
xlswrite('Resultadosrb_final.xlsx',Sb_agua(:,1)./1000,'Sb_agua,psolido_sol=0,1','C3');  
xlswrite('Resultadosrb_final.xlsx',Sb_agua(:,2)./1000,'Sb_agua,psolido_sol=0,25','C3');  
xlswrite('Resultadosrb_final.xlsx',Sb_agua(:,3)./1000,'Sb_agua,psolido_sol=0,4','C3');
```

```
xlswrite('Resultadosrb_final.xlsx',Eb_tot(:,1)./1000,'Eb_tot,psolido_sol=0,1','C3');  
xlswrite('Resultadosrb_final.xlsx',Eb_tot(:,2)./1000,'Eb_tot,psolido_sol=0,25','C3');  
xlswrite('Resultadosrb_final.xlsx',Eb_tot(:,3)./1000,'Eb_tot,psolido_sol=0,4','C3');
```

```
xlswrite('Resultadosrb_final.xlsx',Sb_tot(:,1)./1000,'Sb_tot,psolido_sol=0,1','C3');  
xlswrite('Resultadosrb_final.xlsx',Sb_tot(:,2)./1000,'Sb_tot,psolido_sol=0,25','C3');  
xlswrite('Resultadosrb_final.xlsx',Sb_tot(:,3)./1000,'Sb_tot,psolido_sol=0,4','C3');
```

```
xlswrite('Resultadosrb_final.xlsx',Xl(:,1),'Xl,psolido_sol=0,1','C3');  
xlswrite('Resultadosrb_final.xlsx',Xl(:,2),'Xl,psolido_sol=0,25','C3');  
xlswrite('Resultadosrb_final.xlsx',Xl(:,3),'Xl,psolido_sol=0,4','C3');
```

```
xlswrite('Resultadosrb_final.xlsx',Xa(:,1),'Xa,psolido_sol=0,1','C3');  
xlswrite('Resultadosrb_final.xlsx',Xa(:,2),'Xa,psolido_sol=0,25','C3');  
xlswrite('Resultadosrb_final.xlsx',Xa(:,3),'Xa,psolido_sol=0,4','C3');
```

```
% Generación de tablas en excel de flujos del reactor de lixiviación
```

```

xlswrite('Resultadosrl_final.xlsx',El_as(:,1),'El_as,psolido_sol=0,1','C3
');
xlswrite('Resultadosrl_final.xlsx',El_as(:,2),'El_as,psolido_sol=0,25','C
3');
xlswrite('Resultadosrl_final.xlsx',El_as(:,3),'El_as,psolido_sol=0,4','C3
');

xlswrite('Resultadosrl_final.xlsx',Sl_as(:,1),'Sl_as,psolido_sol=0,1','C3
');
xlswrite('Resultadosrl_final.xlsx',Sl_as(:,2),'Sl_as,psolido_sol=0,25','C
3');
xlswrite('Resultadosrl_final.xlsx',Sl_as(:,3),'Sl_as,psolido_sol=0,4','C3
');

xlswrite('Resultadosrl_final.xlsx',El_agua(:,1)./1000,'El_agua,psolido_so
l=0,1','C3');
xlswrite('Resultadosrl_final.xlsx',El_agua(:,2)./1000,'El_agua,psolido_so
l=0,25','C3');
xlswrite('Resultadosrl_final.xlsx',El_agua(:,3)./1000,'El_agua,psolido_so
l=0,4','C3');

xlswrite('Resultadosrl_final.xlsx',Sl_agua(:,1)./1000,'Sl_agua,psolido_so
l=0,1','C3');
xlswrite('Resultadosrl_final.xlsx',Sl_agua(:,2)./1000,'Sl_agua,psolido_so
l=0,25','C3');
xlswrite('Resultadosrl_final.xlsx',Sl_agua(:,3)./1000,'Sl_agua,psolido_so
l=0,4','C3');

xlswrite('Resultadosrl_final.xlsx',El_tot(:,1)./1000,'El_tot,psolido_sol=
0,1','C3');
xlswrite('Resultadosrl_final.xlsx',El_tot(:,2)./1000,'El_tot,psolido_sol=
0,25','C3');
xlswrite('Resultadosrl_final.xlsx',El_tot(:,3)./1000,'El_tot,psolido_sol=
0,4','C3');

xlswrite('Resultadosrl_final.xlsx',Sl_tot(:,1)./1000,'Sl_tot,psolido_sol=
0,1','C3');
xlswrite('Resultadosrl_final.xlsx',Sl_tot(:,2)./1000,'Sl_tot,psolido_sol=
0,25','C3');
xlswrite('Resultadosrl_final.xlsx',Sl_tot(:,3)./1000,'Sl_tot,psolido_sol=
0,4','C3');

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%%
% Generación de tablas en excel con los valores de:
% - Volumen total del sistema.
% - Razón masamin_masaS.
% - Masa de azufre.
% - Masa de mineral.
%
%
%
% v1.0                María Fernanda Godoy        margodoy@ug.uchile.cl

```

```

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%%
%% Generación de tablas en excel del volumen total de ambos reactores

xlswrite('Resultadosfinal.xlsx',Vt(:,1,1),'Vt,psolido_sol=0,1','C2');
xlswrite('Resultadosfinal.xlsx',Vt(:,1,2),'Vt,psolido_sol=0,1','C44');
xlswrite('Resultadosfinal.xlsx',Vt(:,1,3),'Vt,psolido_sol=0,1','C86');

xlswrite('Resultadosfinal.xlsx',Vt(:,2,1),'Vt,psolido_sol=0,25','C2');
xlswrite('Resultadosfinal.xlsx',Vt(:,2,2),'Vt,psolido_sol=0,25','C44');
xlswrite('Resultadosfinal.xlsx',Vt(:,2,3),'Vt,psolido_sol=0,25','C86');

xlswrite('Resultadosfinal.xlsx',Vt(:,3,1),'Vt,psolido_sol=0,4','C2');
xlswrite('Resultadosfinal.xlsx',Vt(:,3,2),'Vt,psolido_sol=0,4','C44');
xlswrite('Resultadosfinal.xlsx',Vt(:,3,3),'Vt,psolido_sol=0,4','C86');

%% Generación de tablas en excel de la razón masamin_masaS

xlswrite('Resultadosfinal.xlsx', masamin_masaS
(:,1,1),'gama,psolido_sol=0,1','C2');
xlswrite('Resultadosfinal.xlsx', masamin_masaS
(:,1,2),'gama,psolido_sol=0,1','C44');
xlswrite('Resultadosfinal.xlsx', masamin_masaS
(:,1,3),'gama,psolido_sol=0,1','C86');

xlswrite('Resultadosfinal.xlsx', masamin_masaS
(:,2,1),'gama,psolido_sol=0,25','C2');
xlswrite('Resultadosfinal.xlsx', masamin_masaS
(:,2,2),'gama,psolido_sol=0,25','C44');
xlswrite('Resultadosfinal.xlsx', masamin_masaS
(:,2,3),'gama,psolido_sol=0,25','C86');

xlswrite('Resultadosfinal.xlsx', masamin_masaS
(:,3,1),'gama,psolido_sol=0,4','C2');
xlswrite('Resultadosfinal.xlsx', masamin_masaS
(:,3,2),'gama,psolido_sol=0,4','C44');
xlswrite('Resultadosfinal.xlsx', masamin_masaS
(:,3,3),'gama,psolido_sol=0,4','C86');

%% Generación de tablas en excel de la masa de azufre.

xlswrite('Resultadosfinal.xlsx',mb_S(:,1,1)./1000,'mb_S,psolido_sol=0,1',
'C3');
xlswrite('Resultadosfinal.xlsx',mb_S(:,1,2)./1000,'mb_S,psolido_sol=0,1',
'C45');
xlswrite('Resultadosfinal.xlsx',mb_S(:,1,3)./1000,'mb_S,psolido_sol=0,1',
'C87');

xlswrite('Resultadosfinal.xlsx',mb_S(:,2,1)./1000,'mb_S,psolido_sol=0,25',
'C3');
xlswrite('Resultadosfinal.xlsx',mb_S(:,2,2)./1000,'mb_S,psolido_sol=0,25',
'C45');
xlswrite('Resultadosfinal.xlsx',mb_S(:,2,3)./1000,'mb_S,psolido_sol=0,25',
'C87');

```



```

xlswrite('Resultadosfinal.xlsx',mb_S(:,3,1)./1000,'mb_S,psolido_sol=0,4',
'C3');
xlswrite('Resultadosfinal.xlsx',mb_S(:,3,2)./1000,'mb_S,psolido_sol=0,4',
'C45');
xlswrite('Resultadosfinal.xlsx',mb_S(:,3,3)./1000,'mb_S,psolido_sol=0,4',
'C87');

%% Generación de tablas en excel de la masa de mineral.

xlswrite('Resultadosfinal.xlsx',ml_min(:,1)./1000,'ml_min,psolido_sol=0,1',
'B3');
xlswrite('Resultadosfinal.xlsx',ml_min(:,2)./1000,'ml_min,psolido_sol=0,2',
'B5');
xlswrite('Resultadosfinal.xlsx',ml_min(:,3)./1000,'ml_min,psolido_sol=0,4',
'B3');

```

D.4 Conversión de la fosforita y cálculo del volumen del reactor de lixiviación.

Nombre del archivo: solve_difusion

```

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% Algoritmo para determinar:
% - Conversión de fosforita en el tiempo.
% - Tiempo de residencia para el reactor de lixiviación.
% - Volumen del reactor de lixiviación.
%
% Exportación de tablas en excel de:
% - Volumen del reactor de lixiviación.
% - Tiempo de residencia para el reactor de lixiviación.
%
% Gráficos de:
% - Conversión en el tiempo.
% - Volumen del reactor de lixiviación v/s pH de operación del reactor de
% lixiviación.
%
%
% v1.0          María Fernanda Godoy      margodoy@ug.uchile.cl
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

clc
close all

global Qerltot pHl psolido_sol

b = 1/10;          % Coeficiente estequiométrico de la fosforita []
rob = 1.68;       % Densidad molar del mineral (fosforita) [kmol/m^3]
r1 = 6.5*10^-5;  % Radio de 65 micrómetros [m]

```

```

Clas_molar = 10.^(-pH1); % Concentración molar de ácido sulfúrico al
interior del reactor de lixiviación [mol/L]
De = 1.24*10^-8; % Coeficiente de difusión al interior de la
partícula [m^2/min]

Td = (rob.*r1^2)./(6.*b.*Clas_molar.*De); % Tiempo para la conversión
completa de la reacción para cada pH1 [min]

alfa = 0:0.1:1; % Vector de conversión de la fosforita []

for i = 1:1:length(pH1)
    for k = 1:1:length(psolido_sol)

        t(i,:) = Td(i).*(1-3.*(1-alfa).^(2/3)+2.*(1-alfa));
% Tiempo de transcurso de la reacción para cada pH1 [min]

        tc_min(i) = Td(i).*(1-3.*(1-0.95).^(2/3)+2.*(1-0.95));
% Tiempo de conversión 95% de la reacción para cada pH1 [min]

        tc_dia(i) = tc_min(i)./(60*24);
% Tiempo de conversión 95% de la reacción para cada pH1 [día]

        V1(i,k) = Qerltot(i,k).*tc_dia(i);
% Volumen reactor de lixiviación para cada pH1 y cada psolido_sol [m^3]

    end
end

%% Exportación de Tablas

xlswrite('ResultadosV1.xlsx',V1,'V1','C11');
xlswrite('ResultadosV1.xlsx',tc_min,'tc_min','C11');

%% Gráficos

figure(1)
plot(t(1,:),alfa,'r*-.',t(2,:),alfa,'g*-.',t(3,:),alfa,'m*-.',
t(4,:),alfa,'k*-.',t(5,:),alfa,'b*-.',t(6,:),alfa,'c*-.');
xlim ([0,120]);
xlabel('Tiempo [min]');
ylabel('Conversión');
title ('Conversión v/s tiempo');
legend('pH1=0.5','pH1=1.0','pH1=1.5','pH1=2.0','pH1=2.5','pH1=3.0','Locat
ion','SouthEast');

figure(2)
plot(pH1,V1(:,1),'r*-.',pH1,V1(:,2),'b*-.',pH1,V1(:,3),'c*-.');
xlim ([1 3]);
ylim ([0 100]);
xlabel('pH reactor lixiviación');

```

```
ylabel('Volumen reactor lixiviación [m^3]');  
title ('V_l v/s pH_l');  
legend('p_s_ó_l_i_d_o/_s_o_l=0.1','p_s_ó_l_i_d_o/_s_o_l=0.25','p_s_ó_l_  
i_d_o/_s_o_l=0.4','Location','NorthWest');
```

Anexo E. Tablas.

E.1 Resultados Reactor Biológico.

Tabla 19: Equivalencia entre ε y razón p/p de azufre versus solución.

$\varepsilon [m^3/m^3]$	$p_{S/sol} [kg/kg](*)$
0,01	0,0195
0,05	0,0977
0,1	0,195

(*) Valor promedio para los distintos valores de $p_{sólido/sol}$ y pH_l .

Cabe señalar que el cálculo de la razón p/p entre el azufre y la solución es aproximado ya que la densidad calculada no considera la del azufre, dado que se calculó como la densidad de la solución salida (en la cual no se encuentra este compuesto).

Tabla 20: Tasa específica de crecimiento (μ) [1/día].

$p_{sólido/sol} \rightarrow$ $pH_l \downarrow$	0,10	0,25	0,40
1,0	2,65	2,09	1,36
1,1	3,11	2,51	1,74
1,2	3,54	2,89	2,08
1,3	3,93	3,23	2,38
1,4	4,28	3,53	2,64
1,5	4,60	3,79	2,87
1,6	4,88	4,01	3,05
1,7	5,12	4,21	3,21
1,8	5,34	4,37	3,35
1,9	5,52	4,51	3,46
2,0	5,68	4,62	3,55
2,1	5,81	4,72	3,62
2,2	5,91	4,80	3,68
2,3	6,00	4,86	3,73

2,4	6,08	4,91	3,77
2,5	6,14	4,95	3,80
2,6	6,18	4,99	3,82
2,7	6,22	5,01	3,85
2,8	6,25	5,03	3,86
2,9	6,28	5,05	3,87
3,0	6,30	5,07	3,88
3,1	6,31	5,08	3,89
3,2	6,33	5,09	3,90
3,3	6,34	5,09	3,90
3,4	6,35	5,10	3,91
3,5	6,35	5,10	3,91
3,6	6,36	5,11	3,91
3,7	6,36	5,11	3,92
3,8	6,36	5,11	3,92
3,9	6,37	5,11	3,92
4,0	6,37	5,11	3,92
4,1	6,37	5,12	3,92
4,2	6,37	5,12	3,92
4,3	6,37	5,12	3,92
4,4	6,37	5,12	3,92
4,5	6,37	5,12	3,92
4,6	6,37	5,12	3,92
4,7	6,37	5,12	3,92
4,8	6,37	5,12	3,92
4,9	6,38	5,12	3,92
5,0	6,38	5,12	3,92

Tabla 21: Volumen del reactor biológico [m³].

ε [m ³ /m ³]	$p_{sólido/sol}$	0,1	0,25	0,4	$p_{sólido/sol}$	0,1	0,25	0,4
	pH_l				pH_l			
0,01	1,0	227	143	164	3,1	95,5	59,0	57,4
	1,1	193	119	128	3,2	95,3	58,9	57,3
	1,2	170	104	107	3,3	95,1	58,8	57,2
	1,3	153	92,7	93,7	3,4	95,0	58,7	57,2
	1,4	141	84,8	84,5	3,5	94,9	58,7	57,1
	1,5	131	79,0	77,9	3,6	94,8	58,6	57,1
	1,6	124	74,5	73,1	3,7	94,8	58,6	57,1

	1,7	118	71,1	69,5	3,8	94,7	58,6	57,0
	1,8	113	68,5	66,8	3,9	94,7	58,5	57,0
	1,9	109	66,4	64,6	4,0	94,7	58,5	57,0
	2,0	106	64,7	63,0	4,1	94,6	58,5	57,0
	2,1	104	63,4	61,7	4,2	94,6	58,5	57,0
	2,2	102	62,4	60,7	4,3	94,6	58,5	57,0
	2,3	100	61,6	59,9	4,4	94,6	58,5	57,0
	2,4	99,2	60,9	59,3	4,5	94,6	58,5	57,0
	2,5	98,2	60,4	58,8	4,6	94,6	58,5	57,0
	2,6	97,5	60,0	58,4	4,7	94,6	58,5	57,0
	2,7	96,9	59,7	58,1	4,8	94,6	58,5	56,9
	2,8	96,4	59,5	57,9	4,9	94,6	58,5	56,9
	2,9	96,0	59,3	57,7	5,0	94,6	58,5	56,9
	3,0	95,7	59,1	57,5				
0,05	1,0	45,3	28,6	32,8	3,1	19,1	11,8	11,5
	1,1	38,6	23,8	25,6	3,2	19,1	11,8	11,5
	1,2	34,0	20,7	21,4	3,3	19,0	11,8	11,4
	1,3	30,6	18,5	18,7	3,4	19,0	11,7	11,4
	1,4	28,1	17,0	16,9	3,5	19,0	11,7	11,4
	1,5	26,2	15,8	15,6	3,6	19,0	11,7	11,4
	1,6	24,7	14,9	14,6	3,7	19,0	11,7	11,4
	1,7	23,5	14,2	13,9	3,8	18,9	11,7	11,4
	1,8	22,6	13,7	13,4	3,9	18,9	11,7	11,4
	1,9	21,8	13,3	12,9	4,0	18,9	11,7	11,4
	2,0	21,2	12,9	12,6	4,1	18,9	11,7	11,4
	2,1	20,8	12,7	12,3	4,2	18,9	11,7	11,4
	2,2	20,4	12,5	12,1	4,3	18,9	11,7	11,4
	2,3	20,1	12,3	12,0	4,4	18,9	11,7	11,4
2,4	19,8	12,2	11,9	4,5	18,9	11,7	11,4	
2,5	19,6	12,1	11,8	4,6	18,9	11,7	11,4	
2,6	19,5	12,0	11,7	4,7	18,9	11,7	11,4	
2,7	19,4	11,9	11,6	4,8	18,9	11,7	11,4	
2,8	19,3	11,9	11,6	4,9	18,9	11,7	11,4	
2,9	19,2	11,9	11,5	5,0	18,9	11,7	11,4	
3,0	19,1	11,8	11,5					
0,1	1,0	22,7	14,3	16,4	3,1	9,55	5,90	5,74
	1,1	19,3	11,9	12,8	3,2	9,53	5,89	5,73
	1,2	17,0	10,4	10,7	3,3	9,51	5,88	5,72
	1,3	15,3	9,27	9,37	3,4	9,50	5,87	5,72
	1,4	14,1	8,48	8,45	3,5	9,49	5,87	5,71

	1,5	13,1	7,90	7,79	3,6	9,48	5,86	5,71
	1,6	12,4	7,45	7,31	3,7	9,48	5,86	5,71
	1,7	11,8	7,11	6,95	3,8	9,47	5,86	5,70
	1,8	11,3	6,85	6,68	3,9	9,47	5,85	5,70
	1,9	10,9	6,64	6,46	4,0	9,47	5,85	5,70
	2,0	10,6	6,47	6,30	4,1	9,46	5,85	5,70
	2,1	10,4	6,34	6,17	4,2	9,46	5,85	5,70
	2,2	10,2	6,24	6,07	4,3	9,46	5,85	5,70
	2,3	10,0	6,16	5,99	4,4	9,46	5,85	5,70
	2,4	9,92	6,09	5,93	4,5	9,46	5,85	5,70
	2,5	9,82	6,04	5,88	4,6	9,46	5,85	5,70
	2,6	9,75	6,00	5,84	4,7	9,46	5,85	5,70
	2,7	9,69	5,97	5,81	4,8	9,46	5,85	5,69
	2,8	9,64	5,95	5,79	4,9	9,46	5,85	5,69
	2,9	9,60	5,93	5,77	5,0	9,46	5,85	5,69
	3,0	9,57	5,91	5,75				

Tabla 22: Tiempo de residencia en el reactor biológico [min].

ε [m ³ /m ³]	$p_{sólido/sol}$	0,1	0,25	0,4	$p_{sólido/sol}$	0,1	0,25	0,4
	pH_l				pH_l			
0,01	1,0	243	280	404	3,1	102	115	141
	1,1	207	233	315	3,2	102	115	141
	1,2	182	202	264	3,3	102	115	141
	1,3	164	181	231	3,4	102	115	141
	1,4	151	166	208	3,5	102	115	141
	1,5	140	154	192	3,6	102	115	140
	1,6	132	146	180	3,7	102	114	140
	1,7	126	139	171	3,8	101	114	140
	1,8	121	134	164	3,9	101	114	140
	1,9	117	130	159	4,0	101	114	140
	2,0	114	126	155	4,1	101	114	140
	2,1	111	124	152	4,2	101	114	140
	2,2	109	122	149	4,3	101	114	140
	2,3	108	120	147	4,4	101	114	140
	2,4	106	119	146	4,5	101	114	140
	2,5	105	118	145	4,6	101	114	140
	2,6	104	117	144	4,7	101	114	140
2,7	104	117	143	4,8	101	114	140	

	2,8	103	116	142	4,9	101	114	140
	2,9	103	116	142	5,0	101	114	140
	3,0	103	115	142				
0,05	1,0	48,7	56,0	80,8	3,1	20,5	23,0	28,2
	1,1	41,5	46,6	63,0	3,2	20,4	23,0	28,2
	1,2	36,5	40,5	52,7	3,3	20,4	23,0	28,2
	1,3	32,9	36,2	46,1	3,4	20,4	22,9	28,1
	1,4	30,2	33,2	41,6	3,5	20,3	22,9	28,1
	1,5	28,1	30,9	38,4	3,6	20,3	22,9	28,1
	1,6	26,5	29,1	36,0	3,7	20,3	22,9	28,1
	1,7	25,2	27,8	34,2	3,8	20,3	22,9	28,1
	1,8	24,2	26,8	32,9	3,9	20,3	22,9	28,1
	1,9	23,4	25,9	31,8	4,0	20,3	22,9	28,0
	2,0	22,8	25,3	31,0	4,1	20,3	22,9	28,0
	2,1	22,2	24,8	30,4	4,2	20,3	22,9	28,0
	2,2	21,8	24,4	29,9	4,3	20,3	22,9	28,0
	2,3	21,5	24,1	29,5	4,4	20,3	22,9	28,0
	2,4	21,3	23,8	29,2	4,5	20,3	22,9	28,0
	2,5	21,0	23,6	28,9	4,6	20,3	22,9	28,0
	2,6	20,9	23,5	28,7	4,7	20,3	22,8	28,0
	2,7	20,8	23,3	28,6	4,8	20,3	22,8	28,0
	2,8	20,7	23,2	28,5	4,9	20,3	22,8	28,0
	2,9	20,6	23,2	28,4	5,0	20,3	22,8	28,0
3,0	20,5	23,1	28,3					
0,1	1,0	24,3	28,0	40,4	3,1	10,2	11,5	14,1
	1,1	20,7	23,3	31,5	3,2	10,2	11,5	14,1
	1,2	18,2	20,2	26,4	3,3	10,2	11,5	14,1
	1,3	16,4	18,1	23,1	3,4	10,2	11,5	14,1
	1,4	15,1	16,6	20,8	3,5	10,2	11,5	14,1
	1,5	14,0	15,4	19,2	3,6	10,2	11,5	14,0
	1,6	13,2	14,6	18,0	3,7	10,2	11,4	14,0
	1,7	12,6	13,9	17,1	3,8	10,1	11,4	14,0
	1,8	12,1	13,4	16,4	3,9	10,1	11,4	14,0
	1,9	11,7	13,0	15,9	4,0	10,1	11,4	14,0
	2,0	11,4	12,6	15,5	4,1	10,1	11,4	14,0
	2,1	11,1	12,4	15,2	4,2	10,1	11,4	14,0
	2,2	10,9	12,2	14,9	4,3	10,1	11,4	14,0
	2,3	10,8	12,0	14,7	4,4	10,1	11,4	14,0
	2,4	10,6	11,9	14,6	4,5	10,1	11,4	14,0
2,5	10,5	11,8	14,5	4,6	10,1	11,4	14,0	

	2,6	10,4	11,7	14,4	4,7	10,1	11,4	14,0
	2,7	10,4	11,7	14,3	4,8	10,1	11,4	14,0
	2,8	10,3	11,6	14,2	4,9	10,1	11,4	14,0
	2,9	10,3	11,6	14,2	5,0	10,1	11,4	14,0
	3,0	10,3	11,5	14,2				

Tabla 23: pH de operación del reactor biológico.

$p_{sólido/sol}$	0,1	0,25	0,4	$p_{sólido/sol}$	0,1	0,25	0,4
pH_l				pH_l			
1,0	0,9	0,8	0,7	3,1	2,0	1,5	1,2
1,1	1,0	0,9	0,8	3,2	2,0	1,5	1,2
1,2	1,1	1,0	0,8	3,3	2,0	1,5	1,2
1,3	1,2	1,1	0,9	3,4	2,0	1,5	1,2
1,4	1,3	1,1	0,9	3,5	2,0	1,5	1,2
1,5	1,4	1,2	1,0	3,6	2,0	1,5	1,2
1,6	1,4	1,2	1,0	3,7	2,0	1,5	1,2
1,7	1,5	1,3	1,1	3,8	2,0	1,5	1,2
1,8	1,6	1,3	1,1	3,9	2,0	1,5	1,2
1,9	1,6	1,3	1,1	4,0	2,0	1,5	1,2
2,0	1,7	1,4	1,1	4,1	2,0	1,5	1,2
2,1	1,7	1,4	1,1	4,2	2,0	1,5	1,2
2,2	1,8	1,4	1,2	4,3	2,0	1,5	1,2
2,3	1,8	1,4	1,2	4,4	2,0	1,5	1,2
2,4	1,8	1,4	1,2	4,5	2,0	1,5	1,2
2,5	1,9	1,5	1,2	4,6	2,0	1,5	1,2
2,6	1,9	1,5	1,2	4,7	2,0	1,5	1,2
2,7	1,9	1,5	1,2	4,8	2,0	1,5	1,2
2,8	1,9	1,5	1,2	4,9	2,0	1,5	1,2
2,9	1,9	1,5	1,2	5,0	2,0	1,5	1,2
3,0	1,9	1,5	1,2				

Tabla 24: Masa de azufre al interior del reactor biológico [ton].

$p_{sólido/sol}$	0,1	0,25	0,4	$p_{sólido/sol}$	0,1	0,25	0,4
pH_l				pH_l			
1,0	4,44	2,80	3,22	3,1	1,87	1,16	1,13
1,1	3,78	2,33	2,51	3,2	1,87	1,15	1,12

1,2	3,33	2,03	2,10	3,3	1,86	1,15	1,12
1,3	3,00	1,82	1,84	3,4	1,86	1,15	1,12
1,4	2,76	1,66	1,66	3,5	1,86	1,15	1,12
1,5	2,57	1,55	1,53	3,6	1,86	1,15	1,12
1,6	2,42	1,46	1,43	3,7	1,86	1,15	1,12
1,7	2,30	1,39	1,36	3,8	1,86	1,15	1,12
1,8	2,21	1,34	1,31	3,9	1,86	1,15	1,12
1,9	2,14	1,30	1,27	4,0	1,86	1,15	1,12
2,0	2,08	1,27	1,23	4,1	1,85	1,15	1,12
2,1	2,03	1,24	1,21	4,2	1,85	1,15	1,12
2,2	2,00	1,22	1,19	4,3	1,85	1,15	1,12
2,3	1,97	1,21	1,17	4,4	1,85	1,15	1,12
2,4	1,94	1,19	1,16	4,5	1,85	1,15	1,12
2,5	1,93	1,18	1,15	4,6	1,85	1,15	1,12
2,6	1,91	1,18	1,15	4,7	1,85	1,15	1,12
2,7	1,90	1,17	1,14	4,8	1,85	1,15	1,12
2,8	1,89	1,17	1,13	4,9	1,85	1,15	1,12
2,9	1,88	1,16	1,13	5,0	1,85	1,15	1,12
3,0	1,88	1,16	1,13				

Cabe señalar que la masa de azufre al interior del reactor biológico no depende del factor ε .

E.2 Resultados Reactor de Lixiviación.

Tabla 25: Volumen del reactor de lixiviación [m³].

$p_{sólido/sol}$	0,1	0,25	0,4	$p_{sólido/sol}$	0,1	0,25	0,4
pH_l				pH_l			
1,0	4,43	1,66	9,64E-01	3,1	560	210	122
1,1	5,58	2,09	1,21	3,2	705	264	153
1,2	7,04	2,63	1,53	3,3	888	332	193
1,3	8,86	3,31	1,93	3,4	1,12E+03	418	243
1,4	11,2	4,17	2,43	3,5	1,41E+03	526	306
1,5	14,1	5,26	3,06	3,6	1,77E+03	663	385
1,6	17,7	6,62	3,85	3,7	2,23E+03	834	485
1,7	22,3	8,34	4,85	3,8	2,81E+03	1,05E+03	611

1,8	28,1	10,5	6,10	3,9	3,54E+03	1,32E+03	769
1,9	35,3	13,2	7,68	4,0	4,45E+03	1,66E+03	968
2,0	44,5	16,6	9,67	4,1	5,60E+03	2,10E+03	1,22E+03
2,1	56,0	20,9	12,2	4,2	7,05E+03	2,64E+03	1,53E+03
2,2	70,5	26,4	15,3	4,3	8,88E+03	3,32E+03	1,93E+03
2,3	88,8	33,2	19,3	4,4	1,12E+04	4,18E+03	2,43E+03
2,4	112	41,8	24,3	4,5	1,41E+04	5,26E+03	3,06E+03
2,5	141	52,6	30,6	4,6	1,77E+04	6,63E+03	3,85E+03
2,6	177	66,3	38,5	4,7	2,23E+04	8,34E+03	4,85E+03
2,7	223	83,4	48,5	4,8	2,81E+04	1,05E+04	6,11E+03
2,8	281	105	61,1	4,9	3,54E+04	1,32E+04	7,69E+03
2,9	354	132	76,9	5,0	4,45E+04	1,66E+04	9,68E+03
3,0	445	166	96,8				

Tabla 26: Tiempo de residencia del reactor de lixiviación [hr].

pH_l	Tiempo residencia [hr]	pH_l	Tiempo residencia [hr]
1,0	1,10E-01	3,1	13,9
1,1	1,39E-01	3,2	17,5
1,2	1,75E-01	3,3	22,0
1,3	2,20E-01	3,4	27,7
1,4	2,77E-01	3,5	34,8
1,5	3,48E-01	3,6	43,9
1,6	4,39E-01	3,7	55,2
1,7	5,52E-01	3,8	69,5
1,8	6,95E-01	3,9	87,5
1,9	8,75E-01	4,0	110
2,0	1,10	4,1	139
2,1	1,39	4,2	175
2,2	1,75	4,3	220
2,3	2,20	4,4	277
2,4	2,77	4,5	348
2,5	3,48	4,6	439
2,6	4,39	4,7	552
2,7	5,52	4,8	695
2,8	6,95	4,9	875
2,9	8,75	5,0	1,10E+03
3,0	11,0		

Tabla 27: Masa de mineral al interior del reactor de lixiviación [ton].

$P_{sólido/sol}$	0,1	0,25	0,4	$P_{sólido/sol}$	0,1	0,25	0,4
pH_l				pH_l			
1,0	4,69E-01	4,82E-01	4,89E-01	3,1	58,8	60,6	61,5
1,1	5,90E-01	6,06E-01	6,16E-01	3,2	74,1	76,3	77,5
1,2	7,42E-01	7,63E-01	7,75E-01	3,3	93,2	96,0	97,5
1,3	9,34E-01	9,61E-01	9,76E-01	3,4	117	121	123
1,4	1,18	1,21	1,23	3,5	148	152	155
1,5	1,48	1,52	1,55	3,6	186	192	195
1,6	1,86	1,92	1,95	3,7	234	241	245
1,7	2,34	2,41	2,45	3,8	295	304	308
1,8	2,95	3,04	3,08	3,9	371	382	388
1,9	3,71	3,82	3,88	4,0	467	481	489
2,0	4,67	4,81	4,89	4,1	588	606	615
2,1	5,88	6,06	6,15	4,2	741	762	775
2,2	7,41	7,63	7,75	4,3	932	960	975
2,3	9,33	9,60	9,75	4,4	1,17E+03	1,21E+03	1,23E+03
2,4	11,7	12,1	12,3	4,5	1,48E+03	1,52E+03	1,55E+03
2,5	14,8	15,2	15,5	4,6	1,86E+03	1,92E+03	1,95E+03
2,6	18,6	19,2	19,5	4,7	2,34E+03	2,41E+03	2,45E+03
2,7	23,4	24,1	24,5	4,8	2,95E+03	3,04E+03	3,08E+03
2,8	29,5	30,4	30,8	4,9	3,71E+03	3,82E+03	3,88E+03
2,9	37,1	38,2	38,8	5,0	4,67E+03	4,81E+03	4,89E+03
3,0	46,7	48,1	48,9				

E.3 Resultados Sistema Completo.

Tabla 28: Volumen total del sistema [m³].

ε [m ³ /m ³]	$P_{sólido/sol}$	0,1	0,25	0,4	$P_{sólido/sol}$	0,1	0,25	0,4
	pH_l				pH_l			
0,01	1,0	231	145	165	3,1	656	269	179
	1,1	199	121	129	3,2	801	323	211
	1,2	177	106	109	3,3	983	391	250
	1,3	162	96,0	95,6	3,4	1,21E+03	477	300
	1,4	152	89,0	86,9	3,5	1,50E+03	585	363
	1,5	145	84,2	81,0	3,6	1,87E+03	721	442

	1,6	141	81,2	77,0	3,7	2,33E+03	893	542
	1,7	140	79,5	74,3	3,8	2,90E+03	1,11E+03	668
	1,8	141	78,9	72,9	3,9	3,63E+03	1,38E+03	826
	1,9	144	79,6	72,3	4,0	4,55E+03	1,72E+03	1,02E+03
	2,0	151	81,4	72,7	4,1	5,70E+03	2,15E+03	1,28E+03
	2,1	160	84,4	73,9	4,2	7,15E+03	2,70E+03	1,59E+03
	2,2	172	88,8	76,0	4,3	8,98E+03	3,38E+03	1,99E+03
	2,3	189	94,8	79,2	4,4	1,13E+04	4,24E+03	2,49E+03
	2,4	211	103	83,6	4,5	1,42E+04	5,32E+03	3,12E+03
	2,5	239	113	89	4,6	1,78E+04	6,68E+03	3,91E+03
	2,6	275	126	97	4,7	2,24E+04	8,40E+03	4,91E+03
	2,7	320	143	107	4,8	2,82E+04	1,06E+04	6,16E+03
	2,8	377	164	119	4,9	3,55E+04	1,33E+04	7,74E+03
	2,9	450	191	135	5,0	4,46E+04	1,67E+04	9,74E+03
	3,0	541	226	154				
0,05	1,0	49,7	30,2	33,8	3,1	579	221	133
	1,1	44,2	25,9	26,8	3,2	724	276	165
	1,2	41,0	23,3	22,9	3,3	907	344	205
	1,3	39,5	21,8	20,7	3,4	1,14E+03	430	255
	1,4	39,3	21,1	19,3	3,5	1,43E+03	538	317
	1,5	40,3	21,1	18,6	3,6	1,79E+03	674	397
	1,6	42,4	21,5	18,5	3,7	2,25E+03	846	496
	1,7	45,8	22,6	18,7	3,8	2,83E+03	1,06E+03	622
	1,8	50,6	24,2	19,5	3,9	3,55E+03	1,33E+03	780
	1,9	57,2	26,5	20,6	4,0	4,47E+03	1,68E+03	979
	2,0	65,7	29,6	22,3	4,1	5,62E+03	2,11E+03	1,23E+03
	2,1	76,8	33,6	24,5	4,2	7,07E+03	2,65E+03	1,55E+03
	2,2	90,9	38,9	27,5	4,3	8,90E+03	3,33E+03	1,94E+03
	2,3	109	45,5	31,3	4,4	1,12E+04	4,19E+03	2,44E+03
	2,4	132	54,0	36,2	4,5	1,41E+04	5,28E+03	3,07E+03
2,5	160	64,7	42,4	4,6	1,77E+04	6,64E+03	3,86E+03	
2,6	197	78,3	50,2	4,7	2,23E+04	8,35E+03	4,86E+03	
2,7	242	95,4	60,1	4,8	2,81E+04	1,05E+04	6,12E+03	
2,8	300	117	72,6	4,9	3,54E+04	1,32E+04	7,70E+03	
2,9	373	144	88,4	5,0	4,45E+04	1,67E+04	9,69E+03	
3,0	464	178	108					
0,1	1,0	27,1	16,0	17,4	3,1	570	215	128
	1,1	24,9	14,0	14,0	3,2	715	270	159
	1,2	24,0	13,0	12,2	3,3	898	338	199
	1,3	24,2	12,6	11,3	3,4	1,13E+03	424	249
	1,4	25,2	12,7	10,9	3,5	1,42E+03	532	312
	1,5	27,2	13,2	10,8	3,6	1,78E+03	669	391
	1,6	30,1	14,1	11,2	3,7	2,24E+03	840	491

1,7	34,0	15,4	11,8	3,8	2,82E+03	1,06E+03	616
1,8	39,4	17,3	12,8	3,9	3,55E+03	1,33E+03	774
1,9	46,3	19,9	14,1	4,0	4,46E+03	1,67E+03	974
2,0	55,1	23,1	16,0	4,1	5,61E+03	2,10E+03	1,22E+03
2,1	66,4	27,3	18,4	4,2	7,06E+03	2,64E+03	1,54E+03
2,2	80,7	32,6	21,4	4,3	8,89E+03	3,33E+03	1,94E+03
2,3	98,8	39,4	25,3	4,4	1,12E+04	4,19E+03	2,44E+03
2,4	122	47,9	30,2	4,5	1,41E+04	5,27E+03	3,07E+03
2,5	151	58,7	36,5	4,6	1,77E+04	6,63E+03	3,86E+03
2,6	187	72,3	44,4	4,7	2,23E+04	8,35E+03	4,86E+03
2,7	233	89,4	54,3	4,8	2,81E+04	1,05E+04	6,11E+03
2,8	290	111	66,9	4,9	3,54E+04	1,32E+04	7,69E+03
2,9	363	138	82,6	5,0	4,45E+04	1,67E+04	9,68E+03
3,0	455	172	103				

Tabla 29: Valor de la razón entre la masa de mineral al interior del reactor de lixiviación y la masa de azufre al interior del reactor biológico.

$P_{sólido/sol}$	0,1	0,25	0,4	$P_{sólido/sol}$	0,1	0,25	0,4
pH_l				pH_l			
1,0	1,06E-01	1,72E-01	1,52E-01	3,1	31,4	52,4	54,7
1,1	1,56E-01	2,60E-01	2,46E-01	3,2	39,7	66,1	69,0
1,2	2,23E-01	3,76E-01	3,69E-01	3,3	50,0	83,3	86,9
1,3	3,11E-01	5,29E-01	5,31E-01	3,4	63,0	105	110
1,4	4,26E-01	7,28E-01	7,42E-01	3,5	79,4	132	138
1,5	5,76E-01	9,84E-01	1,01	3,6	100	167	174
1,6	7,69E-01	1,31	1,36	3,7	126	210	219
1,7	1,02	1,73	1,80	3,8	159	264	276
1,8	1,33	2,26	2,36	3,9	200	333	347
1,9	1,74	2,94	3,07	4,0	252	419	437
2,0	2,25	3,79	3,96	4,1	317	528	551
2,1	2,89	4,87	5,09	4,2	399	665	694
2,2	3,71	6,24	6,51	4,3	503	837	873
2,3	4,74	7,95	8,30	4,4	633	1,05E+03	1,10E+03
2,4	6,04	10,1	10,6	4,5	797	1,33E+03	1,38E+03
2,5	7,68	12,8	13,4	4,6	1,00E+03	1,67E+03	1,74E+03
2,6	9,74	16,3	17,0	4,7	1,26E+03	2,10E+03	2,19E+03
2,7	12,3	20,6	21,5	4,8	1,59E+03	2,65E+03	2,76E+03
2,8	15,6	26,1	27,2	4,9	2,00E+03	3,33E+03	3,48E+03
2,9	19,7	32,9	34,3	5,0	2,52E+03	4,20E+03	4,38E+03
3,0	24,9	41,5	43,3				

Cabe señalar que el valor de esta razón no depende del factor ε .

E.4 Tablas de Balances de Masa.

El valor del flujo másico y las tasas de consumo y/o producción de algunas especies no depende de los parámetros variables en estudio, por lo que poseen un valor único en el caso de estudio. Estas especies son:

- Mineral.

El flujo de entrada de mineral al reactor de lixiviación es un parámetro fijo del modelo, que en el caso estudiado corresponde a 100 [ton/día].

Tabla 30: Flujo másico de entrada y salida de mineral.

<i>Corriente</i> →	<i>E</i>	<i>S</i>	<i>D</i>	<i>P</i>
<i>Reactor</i> ↓	[kg/día]	[kg/día]	[kg/día]	[kg/día]
<i>Biológico</i>	0	0	0	0
<i>Lixiviación</i>	1,00E+05	9,91E+04	950	0

- Fosforita.

El flujo de entrada de fosforita al reactor de lixiviación depende del flujo de entrada de mineral, del porcentaje de fosforita en este último, y de la conversión que se espera obtener, que en el caso estudiado corresponden a 100 [ton/día], 1% y 95% respectivamente.

Tabla 31: Flujo másico de entrada y salida de fosforita.

<i>Corriente</i> →	<i>E</i>	<i>S</i>	<i>D</i>	<i>P</i>
<i>Reactor</i> ↓	[kg/día]	[kg/día]	[kg/día]	[kg/día]
<i>Biológico</i>	0	0	0	0
<i>Lixiviación</i>	1,00E+03	50,0	950	0

- Azufre.

El flujo de entrada de azufre al reactor biológico depende del flujo de entrada de fosforita al reactor de lixiviación y de la conversión esperada de esta:

Tabla 32: Flujo másico de entrada y salida de azufre.

<i>Corriente</i> →	<i>E</i>	<i>S</i>	<i>D</i>	<i>P</i>
<i>Reactor</i> ↓	[kg/día]	[kg/día]	[kg/día]	[kg/día]
<i>Biológico</i>	302	0	302	0
<i>Lixiviación</i>	0	0	0	0

- Oxígeno.

El oxígeno de entrada al reactor biológico depende del flujo de entrada de azufre:

Tabla 33: Flujo másico de entrada y salida de oxígeno.

<i>Corriente</i> →	<i>E</i>	<i>S</i>	<i>D</i>	<i>P</i>
<i>Reactor</i> ↓	[kg/día]	[kg/día]	[kg/día]	[kg/día]
<i>Biológico</i>	452	0	452	0
<i>Lixiviación</i>	0	0	0	0

- Dióxido de Carbono.

El flujo de dióxido de carbono de la entrada se itera, según lo visto en el punto 2.21 del Anexo C.2.

Tabla 34: Flujo másico de entrada y salida de dióxido de carbono.

<i>Corriente</i> →	<i>E</i>	<i>S</i>	<i>D</i>	<i>P</i>
<i>Reactor</i> ↓	[kg/día]	[kg/día]	[kg/día]	[kg/día]
<i>Biológico</i>	148	0	148	0
<i>Lixiviación</i>	0	0	0	0

- Ácido fosfórico.

Los flujos de ácido fosfórico dependen del flujo de entrada de mineral al reactor de lixiviación, del porcentaje de fosforita del mineral, de la conversión de esta última, y de la cantidad de ácido fosfórico que se retira del sistema, que para el caso de estudio, corresponden a 100 [ton/día], 10%, 95% y 90% respectivamente.

Tabla 35: Flujo másico de entrada y salida de ácido fosfórico.

<i>Corriente</i> →	<i>E</i>	<i>S</i>	<i>D</i>	<i>P</i>
<i>Reactor</i> ↓	[kg/día]	[kg/día]	[kg/día]	[kg/día]
<i>Biológico</i>	61,5	61,5	0	0
<i>Lixiviación</i>	61,5	615	0	554
<i>Sistema</i>	0	554	0	0

- Yeso dihidratado.

El flujo de yeso depende del flujo de entrada de mineral al reactor de lixiviación, del porcentaje de fosforita del mineral, y de la conversión de esta última.

Tabla 36: Flujo másico de entrada y salida de yeso dihidratado.

<i>Corriente</i> → <i>Reactor</i> ↓	<i>E</i> [kg/día]	<i>S</i> [kg/día]	<i>D</i> [kg/día]	<i>P</i> [kg/día]
<i>Biológico</i>	0	0	0	0
<i>Lixiviación</i>	0	1,62E+03	0	1,62E+03

- Ácido fluorhídrico.

El flujo de ácido fluorhídrico depende del flujo de entrada de mineral al reactor de lixiviación, del porcentaje de fosforita del mineral, y de la conversión de esta última.

Tabla 37: Flujo másico de entrada y salida de ácido fluorhídrico.

<i>Corriente</i> → <i>Reactor</i> ↓	<i>E</i> [kg/día]	<i>S</i> [kg/día]	<i>D</i> [kg/día]	<i>P</i> [kg/día]
<i>Biológico</i>	0	0	0	0
<i>Lixiviación</i>	0	37,7	0	37,7

- Biomasa.

Los flujos másicos de biomasa dependen del flujo másico de entrada de dióxido de carbono al reactor biológico.

Tabla 38: Flujo másico de entrada y salida de biomasa.

<i>Corriente</i> → <i>Reactor</i> ↓	<i>E</i> [kg/día]	<i>S</i> [kg/día]	<i>D</i> [kg/día]	<i>P</i> [kg/día]
<i>Biológico</i>	0	148	0	148
<i>Lixiviación</i>	148	0	148	0

- Debris celular.

El flujo másico de debris celular depende del flujo másico de entrada de biomasa al reactor de lixiviación.

Tabla 39: Flujo másicos de entrada y salida de debris celular.

<i>Corriente</i> → <i>Reactor</i> ↓	<i>E</i> [kg/día]	<i>S</i> [kg/día]	<i>D</i> [kg/día]	<i>P</i> [kg/día]
Biológico	0	0	0	0
Lixiviación	0	148	0	148

Para el resto de las especies, cuyos flujos dependen de los parámetros variables, se tienen las tablas que se muestran a continuación. Cabe señalar que en las siguientes tablas la unidad utilizada (para los flujos másicos) es de ton/día o de kg/día, según se señale en el título de la tabla.

Por especie:

- Ácido sulfúrico.

Tabla 40: Flujo másico de entrada y salida de ácido sulfúrico [kg/día].

<i>p</i> _{sólido/sol} <i>Corriente</i> → <i>pH_l</i> ↓	0,10		0,25		0,40	
	$E_{H_2SO_4}^l$ ($S_{H_2SO_4}^b$)	$S_{H_2SO_4}^l$ ($E_{H_2SO_4}^b$)	$E_{H_2SO_4}^l$ ($S_{H_2SO_4}^b$)	$S_{H_2SO_4}^l$ ($E_{H_2SO_4}^b$)	$E_{H_2SO_4}^l$ ($S_{H_2SO_4}^b$)	$S_{H_2SO_4}^l$ ($E_{H_2SO_4}^b$)
1	1,01E+04	9,19E+03	4,27E+03	3,34E+03	2,84E+03	1,91E+03
1,1	8,23E+03	7,31E+03	3,58E+03	2,66E+03	2,45E+03	1,52E+03
1,2	6,73E+03	5,81E+03	3,04E+03	2,11E+03	2,13E+03	1,21E+03
1,3	5,54E+03	4,62E+03	2,60E+03	1,68E+03	1,89E+03	962
1,4	4,60E+03	3,67E+03	2,26E+03	1,33E+03	1,69E+03	764
1,5	3,84E+03	2,92E+03	1,98E+03	1,06E+03	1,53E+03	607
1,6	3,24E+03	2,32E+03	1,77E+03	843	1,41E+03	482
1,7	2,77E+03	1,84E+03	1,59E+03	670	1,31E+03	383
1,8	2,39E+03	1,46E+03	1,46E+03	532	1,23E+03	305
1,9	2,09E+03	1,16E+03	1,35E+03	423	1,17E+03	242

2	1,85E+03	925	1,26E+03	336	1,12E+03	192
2,1	1,66E+03	735	1,19E+03	267	1,08E+03	153
2,2	1,51E+03	584	1,14E+03	212	1,05E+03	121
2,3	1,39E+03	464	1,09E+03	168	1,02E+03	96,4
2,4	1,29E+03	368	1,06E+03	134	1,00E+03	76,6
2,5	1,22E+03	293	1,03E+03	106	985	60,8
2,6	1,16E+03	232	1,01E+03	84,4	972	48,3
2,7	1,11E+03	185	991	67,1	962	38,4
2,8	1,07E+03	147	977	53,3	954	30,5
2,9	1,04E+03	116	966	42,3	948	24,2
3	1,02E+03	92,5	957	33,6	943	19,2
3,1	997	73,5	950	26,7	939	15,3
3,2	982	58,4	945	21,2	936	12,1
3,3	970	46,4	941	16,8	933	9,64
3,4	961	36,8	937	13,4	931	7,66
3,5	953	29,3	934	10,6	930	6,08
3,6	947	23,2	932	8,44	929	4,83
3,7	942	18,5	931	6,71	928	3,84
3,8	938	14,7	929	5,33	927	3,05
3,9	935	11,6	928	4,23	926	2,42
4	933	9,25	927	3,36	926	1,92
4,1	931	7,35	926	2,67	925	1,53
4,2	930	5,84	926	2,12	925	1,21
4,3	928	4,64	925	1,68	925	9,64E-01
4,4	927	3,68	925	1,34	925	7,66E-01
4,5	927	2,93	925	1,06	924	6,08E-01
4,6	926	2,32	925	8,44E-01	924	4,83E-01
4,7	926	1,85	924	6,71E-01	924	3,84E-01
4,8	925	1,47	924	5,33E-01	924	3,05E-01
4,9	925	1,16	924	4,23E-01	924	2,42E-01
5	925	9,25E-01	924	3,36E-01	924	1,92E-01

El consumo de ácido sulfúrico en el reactor de lixiviación (equivalente a lo que se produce en el reactor biológico) es de 924 [kg/día].

Tabla 41: Porcentaje de variación entre los flujos de entrada y salida de ácido sulfúrico para cada par de valores de pH_L .

%Variación $P_{sólido/sol} \rightarrow$ $\Delta pH_L \downarrow$	% $(E_1 - E_2)/E_1$			% $(S_1 - S_2)/S_1$		
	0,10	0,25	0,40	0,10	0,25	0,40
1,0-1,1	18,62	16,04	13,82	20,49	20,47	20,49
1,1-1,2	18,17	15,21	12,76	20,47	20,49	20,50
1,2-1,3	17,68	14,27	11,63	20,49	20,51	20,52
1,3-1,4	17,09	13,26	10,47	20,50	20,55	20,53
1,4-1,5	16,39	12,13	9,31	20,52	20,52	20,57
1,5-1,6	15,59	10,97	8,14	20,53	20,53	20,53
1,6-1,7	14,69	9,80	7,05	20,54	20,54	20,54
1,7-1,8	13,68	8,63	6,03	20,54	20,54	20,55
1,8-1,9	12,60	7,51	5,10	20,55	20,55	20,55
1,9-2,0	11,46	6,45	4,27	20,55	20,55	20,55
2,0-2,1	10,28	5,48	3,54	20,55	20,56	20,56
2,1-2,2	9,11	4,61	2,92	20,56	20,56	20,56
2,2-2,3	7,96	3,84	2,39	20,56	20,56	20,56
2,3-2,4	6,87	3,17	1,94	20,56	20,56	20,56
2,4-2,5	5,86	2,60	1,57	20,56	20,56	20,56
2,5-2,6	4,95	2,12	1,27	20,56	20,56	20,56
2,6-2,7	4,13	1,72	1,02	20,56	20,56	20,56
2,7-2,8	3,43	1,39	0,82	20,56	20,56	20,57
2,8-2,9	2,82	1,12	0,66	20,57	20,57	20,57
2,9-3,0	2,30	0,90	0,53	20,57	20,57	20,57
3,0-3,1	1,87	0,72	0,42	20,57	20,57	20,57
3,1-3,2	1,52	0,58	0,33	20,57	20,57	20,57
3,2-3,3	1,22	0,46	0,27	20,57	20,57	20,57
3,3-3,4	0,98	0,37	0,21	20,57	20,57	20,57
3,4-3,5	0,79	0,29	0,17	20,57	20,57	20,57
3,5-3,6	0,63	0,23	0,13	20,57	20,57	20,57
3,6-3,7	0,50	0,19	0,11	20,57	20,57	20,57
3,7-3,8	0,40	0,15	0,09	20,57	20,57	20,57
3,8-3,9	0,32	0,12	0,07	20,57	20,57	20,57
3,9-4,0	0,26	0,09	0,05	20,57	20,57	20,57
4,0-4,1	0,20	0,07	0,04	20,57	20,57	20,57
4,1-4,2	0,16	0,06	0,03	20,57	20,57	20,57
4,2-4,3	0,13	0,05	0,03	20,57	20,57	20,57
4,3-4,4	0,10	0,04	0,02	20,57	20,57	20,57
4,4-4,5	0,08	0,03	0,02	20,57	20,57	20,57

4,5-4,6	0,06	0,02	0,01	20,57	20,57	20,57
4,6-4,7	0,05	0,02	0,01	20,57	20,57	20,57
4,7-4,8	0,04	0,01	0,01	20,57	20,57	20,57
4,8-4,9	0,03	0,01	0,01	20,57	20,57	20,57
4,9-5,0	0,03	0,01	0,01	20,57	20,57	20,57

- Agua.

Tabla 42. Flujo másico de entrada y salida de agua al reactor de lixiviación [ton/día].

<i>Corriente</i>	$E_{H_2O}^l$			$S_{H_2O}^l$		
	$P_{sólido/sol} \rightarrow$					
$pH_l \downarrow$	0,10	0,25	0,40	0,10	0,25	0,40
1,0	896	298	149	896	298	148
1,1	898	299	149	898	299	149
1,2	900	299	149	899	299	149
1,3	901	300	150	901	300	149
1,4	902	300	150	902	300	149
1,5	903	301	150	902	300	150
1,6	903	301	150	903	300	150
1,7	904	301	150	903	301	150
1,8	904	301	150	904	301	150
1,9	904	301	150	904	301	150
2,0	905	301	150	904	301	150
2,1	905	301	150	905	301	150
2,2	905	301	150	905	301	150
2,3	905	301	150	905	301	150
2,4	905	301	151	905	301	150
2,5	905	301	151	905	301	150
2,6	905	302	151	905	301	150
2,7	905	302	151	905	301	150
2,8	905	302	151	905	301	150
2,9	906	302	151	905	301	150
3,0	906	302	151	905	301	150
3,1	906	302	151	905	301	150
3,2	906	302	151	905	301	150
3,3	906	302	151	905	301	150
3,4	906	302	151	905	301	150
3,5	906	302	151	905	301	150

3,6	906	302	151	905	301	150
3,7	906	302	151	905	301	150
3,8	906	302	151	905	301	150
3,9	906	302	151	905	301	150
4,0	906	302	151	905	301	150
4,1	906	302	151	905	301	150
4,2	906	302	151	905	301	150
4,3	906	302	151	905	301	150
4,4	906	302	151	905	301	150
4,5	906	302	151	905	301	150
4,6	906	302	151	905	301	150
4,7	906	302	151	905	301	150
4,8	906	302	151	905	301	150
4,9	906	302	151	905	301	150
5,0	906	302	151	905	301	150

Tabla 43: Flujo másico de entrada y salida de agua al reactor biológico [ton/día].

<i>Corriente</i>	$E_{H_2O}^b$			$S_{H_2O}^b$		
	0,10	0,25	0,40	0,10	0,25	0,40
$p_{sólido/sol} \rightarrow$	0,10	0,25	0,40	0,10	0,25	0,40
$pH_l \downarrow$						
1,0	896	297	148	895	297	148
1,1	897	298	148	897	298	148
1,2	899	299	148	899	298	148
1,3	900	299	149	900	299	149
1,4	901	299	149	901	299	149
1,5	902	300	149	902	299	149
1,6	902	300	149	902	300	149
1,7	903	300	149	903	300	149
1,8	903	300	149	903	300	149
1,9	904	300	149	903	300	149
2,0	904	300	149	904	300	149
2,1	904	300	150	904	300	149
2,2	904	300	150	904	300	149
2,3	904	301	150	904	300	149
2,4	904	301	150	904	300	149
2,5	904	301	150	904	300	149
2,6	904	301	150	904	300	149
2,7	905	301	150	904	300	149
2,8	905	301	150	904	300	149

2,9	905	301	150	904	300	149
3,0	905	301	150	904	300	150
3,1	905	301	150	904	301	150
3,2	905	301	150	904	301	150
3,3	905	301	150	905	301	150
3,4	905	301	150	905	301	150
3,5	905	301	150	905	301	150
3,6	905	301	150	905	301	150
3,7	905	301	150	905	301	150
3,8	905	301	150	905	301	150
3,9	905	301	150	905	301	150
4,0	905	301	150	905	301	150
4,1	905	301	150	905	301	150
4,2	905	301	150	905	301	150
4,3	905	301	150	905	301	150
4,4	905	301	150	905	301	150
4,5	905	301	150	905	301	150
4,6	905	301	150	905	301	150
4,7	905	301	150	905	301	150
4,8	905	301	150	905	301	150
4,9	905	301	150	905	301	150
5,0	905	301	150	905	301	150

Tabla 44: Consumo de agua en cada reactor.

$D_{H_2O}^b$ [kg/día]	$D_{H_2O}^l$ [kg/día]
170	339

Cabe señalar que la salida de agua del sistema corresponde a 554 [kg/día].

- Concentración Celular.

Tabla 45: Concentración de células en suspensión al interior del reactor biológico [cel/m³].

<i>P</i> _{sólido/sol}	0,1	0,25	0,4	<i>P</i> _{sólido/sol}	0,1	0,25	0,4
<i>pH</i> _l				<i>pH</i> _l			
1,0	1,63E+14	4,91E+14	9,86E+14	3,1	1,63E+14	4,89E+14	9,80E+14
1,1	1,63E+14	4,91E+14	9,85E+14	3,2	1,63E+14	4,89E+14	9,80E+14
1,2	1,63E+14	4,90E+14	9,84E+14	3,3	1,63E+14	4,89E+14	9,80E+14
1,3	1,63E+14	4,90E+14	9,83E+14	3,4	1,63E+14	4,89E+14	9,80E+14
1,4	1,63E+14	4,90E+14	9,83E+14	3,5	1,63E+14	4,89E+14	9,80E+14
1,5	1,63E+14	4,90E+14	9,82E+14	3,6	1,63E+14	4,89E+14	9,80E+14
1,6	1,63E+14	4,90E+14	9,82E+14	3,7	1,63E+14	4,89E+14	9,80E+14
1,7	1,63E+14	4,89E+14	9,82E+14	3,8	1,63E+14	4,89E+14	9,80E+14
1,8	1,63E+14	4,89E+14	9,81E+14	3,9	1,63E+14	4,89E+14	9,80E+14
1,9	1,63E+14	4,89E+14	9,81E+14	4,0	1,63E+14	4,89E+14	9,80E+14
2,0	1,63E+14	4,89E+14	9,81E+14	4,1	1,63E+14	4,89E+14	9,80E+14
2,1	1,63E+14	4,89E+14	9,81E+14	4,2	1,63E+14	4,89E+14	9,80E+14
2,2	1,63E+14	4,89E+14	9,81E+14	4,3	1,63E+14	4,89E+14	9,80E+14
2,3	1,63E+14	4,89E+14	9,81E+14	4,4	1,63E+14	4,89E+14	9,80E+14
2,4	1,63E+14	4,89E+14	9,81E+14	4,5	1,63E+14	4,89E+14	9,80E+14
2,5	1,63E+14	4,89E+14	9,81E+14	4,6	1,63E+14	4,89E+14	9,80E+14
2,6	1,63E+14	4,89E+14	9,81E+14	4,7	1,63E+14	4,89E+14	9,80E+14
2,7	1,63E+14	4,89E+14	9,80E+14	4,8	1,63E+14	4,89E+14	9,80E+14
2,8	1,63E+14	4,89E+14	9,80E+14	4,9	1,63E+14	4,89E+14	9,80E+14
2,9	1,63E+14	4,89E+14	9,80E+14	5,0	1,63E+14	4,89E+14	9,80E+14
3,0	1,63E+14	4,89E+14	9,80E+14				

Tabla 46: N° de células adheridas a las partículas de azufre al interior del reactor biológico [cel/m²].

<i>P</i> _{sólido/sol}	0,1	0,25	0,4	<i>P</i> _{sólido/sol}	0,1	0,25	0,4
<i>pH</i> _l				<i>pH</i> _l			
1,0	2,46E+11	4,96E+11	6,64E+11	3,1	2,45E+11	4,94E+11	6,62E+11
1,1	2,46E+11	4,95E+11	6,63E+11	3,2	2,45E+11	4,94E+11	6,62E+11
1,2	2,46E+11	4,95E+11	6,63E+11	3,3	2,45E+11	4,94E+11	6,62E+11
1,3	2,46E+11	4,95E+11	6,63E+11	3,4	2,45E+11	4,94E+11	6,62E+11
1,4	2,46E+11	4,95E+11	6,63E+11	3,5	2,45E+11	4,94E+11	6,62E+11
1,5	2,46E+11	4,95E+11	6,63E+11	3,6	2,45E+11	4,94E+11	6,62E+11
1,6	2,46E+11	4,95E+11	6,63E+11	3,7	2,45E+11	4,94E+11	6,62E+11
1,7	2,46E+11	4,95E+11	6,63E+11	3,8	2,45E+11	4,94E+11	6,62E+11
1,8	2,46E+11	4,95E+11	6,62E+11	3,9	2,45E+11	4,94E+11	6,62E+11

1,9	2,46E+11	4,95E+11	6,62E+11	4,0	2,45E+11	4,94E+11	6,62E+11
2,0	2,46E+11	4,95E+11	6,62E+11	4,1	2,45E+11	4,94E+11	6,62E+11
2,1	2,46E+11	4,94E+11	6,62E+11	4,2	2,45E+11	4,94E+11	6,62E+11
2,2	2,46E+11	4,94E+11	6,62E+11	4,3	2,45E+11	4,94E+11	6,62E+11
2,3	2,46E+11	4,94E+11	6,62E+11	4,4	2,45E+11	4,94E+11	6,62E+11
2,4	2,46E+11	4,94E+11	6,62E+11	4,5	2,45E+11	4,94E+11	6,62E+11
2,5	2,46E+11	4,94E+11	6,62E+11	4,6	2,45E+11	4,94E+11	6,62E+11
2,6	2,46E+11	4,94E+11	6,62E+11	4,7	2,45E+11	4,94E+11	6,62E+11
2,7	2,45E+11	4,94E+11	6,62E+11	4,8	2,45E+11	4,94E+11	6,62E+11
2,8	2,45E+11	4,94E+11	6,62E+11	4,9	2,45E+11	4,94E+11	6,62E+11
2,9	2,45E+11	4,94E+11	6,62E+11	5,0	2,45E+11	4,94E+11	6,62E+11
3,0	2,45E+11	4,94E+11	6,62E+11				

- Masa Total.

La masa total de entrada y salida en cada reactor es independiente del pH del reactor de lixiviación.

Tabla 47: Flujo másico de entrada y salida de masa total y de solución en el reactor de lixiviación [ton/día].

<i>Corriente</i> → <i>p</i> _{sólido/sol} ↓	E_{tot}^l	S_{tot}^l	E_{sol}^l	S_{sol}^l
0,10	1,01E+03	1,01E+03	907	1,01E+03
0,25	403	403	303	403
0,40	252	252	152	252

Tabla 48: Flujo másico de entrada y salida de masa total y solución en el reactor biológico [ton/día].

<i>Corriente</i> → <i>p</i> _{sólido/sol} ↓	E_{tot}^b	S_{tot}^b	E_{sol}^b	S_{sol}^b
0,10	906	906	905	906
0,25	302	302	301	302
0,40	151	151	150	151

Anexo F. Gráficos.

El Gráfico 11 presenta la conversión de fósforo en función del tiempo, para diferentes pH de operación del reactor de lixiviación.

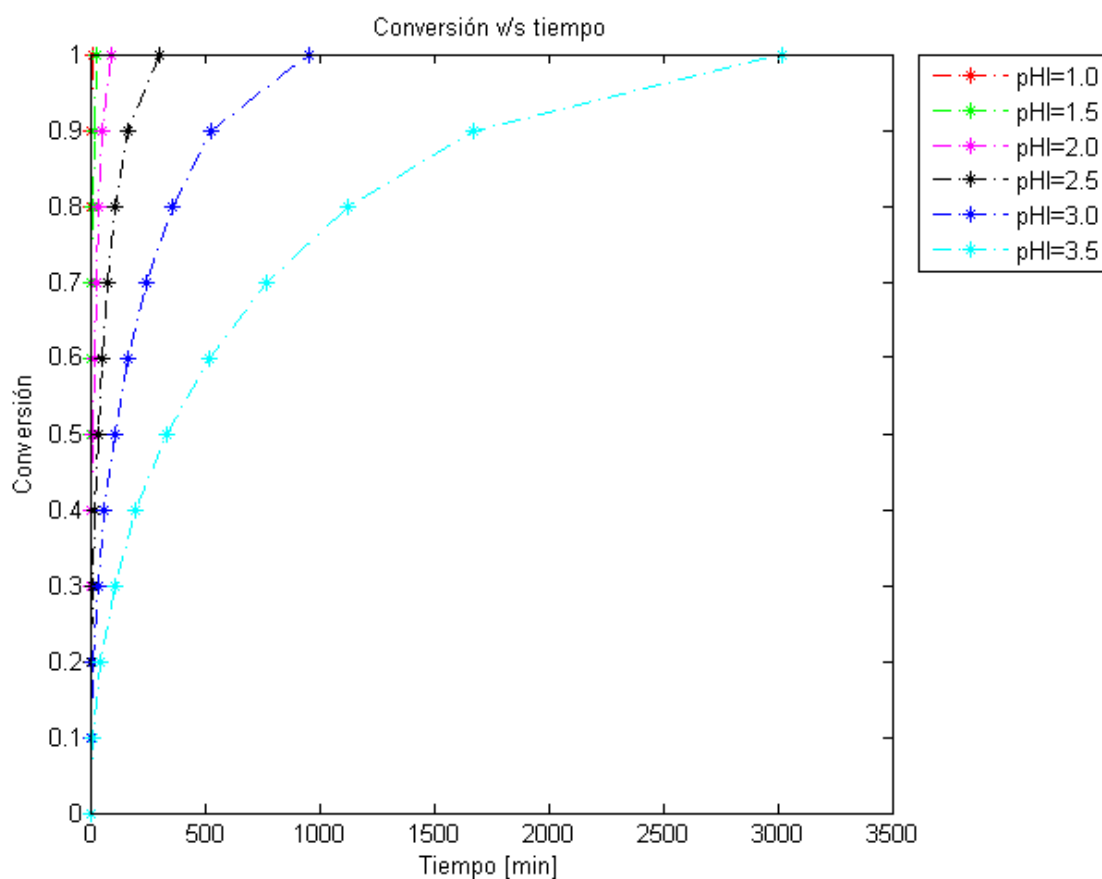


Gráfico 11: Conversión de la fosforita en el tiempo para distintos pH de operación.

Para una conversión del 95%, se calcula el tiempo de residencia y el volumen del reactor de lixiviación en función de los diferentes pH de operación, para finalmente graficar el volumen versus el pH, como se muestra en el Gráfico 12.

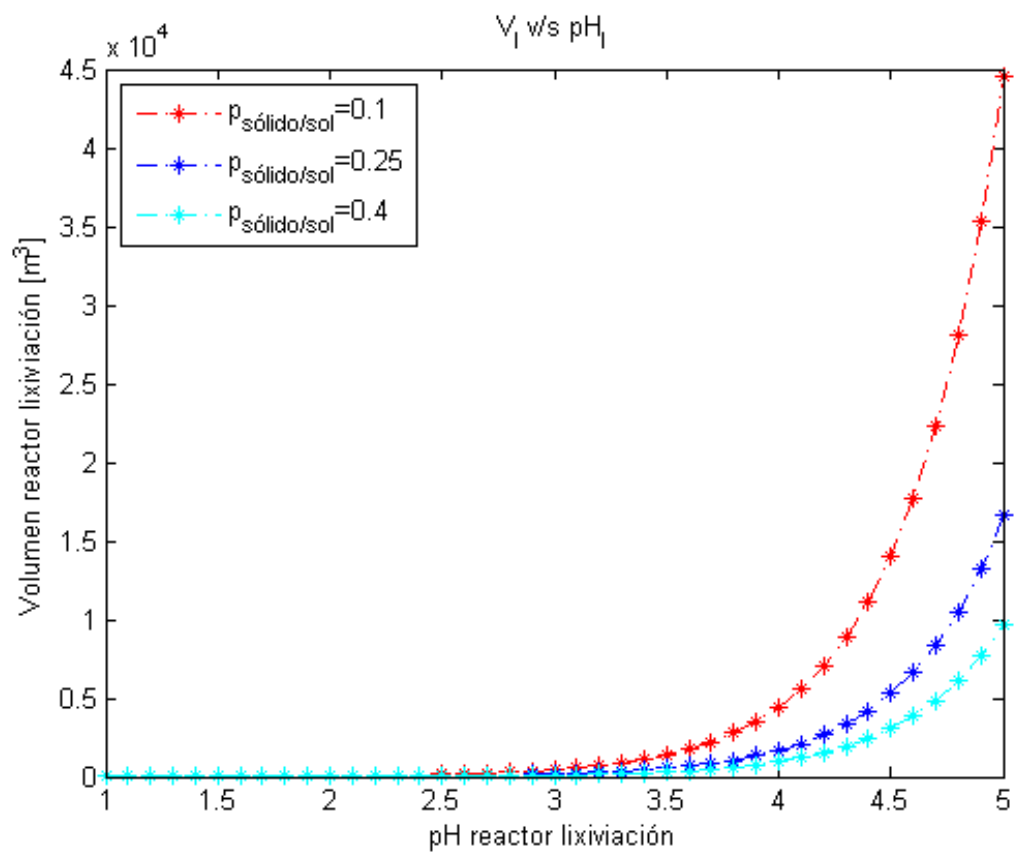


Gráfico 12: Volumen del reactor de lixiviación en función del pH de operación.

Además se grafica la razón $masa_{min}/masa_s$ versus pH_b y pH_l , como se observa en el Gráfico 13.

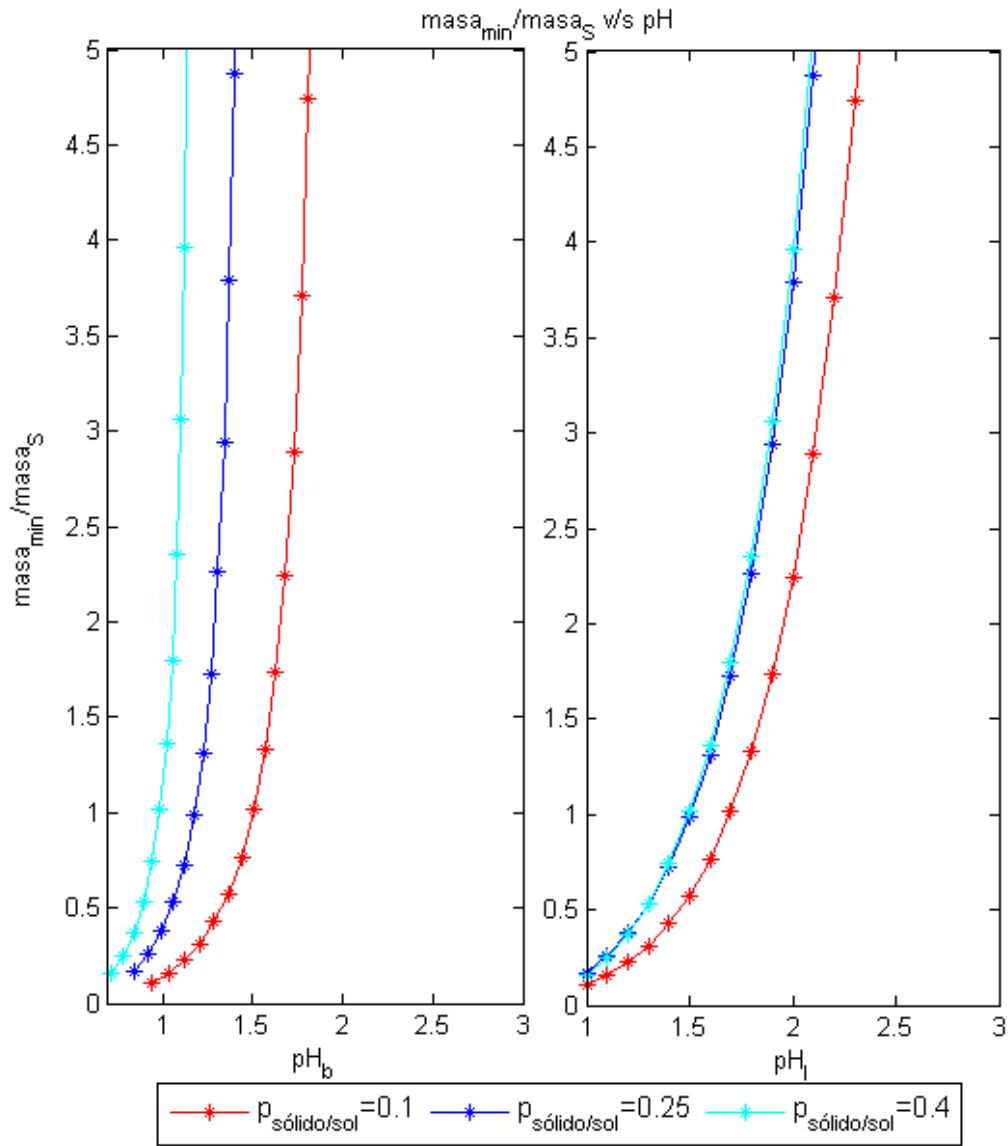


Gráfico 13: Razón masa_{min}/masa_s versus pH_l y pH_b.