



UNIVERSIDAD DE CHILE
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA DE MINAS

MODELAMIENTO FENOMENOLÓGICO DE LA FLUIDODINÁMICA DE LA FASE
GASEOSA Y DEL BALANCE DE OXÍGENO AL INTERIOR DE UNA PILA DE
BIOLIXIVIACIÓN

MEMORIA PARA OPTAR AL TÍTULO DE INGENIERO CIVIL DE MINAS

FRANCISCO JOSÉ ROJAS THUMM

PROFESOR GUÍA:
TOMÁS VARGAS VALERO

MIEMBROS DE LA COMISIÓN:
JACQUES WIERTZ FRISQUE
CHRISTIAN IHLE BASCUÑÁN

SANTIAGO DE CHILE
2015

RESUMEN DE LA MEMORIA PARA OPTAR AL
TÍTULO DE: Ingeniero Civil de Minas
POR: Francisco José Rojas Thumm
FECHA: 30/07/2015
PROFESOR GUÍA: Tomás Vargas Valero

MODELAMIENTO FENOMENOLÓGICO DE LA FLUIDODINÁMICA DE LA FASE GASEOSA Y DEL BALANCE DE OXÍGENO AL INTERIOR DE UNA PILA DE BIOLIXIVIACIÓN

Se ha desarrollado el modelamiento fenomenológico de la fluidodinámica de la fase gaseosa y del balance de oxígeno, en una dimensión, al interior de una pila de biolixiviación. Estos modelos pueden igualmente ser aplicados a columnas y botaderos. Los modelos fueron integrados a un modelo general de biolixiviación, ya existente y desarrollado por la empresa BioSigma.

Se utilizaron las ecuaciones de conservación de masa y conservación de movimiento en los modelos de balance de oxígeno y fluidodinámica del aire, respectivamente. Para la discretización y resolución numérica de estas ecuaciones se empleó el método de volumen de control, el algoritmo SIMPLER y el algoritmo de Thomas. Se introdujo una modificación en la ecuación de movimiento para considerar el régimen de movimiento del aire por convección natural. También se desarrolló una expresión matemática para determinar el coeficiente global volumétrico de transferencia de oxígeno, a partir de la tasa de riego, el contenido de humedad, el tamaño promedio de partícula y la temperatura de la pila.

Se realizó una calibración del modelo general con datos experimentales de una pila de biolixiviación, proporcionados por BioSigma. Al contrastar los resultados del modelo con las mediciones experimentales, se pudo verificar que la simulación generó una buena reproducibilidad de los datos reales.

Una vez obtenidos los parámetros de ajuste, se realizaron estudios de sensibilidad del modelo general (considerando como caso base los parámetros de entrada y de operación de la pila de BioSigma) respecto a la tasa de aireación, temperatura, granulometría, ciclos de riego y reposo, y a los tamaños de pila, para analizar los cambios en los valores de recuperación de cobre, temperatura, actividad bacteriana, y tasa de transferencia de oxígeno y flujo de aire (en convección natural) al interior de la pila.

Como principales conclusiones, los resultados del modelo general muestran que: 1) La tasa de aireación utilizada en la pila de BioSigma está sobredimensionada, dado que el modelo indica que al utilizar una inyección de aire 100 veces menor se lograría una recuperación de cobre similar; 2) El aumento de la tasa de aireación incrementa la temperatura promedio de la pila; 3) Un leve incremento de la tasa de aireación, en una pila sin inyección de aire, puede generar un mayor aumento de la recuperación de cobre en comparación a una pequeña alza de la temperatura del lecho; 4) El flujo de aireación al interior de la pila afecta de forma importante la actividad bacteriana; 5) El aumento de la tasa de transferencia de oxígeno es más significativo cuando se incrementa el flujo de aire que aumentando el valor del coeficiente global volumétrico de transferencia en la pila; 6) El coeficiente de transferencia de oxígeno es muy sensible a la tasa de riego; 7) Y para pilas de pequeñas dimensiones, en convección natural, el control de oxigenación del lecho mediante ciclos de riego y reposo no es efectivo.

A mis Padres y Hermana.

AGRADECIMIENTOS

Deseo expresar mi sincero agradecimiento al Dr. Roberto Collao por haberme dado la oportunidad de desarrollar este tema de memoria, por su permanente colaboración y apoyo en las etapas complejas de este trabajo, y por ser mi maestro en el arte de la modelación.

Agradezco a mi profesor guía, Dr. Tomás Vargas, por su valiosa cooperación en el perfeccionamiento de este trabajo de título, aportando comentarios y consejos relevantes en el aspecto técnico.

A los profesores de mi comisión, Dr. Jacques Wiertz y Dr. Christian Ihle, mi gratitud por la revisión de este trabajo y contribución en las correcciones.

Finalmente, agradezco el apoyo brindado por la empresa BioSigma S.A. durante el periodo de realización de los programas computacionales, además de facilitar la información requerida para el diseño y construcción de los modelos y la ejecución de las simulaciones consideradas.

TABLA DE CONTENIDO

1. INTRODUCCIÓN	1
1.1. Descripción de los Principales Fenómenos que Ocurren en la Biolixiviación de Pilas....	3
1.1.1. Fenómenos de la Macro-Escala.....	4
1.1.2. Fenómenos de la Meso-Escala	4
1.1.3. Fenómenos de la Micro-Escala.....	5
1.2. Modelamiento de la Biolixiviación.....	5
2. ANTECEDENTES.....	7
2.1. Revisión Bibliográfica del Modelamiento del Balance de Oxígeno y de la Fluidodinámica de la Fase Gaseosa	7
2.2. Modelo de Biolixiviación Desarrollado por BioSigma	9
2.3. Antecedentes Generales.....	15
2.3.1. Ecuación General de Conservación de Masa	15
2.3.2. Ecuación de Continuidad.....	17
2.3.3. Advección.....	18
2.3.4. Difusión y Dispersión Hidrodinámica.....	18
2.3.5. Transferencia de Masa en la Interfase Líquido-Gas.....	21
3. OBJETIVOS	24
3.1. Objetivo General.....	24
3.2. Objetivos Específicos	24
4. METODOLOGÍA	25
5. DESARROLLO DE LOS MODELOS	26
5.1. Modelos de Advección y Dispersión/Difusión de Oxígeno en las Fases Líquida y Gaseosa	26
5.1.1. Método de Discretización.....	27
5.1.2. Análisis de Esquemas de Discretización de la Ecuación de Advección-Difusión ..	29
5.1.3. Modelo de Advección y Dispersión del Oxígeno en la Fase Líquida	34
5.1.4. Estimación del Coeficiente de Difusión de Oxígeno en la Fase Gaseosa	54
5.1.5. Modelo de Advección y Difusión del Oxígeno en la Fase Gaseosa.....	56
5.2. Modelo de la Fluidodinámica de la Fase Gaseosa.....	72
5.2.1. Ecuación de Conservación de Movimiento del Flujo de Aire.....	73
5.2.2. Método de Discretización.....	78
5.2.3. Dificultades en la Discretización de la Ecuación	79

5.2.4.	La Grilla Desplazada	80
5.2.5.	Discretización de la Ecuación en los Nodos Interiores	81
5.2.6.	Discretización de la Ecuación en el Borde Inferior	86
5.2.7.	Discretización de la Ecuación en el Borde Superior	90
5.2.8.	Discretización de la Ecuación de Presión.....	94
5.2.9.	Coefficientes del Algoritmo de Thomas para las Ecuaciones de Velocidad	97
5.2.10.	Coefficientes del Algoritmo de Thomas para las Ecuaciones de Presión.....	98
5.2.11.	Algoritmo SIMPLER.....	99
5.2.12.	Modificación del Modelo para Convección Natural	100
5.2.13.	Diagrama de Flujo del Algoritmo.....	105
5.3.	Determinación del Coeficiente Global Volumétrico de Transferencia de Oxígeno entre las Fases Líquida y Gaseosa	105
5.3.1.	Área Interfacial Efectiva de Transferencia.....	106
5.3.2.	Coeficiente Global Volumétrico de Transferencia de Oxígeno	112
5.4.	Modelo de Determinación de la Tasa de Consumo y Aporte de Oxígeno en las Fases Líquida y Gaseosa.....	116
5.4.1.	Determinación del Consumo y Aporte de Oxígeno en las Fases Líquida y Gaseosa.. ..	116
5.4.2.	Diagrama de Flujo del Algoritmo.....	125
5.5.	Solución Numérica General del Balance de Oxígeno.....	125
6.	INTERFAZ GRÁFICA DE USUARIO	129
7.	CALIBRACIÓN DEL MODELO.....	132
8.	DATOS DE ENTRADA	133
9.	RESULTADOS Y DISCUSIÓN.....	137
9.1.	Modelo Calibrado / Caso Base	137
9.2.	Análisis de Sensibilidad.....	146
9.2.1.	Efecto del Flujo de Inyección de Aire	146
9.2.2.	Efecto de la Granulometría.....	155
9.2.3.	Efecto de la Temperatura.....	158
9.2.4.	Efecto del Régimen de Riego y del Tamaño de Pila	161
10.	CONCLUSIONES.....	166
11.	NOMENCLATURA.....	170
11.1.	Subíndices	172
12.	BIBLIOGRAFÍA.....	173

ANEXOS	178
Anexo A. Método Operator Splitting.....	178
Anexo B. Método de Newton-Raphson	179
Anexo C. Perfil de Temperaturas Durante el Tiempo de Operación	180
Anexo D. Concentración de Bacterias Ferrooxidantes y Thiooxidantes Adheridas en Cada Sección de la Pila Durante el Tiempo de Operación	181
Anexo E. Concentración de Ácido en Cada Sección de la Pila Durante el Tiempo de Operación	182
Anexo F. Concentración de Férrico en Cada Sección de la Pila Durante el Tiempo de Operación.....	183
Anexo G. Perfil de Concentraciones de Oxígeno en la Solución Durante el Tiempo de Operación.....	184
Anexo H. Perfil de Concentraciones de Oxígeno en el Aire Durante el Tiempo de Operación	185
Anexo I. Coeficiente k_{LA} en Cada Sección de la Pila Durante el Tiempo de Operación	186
Anexo J. Velocidad Superficial del Flujo de Aire en Cada Sección de la Pila Durante el Tiempo de Operación.....	187

Índice de Figuras

FIGURA 1.....	3
FIGURA 2.....	15
FIGURA 3.....	20
FIGURA 4.....	21
FIGURA 5.....	26
FIGURA 6.....	28
FIGURA 7.....	31
FIGURA 8.....	36
FIGURA 9.....	42
FIGURA 10.....	46
FIGURA 11.....	54
FIGURA 12.....	58
FIGURA 13.....	62
FIGURA 14.....	64
FIGURA 15.....	67
FIGURA 16.....	72
FIGURA 17.....	80
FIGURA 18.....	81
FIGURA 19.....	82
FIGURA 20.....	87
FIGURA 21.....	91
FIGURA 22.....	105
FIGURA 23.....	114
FIGURA 24.....	125
FIGURA 25.....	126
FIGURA 26.....	128
FIGURA 27.....	130
FIGURA 28.....	131
FIGURA 29.....	131

Índice de Gráficos

GRÁFICO 1.....	137
GRÁFICO 2.....	138
GRÁFICO 3.....	139
GRÁFICO 4.....	139
GRÁFICO 5.....	140
GRÁFICO 6.....	141
GRÁFICO 7.....	142
GRÁFICO 8.....	142
GRÁFICO 9.....	143
GRÁFICO 10.....	143
GRÁFICO 11.....	147
GRÁFICO 12.....	148
GRÁFICO 13.....	148
GRÁFICO 14.....	149

GRÁFICO 15.....	149
GRÁFICO 16.....	150
GRÁFICO 17.....	150
GRÁFICO 18.....	151
GRÁFICO 19.....	152
GRÁFICO 20.....	153
GRÁFICO 21.....	156
GRÁFICO 22.....	156
GRÁFICO 23.....	157
GRÁFICO 24.....	157
GRÁFICO 25.....	158
GRÁFICO 26.....	159
GRÁFICO 27.....	159
GRÁFICO 28.....	160
GRÁFICO 29.....	163
GRÁFICO 30.....	163
GRÁFICO 31.....	164
GRÁFICO 32.....	164

Índice de Tablas

TABLA 1. DATOS DE ENTRADA PARA EL CASO BASE, PARTE I.....	133
TABLA 2. DATOS DE ENTRADA PARA EL CASO BASE, PARTE II.....	134
TABLA 3 DATOS DE ENTRADA PARA EL CASO BASE, PARTE III.....	135
TABLA 4. LEY, MINERALOGÍA Y GRANULOMETRÍA PARA EL CASO BASE.....	135
TABLA 5. CONDICIONES DE OPERACIÓN PARA EL CASO BASE.....	136
TABLA 6. DATOS DE GRANULOMETRÍA MODIFICADOS.....	155
TABLA 7. LEY, MINERALOGÍA Y GRANULOMETRÍA PARA LAS PILAS SINTÉTICAS.....	161
TABLA 8. CONDICIONES DE OPERACIÓN PARA LAS PILAS SINTÉTICAS.....	162
TABLA 9. CONCENTRACIÓN DE ÁCIDO Y DE MICROORGANISMOS EN EL RIEGO PARA CADA FASE DE BIOLIXIVIACIÓN.....	162

1. INTRODUCCIÓN

La lixiviación de pilas es una tecnología desarrollada en los procesos mineros, que involucra el apilamiento del mineral chancado en pilas, construidas sobre una capa impermeable que incorpora un sistema de drenaje de solución. En muchos casos el mineral es aglomerado con ácido y/o es regado con solución ácida previo al apilamiento [1].

La solución es irrigada (de forma permanente o discontinua durante el periodo de operación) sobre la superficie de la pila (corona) de tal manera que percole a través del lecho de mineral, donde puede reaccionar con los minerales objetivos (de interés). Luego, los metales disueltos son transportados, por el movimiento del flujo de solución, hacia el fondo o piso de la pila, donde posteriormente son removidos por medio de un sistema de captación y propulsión hacia una piscina de colección o pond, como solución preñada de lixiviación (Pregnant Liquid Solution, PLS). El metal de interés es extraído del PLS a través de alguna tecnología adecuada al proceso aguas abajo (puede usarse extracción por solvente, cementación o adsorción), y la solución pobre o gastada (usualmente referida como refinó) retorna hacia el riego de la corona de la pila, en un circuito cerrado [1].

Esta tecnología ha sido utilizada desde la década de 1960 para la lixiviación ácida de minerales de óxido de cobre, y desde la década de 1970 para la lixiviación de plata y oro con cianuro (cianuración). Una tecnología similar, la lixiviación de botaderos, está basada en los mismos principios que la lixiviación de pilas, pero se compone, comúnmente, de material no chancado run-of-mine (ROM), que usualmente contiene minerales sulfurados, o rípios de pilas de lixiviación o minerales con leyes demasiadas bajas para garantizar otras etapas de procesamiento adicionales [1].

El potencial de la biolixiviación, realizada por microorganismos, fue descubierto primeramente en operaciones de lixiviación de botaderos de sulfuros de cobre [2, 3]. Mientras los organismos involucrados en el proceso ocurrían de forma natural, no era necesaria ninguna intervención externa para mantener su crecimiento. Posteriormente, la biolixiviación de minerales de cobre, como principal método para la extracción del metal, fue introducida de forma inicial en la operación de Lo Aguirre (Chile) a fines de la década de 1980, y luego se extendió en otras numerosas operaciones a partir de la década de 1990 [2]. Siguiendo el mismo procedimiento que la lixiviación convencional de óxidos en pilas, el mineral chancado y aglomerado es apilado y luego irrigado con una solución ácida reciclada. Además, es posible aplicar la inyección de aire a través de tubos ubicados debajo de la capa colectora de solución (piso de la pila) para asegurar un suministro constante de oxígeno y dióxido de carbono hacia el interior del lecho. En algunos casos, se practica la inoculación y se mejora el ambiente microbiano al adicionar nutrientes a la solución de entrada (riego), pero en general, en las pilas de biolixiviación, el crecimiento de microorganismos se desarrolla de forma natural con muy poca intervención externa [4].

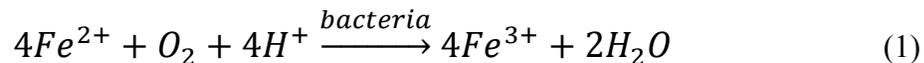
La biolixiviación consiste de la conversión de un metal insoluble (usualmente un sulfuro metálico) a una forma soluble (usualmente el sulfato del metal), acompañada por la oxidación biológica y procesos de formación de complejos [5]. Industrialmente esta tecnología es practicada en dos aplicaciones principales: la disolución de piritita y/o arsenopiritita en minerales refractarios de oro para liberar el oro cianurable, y la extracción de cobre desde minerales sulfurados de cobre. La disolución biológica de minerales de sulfuros de cobre también puede ocurrir en botaderos, aunque la escasez de fuentes de aireación artificial tiende a limitar la extensión de este fenómeno [1].

La inoculación activa con bacteria no es una práctica común en operaciones industriales de pilas y botaderos, pero ocurre usualmente a través del proceso de aglomeración, estando la bacteria disuelta en el refino, o alternativamente, la población bacteriana comienza a crecer de forma natural en el lecho de mineral después de algún tiempo. En la práctica, el suministro de nutrientes para los microorganismos es muy poca o nula (excepto en reactores agitados, en los cuales se agregan nutrientes constantemente) [1].

Los microorganismos que han sido identificados en la biolixiviación pueden clasificarse en mesófilos (operan en un rango de temperatura de 15 a 30 °C), termófilos (operan a 40-60 °C) y termófilos extremos (operan a 50-90 °C). Además estos microorganismos son acidófilos, es decir, crecen en soluciones ácidas, con pH de 1,4 a 3 [6, 7].

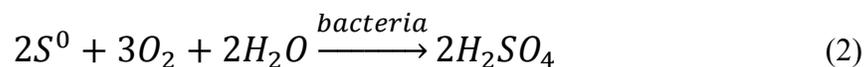
La caracterización de la ecología microbiana en pilas de sulfuros de cobre ha revelado la presencia de *Acidithiobacillus ferrooxidans*, *Acidithiobacillus thiooxidans*, *Leptospirillum*, *Acidithiobacillus caldus*, *Sulfobacillus-like*, como también ciertos tipos de arqueas, los cuales pertenecen al grupo de microorganismos conocidos como autótrofos quimiosintéticos. Los primeros 3 microorganismos antes mencionados son mesófilos y los dos siguientes son termófilos moderados [6, 7, 8, 9]. Los organismos autótrofos obtienen todos los nutrientes para su crecimiento desde compuestos inorgánicos, y los tipos quimiosintéticos obtienen energía a través de la oxidación de compuestos inorgánicos [7].

El principal mecanismo de biolixiviación es la oxidación del ion ferroso a ion férrico (con la concomitante reducción de oxígeno), la cual es utilizada como fuente de energía metabólica por estos microorganismos oxidantes [6, 7, 8].



El ion férrico, a su vez, efectúa la disolución oxidativa de los minerales sulfurados. El oxígeno requerido en la reacción de bio-oxidación de la ecuación (1) proviene del flujo de gas aireado a través de la pila. La reacción de la ecuación (1) también se denomina la reacción catalítica bacteriana. La oxidación de ferroso por la ecuación (1) incrementa la tasa de reacción del agente oxidante por un factor de 10^4 , en comparación a la oxidación directa de férrico sin la presencia de las bacterias [7, 10].

El azufre elemental producido por las reacciones de lixiviación de los minerales sulfurados también puede ser oxidado por microorganismos thiooxidantes, tales como el *A. thiooxidans* y *Sulfobacillus-like*, generando ácido [7, 8].



Los microorganismos oxidantes de hierro y azufre juegan un rol preponderante en la regeneración del ion férrico y ácido en las operaciones de biolixiviación en pilas, produciendo in situ los reactivos necesarios para la oxidación de los minerales.

En la literatura se han propuesto dos mecanismos para la oxidación bacteriana de minerales en una pila de biolixiviación: los mecanismos directos y los indirectos. En los mecanismos directos el mineral es lixiviado por algún agente biológico, en otras palabras, los microorganismos obtienen electrones directamente desde el mineral. Las bacterias están adheridas a las partículas, provocando una interacción muy próxima con el mineral sulfurado. Actualmente, es generalmente aceptado que el mecanismo directo no existe para la oxidación de los minerales sulfurados de metales bases [11], aunque puede existir para la oxidación de azufre elemental. En el mecanismo indirecto, los

minerales son lixiviados únicamente por iones férricos; los microorganismos participan en la oxidación de los iones ferrosos, formados en los procesos de lixiviación de los minerales, a iones férricos (función de re-oxidación de ion ferroso a ion férrico). Este último mecanismo se sub-divide en los mecanismos de contacto y de no contacto. El mecanismo de no contacto abarca la oxidación de iones férricos en solución por microorganismos planctónicos. El mecanismo de contacto considera que la mayoría de los microorganismos se adhieren en la superficie de los minerales sulfurados, y por medio de iones férricos acomplejados, generados en su capa de sustancias poliméricas extracelulares, ellos comienzan a degradar los minerales sulfurados [6].

Si bien la literatura relacionada a la cinética de biolixiviación es extensiva, gran parte del trabajo se ha enfocado en los procesos de lixiviación en estanques agitados, mantenidos bajo condiciones de operación constantes. Por el contrario, en la lixiviación de pilas, muchos parámetros, tales como la temperatura, pH, y oxígeno y dióxido de carbono disponibles, no han sido bien controlados y pueden de hecho limitar la bio-oxidación efectiva del mineral. Dentro de los estudios de los fundamentos de los procesos de biolixiviación, se ha desarrollado muy poco respecto a la determinación de los parámetros cinéticos de oxidación en las condiciones típicas de lixiviación en pilas [12].

1.1. Descripción de los Principales Fenómenos que Ocurren en la Biolixiviación de Pilas

Aunque la lixiviación en pilas parece ser conceptualmente un proceso muy simple, los sub-procesos que toman lugar al interior del lecho mineral, mientras la solución escurre a través de éste, son bastante complejos y sus interacciones todavía no son comprendidas completamente. Los procesos pueden clasificarse según la escala de acción sobre el sistema, distinguiéndose la macro-escala, la meso-escala y la micro-escala [13]. En la Figura 1 se aprecian los diferentes niveles de análisis de los fenómenos que ocurren en la biolixiviación de pilas.

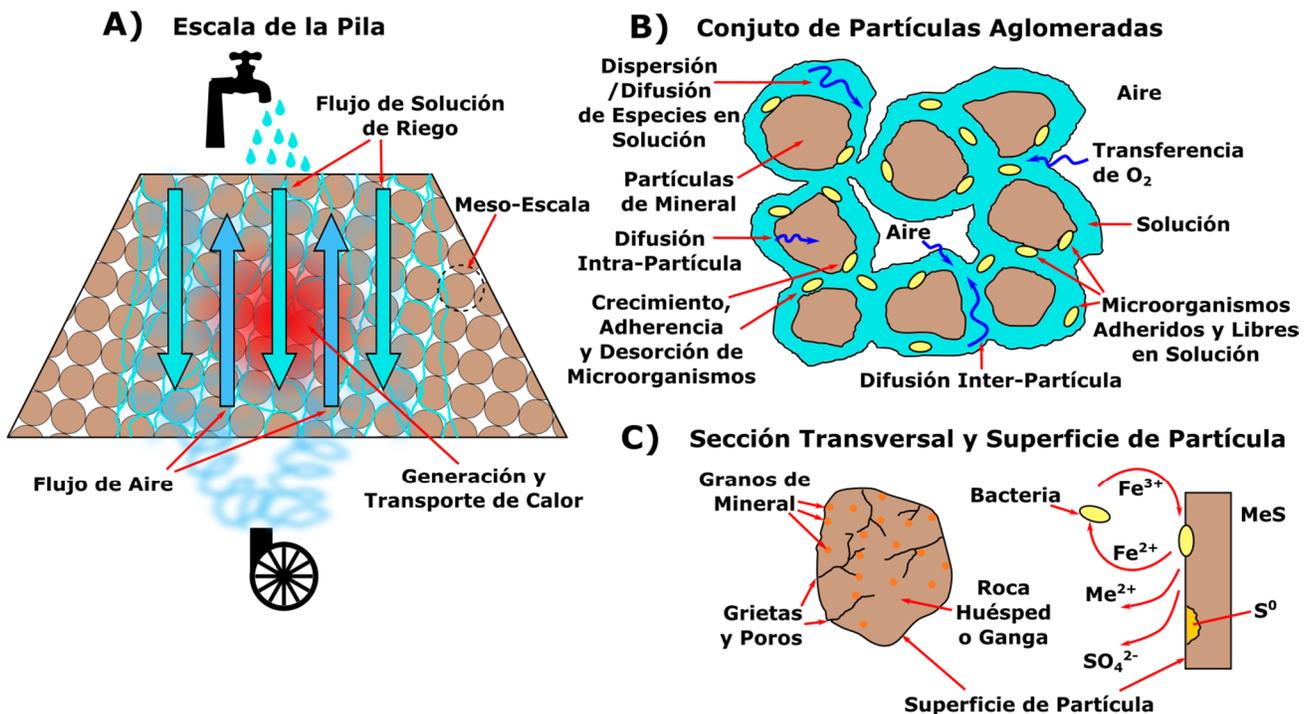


Figura 1. Representación esquemática de los diferentes fenómenos que ocurren en una pila de biolixiviación.

1.1.1. Fenómenos de la Macro-Escala

En la escala global de la pila, la lixiviación es gobernada principalmente por el transporte de masa y de energía que ocurre hacia el interior, a través y hacia el exterior de la estructura del lecho particulado. Específicamente, los sub-procesos que ocurren en esta escala son el transporte de flujo de líquido (solución), el transporte de flujo de calor y el transporte de flujo de gas (aire) [1, 6].

En lechos empacados no saturados de partículas gruesas, la solución fluye a través de caminos tortuosos generados por el espacio de poros y los intersticios creados entre las partículas sólidas. La estructura de lecho empacado de partículas influye fuertemente en el desempeño de la pila, en términos de conducción y entrega de reactivos, y remoción de productos desde los sitios de reacción situados al interior de las partículas de mineral.

El calor de reacción, el cual es significativo en la lixiviación de sulfuros, es transportado a través de la pila en sentido descendente, como calor sensible con el flujo de la solución, y también en sentido ascendente, como calor latente con el flujo de aire húmedo. Dependiendo de las tasas de flujo de aire y de solución, en las pilas se pueden establecer ciertos perfiles de temperatura, y la manipulación juiciosa de estas variables puede incluso permitir un grado de control en la operación.

El transporte de gas es importante para el suministro de oxígeno al interior de la pila, el cual a su vez es crucial en las reacciones de oxidación que ocurren en el sistema. El transporte de aire es una función de la permeabilidad de la pila y la saturación de líquido, la temperatura de la pila, el consumo de oxígeno y la producción de vapor de agua [14]. En pilas sin aireación forzada (es decir, que operan bajo un régimen de convección natural en el flujo de aire), la disponibilidad de oxígeno se ve limitada, y los patrones de distribución de este componente son complejos. La convección natural es típicamente el único medio de transporte de aire en botaderos. La convección natural en botaderos o en pilas se debe a variaciones de la densidad del gas, causada por cambios de temperatura, consumo de oxígeno y humidificación [6].

1.1.2. Fenómenos de la Meso-Escala

La meso-escala (nivel intermedio), engloba los fenómenos desarrollados en un grupo de partículas. En este sistema, tres procesos o grupos de procesos contribuyen a la cinética global de lixiviación: la transferencia de especies entre las fases líquida y gaseosa, la actividad bacteriana y la dispersión/difusión de especies en solución [1].

La captación de especies contenidas en el gas (oxígeno y dióxido de carbono) hacia la fase líquida es un paso simple de transferencia de masa, donde su velocidad está determinada principalmente por la temperatura, pero que requiere de la medición de un coeficiente de transferencia de masa específico del sistema.

La actividad bacteriana, propagación de especies y oxidación son los procesos que abarcan las interacciones complejas de diferentes tipos de microorganismos presentes en la fase líquida y sobre la superficie del mineral. Incluye el comportamiento de crecimiento, adherencia y desorción de cada tipo de microorganismo (cepa) en función de la temperatura, el flujo de líquido y la concentración de constituyentes disueltos (ácido, ion ferroso y férrico, oxígeno, dióxido de carbono como fuente de carbón, etc.), y cualquier tipo de sinergias entre éstos y las reacciones de oxidación de hierro ($\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{2+}$) y azufre concomitantes.

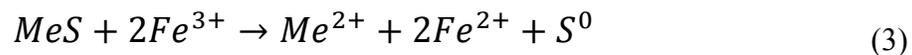
La dispersión/difusión de especies en solución comprende los procesos de difusión intra- e inter-partícula. La difusión es el modo principal de transporte de los constituyentes disueltos desde y hacia la solución que se mueve entre los espacios de poros creados por las partículas y entre las grietas y fisuras al interior de las partículas. El efecto de la difusión de poro en la cinética global de la biolixiviación es determinada por el largo del camino de difusión, el cual puede ser significativo para sistemas con una pobre distribución de solución (pilas con baja permeabilidad y/o que presentan secciones estancos en el lecho).

1.1.3. Fenómenos de la Micro-Escala

Al nivel de la partícula de mineral (o conjunto de granos de mineral), los efectos topológicos presentan otro grado de complejidad. Los efectos topológicos se refieren a la forma en la cual los granos de mineral (o más precisamente, sus superficies) son dispuestos en una sola partícula, y como éstos son distribuidos a través de los diferentes tamaños de partículas. Los granos de mineral pueden ocurrir ya sea como granos libres, como puntos altamente localizados sobre la superficie de la partícula o como bandas de granos que se dispersan en una matriz inerte. La distribución de granos y su accesibilidad al interior de las partículas determinan directamente el grado de lixivabilidad del mineral de interés. Además, la mineralogía de la matriz de ganga es relevante, dado que puede interferir con la lixivación del mineral y los diversos fenómenos biológicos involucrados [1, 14].

Considerando el nivel de un único grano de mineral, la lixivación es gobernada por las interacciones químicas y electroquímicas en la superficie del grano. Los minerales sulfurados generalmente se lixivian por la acción oxidativa de los iones férricos en solución, y la cinética de reacción es una función, fundamentalmente, de la temperatura y de la concentración del ion férrico y, en algunos casos, del ion ferroso.

La reacción de lixivación paradigmática en la biolixiviación de sulfuros, es la oxidación de un sulfuro metálico (MeS) por iones férricos (ver Figura 1, apartado C)) [6]:



Los principales mecanismos de tales reacciones han sido bien comprendidos (excepto tal vez, los mecanismos que explican las reacciones de la calcopirita), aunque las mediciones de los valores exactos de los parámetros críticos para cada caso específico permanecen sin ser realizadas. Pueden originarse complicaciones adicionales cuando diferentes minerales se acoplan galvánicamente, como se da en el caso de la pirita, presente en muchos minerales sulfurados de metales base, con los sulfuros de cobre [1]. La formación de cuplas galvánicas entre la pirita y la calcopirita en contacto, en el curso de la biolixiviación de minerales de cobre, genera como resultado una pasivación de la pirita y una fuerte corrosión (lixiviación) de la calcopirita (potencial de la pirita superior al de la calcopirita) [15].

1.2. Modelamiento de la Biolixiviación

Los fenómenos descritos anteriormente tienden a interactuar entre ellos mismos en patrones, que en la mayoría de los casos, son demasiados complejos para entender de forma intuitiva. Cualquiera de estos sub-procesos puede convertirse en el paso controlante de la cinética global bajo ciertas circunstancias, y el control puede cambiar desde un dominio a otro en el curso de un escenario particular de lixivación. Con tantos niveles de complejidad, el diagnóstico de los efectos de ciertas variables en el desempeño global de la pila se vuelve virtualmente imposible o muy costoso sin una herramienta de modelamiento sofisticado [1, 14].

Los modelos son utilizados como herramientas de diseño y evaluación económica, y también para interpretar nuevos resultados obtenidos, en planta o en laboratorio, al modificar parámetros de operación y características específicas del sistema (mineral, permeabilidad, tipo de solución, etc.).

Durante los últimos años los modelos de lixiviación de pilas (y/o de botaderos) se han venido desarrollando a medida que la tecnología disponible para el procesamiento de minerales ha ido evolucionando; primero se concentraron los esfuerzos en modelar la lixiviación ácida, luego se enfocaron en la lixiviación con cianuro, y finalmente en la biolixiviación [1]. La complejidad de estos modelos ha ido incrementándose continuamente. Algunos modelos desarrollados toman en consideración todos los sub-procesos identificados y las complejidades del sistema descritas anteriormente, mientras otros se enfocan en caracterizar un conjunto acotado de fenómenos, asumiendo escenarios de comportamiento en los otros sub-procesos.

Se han desarrollado pocos modelos comerciales, pero el más destacado es el modelo HeapSim [16], el cual ha sido aplicado para la modelación de biolixiviación de minerales sulfurados de cobre y hierro [6, 13, 14].

Los modelos son usualmente calibrados utilizando datos obtenidos por pruebas de campo realizadas en operaciones de biolixiviación (escala piloto o industrial) o por ensayos de laboratorio en columnas del mineral requerido [1, 17].

En el presente trabajo se realiza el modelamiento fenomenológico de la fluidodinámica de la fase gaseosa y del balance de oxígeno, en una dimensión, al interior de una pila de biolixiviación. Estos modelos son integrados a un modelo general de biolixiviación, desarrollado por la empresa BioSigma.

2. ANTECEDENTES

En el presente capítulo se revisan las características distintivas de algunos modelos de balance de oxígeno y de fluidodinámica de la fase gaseosa en pilas lixiviadas disponibles en la literatura. También se detallan las características del modelo general de biolixiviación desarrollado por BioSigma, y los múltiples modelos que lo integran. Finalmente, se realiza una descripción de los principales conceptos utilizados en la formulación de los modelos de balance de oxígeno y de fluidodinámica de la fase gaseosa.

2.1. Revisión Bibliográfica del Modelamiento del Balance de Oxígeno y de la Fluidodinámica de la Fase Gaseosa

El modelo desarrollado por Neuburg et al. [18] se diseñó para simular el proceso de biolixiviación de un mineral de cobre en columnas de 1,8 m de altura y aprox. 30 cm de diámetro. Consideró la acción de una cepa de *T. ferrooxidans* en la oxidación bacteriana de ferroso. El modelamiento del balance de masa en las fases líquida y gaseosa asumió un comportamiento de flujo-pistón y condiciones de estado pseudo-estacionario en el transporte de especies realizadas por ambos fluidos al interior de la columna. Con esta simplificación los autores consideraron constantes, a lo largo de la columna, el hold up de líquido, el coeficiente de dispersión, coeficiente de difusión, contenido volumétrico de gas y la velocidad superficial del líquido y del aire. Los cambios de la porosidad en el lecho con la tasa de riego, los coeficientes de transferencia de masa según superficie específica del lecho y el hold up de líquido fueron estimados a través de correlaciones empíricas. El coeficiente global de transferencia de oxígeno entre las fases líquida y gaseosa se asume constante en toda la columna y durante todo el tiempo de simulación, y fue estimado por pruebas experimentales. En este modelo se consideraron condiciones isothermas en toda la columna, por lo que no se realizaron balances de calor. El modelo considera que la velocidad de crecimiento máxima de los microorganismos depende de los niveles de oxígeno disuelto en solución a través de un factor, sin embargo no específica como se define este factor. Se utiliza el modelo de núcleo no reaccionado para definir las ecuaciones que describen la tasa de consumo o generación de las especies contenidas en la partícula de mineral.

Sociedad Minera Pudahuel desarrolla un modelo aplicado para su tecnología de lixiviación Thin Layer (T. L.) a principios de la década de 1980 [19, 20, 21, 22]. Este modelo asume dos escenarios en las condiciones hidrodinámicas del sistema: se tiene el fluido de solución que percola a través del lecho (líquido en movimiento, considerado en la macro escala) y una delgada capa de líquido que rodea las partículas aglomeradas (líquido estático, para una meso escala). El modelo utiliza diferentes coeficientes de transferencia de masa para representar los mecanismos de movimiento de cationes y iones entre ambas fases líquidas. Utiliza una ecuación modificada de la ecuación de conservación de masa en una dimensión para explicar el transporte de especies en las fases líquida y gaseosa. Para el modelamiento de la fluidodinámica de la fase líquida usa una ecuación modificada de la ley de Darcy para flujos que atraviesan medios porosos. Este modelo determina la velocidad de la solución para diferentes condiciones de borde del contenido de líquido en el lecho (asume diferentes regímenes de velocidad cuando el contenido de líquido supera el volumen definido por la capa de líquido que rodea las partículas aglomeradas). También considera que la concentración de oxígeno se mantiene constante en la solución, y que se encuentra en exceso en el sistema (no es un factor limitante de la velocidad de lixiviación). El modelo además realiza el balance de energía en el sistema.

Casas et al. [23] desarrollaron un modelo de biolixiviación en pilas y botaderos de dos dimensiones para un mineral de cobre que contiene principalmente calcosina y pirita, y que incorpora el balance de oxígeno en el aire y en el líquido, además de desarrollar un modelo de la fluidodinámica de la fase gaseosa. Casas asumió que el transporte de oxígeno a través del lecho estaba asociado a la convección natural del aire. El modelo es capaz de estimar los campos de velocidad del aire al interior de la pila/botadero y los perfiles de temperatura y concentración de oxígeno. Casas también utilizó la ley de Darcy para calcular la velocidad del flujo de aire. Usó una relación empírica para estimar la permeabilidad relativa gaseosa del lecho con la saturación efectiva del líquido (asume una permeabilidad constante en la pila). Como condiciones de borde impone que en el centro (definido por una línea paralela al eje vertical) y en el piso de la pila/botadero no existen flujos de oxígeno ni de calor; además asume una temperatura y concentración de oxígeno constantes en la corona y en los taludes de la pila/botadero, y que la velocidad del gas es perpendicular a la superficie del lecho. El modelo de Casas no estima el campo de presiones al interior del lecho y no determina un valor del coeficiente global de transferencia de oxígeno entre las fases líquida y gaseosa, ya que supone que la resistencia impuesta por el transporte de oxígeno entre ambas fases es despreciable (disponibilidad instantánea de oxígeno, donde se consideró que la concentración de oxígeno disuelto está en equilibrio con la concentración de oxígeno en el aire, la cual fue calculada por la constante de Henry). Este modelo reportó que el aire fluye al interior de la pila, desde los taludes hacia la corona, bajo condiciones de convección natural.

Dixon et al. [6, 13, 14, 16, 24] desarrollan un modelo comercial de biolixiviación en pilas y columnas, denominado HeapSim. Este es uno de los modelos más completos, que incorpora una gran cantidad de fenómenos presentes en el proceso de biolixiviación. A diferencia de otros modelos, HeapSim incorpora el coeficiente global de transferencia de oxígeno entre las fases líquida y gaseosa. Al igual que el modelo desarrollado por los autores [19, 20, 21, 22], HeapSim separa la fase líquida del sistema en la solución estancada y la solución en movimiento. Usa este enfoque para modelar el transporte de especies (excepto el oxígeno) en la fase líquida. El modelo asume que el oxígeno, cuando es adsorbido desde el aire hacia la solución, no sigue la ruta de transporte entre las fases de líquido en movimiento y líquido estancado. En cambio, se transfiere directamente desde el gas hacia la fase de solución estancada, donde es consumido por los microorganismos. La tasa de transferencia de oxígeno se modela utilizando el coeficiente global de transferencia, el cual a su vez es estimado de forma empírica a través de diversas fuentes. El valor del coeficiente global de transferencia estimado varía en un rango bastante amplio, con un alto porcentaje de error. Para minimizar la dispersión del valor del coeficiente de transferencia, este parámetro es ajustado en el modelo con datos experimentales. No se realiza la determinación de la variación del coeficiente global de transferencia con el hold up de líquido (cálculo del área interfacial), tasa de riego, o tamaño de partícula. También los autores asumen un estado pseudo estacionario en el balance de oxígeno en la fase líquida (los autores argumentan que esto sucede cuando la ley o reactividad de los minerales sulfurados es alta), de tal forma que la transferencia de masa de oxígeno entre ambas fases es equivalente a las tasas de oxidación biológica del ferroso y azufre elemental, por lo que no hay una acumulación de oxígeno en el sistema. Para el balance de oxígeno en la fase gaseosa los autores asumen que el consumo de oxígeno produce una variación despreciable en la densidad del aire seco (se establece la aproximación de Boussinesq), que la difusión del oxígeno es despreciable en comparación al componente de advección del fluido, y que no hay una variación de la concentración de oxígeno en el aire respecto al tiempo (estado estacionario). El modelo también incluye el fenómeno de precipitación de especies de hierro (jarosita) por la hidratación de iones en solución.

Leahy et al. [8, 25] construyeron un modelo de biolixiviación de dos dimensiones, aplicado a pilas de minerales sulfurados de cobre. La formulación de las ecuaciones de este modelo comparte semejanzas con las presentadas por otros autores. El modelo incorpora el balance de energía del sistema y considera la inyección de aire en la pila. El coeficiente global de transferencia de oxígeno también es un dato de entrada y se mantiene constante a lo largo de la pila. El modelamiento de la fluidodinámica de la fase gaseosa, al interior de la pila de biolixiviación, se realiza a través de la ecuación de conservación de movimiento, considerando un espacio reducido para el flujo de aire (definido por en la porosidad) y la resistividad del flujo debido al medio poroso (permeabilidad). También se introduce la fuerza de gravedad (peso del aire) como componente de fuerza que provoca movimiento del fluido. Este modelo considera la acción de microorganismos consumidores de ferroso y de azufre. En las ecuaciones que modelan el balance de masa de oxígeno en la fase líquida y gaseosa no se realizan simplificaciones de los términos de difusión o de advección, por lo que la fuerza de transporte de estos dos fenómenos queda bien representada. El modelo permite estimar las líneas de velocidad del flujo de aire al interior de la pila. Además asume que el coeficiente de difusión del oxígeno en el aire y la densidad del aire se mantienen constantes para cualquier posición al interior de la pila, sin que puedan modificarse por variaciones en la concentración de oxígeno, temperatura o presión.

El modelo desarrollado por Yin et al. [26] también utiliza la ecuación de conservación de movimiento para modelar la fluidodinámica de la fase gaseosa, aunque consideraron solamente el estado estacionario en la resolución de esta ecuación. En este modelo, el coeficiente global de transferencia de masa de oxígeno es un parámetro de entrada constante, que debe ser conocido por el usuario.

De acuerdo a la revisión bibliográfica realizada, el oxígeno es el componente de interés en el modelamiento de la fase gaseosa en pilas y de botaderos, aunque algunos modelos incluyen el transporte de vapor de agua en la fase gaseosa [27]. Si bien el dióxido de carbono también es un sustrato importante para los microorganismos, no se considera en ninguno de los modelos revisados en este trabajo.

2.2. Modelo de Biolixiviación Desarrollado por BioSigma

BioSigma es una empresa filial de CODELCO, dedicada al desarrollo e implementación de soluciones biotecnológicas en la industria minera.

BioSigma ha desarrollado un modelo de biolixiviación de pilas en una dimensión (a lo largo del eje vertical), que es aplicable para minerales sulfurados y oxidados de cobre. Este modelo considera diversos fenómenos que ocurren en una pila de biolixiviación, tales como la fluidodinámica de la fase líquida, el balance de especies en solución, el balance de bacterias libres en solución, actividad bacteriana, reacciones químicas entre la solución y las partículas de mineral, el balance de energía al interior de la pila, precipitación de especies de hierro, y la especiación de iones en solución.

El modelo reconoce diferentes intervalos de tamaños de partículas, y 8 especies mineralógicas: calcosina, covelina, bornita, calcopirita, óxidos de cobre, pirita, ganga que aporta hierro y ganga general. También incorpora la fracción liberada de cobre (que no está ocluida) por especie y por fracción de tamaño como información adicional para la caracterización mineralógica de las partículas a lixiviar. Por simplificación, el modelo agrupa los diversos tipos de óxidos de cobre en una sola especie representativa. Para la ganga, dado que es muy difícil identificar completamente las diferentes especies mineralógicas que la componen, se asume que existen dos tipos: una especie representativa de ganga que aporta iones ferrosos y/o férricos y una ganga genérica que aporta

impurezas. Ambos tipos de ganga son consumidoras de ácido, es decir, reaccionan con el protón H^+ . En las simulaciones realizadas por BioSigma, se considera que la ganga general aporta aluminio como impureza. Este supuesto también es asimilado en este trabajo.

El modelo asume que la pila se compone de partículas de mineral esféricas, y que éstas se distribuyen de forma homogénea (no hay segregación por tamaño). Este último supuesto se basa en que el material de la pila ha sido aglomerado, y que en su construcción, se mantuvo constante la distribución de tamaño de las partículas según el eje vertical. También se consideraron simplificaciones respecto a los microorganismos que actúan en el sistema: las bacterias ferrooxidantes y thiooxidantes son las especies de microorganismos oxidantes que participan de los fenómenos de la biolixiviación, y en el modelo son tomadas en cuenta como los microorganismos consumidores de ferroso (para la primera) y azufre (para la segunda). Esta clasificación no especifica en detalle la familia o género de los microorganismos biolixiviantes, por lo que se pueden agrupar diferentes tipos de especies consumidoras de ferroso o azufre.

El modelo desarrollado por BioSigma también puede simular otros sistemas de lixiviación en lechos de partículas, como columnas y botaderos. Debido que el modelo es en una dimensión, éste entrega excelentes resultados de simulación en columnas (la pérdida de información, causada por la modelación en el eje vertical, no es importante, ya que el espacio modelado es bastante reducido en el plano horizontal). Dado que en los botaderos la segregación de partículas es importante, la precisión del modelo disminuye cuando se simulan estos sistemas.

El modelo se desarrolló en el software matemático Scilab. Este se compone de un programa principal y de programas tributarios, denominados módulos. El programa principal realiza el ingreso de datos y cálculos de variables internas. Desde este programa se invocan las funciones que modelan los diferentes fenómenos de la biolixiviación, es decir, se ejecutan los módulos ingresando las variables definidas en el entorno del programa principal. Dado que los módulos se escriben como funciones en el código, los resultados del modelamiento, realizado en cada uno de ellos, son recuperados en el dominio del programa principal. El programa principal se encarga de crear, recuperar, modificar y eliminar los diferentes vectores y matrices involucrados en el cálculo, y simplificar la asociación de diferentes variables entre los módulos de modelamiento, generando un procedimiento eficiente de cómputo de los algoritmos. Las variables de salidas son guardadas por archivos de respaldo, usados para visualizar los gráficos (usando la interfaz gráfica o ejecutando un programa externo).

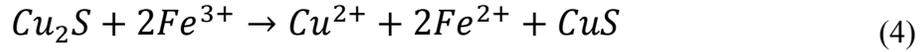
Se define el término “modelo general” para señalar el conjunto de programas (programa principal más los módulos de modelamiento y programas anexos) requeridos para realizar la simulación del proceso de biolixiviación.

El modelo de fluidodinámica de la fase líquida determina el flujo de solución que percola en un área de riego definido en la pila (el área de riego, o extensión en el plano horizontal de la dimensión vertical modelada, es un dato de entrada). Además calcula el hold up de líquido que existe a lo largo del eje vertical.

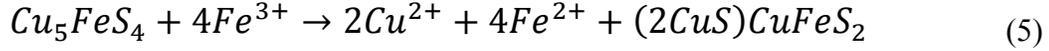
Los modelos de advección y dispersión de especies químicas y bacterias libres en solución determinan la variación de concentración de estas especies en el líquido, según la posición vertical, debido al movimiento de la solución lixivante al interior del lecho.

En el modelo general de BioSigma se han considerado los siguientes mecanismos de reacción entre especies mineralógicas y especies iónicas lixiviantes.

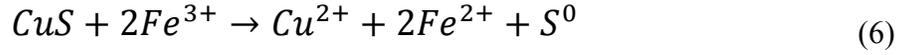
Lixiviación férrica de calcosina (Cu_2S):



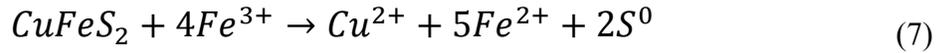
Lixiviación férrica de la bornita (Cu_5FeS_4):



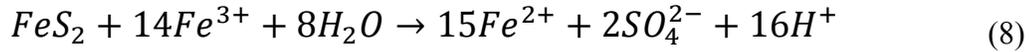
Lixiviación férrica de la covelina (CuS):



Lixiviación férrica de la calcopirita ($CuFeS_2$):



Lixiviación férrica de la pirita (FeS_2):

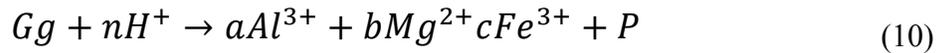


Lixiviación ácida de una especie oxidada de cobre (por simplificación se asume la forma genérica CuO):



En esta última reacción, O representa oxígeno u otros elementos. A su vez, P representa uno o más productos de la reacción.

Lixiviación ácida de una especie de ganga genérica (Gg):



Ganga que aporta ferroso y ganga que aporta impureza

En donde:

$$n = 3a + 2b + 3c \quad (11)$$

Gg representa una especie cualquiera de ganga, y P representa uno o más productos de la reacción.

Para modelar las reacciones de lixiviación de las especies mineralógicas se consideró el Modelo de Núcleo No Reaccionado (MNNR), con control mixto en los fenómenos de reacción y difusión. Según este modelo, la reacción procede de tal manera que la especie lixivante, al ir avanzando hacia el interior de la partícula, deja atrás una zona de mineral totalmente reaccionado, mientras que al interior existe un núcleo de mineral que no ha reaccionado [28].

Este modelo también supone que las cinéticas de lixiviación de los sulfuros de cobre mediante el ion férrico son diferentes, según el orden de extracción del átomo de cobre que compone el cristal del mineral. Así, existen diferentes etapas de oxidación de un mineral, cada una de ellas caracterizada por una cinética de extracción, que puede verse representada por la extracción individual de cada átomo de cobre que compone la estructura cristalina del mineral. Por ejemplo, para el caso de la oxidación de calcosina mediante Fe^{3+} , el primer átomo de cobre se extrae con

una cinética rápida, en comparación con el segundo átomo, el cual tiene una velocidad de extracción más lenta.

Teniendo en cuenta lo anterior, el modelo incorpora una simplificación en el tratamiento de las cinéticas de reacción de los sulfuros, agrupando las cinéticas de los minerales según su velocidad de reacción, independiente de la especie. Como resultado de esto último, se engloban 3 cinéticas para los sulfuros y una para la reacción de los óxidos de cobre, además de considerar las cinéticas para la oxidación de la pirita y las reacciones de ácido con la ganga que aporta fierro y con la ganga que aporta impurezas:

- Extracción con Fe^{3+} de Cu de cinética rápida: Cu_2S (1/2), Cu_5FeS_4 (2/5).
- Extracción con Fe^{3+} de Cu de cinética lenta: CuS , Cu_2S (1/2), Cu_5FeS_4 (2/5).
- Extracción con Fe^{3+} de Cu calcopiríticos: CuFeS_2 , Cu_5FeS_4 (1/5).
- Extracción con Fe^{3+} de Fe^{2+} de pirita.
- Extracción con ácido de óxidos de Cu.
- Disolución con ácido de ganga que aporta $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$.
- Disolución con ácido de ganga que aporta alguna impureza (Al).

Los valores en paréntesis indican el número de átomos de cobre de la especie asociados a esa cinética. En la tercera categoría, los cobres calcopiríticos denotan al último átomo de cobre extraído de la bornita y al átomo de cobre que se extrae de la calcopirita, los cuales tienen una cinética de lixiviación extremadamente lenta. De la clasificación anterior, se desprende que se requieren 7 constantes cinéticas y ordenes de reacción diferentes para poder describir las reacciones químicas entre el mineral y el férrico/ácido (proton) en el modelo.

Para mejorar la capacidad predictiva del modelo, se introducen factores que multiplican las constantes cinéticas de las especies secundarias, corrigiendo en parte el sesgo producido al agrupar las velocidades de extracción de los átomos de cobre de diferentes especies mineralógicas (permite representar de mejor manera la cinética de las diferentes sub-etapas de lixiviación de las especies).

A continuación se presentan las principales ecuaciones usadas para modelar la tasa de generación o consumo de especies producto de las reacciones entre las partículas de mineral y la solución lixivante.

$$\mathcal{R}_{i,j} = \pm 4\pi r_{n,j}^2 \sigma_j N_p \rho_j \frac{dr_{n,j}}{dt} \quad (12)$$

$$v_j = k_j C_S^{m_j} \quad (13)$$

$$\frac{dr_{n,j}}{dt} = - \frac{k_j D_{e,Fe} r_{0,j} C_0 a - G_j k_j^2 \sigma_j r_{n,j} (r_{0,j} - r_{n,j}) a b}{D_{e,Fe} r_{0,j} \rho_{min} + \rho_{min} G_j k_j \sigma_j r_{n,j} (r_{0,j} - r_{n,j}) a} - \frac{k_j b}{\rho_{min}} \quad (14)$$

Con:

$$a = m_j C_S^{m_j-1} \quad (15)$$

$$b = (1 - m_j)C_S^{m_j} \quad (16)$$

Donde:

$\mathcal{R}_{i,j}$: Tasa de generación o consumo de la especie iónica i (H^+ , Cu^{2+} , Fe^{2+} o Fe^{3+}), debido a la reacción de la especie mineralógica j , por unidad de volumen de lecho, [$kg/(d \cdot m^3 \text{ lecho})$].

N_p : Número de partículas de mineral por unidad de volumen de lecho [$1 / m^3 \text{ lecho}$].

ρ_j : Densidad de la especie mineralógica j (masa del metal de interés en la especie mineralógica j , dividido por el volumen de partícula en que está contenida dicha masa), [kg/m^3].

v_j : Tasa de disolución del metal de interés (cobre o hierro) desde la especie mineralógica j , [$kg/(m^2 \cdot d)$].

k_j : Constante cinética de reacción química de la especie mineralógica j , [m/d].

C_S : Concentración de la especie lixivante (férrico o ácido) en la superficie del núcleo no reaccionado, [kg/m^3].

m_j : Orden de reacción de la especie mineralógica j , adimensional.

$r_{n,j}$: Radio del núcleo no reaccionado de la especie mineralógica j , [m].

$r_{0,j}$: Radio de la partícula de mineral de la especie mineralógica j (radio inicial del núcleo no reaccionado), [m].

$D_{e,l}$: Coeficiente de difusión efectiva de los iones férricos o H^+ (agentes lixiviantes) en la fase líquida, [m^2/d].

C_0 : Concentración de la especie lixivante (férrico o ácido) fuera de la partícula (en la solución), [kg/m^3].

G_j : Grado o ley del metal principal (cobre, hierro o impureza –aluminio–) en la especie mineralógica j , [$kg \text{ metal} / kg \text{ partícula}$].

σ_j : Coeficiente estequiométrico de la especie mineralógica j , adimensional.

ρ_{min} : Densidad del mineral, [kg/m^3].

La variación de la cinética de las reacciones químicas con la temperatura se modeló mediante la ecuación de Arrhenius [8, 24, 28, 29]:

$$k_j = k_{0,j} \exp \left(-\frac{E_{A,j}}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right) \right) \quad (17)$$

Donde:

$k_{0,j}$: Constante cinética intrínseca de reacción química de la especie mineralógica j (medida a una temperatura de referencia T_0), [m/d].

$E_{A,j}$: Energía de activación de la especie mineralógica j , [J/mol].

R : Constante de los gases ideales, 8,3145 [J/(K·mol)].

T_0 : Temperatura de referencia, [K].

T : Temperatura del sistema, [K].

Al resolver la ecuación (14) se obtiene la conversión o grado de avance de la reacción en la especie mineralógica j , definida como:

$$\alpha_j = 1 - \left(\frac{r_{n,j}}{r_{0,j}} \right)^3 \quad (18)$$

Donde:

α_j : Conversión de la especie mineralógica j , adimensional.

El modelo de crecimiento, adherencia y desorción de bacterias realiza el balance de microorganismos adheridos en los sólidos, considerando que el crecimiento de la población de bacterias solo se produce cuando éstas están adheridas a los sólidos. El modelo supone que las bacterias, además de oxígeno, ferroso y azufre, consumen amonio para incrementar su masa celular. Por otro lado, se considera que el dióxido de carbono (otro nutriente básico para los microorganismos, usado como fuente de carbono [29]) no limita la cinética global de la biolixiviación, es decir, en el sistema su concentración se encuentra en exceso. Este modelo, en conjunto con el modelo de advección y dispersión, determina la concentración de bacterias adheridas y en solución (según la clasificación dada por el modelo general) en cada posición al interior de la pila.

Para calcular la temperatura del sistema se utiliza el modelo de balance de energía, el cual engloba los fenómenos de generación de calor por reacción química (tales como, la reacción de oxidación de azufre y de pirita), el transporte de calor por conducción, el transporte de calor por el flujo de la solución, el transporte de calor por el aire y el vapor de agua, y los efectos de borde (evaporación, radiación solar y viento que afectan a la corona de la pila y a los taludes).

El modelo de precipitación de especies de hierro calcula la cantidad de jarosita de amonio precipitada según el pH y la concentración de férrico, recalculando las concentraciones de protón, férrico, sulfato y amonio en la solución. Este modelo también puede ser modificado para estimar la precipitación de otros hidróxidos de hierro.

El modelo de especiación determina el equilibrio químico de la solución. Este modelo calcula la formación de complejos acuosos y las concentraciones actualizadas de las diferentes especies en la fase líquida.

Además de realizar simulaciones, el modelo general presenta diferentes funcionalidades: incorpora un módulo de calibración automática (que permite ajustar las variables de entrada teóricas para mejorar las curvas de simulación respecto a un set de datos experimentales), genera gráficos dinámicos (los datos principales modelados son plotados en el tiempo real de simulación, para cada intervalo de tiempo de simulación), y visualiza las variables de salida calculadas mediante gráficos en dos y tres dimensiones (2D y 3D).

BioSigma requiere de la construcción, y posterior integración, de módulos que modelen el balance de oxígeno y la fluidodinámica de la fase gaseosa, para mejorar la capacidad predictiva de su modelo general de biolixiviación.

En la Figura 2 se muestra el esquema de orden de cómputo de los módulos de modelamiento en el programa principal. Este esquema también expone los diversos fenómenos que constituyen el modelo general de biolixiviación. Usando este contexto, se indican los nuevos módulos de modelamiento desarrollados en este trabajo y su secuencia de ejecución en el grupo de programas ya desarrollado por BioSigma.

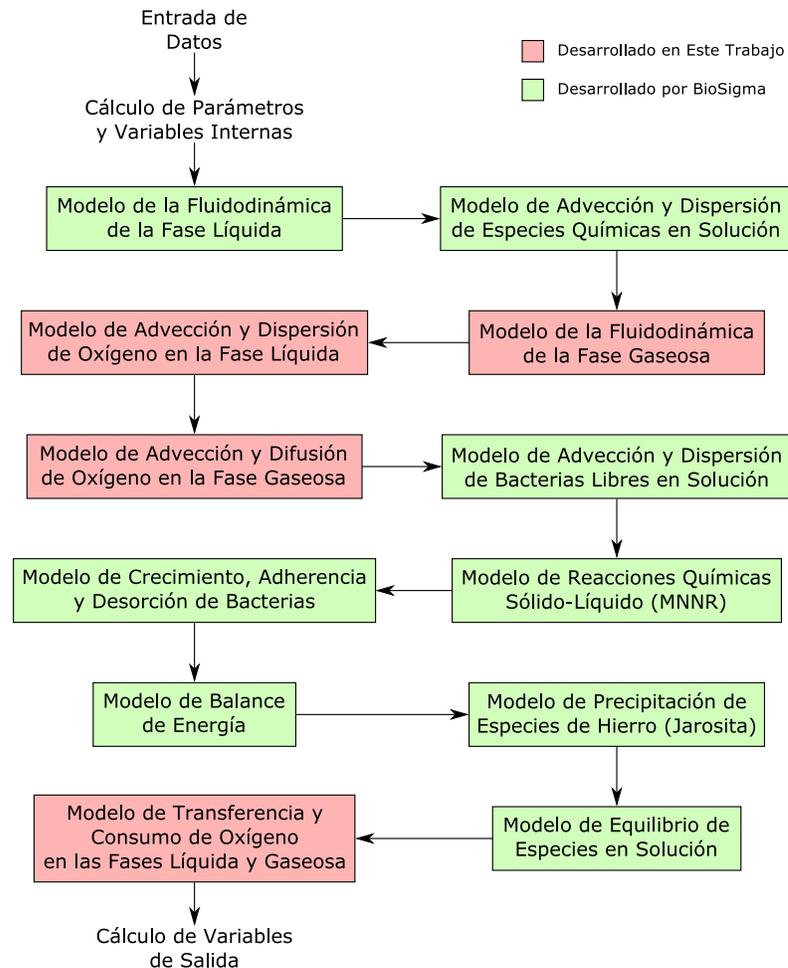


Figura 2. Orden de cálculo computacional de los diferentes módulos de modelamiento que integran el modelo general de biolixiviación de BioSigma. El esquema representa la secuencia de ejecución de los programas de modelamiento en el código principal, para cada tiempo discreto simulado.

2.3. Antecedentes Generales

En esta sección se detallan los conceptos y términos esenciales en la formulación de los modelos de los sub-procesos de biolixiviación considerados.

2.3.1. Ecuación General de Conservación de Masa

La concentración de una especie disuelta en un fluido que penetra un medio poroso se puede estimar por medio del balance de la cantidad de especie en un volumen de control infinitesimal fijo en el espacio, que es atravesado por el fluido (de fase líquida o gaseosa) [30, 31].

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_i m_i) + \text{div}(\varepsilon_i v_i m_i + J_{m,i}) = R_i \quad (19)$$

Donde:

m_i : Concentración de la especie en la fase i , [kg/m³].

ε_i : Fracción volumétrica de la fase i en el lecho, [m³ fase i / m³ lecho].

v_i : Velocidad intersticial del fluido de fase i , [m/d].

$J_{m,i}$: Flujo de difusión de la especie en la fase i , [kg/(m²·d)].

R_i : Tasa de generación/consumo de la especie en la fase i , [kg/(m³·d)].

La ecuación anterior se define como la ecuación general de conservación de masa o ecuación general de advección y difusión para una especie m_i cualquiera, escrita en notación vectorial [18, 23, 25, 30].

En la ecuación (19) el primer término denota la tasa de cambio de la masa de la especie por unidad de volumen a lo largo del tiempo. El término $\varepsilon_i v_i m_i$ es el flujo advectivo de las especies, es decir, el transporte de solutos generado por el campo de flujo general $\varepsilon_i v_i$. El flujo de difusión, $J_{m,i}$, representa el movimiento de las especies disueltas debido a la existencia de gradientes de concentración. El término a la derecha de la igualdad se denomina también el término fuente, e indica la generación o consumo de las especies causada por reacciones químicas u otros fenómenos.

Dado que el fluido atraviesa un medio disperso de partículas, la velocidad del líquido o del gas varía según los espacios dejados por las partículas sólidas, es decir, los intersticios. Lo anterior implica que la fracción de líquido o gas en una sección definida del lecho poroso afecta la velocidad local del fluido mientras escurre en la dirección preferencial vertical.

Si se expresa el flujo difusivo mediante la primera ley de Fick de difusión, se tiene entonces [28, 30, 31]:

$$J_{m,i} = -\varepsilon_i D_{m,i} \text{grad}(m_i) \quad (20)$$

Donde:

$D_{m,i}$: Coeficiente de difusión representativa de la especie m en la fase i , [m²/d].

En la ecuación (20) se expresa que el coeficiente de difusión es “representativo”. Esto implica que la ecuación (20) tiene validez para diferentes acepciones del concepto de difusión.

Al insertar la ecuación (20) en la ecuación (19), se obtiene:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_i m_i) = \text{div}(\varepsilon_i D_{m,i} \text{grad}(m_i)) - \text{div}(\varepsilon_i v_i m_i) + R_i \quad (21)$$

Al escribir la ecuación (21) en la forma tensorial-cartesiana e imponer el balance de masa de las especies en una dimensión, orientada en la dirección vertical (denotada con la coordenada espacial Z), se tiene:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_i m_i) = \frac{\partial}{\partial z} \left(\varepsilon_i D_{m,i} \frac{\partial m_i}{\partial z} \right) - \frac{\partial}{\partial z} (\varepsilon_i v_i m_i) + R_i \quad (22)$$

La ecuación (22) es la expresión final de la versión adaptada de la ecuación general de conservación de masa. Esta ecuación, definida en el formato de una dimensión, es usada como la ecuación principal de referencia para modelar la conservación de las especies iónicas, los microorganismos y el oxígeno disuelto en la fase líquida, además de modelar la concentración del oxígeno en la fase gaseosa.

La representación conceptual de la ecuación general de conservación de masa permite relacionar de mejor forma los fenómenos descritos a cada término presente en la ecuación (22).

$$\text{Acumulación} = \text{Difusión (Dispersión)} + \text{Advección} + \text{Reacción}$$

El término de reacción, en el caso de especies iónicas, depende de las reacciones entre el mineral de la pila y los agentes oxidantes que contiene la solución que atraviesa el lecho. Lo anterior implica que se pueden consumir especies (tales como Fe^{3+} y H^+) o generar especies (tales como Fe^{2+} y Cu^{2+}). En el caso de los microorganismos, el término de reacción depende de los fenómenos de crecimiento, adherencia y desorción del mineral. Por último, en el caso del oxígeno disuelto, el término de reacción depende de la transferencia de oxígeno desde la fase gaseosa a la fase líquida, y del consumo de oxígeno por los microorganismos.

2.3.2. Ecuación de Continuidad

Al aplicar la ley de conservación de la materia para un fluido que atraviesa un volumen de control infinitesimal fijo en el espacio, se obtiene [30, 31, 32]:

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \text{div}(\rho_i v_i) = 0 \quad (23)$$

Donde:

ρ_i : Densidad del fluido de fase i , [kg/m^3].

Al realizar el balance de la cantidad de volumen del fluido en una sección definida del medio multifásico (sistema poroso o lecho), se genera otra versión de la ecuación de continuidad:

$$\frac{\partial \varepsilon_i}{\partial t} + \text{div}(\varepsilon_i v_i) = 0 \quad (24)$$

Al escribir las ecuaciones (23) y (24) en la forma tensorial-cartesiana e imponer el balance de masa del fluido de fase i en una dimensión, orientada en la dirección vertical (denotada con la coordenada espacial z), se tiene:

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} (\rho_i v_i) = 0 \quad (25)$$

$$\frac{\partial \varepsilon_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} (\varepsilon_i v_i) = 0 \quad (26)$$

Además de satisfacer la ecuación general de conservación de masa, el campo de flujo de un fluido de fase i debe satisfacer la restricción adicional que impone la ecuación de continuidad [30, 31, 32, 33]. De este modo, la velocidad y la densidad (o fracción volumétrica respecto al lecho) del fluido están relacionadas en una ecuación complementaria, lo que incrementa la versatilidad de la ecuación (22) para encontrar una solución numérica en sistemas con un número acotado de condiciones iniciales conocidas.

2.3.3. Advección

Se denomina advección al movimiento principal que tienen las especies disueltas en solución, como consecuencia del movimiento del fluido. En el caso del sistema modelado, el líquido que percola desde la corona hasta el piso de una pila de biolixiviación transporta especies iónicas, microorganismos (bacterias ferrooxidantes y thiooxidantes) y el oxígeno disuelto en la dirección vertical. De igual forma, el aire que ingresa por el piso de la pila transporta oxígeno hacia la corona, en la misma dirección pero en sentido contrario al flujo del líquido. Es posible entender el fenómeno de advección como el movimiento de soluto que es “arrastrado” por el flujo (ver Figura 3).

La advección no reproduce los procesos de dilución y mezcla de las especies disueltas, es decir, la advección solo representa el movimiento de traslación de las especies en la dirección del flujo. El movimiento de las especies por efecto de la advección es provocado por la velocidad media de la fase (o velocidad del seno del fluido). En el caso de un fluido que atraviesa un lecho poroso, la velocidad media está definida por la razón entre el caudal del fluido y el producto del área total atravesada por el fluido y la fracción volumétrica de la fase en el lecho poroso. La velocidad media de transporte advectivo también corresponde a la velocidad intersticial de la fase que atraviesa el lecho poroso.

2.3.4. Difusión y Dispersión Hidrodinámica

La difusión es el movimiento aleatorio (movimiento individual de iones, moléculas u otras sustancias en solución) que experimentan las especies disueltas en un fluido debido a la existencia de gradientes de concentración (movimiento neto de una especie desde una región de alta concentración a una región de baja concentración). La difusión puede ocurrir en sistemas de fluidos estáticos o en fluidos que se están moviendo. Se considera que la difusión es un proceso físico irreversible. La primera ley de Fick (señalada en la ecuación (20)) describe el fenómeno de difusión de una sustancia en un medio dado.

En un medio poroso, la difusión de un soluto es obstaculizada por la naturaleza tortuosa de los poros, la disminución del área transversal disponible para la difusión y el tamaño de poros. Al considerar que el sistema modelado está compuesto por tres fases, donde el espacio de poro generado por las partículas sólidas puede ser ocupado por la fase líquida y/o gaseosa, el coeficiente de difusión de un soluto en el aire (fase gaseosa), en una zona no saturada de líquido en el lecho, también debe considerar la fracción volumétrica de líquido (que define los espacios disponibles para el volumen de gas en el medio poroso). El coeficiente de difusión efectiva toma en consideración las características del medio poroso para ajustar el valor del coeficiente de difusión en gases en condiciones normales.

Para estimar el coeficiente de difusión efectiva para lechos con baja porosidad gaseosa, se utiliza la siguiente ecuación, obtenida mediante correlaciones empíricas [34]:

$$D_{e,g} = \frac{D_g \varepsilon_g^{3,1}}{(\varepsilon_g + \varepsilon_l)^2} \quad (27)$$

Donde:

$D_{e,g}$: Coeficiente de difusión efectiva en la fase gaseosa, [m²/d].

D_g : Coeficiente de difusión en la fase gaseosa, [m²/d].

ε_g : Porosidad de la fase gaseosa (fracción volumétrica de gas en el lecho), [m³ gas / m³ lecho].

ε_l : Contenido de humedad (hold up de líquido), [m³ líquido / m³ lecho].

Cuando un fluido fluye a través de un medio poroso (compuesto por partículas sólidas que experimentan una resistencia al movimiento del fluido), se genera una alteración en la dirección de movimiento de las especies disueltas. En un medio poroso, el espacio entre cada partícula define poros y caminos de irrigación interconectados, dispuestos en una configuración aleatoria. Las velocidades del fluido al interior de los canales o poros van a ser menores o mayores que la velocidad media de éste, dependiendo de la geometría y orientación de estos espacios. Esto implica que la variación entre los espacios e interconexiones, que permiten la circulación del fluido a través del sistema poroso, provoca una variación de velocidades. Este fenómeno se denomina dispersión mecánica [35, 36]. La dispersión mecánica, desde el punto de vista del sistema modelado, también puede entenderse como el movimiento del fluido alrededor de la superficie de las partículas sólidas del lecho, lo que genera líneas de flujo fuera de la dirección vertical (movimiento principal del líquido mientras descende a través del lecho por la gravedad o del aire que sube por efecto de un gradiente de presión), y que trasladan las especies disueltas en el sentido axial (ver Figura 3).

Los dos elementos básicos requeridos para que exista dispersión mecánica en la fase líquida son: el movimiento del líquido (es decir, que exista un flujo) y la presencia de un arreglo de partículas sólidas (las cuales definen un sistema de poros) que obstaculizan el trayecto del líquido.

En base a modelos matemáticos simplificados y a datos experimentales, el flujo másico por dispersión mecánica también puede ser modelado con la primera ley de Fick [8, 25, 35, 36, 37].

El coeficiente de dispersión mecánica es usualmente proporcional a la velocidad intersticial del fluido y al tamaño promedio de partículas que componen la pila (considerando que el lecho tiene una distribución uniforme de tamaños de partícula a lo largo del eje vertical, es decir, no existe segregación) [8, 25, 37]. El coeficiente de dispersión mecánica en la fase líquida se expresa como:

$$D_{Mec} = \overline{d_p} v_l \quad (28)$$

Donde:

D_{Mec} : Coeficiente de dispersión mecánica en la fase líquida, [m²/d].

$\overline{d_p}$: Diámetro promedio de las partículas en la pila de biolixiviación, [m].

v_l : Velocidad intersticial del líquido, [m³/d/m² ≡ m/d].

De la ecuación (28) se puede establecer que la dispersión aumenta cuando se incrementa el tamaño de las partículas, y que mientras más grande sea el flujo del líquido que atraviesa el medio poroso,

mayor es la dispersión de las especies disueltas, dado que el incremento en las colisiones del líquido con las partículas ocasiona que las líneas de flujo se aparten en mayor grado hacia el sentido axial (perpendicular a la dirección principal de movimiento del fluido).

La dispersión hidrodinámica es el resultado global del movimiento de las especies disueltas en un líquido producto de la dispersión mecánica y la difusión. Experimentalmente se ha evidenciado que el efecto de la difusión no puede ser separado del efecto de la dispersión mecánica: la dispersión hidrodinámica incluye ambos procesos de una forma inseparable.

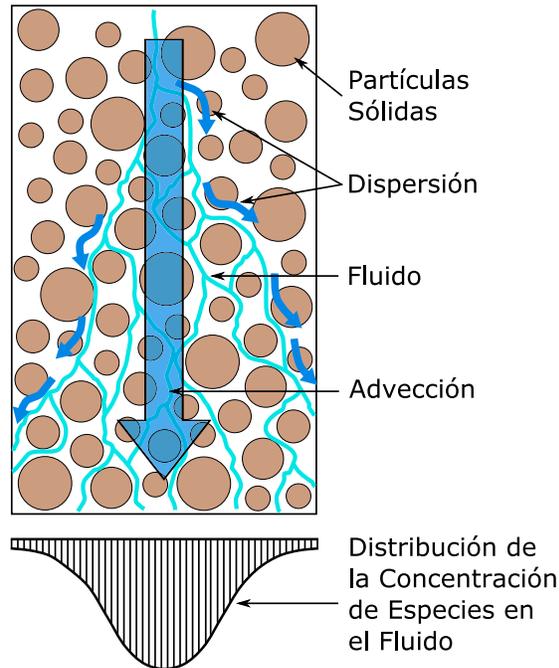


Figura 3. Dispersión y advección en un flujo de líquido que atraviesa un medio poroso.

Macroscópicamente el coeficiente de dispersión hidrodinámica puede escribirse como la suma de los otros dos términos [35, 36]:

$$D_H = D_{Mec} + D_{e,l} \quad (29)$$

Donde:

D_H : Coeficiente de dispersión hidrodinámica, [m²/d].

$D_{e,l}$: Coeficiente de difusión efectiva en la fase líquida, [m²/d].

En este modelo, al igual que otros autores, el coeficiente de difusión para las especies en el líquido es ignorado, ya que generalmente éste último posee un valor mucho menor que el coeficiente de dispersión mecánica [8, 25, 35, 36]. De igual modo, se desprecia el aporte de la dispersión mecánica en el aire, dado que la difusión tiene un efecto más significativo en esta fase (los coeficientes de difusión en solventes gaseosos son bastante mayores en comparación a los coeficientes de difusión en solventes líquidos).

Al considerar lo anterior, el coeficiente de dispersión hidrodinámica se simplifica a la siguiente expresión:

$$D_H = \frac{\overline{d_p q_l}}{\varepsilon_l} \quad (30)$$

Tanto la difusión como la dispersión mecánica provocan el movimiento secundario de especies disueltas en un fluido, es decir, la contribución de estos fenómenos en el transporte global de las especies en un fluido es menor cuando se compara con el transporte de las especies por efecto de la advección.

2.3.5. Transferencia de Masa en la Interfase Líquido-Gas

El transporte de masa entre dos fases diferentes involucra tres pasos de transferencia. Para el caso del transporte de oxígeno desde el aire hacia el líquido, estos pasos son [38]:

- La transferencia de oxígeno desde el seno de la fase gaseosa hacia la superficie del líquido.
- La transferencia de oxígeno a través de la interfase.
- La transferencia de oxígeno desde la interfase hacia el seno de la fase líquida.

En el siguiente esquema se puede visualizar un perfil representativo de la concentración de oxígeno en la proximidad de la interfase. En la Figura 4 se aprecia que la distancia entre la interfase y la concentración equivalente a la presión parcial de oxígeno en el seno del gas definen una distancia de transporte de oxígeno en la fase gaseosa; para la fase líquida se tiene lo mismo, al considerar la concentración en el seno del líquido. En el modelo, las concentraciones en el seno de cada fluido representan las concentraciones calculadas en los nodos de la grilla. Las distancias de transporte de oxígeno en cada fase establecen, en conjunto con la difusión efectiva en cada fase, la resistencia que opone el líquido o el gas al transporte del oxígeno.

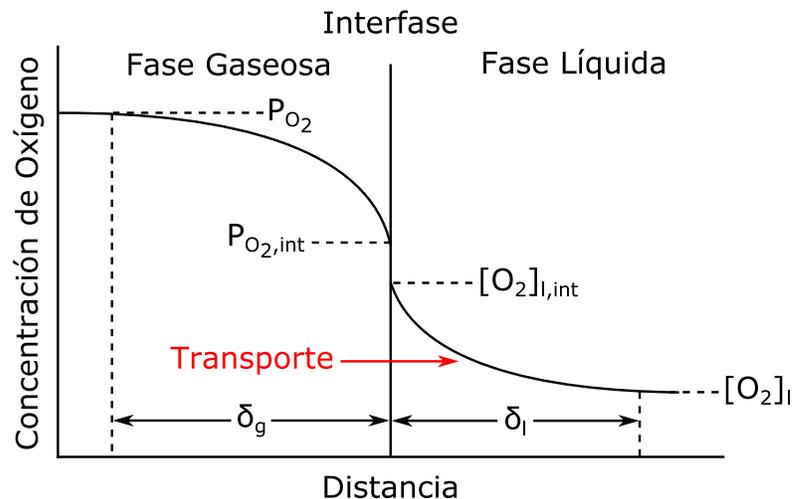


Figura 4. Perfil de concentración de oxígeno en la proximidad de la interfase líquido-gas. δ_l y δ_g denotan la distancia de transporte de oxígeno en las fases líquida y gaseosa, respectivamente.

El coeficiente de transferencia de masa es la razón entre la diferencia de concentración (fuerza impulsora) y la tasa de transferencia [39, 40]. El coeficiente de transferencia de masa indica la resistencia que opone un medio al transporte de una especie generado por gradientes de concentración.

Dado que no se conoce el perfil de concentración de oxígeno (como el presentado en la Figura 4) al interior del lecho, no es posible determinar el valor de las distancias. De esta forma, no es viable

la cuantificación de la resistencia del movimiento de oxígeno en cada fase a partir de las distancias de transporte.

Se puede simplificar el problema del transporte de oxígeno entre las fases líquida y gaseosa, en el interior de una pila de biolixiviación, al considerar un coeficiente global de transferencia de masa, el cual incluye las resistencias de ambas fases y utiliza las concentraciones de oxígeno en el líquido y el gas para calcular una fuerza impulsora global [38, 40].

Asumiendo que la concentración del oxígeno disuelto en la solución está en equilibrio local con la concentración de oxígeno en la fase gaseosa, el flujo másico del sistema descrito en la Figura 4 puede expresarse como [38, 41]:

$$J_{O_2} = k_L([O_2]_l^\# - [O_2]_l) \quad (31)$$

Donde:

J_{O_2} : Flujo másico de oxígeno a través de la interfase líquido-gas, [kg/(m²·s)].

k_L : Coeficiente global de transferencia de oxígeno entre las fases líquida y gaseosa (referido para concentraciones de oxígeno en la fase líquida), [m/s].

$[O_2]_l^\#$: Concentración teórica de oxígeno en equilibrio con la presión parcial de oxígeno en el seno de la fase gaseosa, [kg/m³].

$[O_2]_l$: Concentración de oxígeno en el seno de la fase líquida, [kg/m³].

La ecuación anterior está escrita respecto a la concentración en la fase líquida.

Por definición, la concentración $[O_2]_l^\#$ puede relacionarse con la concentración de oxígeno en la fase gaseosa al emplear la ley de Henry [23, 25, 38, 40]:

$$[O_2]_l^\# = H_e[O_2]_g \quad (32)$$

Donde:

H_e : Constante de Henry para el oxígeno disuelto en el líquido, adimensional.

También se tiene que la tasa de transferencia y el flujo están relacionados por la siguiente igualdad [41]:

$$aJ_{O_2} = \frac{d[O_2]_l}{dt} \quad (33)$$

Donde:

a : Área interfacial entre las fases líquida y gaseosa por unidad de volumen de líquido, [m²/m³].

Entonces, en términos de la tasa de transferencia de oxígeno, la ecuación (31) se convierte en [23, 25, 41]:

$$\frac{d[O_2]_l}{dt} = k_L a (H_e[O_2]_g - [O_2]_l) \quad (34)$$

Donde:

$k_L a$: Coeficiente global volumétrico de transferencia de oxígeno entre las fases líquida y gaseosa (referido para concentraciones de oxígeno en la fase líquida), [1/s].

3. OBJETIVOS

3.1. Objetivos Generales

- Desarrollar un modelo del balance de oxígeno en las fases líquida y gaseosa al interior de una pila de biolixiviación.
- Desarrollar un modelo de la fluidodinámica de la fase gaseosa al interior de una pila de biolixiviación.
- Evaluar el impacto de la convección natural y forzada de aire sobre la recuperación de cobre y otros parámetros biometalúrgicos en una pila de biolixiviación.

3.2. Objetivos Específicos

Utilizar los modelos desarrollados para estimar:

- El efecto de la temperatura, la humedad y el contenido de oxígeno (consumido por los microorganismos), sobre el flujo de aire por convección natural.
- El efecto del flujo de aire por convección natural o forzada sobre la actividad de los microorganismos biolixivantes, el balance de calor, y las reacciones mineral-solución.
- El efecto de la tasa de riego, el contenido de humedad, la granulometría, los ciclos de riego y reposo, y de las dimensiones de la pila sobre la tasa de transferencia de oxígeno entre las fases líquida y gaseosa.

4. METODOLOGÍA

Para lograr los objetivos señalados, se plantean las ecuaciones correspondientes al movimiento de aire al interior de una pila, por convección natural y forzada, y las del balance de oxígeno en las fases líquida y gaseosa, en una dimensión (en la dirección en que percola el líquido en la pila).

Posteriormente, se discretizan las ecuaciones diferenciales de acuerdo a un método numérico (volumenes de control), y se programan en un software matemático adecuado.

Para realizar el modelamiento del balance de oxígeno, se desarrolla una expresión que permite estimar el coeficiente de transferencia de oxígeno entre el líquido y el gas, en función del contenido de humedad del lecho de mineral, la tasa de riego, la temperatura, la granulometría del mineral y las dimensiones de la pila.

Con estos modelos se determinan los campos de velocidades y presiones del aire, y las concentraciones de oxígeno en el líquido y en el aire.

Los modelos de la fluidodinámica del aire y el balance de oxígeno se integran a un modelo existente de biolixiviación en pilas, de propiedad de BioSigma, el cual considera la fluidodinámica de la fase líquida, reacciones entre mineral-solución de especies sulfuradas y oxidadas de cobre, crecimiento de microorganismos oxidantes de hierro y azufre, balance de calor, especiación y precipitación de especies en solución.

Se desarrolla un entorno gráfico computacional, mediante el cual el usuario del modelo general de biolixiviación puede visualizar el avance de simulación, gráficos de las variables calculadas, edición e ingreso de datos, y ajustes de calibración, a través de ventanas.

Para la programación de los modelos e interfaz gráfica y la ejecución de las simulaciones se utiliza el software matemático Scilab, el cual está disponible en múltiples sistemas operativos, y se puede descargar gratuitamente [42].

El modelo general de biolixiviación fue calibrado utilizando datos experimentales reales de una pila en operación, facilitados por BioSigma. Con la calibración se encontraron los valores de los parámetros de ajuste, usados para realizar las simulaciones.

Se efectuaron las simulaciones requeridas para evaluar el impacto de la aireación natural y forzada de la pila en la recuperación de cobre, considerando su relación con la temperatura, la actividad de los microorganismos biolixiviantes, las dimensiones de la pila, y las condiciones operacionales, tales como tasa de riego y ciclos de riego y reposo. La mayoría de los datos de entrada del modelo fueron proporcionados por BioSigma, aunque también se usaron valores informados por la literatura.

5. DESARROLLO DE LOS MODELOS

5.1. Modelos de Advección y Dispersión/Difusión de Oxígeno en las Fases Líquida y Gaseosa

En esta parte se describe la construcción de los modelos de advección y dispersión/difusión de oxígeno en las fases líquida y gaseosa al interior de una pila de biolixiviación. Los modelos utilizan la ecuación general de conservación de masa para determinar la concentración de oxígeno en cada fase, a lo largo del eje vertical, en la pila. Los modelos pueden igualmente ser aplicados para modelar columnas y botaderos.

Se asume que la pila de biolixiviación es un medio poroso homogéneo, con una distribución uniforme de tamaños de partícula. El sistema poroso de la pila se representa como un lecho empacado de partículas esféricas sólidas. Además de la fase sólida, en el interior del lecho conviven las fases líquida y gaseosa. Se considera que la pila mantiene constantes sus propiedades en el plano horizontal, es decir, a partir de un punto seleccionado en el eje vertical, se puede proyectar las condiciones físicas y químicas de las diferentes variables de interés del modelo a toda la sección transversal.

El modelamiento de estos fenómenos se realiza en una dimensión, es decir se consideran sólo los cambios de concentración de las especies a lo largo de la columna o pila, en la orientación vertical, en la que ocurre el mayor movimiento de líquido y del gas; por lo tanto no se determinan los cambios de concentración de especies en el sentido axial o en la orientación horizontal. Lo anterior corresponde a un enfoque simplificado de la problemática planteada. En la siguiente figura se presenta un esquema del sistema modelado.

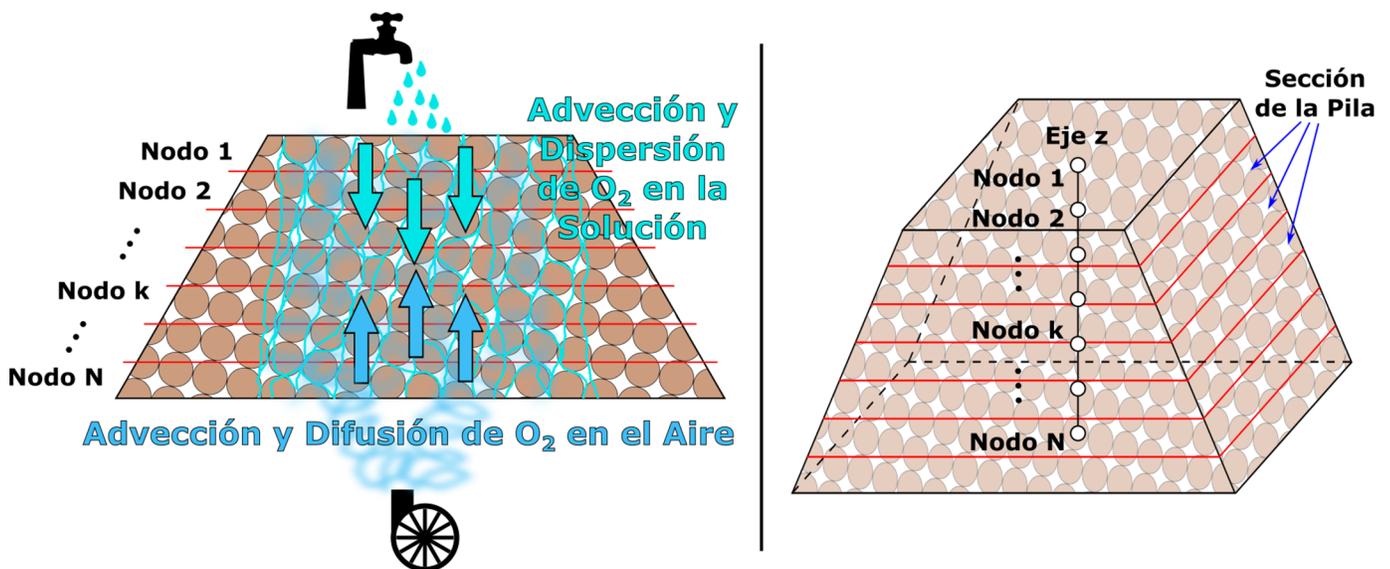


Figura 5. Esquemas generales del modelamiento de la advección y dispersión/difusión del oxígeno en una pila (representativo también para botaderos o columnas).

En el gas se considera que la concentración de oxígeno es afectada por la advección, la difusión y por la transferencia entre las fases líquida y gaseosa. En el líquido, el oxígeno es afectado por la advección, la dispersión hidrodinámica, la transferencia entre las fases líquido-gas y el consumo

de oxígeno por parte de los microorganismos. En estos modelos se asume que el oxígeno disuelto no interactúa con otras especies químicas.

La transferencia de oxígeno entre ambas fases y el consumo de oxígeno por la actividad bacteriana se consideran como procesos reactivos (representan un consumo o aporte de oxígeno en el sistema evaluado) y serán analizados de forma más exhaustiva en secciones posteriores. Por el momento, estos procesos reactivos se dejan expresados de forma simbólica.

La discretización de las ecuaciones diferenciales parciales se realiza a través del método de volúmenes de control. Se obtienen las soluciones de las ecuaciones discretizadas mediante el algoritmo de Thomas.

5.1.1. Método de Discretización

La resolución y discretización de las ecuaciones diferenciales parciales se realiza mediante el método de volúmenes de control. Dado que se realiza el modelamiento de los fenómenos en una dimensión, se establece una línea de cálculo (dominio de cálculo) a lo largo del eje vertical de la pila/botadero/columna. Esta línea representa la dimensión del espacio en donde se evalúan las ecuaciones planteadas y recibe el nombre de “grilla”. La grilla está compuesta por nodos, que son los puntos finitos en el espacio vertical donde las variables de las ecuaciones diferenciales parciales son evaluadas. Ya que interesa modelar una pila de biolixiviación (por defecto el sistema incluye a columnas o botaderos), la grilla de nodos se extiende desde la corona hasta el piso de la pila. En el método de volúmenes de control los nodos se disponen de forma equidistante en la grilla, y la cantidad de nodos en la grilla es especificada (a mayor número de nodos, mayor es la información y precisión obtenida del cálculo en el espacio modelado).

La grilla es dividida en un número finito de volúmenes de control no superpuestos, los cuales a su vez, rodean cada nodo. Como la resolución del problema se plantea para una dimensión, los volúmenes de control definen secciones o tramos con un largo proporcional al número de nodos y a la altura de la pila (columna o botadero). La ecuación diferencial es integrada en cada uno de estos volúmenes de control. Se considera que el valor de una variable, evaluada en un nodo, es constante cuando se evalúa para cualquier otro punto situado al interior del volumen de control que rodea a dicho nodo.

En este método de discretización solo los valores de las variables en los nodos de la grilla son considerados para constituir la solución de la ecuación diferencial, sin ninguna referencia explícita a como varía la variable en el espacio comprendido entre los nodos. Lo anterior supone un problema cuando se desea conocer el valor de las variables en los límites del volumen de control (interfases). En algunas variables se considera el promedio ponderado de los nodos vecinos para estimar su valor fuera de los nodos (promedio aritmético, para el caso de estimar el valor en la interfase definida por dos nodos). El análisis de esquemas de discretización provee otros métodos de interpolación válidos, cuando no es factible realizar una interpolación lineal simple.

Las variables, incógnitas o conocidas, que son utilizadas por las ecuaciones diferenciales parciales, dependen del espacio (posición en el eje vertical) y del tiempo. Cuando las ecuaciones diferenciales parciales son discretizadas, éstas se integran entre los límites definidos por los volúmenes de control (separación entre cada nodo o paso en el espacio, Δz) y por la sección discretizada de tiempo (paso en el tiempo, definido como la sustracción entre un instante t_0 y $t = t_0 + \Delta t$).

En la Figura 6 se muestra que la integración en el espacio se realiza entre las caras n y s de cada volumen de control. Al igual que el paso en el espacio, definido por el número de nodos, el paso en el tiempo de discretización es definido de forma arbitraria.

El eje de referencia (eje vertical z), para la modelación de la advección y dispersión del oxígeno disuelto, apunta hacia el piso de la pila, es decir, la dirección de avance del fluido que percola en la pila/botadero/columna es positiva. Al contrario, para el modelo de advección y dispersión de oxígeno en el aire, el eje de referencia se invierte, de forma que la dirección de avance del aire que atraviesa a pila también sea positiva. De esta forma las ecuaciones para la fase líquida y gaseosa se plantean de forma equivalente y la metodología de discretización se simplifica para el caso de la fase gaseosa.

Dado que las velocidades superficiales del líquido y del gas no se relacionan de forma directa por una ecuación para determinar la concentración de oxígeno en una fase, ambos vectores con valores positivos (por el cambio del eje de referencia) pueden utilizarse sin problemas en la resolución de las ecuaciones diferenciales que modelan los fenómenos de interés.

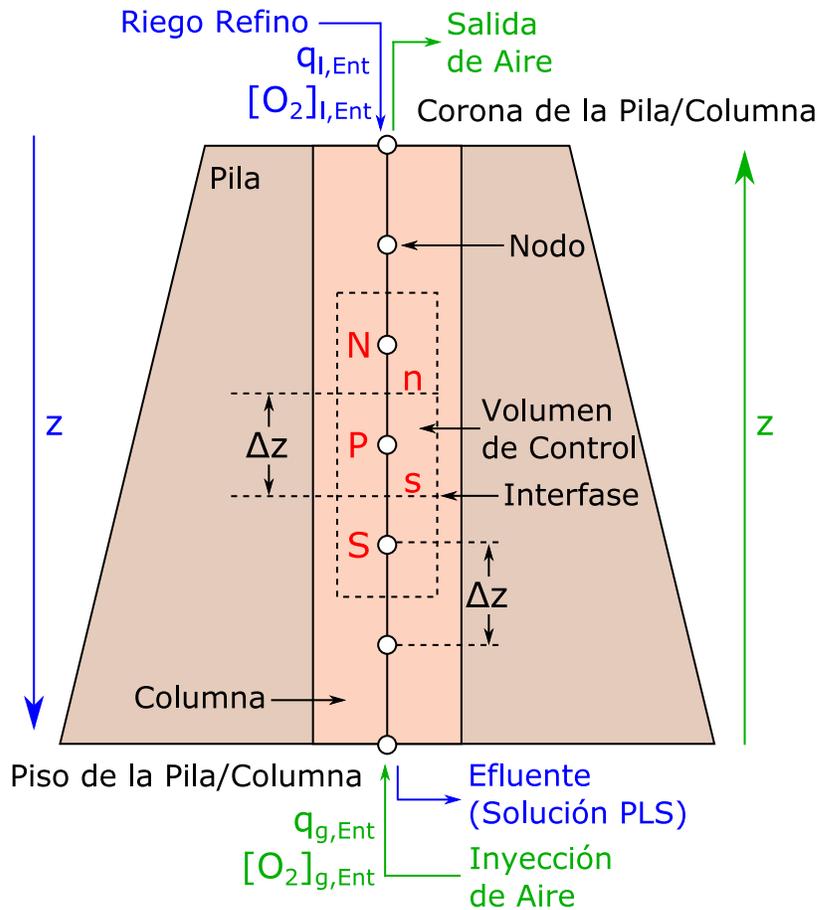


Figura 6. Discretización del espacio modelado en volúmenes de control. Se destaca en color azul el sentido de movimiento preferencial del líquido, y en verde, el del gas.

La discretización de la ecuación obtenida por los volúmenes de control expresa el principio de conservación de la variable relevante de cálculo para los volúmenes de control finitos, tal como la ecuación diferencial lo expresa para un volumen de control infinitesimal.

Al discretizar la ecuación general e integrar en los volúmenes de control, se genera un número de ecuaciones algebraicas equivalente a la cantidad de nodos dispuestos en la grilla. Al considerar la modelación de la ecuación en una dimensión, el sistema de ecuaciones obtenido se puede resolver mediante el algoritmo de Thomas. El algoritmo de Thomas es un método recursivo, bastante simple, para determinar la solución de la variable de interés en todos los nodos de la grilla a un tiempo definido. El algoritmo crea un conjunto de coeficientes que ayudan a calcular el valor de la variable en un nodo dado, a partir del conocimiento de la variable evaluada en uno de sus nodos vecinos y de la información acerca del valor de la variable en el tiempo anterior. Al encontrar el valor de los coeficientes del algoritmo de Thomas, se determina el valor de la variable de forma iterativa, desde el último nodo hasta el primer nodo. La construcción de estos coeficientes se detalla en las secciones homónimas.

5.1.2. Análisis de Esquemas de Discretización de la Ecuación de Advección-Difusión

La ecuación (22) se denomina ecuación de advección-difusión cuando el término de acumulación es cero (situación del sistema en estado estacionario) y cuando no existe generación o consumo de la especie en el fluido [30, 33]. Estas simplificaciones en la ecuación general permitirán analizar de mejor manera la formulación de la discretización de la ecuación diferencial.

$$\frac{\partial}{\partial z} (\varepsilon_i v_i m_i) = \frac{\partial}{\partial z} \left(\varepsilon_i D_{m,i} \frac{\partial m_i}{\partial z} \right) \quad (35)$$

La ecuación de continuidad, al aplicar las simplificaciones mencionadas, resulta:

$$\frac{\partial}{\partial z} (\varepsilon_i v_i) = 0 \quad (36)$$

Al integrar la ecuación (35) en el volumen de control mostrado en la Figura 6, considerando que el eje de referencia apunta hacia abajo (el sentido de integración es el mismo que el sentido de movimiento principal del líquido), resulta:

$$(\varepsilon_i v_i m_i)_s - (\varepsilon_i v_i m_i)_n = \left(\varepsilon_i D_{m,i} \frac{\partial m_i}{\partial z} \right)_s - \left(\varepsilon_i D_{m,i} \frac{\partial m_i}{\partial z} \right)_n \quad (37)$$

Es posible asumir que los valores de ε_i , v_i y $D_{m,i}$ en las caras de los volúmenes de control s y n se definen a partir del promedio de estos términos evaluados en los dos nodos que delimitan cada interfase (considerando que la interfase es equidistante del par de nodos). Por ejemplo, la estimación del valor de la velocidad en las interfases sería:

$$v_{i,s} = \frac{v_{i,S} + v_{i,P}}{2} \quad ; \quad v_{i,n} = \frac{v_{i,P} + v_{i,N}}{2} \quad (38)$$

Si se asume que esta interpolación lineal también puede ser aplicada al término m_i , se tiene que la ecuación (37) se escribe como:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{i,s} v_{i,s} \frac{(m_{i,S} + m_{i,P})}{2} - \varepsilon_{i,n} v_{i,n} \frac{(m_{i,P} + m_{i,N})}{2} \\ = \frac{\varepsilon_{i,s} D_{m,i,s} (m_{i,S} - m_{i,P})}{\Delta z} - \frac{\varepsilon_{i,n} D_{m,i,n} (m_{i,P} - m_{i,N})}{\Delta z} \end{aligned} \quad (39)$$

Para facilitar el manejo matemático de la expresión anterior, se definen los siguientes términos:

$$F = \varepsilon_i v_i \quad (40)$$

$$\Gamma = \frac{\varepsilon_i D_{m,i}}{\Delta z} \quad (41)$$

El término F representa la fuerza de la advección (o la fuerza de flujo) y Γ representa la conductividad de la difusión [30]. Tanto F como Γ tienen las mismas dimensiones. Es importante notar que, mientras Γ siempre permanece positivo, F puede tomar valores negativos o positivos, dependiendo de la dirección de flujo del fluido.

Con los nuevos términos (incorporando subíndices que indican la interfase donde son evaluados), la discretización de la ecuación (35) resulta:

$$\left(\Gamma_s + \frac{F_s}{2} + \Gamma_n - \frac{F_n}{2} \right) m_{i,P} = \left(\Gamma_s - \frac{F_s}{2} \right) m_{i,S} + \left(\Gamma_n + \frac{F_n}{2} \right) m_{i,N} \quad (42)$$

De la ecuación (42) podemos realizar un simple ejemplo de cálculo, asignando los valores $\Gamma_s = \Gamma_n = 1$ y $F_s = F_n = 4$.

Luego, si los valores de $m_{i,S}$ y $m_{i,N}$ son conocidos, se puede obtener el valor de $m_{i,P}$. Considerando el siguiente conjunto de valores:

- Si $m_{i,S} = 200$ y $m_{i,N} = 100$, se tiene como resultado $m_{i,P} = 50$.
- Si $m_{i,S} = 100$ y $m_{i,N} = 200$, se tiene como resultado $m_{i,P} = 250$.

El segundo caso pone en evidencia un grave problema de este modo de discretización: se pueden obtener resultados sin sentido físico real, ya que el valor de $m_{i,P}$, en la realidad, no puede salirse del rango de 100-200 establecido por los nodos vecinos.

Ante esta situación, se descarta aplicar la interpolación del valor de m_i en la interfase a través del promedio de los valores evaluados en los nodos contiguos.

Para resolver esta dificultad, se aplica el esquema de diferencias en contracorriente (upwind scheme) [30, 32, 33]. Este esquema propone que el valor de m_i en una interfase dada es equivalente al valor de m_i en el nodo más próximo situado al lado contrario de la dirección del flujo.

De esta forma, para el volumen de control utilizado (tomando en cuenta la dirección del flujo de líquido):

$$m_{i,s} = \begin{cases} m_{i,P} , & \text{si } F_s > 0 \\ m_{i,S} , & \text{si } F_s < 0 \end{cases} \quad (43)$$

El valor de $m_{i,n}$ puede definirse de manera similar. El postulado condicional de la ecuación (43) se puede escribir de forma más compacta si se define un nuevo operador.

Se define $\|A, B\|$ para denotar el elemento de mayor valor entre A y B (similar a la función computacional “max(·)”). Luego, el esquema de diferencias en contracorriente establece:

$$F_s m_{i,s} = m_{i,p} \|F_s, 0\| - m_{i,s} \|-F_s, 0\| \quad (44)$$

De manera análoga, se tiene que:

$$F_n m_{i,n} = m_{i,N} \|F_n, 0\| - m_{i,p} \|-F_n, 0\| \quad (45)$$

La base lógica detrás del esquema de diferencias en contracorriente se encuentra en el modelo de “Estanque y Tubo”. Como se muestra en la Figura 7, los volúmenes de control pueden considerarse como estanques agitados que están conectados en serie por tubos cortos. El flujo a través de los tubos representa la advección, mientras que la conducción a través de las paredes del estanque representa la difusión. Por lo tanto, es apropiado suponer que el fluido que fluye a través de cada tubo conector mantiene la propiedad de interés (temperatura, concentración de especie, etc.) incorporada en el estanque situado al lado contrario de la dirección del flujo. De forma figurativa, lo anterior indica que, normalmente, el fluido en el tubo no sabrá nada acerca del estanque al que se dirige, pero llevará toda la información del estanque del cual proviene [30, 32].

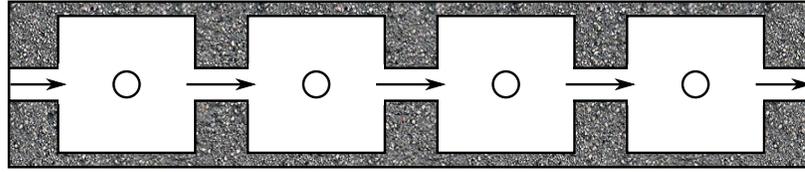


Figura 7. Modelo de estanque y tubo.

El operador $\|\cdot\|$ cumple con la siguiente propiedad:

$$F = \|F, 0\| - \|-F, 0\| \quad (46)$$

De esta forma, también se cumple que:

$$\|F_s, 0\| + \|-F_n, 0\| = \|-F_s, 0\| + F_s + \|F_n, 0\| - F_n \quad (47)$$

Adicionalmente, al considerar la ecuación de continuidad (ecuación (36)), se tiene que:

$$F_s - F_n = 0 \quad (48)$$

Entonces, se obtiene la siguiente igualdad:

$$\|F_s, 0\| + \|-F_n, 0\| = \|-F_s, 0\| + \|F_n, 0\| \quad (49)$$

Si se asume que $D_{m,i}$ es constante, es posible encontrar una solución a la ecuación (35). Si el conjunto dominio de $m_i(x)$ es delimitado a $0 \leq x \leq L$, y las condiciones de borde son:

$$\begin{aligned} \text{Para } x = 0, & \quad m_i = m_{i,0} \\ \text{Para } x = L, & \quad m_i = m_{i,L} \end{aligned} \quad (50)$$

La solución de la ecuación (35) es:

$$m_i = m_{i,0} + \frac{(m_{i,L} - m_{i,0}) \exp\left(\frac{Pe}{L} x\right) - 1}{\exp(Pe) - 1} \quad (51)$$

Donde Pe es el número de Péclet. Pe es adimensional y se define como la razón entre las fuerzas de advección y difusión, es decir:

$$Pe = \frac{F}{\Gamma} = \frac{v_i \Delta Z}{D_{m,i}} \quad (52)$$

Se define el flujo total que atraviesa una interfase entre los nodos, J_T , el cual está compuesto por la suma del flujo advectivo y el flujo difusional.

$$J_T = \varepsilon_i v_i m_i - \varepsilon_i D_{m,i} \frac{\partial m_i}{\partial z} \quad (53)$$

Al utilizar la definición del flujo total, la ecuación (35) se convierte en:

$$\frac{\partial J_T}{\partial z} = 0 \quad (54)$$

Cuando se integra esta última ecuación en el volumen de control presentado en la Figura 6, se obtiene:

$$J_{T,s} - J_{T,n} = 0 \quad (55)$$

Se puede utilizar la ecuación (51) para determinar el valor de m_i y $\frac{\partial m_i}{\partial z}$ en la interfase s , reemplazando los términos $m_{i,0}$, $m_{i,L}$ y L por $m_{i,P}$, $m_{i,S}$ y ΔZ , respectivamente. Luego, se obtiene la siguiente expresión para $J_{T,s}$:

$$J_{T,s} = F_s \left(m_{i,P} + \frac{m_{i,P} - m_{i,S}}{\exp(Pe_s) - 1} \right) \quad (56)$$

Donde:

$$Pe_s = \frac{v_{i,s} \Delta Z}{D_{m,i,s}} \quad (57)$$

El flujo total en la cara n se determina del mismo modo en que se obtuvo la ecuación (56). Al reemplazar la ecuación (56), y usar una expresión similar para $J_{T,n}$, en la ecuación (55):

$$F_s \left(m_{i,P} + \frac{m_{i,P} - m_{i,S}}{\exp(Pe_s) - 1} \right) - F_n \left(m_{i,N} + \frac{m_{i,N} - m_{i,P}}{\exp(Pe_n) - 1} \right) = 0 \quad (58)$$

Al ordenar la ecuación anterior y agrupar términos, se tiene:

$$\Psi_P m_{i,P} = \Psi_S m_{i,S} + \Psi_N m_{i,N} \quad (59)$$

Donde:

$$\Psi_S = \frac{F_s}{\exp(Pe_s) - 1} \quad (60)$$

$$\Psi_N = \frac{F_n \exp(Pe_n)}{\exp(Pe_n) - 1} \quad (61)$$

$$\Psi_P = \Psi_S + \Psi_N + (F_s - F_n) \quad (62)$$

Con la definición del flujo total (ecuación (53)) se encontró una solución general de la ecuación (35), siendo el coeficiente $D_{m,i}$ variable. La metodología usada tiene sentido, si se considera que el supuesto de que $D_{m,i}$ sea constante, se cumple para el dominio establecido en cada volumen de control.

El esquema ley de potencia (power-law scheme) simplifica los resultados obtenidos en las ecuaciones (60), (61) y (62), según la variación del coeficiente Ψ_S en función del número de Péclet [30, 32]. Así, el esquema propone una segmentación de la evaluación de los coeficientes según la preponderancia de las fuerzas difusivas o advectivas en el fluido.

De la ecuación (60) se puede deducir que:

$$\frac{\Psi_S}{\Gamma_S} = \frac{Pe_s}{\exp(Pe_s) - 1} \quad (63)$$

Las variaciones, en los casos límites, de la razón $\frac{\Psi_S}{\Gamma_S}$ con Pe_s , son:

$$\text{Para } Pe_s \rightarrow \infty, \quad \frac{\Psi_S}{\Gamma_S} = 0 \quad (64)$$

$$\text{Para } Pe_s \rightarrow -\infty, \quad \frac{\Psi_S}{\Gamma_S} = -Pe_s \quad (65)$$

$$\text{Para } Pe_s = 0, \quad \frac{\Psi_S}{\Gamma_S} = 1 - \frac{Pe_s}{2} \quad (66)$$

De forma arbitraria, el esquema ley de potencia plantea que para los rangos de evaluación del número de Péclet $-10 \leq Pe_s < 0$ y $0 \leq Pe_s \leq 10$ se pueden obtener curvas aproximadas del valor de la razón $\frac{\Psi_S}{\Gamma_S}$, definidas por funciones que representan de buena forma su comportamiento exponencial. De este modo, se tiene [30]:

$$\text{Para } Pe_s < -10, \quad \frac{\Psi_S}{\Gamma_S} = -Pe_s \quad (67)$$

$$\text{Para } -10 \leq Pe_s < 0, \quad \frac{\Psi_S}{\Gamma_S} = (1 + 0,1Pe_s)^5 - Pe_s \quad (68)$$

$$\text{Para } 0 \leq Pe_s \leq 10, \quad \frac{\Psi_S}{\Gamma_S} = (1 + 0,1Pe_s)^5 - Pe_s \quad (69)$$

$$\text{Para } Pe_s > 10, \quad \frac{\Psi_S}{\Gamma_S} = 0 \quad (70)$$

Las expresiones anteriores pueden combinarse de una manera compacta al usar el operador $\|\cdot\|$:

$$\Psi_S = \Gamma_S \|(1 - 0,1|Pe_s|)^5, 0\| + \|-F_s, 0\| \quad (71)$$

Análogamente, según el esquema ley de potencia, el coeficiente Ψ_N se simplifica a:

$$\Psi_N = \Gamma_n \|(1 - 0,1|Pe_n|)^5, 0\| + \|F_n, 0\| \quad (72)$$

Para facilitar el manejo algebraico, se define la función del esquema ley de potencia:

$$A(Pe_s) = \|(1 - 0,1|Pe_s|)^5, 0\| \quad (73)$$

De las ecuaciones (71) y (72) se puede ver que el esquema ley de potencia incorpora un tratamiento similar al esquema de diferencias en contracorriente para la discretización de la fuerza de advección, y que asocia la discretización del término difusivo a un coeficiente de ponderación que depende de Pe .

5.1.3. Modelo de Advección y Dispersión del Oxígeno en la Fase Líquida

Considerando la ecuación general de conservación de masa (ver ecuación (22)), se adapta una nueva versión para el balance de oxígeno disuelto en la fase líquida.

$$\frac{\partial(\varepsilon_l [O_2]_l)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\varepsilon_l D_{H,O_2} \frac{\partial [O_2]_l}{\partial z} \right) - \frac{\partial(\varepsilon_l v_l [O_2]_l)}{\partial z} + R_l \quad (74)$$

Donde:

$[O_2]_l$: Concentración de oxígeno en la fase líquida, [kg/m³].

ε_l : Contenido de humedad (hold up de líquido), [m³ líquido / m³ lecho].

D_{H,O_2} : Coeficiente de dispersión hidrodinámica del oxígeno, [m²/d].

v_l : Velocidad intersticial del líquido en la dirección z , [m³/d/m² \equiv m/d].

R_l : Tasa de aporte/consumo de la especie en la fase líquida, [kg/(m³·d)].

La velocidad intersticial del líquido que percola a través de la pila de biolixiviación se define como el flujo de líquido que atraviesa el área efectiva de escurrimiento. Si el medio poroso es aleatorio (obedece una distribución de probabilidad respecto a la posición y tamaño de los poros para cualquier plano horizontal que corte la pila), entonces la fracción del área transversal que está

disponible para el área abierta de poros (área de circulación del líquido a través del lecho) es equivalente a la porosidad.

$$v_l = \frac{Q_l}{A_{ef}} = \frac{Q_l}{A_r \varepsilon_l} = \frac{q_l}{\varepsilon_l} \quad (75)$$

Donde:

Q_l : Flujo de líquido, [m³/d].

A_{ef} : Área efectiva de circulación o escurrimiento del fluido, [m²].

A_r : Área de riego (área transversal total del medio poroso atravesado por el fluido), [m²].

q_l : Velocidad superficial (velocidad de Darcy) del líquido [m³/d/m² ≡ m/d].

Al reemplazar el término de la velocidad intersticial del líquido de la ecuación (74) por la expresión definida en la ecuación (75), se obtiene:

$$\frac{\partial(\varepsilon_l [O_2]_l)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\varepsilon_l D_{H,O_2} \frac{\partial [O_2]_l}{\partial z} \right) - \frac{\partial(q_l [O_2]_l)}{\partial z} + R_l \quad (76)$$

El coeficiente de dispersión hidrodinámica del oxígeno se calcula de acuerdo a la ecuación (30). Las variables ε_l y q_l se determinan a través del modelo de fluidodinámica de la fase líquida, desarrollado previamente por BioSigma.

A continuación se discretizan los términos de acumulación, dispersión, advección y reacción de la ecuación (76) para los nodos interiores de la grilla, definidos en la Figura 6.

El sentido de integración de los términos en el espacio se establece según el sentido de movimiento preferencial del líquido (se integra desde la cara sur hasta la cara norte de cada volumen de control).

5.1.3.1. Discretización de la Ecuación en los Nodos Interiores

Se denominan “nodos interiores” al conjunto de nodos que poseen un volumen de control de dimensión Δz , es decir, los nodos que no están en los extremos (bordes) de la grilla. De forma esquemática cualquier nodo interior se puede representar como un nodo P . Este nodo siempre tiene dos vecinos: al sur se encuentra el nodo S y al norte se localiza el nodo N . La discretización del espacio modelado en volúmenes de control de los nodos interiores se detalla en la siguiente figura.

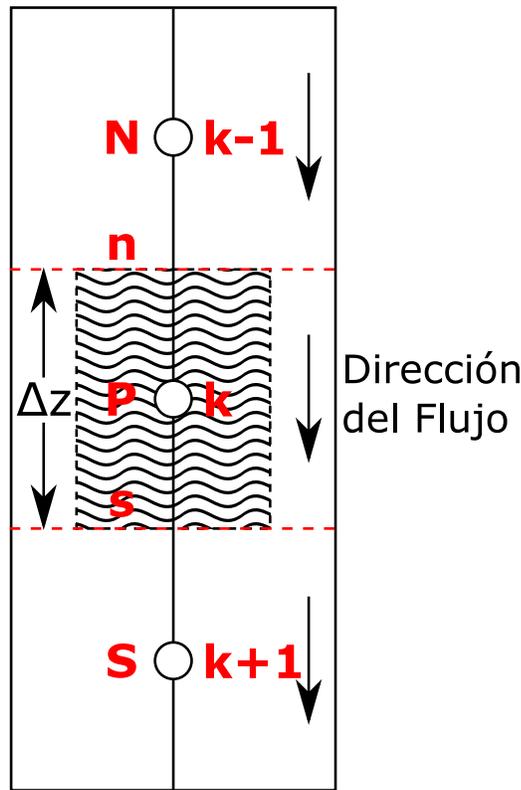


Figura 8. Volúmenes de control definidos en los nodos interiores, para el modelo de advección y dispersión del oxígeno en la solución.

El término de acumulación de la ecuación (76) se integra entre los instantes de tiempo discreto t_0 y $t = t_0 + \Delta t$, y se integra en el espacio entre las interfases s y n , definidas por el volumen de control que rodea el nodo P .

$$\begin{aligned}
 \int_n^s \int_{t_0}^t \frac{\partial(\varepsilon_l [O_2]_l)}{\partial t} \partial t \partial z &= \int_n^s [(\varepsilon_l [O_2]_l) - (\varepsilon_l [O_2]_l)^0] \partial z \\
 &= [(\varepsilon_l [O_2]_l) - (\varepsilon_l [O_2]_l)^0] \Delta z \\
 &= \Delta z \varepsilon_{l,P} [O_2]_{l,P} - \Delta z \varepsilon_{l,P}^0 [O_2]_{l,P}^0
 \end{aligned} \tag{77}$$

El superíndice cero en las variables denota que éstas se evalúan en el tiempo anterior t_0 ; cuando las variables no poseen un superíndice, se considera que éstas se evalúan en tiempo presente, t . Como se detalla en la Figura 8, cuando se integra entre las interfases s y n , el valor infinitesimal del espacio, ∂z , es reemplazado por el valor discreto Δz , que denota la distancia entre las interfases (y entre los nodos). También, al integrar en el espacio, las variables son evaluadas en el nodo P , dado que los valores en el nodo son representativos a cualquier punto situado al interior del volumen de control.

Al integrar el término de dispersión (difusión) de la ecuación (76):

$$\begin{aligned}
& \int_{t_0}^t \int_n^s \frac{\partial}{\partial z} \left(\varepsilon_l D_{H,O_2} \frac{\partial [O_2]_l}{\partial z} \right) \partial z \partial t \\
&= \int_{t_0}^t \left[\left(\varepsilon_l D_{H,O_2} \frac{\partial [O_2]_l}{\partial z} \right)_s - \left(\varepsilon_l D_{H,O_2} \frac{\partial [O_2]_l}{\partial z} \right)_n \right] \partial t \quad (78) \\
&= \left(\varepsilon_l D_{H,O_2} \frac{\partial [O_2]_l}{\partial z} \right)_s \Delta t - \left(\varepsilon_l D_{H,O_2} \frac{\partial [O_2]_l}{\partial z} \right)_n \Delta t
\end{aligned}$$

En la ecuación anterior se realiza la discretización implícita respecto al tiempo, por lo que el valor en el tiempo presente de las variables prevalece en todo el paso del tiempo. De esta forma los valores del contenido de humedad, dispersión y concentración de oxígeno se evalúan en el tiempo presente.

Al igual que en el ejemplo mostrado en la ecuación (38), se asume que ε_l , y D_{H,O_2} , en las caras de los volúmenes de control s y n , se definen a partir del promedio de estos términos evaluados en los nodos S y N . También se asume, en primera instancia, que es factible aplicar esta interpolación lineal para las concentraciones de oxígeno. La ecuación (78) resulta entonces:

$$\begin{aligned}
& \int_{t_0}^t \int_n^s \frac{\partial}{\partial z} \left(\varepsilon_l D_{H,O_2} \frac{\partial [O_2]_l}{\partial z} \right) \partial z \partial t \\
&= \varepsilon_{l,s} D_{H,O_2,s} \Delta t \frac{[O_2]_{l,S} - [O_2]_{l,P}}{\Delta z} \quad (79) \\
&\quad - \varepsilon_{l,n} D_{H,O_2,n} \Delta t \frac{[O_2]_{l,P} - [O_2]_{l,N}}{\Delta z}
\end{aligned}$$

Para agrupar términos, se utiliza el símbolo Γ de manera similar a como se definió en la ecuación (41), con la salvedad de que esta nueva expresión incluye el paso de tiempo Δt . Luego, la ecuación (79) equivale a:

$$\begin{aligned}
& \int_{t_0}^t \int_n^s \frac{\partial}{\partial z} \left(\varepsilon_l D_{H,O_2} \frac{\partial [O_2]_l}{\partial z} \right) \partial z \partial t \quad (80) \\
&= \Gamma_s [O_2]_{l,S} + \Gamma_n [O_2]_{l,N} - (\Gamma_s + \Gamma_n) [O_2]_{l,P}
\end{aligned}$$

Donde:

$$\Gamma_s = \frac{\varepsilon_{l,s} D_{H,O_2,s} \Delta t}{\Delta z} \quad ; \quad \Gamma_n = \frac{\varepsilon_{l,n} D_{H,O_2,n} \Delta t}{\Delta z} \quad (81)$$

Con:

$$\varepsilon_{l,s} = \frac{\varepsilon_{l,S} + \varepsilon_{l,P}}{2} \quad ; \quad \varepsilon_{l,n} = \frac{\varepsilon_{l,P} + \varepsilon_{l,N}}{2} \quad (82)$$

$$D_{H,O_2,S} = \frac{D_{H,O_2,S} + D_{H,O_2,P}}{2} \quad ; \quad D_{H,O_2,n} = \frac{D_{H,O_2,P} + D_{H,O_2,N}}{2} \quad (83)$$

Como se demostró en la sección “Análisis de esquemas de discretización”, la interpolación de las concentraciones de oxígeno en las interfases, realizada a través del promedio de los valores evaluados en los nodos contiguos, puede generar soluciones de la ecuación discretizada sin sentido físico real. Para discretizar correctamente el término de dispersión (o difusión), se adopta la función del esquema ley de potencia, $A(Pe)$ (ver ecuación (73)), el cual pondera correctamente la importancia de los fenómenos de advección y dispersión en la variación de la concentración de oxígeno en los nodos. Finalmente, la discretización del término de dispersión resulta en:

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^t \int_n^s \frac{\partial}{\partial z} \left(\varepsilon_l D_{H,O_2} \frac{\partial [O_2]_l}{\partial z} \right) \partial z \partial t \\ = \Gamma_s A(Pe_s) [O_2]_{l,S} + \Gamma_n A(Pe_n) [O_2]_{l,N} \\ - (\Gamma_s A(Pe_s) + \Gamma_n A(Pe_n)) [O_2]_{l,P} \end{aligned} \quad (84)$$

El número de Péclet, evaluado en las interfases S y n , se define como (ver ecuaciones (52) y (57)):

$$Pe_s = \frac{q_{l,S} \Delta z}{\varepsilon_{l,S} D_{H,O_2,S}} \quad ; \quad Pe_n = \frac{q_{l,n} \Delta z}{\varepsilon_{l,n} D_{H,O_2,n}} \quad (85)$$

Donde la velocidad superficial en las caras S y n también se calcula al considerar el promedio de los nodos vecinos:

$$q_{l,S} = \frac{q_{l,S} + q_{l,P}}{2} \quad ; \quad q_{l,n} = \frac{q_{l,P} + q_{l,N}}{2} \quad (86)$$

A continuación se discretiza el término de advección de la ecuación (76):

$$\begin{aligned} - \int_{t_0}^t \int_n^s \frac{\partial (q_l [O_2]_l)}{\partial z} \partial z \partial t = - \int_{t_0}^t [(q_l [O_2]_l)_s - (q_l [O_2]_l)_n] \partial t \\ = (q_l [O_2]_l)_n \Delta t - (q_l [O_2]_l)_s \Delta t \end{aligned} \quad (87)$$

Para determinar el valor de la concentración de oxígeno en las interfases S y n , se aplica el esquema de diferencias en contracorriente. De forma equivalente a la ecuación (40), se define el término de fuerza advectiva F , que también agrega el término de paso de tiempo. Entonces, la ecuación (87) se expresa como:

$$- \int_{t_0}^t \int_n^s \frac{\partial (q_l [O_2]_l)}{\partial z} \partial z \partial t = F_n [O_2]_{l,n} - F_s [O_2]_{l,s} \quad (88)$$

Donde:

$$F_s = q_{l,S} \Delta t \quad ; \quad F_n = q_{l,n} \Delta t \quad (89)$$

En las ecuaciones anteriores, la velocidad superficial evaluada en las caras del volumen de control se define de acuerdo a la ecuación (86).

Las propiedades estipuladas por el esquema de diferencias en contracorriente, definidas en las ecuaciones (44) y (45), producen la siguiente igualdad:

$$\begin{aligned}
& - \int_{t_0}^t \int_n^s \frac{\partial(q_l[O_2]_l)}{\partial z} \partial z \partial t \\
& = [O_2]_{l,N} \|F_n, 0\| + [O_2]_{l,S} \|-F_s, 0\| \\
& - [O_2]_{l,P} (\| -F_n, 0\| + \|F_s, 0\|)
\end{aligned} \tag{90}$$

Al utilizar la propiedad descrita en la ecuación (49), finalmente se obtiene:

$$\begin{aligned}
& - \int_{t_0}^t \int_n^s \frac{\partial(q_l[O_2]_l)}{\partial z} \partial z \partial t \\
& = [O_2]_{l,N} \|F_n, 0\| + [O_2]_{l,S} \|-F_s, 0\| \\
& - [O_2]_{l,P} (\|F_n, 0\| + \|-F_s, 0\|)
\end{aligned} \tag{91}$$

El término de reacción de la ecuación (76) se integra implícitamente respecto al tiempo (se evalúa en el tiempo presente), y las variables que lo componen se evalúan en el nodo P .

$$\int_{t_0}^t \int_n^s R_l \partial z \partial t = R_{l,P} \Delta z \Delta t \tag{92}$$

Luego, al reunir los 4 términos integrados de la ecuación (76) (definidos en las ecuaciones (77), (84), (91) y (92)), se obtiene la ecuación general del balance de oxígeno en el líquido, discretizada en volúmenes de control para los nodos interiores de la grilla.

$$\begin{aligned}
& \Delta z \varepsilon_{l,P} [O_2]_{l,P} - \Delta z \varepsilon_{l,P}^0 [O_2]_{l,P}^0 \\
& = \Gamma_s A (Pe_s) [O_2]_{l,S} + \Gamma_n A (Pe_n) [O_2]_{l,N} \\
& - (\Gamma_s A (Pe_s) + \Gamma_n A (Pe_n)) [O_2]_{l,P} + [O_2]_{l,N} \|F_n, 0\| \\
& + [O_2]_{l,S} \|-F_s, 0\| - [O_2]_{l,P} (\|F_n, 0\| + \|-F_s, 0\|) \\
& + R_{l,P} \Delta z \Delta t
\end{aligned} \tag{93}$$

La expresión anterior puede simplificarse si se recuerda la ecuación de continuidad (ver ecuación (26)). Se obtiene la siguiente igualdad al integrar la ecuación de continuidad, formulada para la versión del balance de oxígeno en el líquido, en el volumen de control que rodea el nodo P :

$$\int_n^s \int_{t_0}^t \frac{\partial \varepsilon_l}{\partial t} \partial t \partial z + \int_{t_0}^t \int_n^s \frac{\partial q_l}{\partial z} \partial z \partial t = 0 \tag{94}$$

Al considerar el mismo procedimiento de cálculo para la integración de la ecuación general de balance de oxígeno en el líquido, se tiene:

$$\int_n^s [\varepsilon_l - \varepsilon_l^0] \partial z + \int_{t_0}^t [q_{l,s} - q_{l,n}] \partial t = 0 \tag{95}$$

$$\varepsilon_{l,P} \Delta Z - \varepsilon_{l,P}^0 \Delta Z + q_{l,S} \Delta t - q_{l,n} \Delta t = 0 \quad (96)$$

Al multiplicar la ecuación (96) por $[O_2]_{l,P}$ y restar esta expresión con la ecuación general discretizada del balance de oxígeno (ecuación (93)), resulta:

$$\begin{aligned} & \Delta z \varepsilon_{l,P} [O_2]_{l,P} - \Delta z \varepsilon_{l,P}^0 [O_2]_{l,P}^0 - \varepsilon_{l,P} \Delta z [O_2]_{l,P} + \varepsilon_{l,P}^0 \Delta z [O_2]_{l,P} \\ & - q_{l,S} \Delta t [O_2]_{l,P} + q_{l,n} \Delta t [O_2]_{l,P} \\ & = \Gamma_S A (Pe_S) [O_2]_{l,S} + \Gamma_n A (Pe_n) [O_2]_{l,N} \\ & - (\Gamma_S A (Pe_S) + \Gamma_n A (Pe_n)) [O_2]_{l,P} + [O_2]_{l,N} \|F_n, 0\| \\ & + [O_2]_{l,S} \|-F_S, 0\| - [O_2]_{l,P} (\|F_n, 0\| + \|-F_S, 0\|) \\ & + R_{l,P} \Delta z \Delta t \end{aligned} \quad (97)$$

Se eliminan términos y se utiliza el símbolo F para reducir el número de variables:

$$\begin{aligned} & \Delta z \varepsilon_{l,P}^0 [O_2]_{l,P} - \Delta z \varepsilon_{l,P}^0 [O_2]_{l,P}^0 - F_S [O_2]_{l,P} + F_n [O_2]_{l,P} \\ & = \Gamma_S A (Pe_S) [O_2]_{l,S} + \Gamma_n A (Pe_n) [O_2]_{l,N} \\ & - (\Gamma_S A (Pe_S) + \Gamma_n A (Pe_n)) [O_2]_{l,P} + [O_2]_{l,N} \|F_n, 0\| \\ & + [O_2]_{l,S} \|-F_S, 0\| - [O_2]_{l,P} (\|F_n, 0\| + \|-F_S, 0\|) \\ & + R_{l,P} \Delta z \Delta t \end{aligned} \quad (98)$$

Al incorporar el balance de masa del flujo (ecuación (48)) en la ecuación (98), se obtiene la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} & \Delta z \varepsilon_{l,P}^0 [O_2]_{l,P} - \Delta z \varepsilon_{l,P}^0 [O_2]_{l,P}^0 \\ & = \Gamma_S A (Pe_S) [O_2]_{l,S} + \Gamma_n A (Pe_n) [O_2]_{l,N} \\ & - (\Gamma_S A (Pe_S) + \Gamma_n A (Pe_n)) [O_2]_{l,P} + [O_2]_{l,N} \|F_n, 0\| \\ & + [O_2]_{l,S} \|-F_S, 0\| - [O_2]_{l,P} (\|F_n, 0\| + \|-F_S, 0\|) \\ & + R_{l,P} \Delta z \Delta t \end{aligned} \quad (99)$$

Con el desarrollo anterior, se demuestra que el contenido de humedad, presente en el término de acumulación de la ecuación (93), se mantiene constante respecto al tiempo de integración y que se evalúa en el tiempo anterior t_0 . De esta forma, la ecuación (93) puede resolverse sin necesidad de conocer el contenido de humedad del nodo P en el tiempo presente.

Ordenando términos en la ecuación anterior:

$$\begin{aligned} & (\Delta z \varepsilon_{l,P}^0 + \Gamma_S A (Pe_S) + \|-F_S, 0\| + \Gamma_n A (Pe_n) + \|F_n, 0\|) [O_2]_{l,P} \\ & = (\Gamma_S A (Pe_S) + \|-F_S, 0\|) [O_2]_{l,S} \\ & + (\Gamma_n A (Pe_n) + \|F_n, 0\|) [O_2]_{l,N} + R_{l,P} \Delta z \Delta t \\ & + \Delta z \varepsilon_{l,P}^0 [O_2]_{l,P}^0 \end{aligned} \quad (100)$$

Comparando con los coeficientes obtenidos del esquema ley de potencia (ver ecuaciones (71) y (72)), la ecuación (100) se reduce a:

$$\begin{aligned}
(\Delta z \varepsilon_{l,P}^0 + \Psi_S + \Psi_N)[O_2]_{l,P} \\
= \Psi_S[O_2]_{l,S} + \Psi_N[O_2]_{l,N} + R_{l,P} \Delta z \Delta t + \Delta z \varepsilon_{l,P}^0 [O_2]_{l,P}^0
\end{aligned} \quad (101)$$

Donde:

$$\Psi_S = \Gamma_S A(Pe_S) + \|-F_S, 0\| \quad (102)$$

$$\Psi_N = \Gamma_n A(Pe_n) + \|F_n, 0\| \quad (103)$$

Como ya se ha evidenciado, la metodología, presentada en esta sección para la discretización de la ecuación (76), deriva una solución según el esquema ley de potencia, considerando en su construcción la discretización de algunos términos según el esquema de diferencias en contracorriente.

Definiendo nuevos términos:

$$a_P = \Delta z \varepsilon_{l,P}^0 + \Psi_S + \Psi_N \quad (104)$$

$$b_P = R_{l,P} \Delta z \Delta t + \Delta z \varepsilon_{l,P}^0 [O_2]_{l,P}^0 \quad (105)$$

La ecuación (101) resulta en la siguiente expresión:

$$a_P [O_2]_{l,P} = \Psi_S [O_2]_{l,S} + \Psi_N [O_2]_{l,N} + b_P \quad (106)$$

5.1.3.2. Discretización de la Ecuación en el Borde Superior

Se aplica la siguiente condición de borde en la corona de la pila/botadero/columna:

$$-\varepsilon_l D_{H,O_2} \frac{\partial [O_2]_l}{\partial z} + q_l [O_2]_l = q_{l,Ent} [O_2]_{l,Ent} \quad (107)$$

El término a la derecha de la igualdad representa el flujo de entrada de oxígeno en el líquido, aportado por el riego de la pila/botadero/columna. Tanto el término $q_{l,Ent}$ como $[O_2]_{l,Ent}$ son valores conocidos para cualquier tiempo t modelado. Los términos situados a la izquierda de la igualdad están evaluados en el primer nodo de la grilla, situado en la corona.

El valor inicial de la concentración de oxígeno en el riego, establecido como dato de entrada, es recalculado por una rutina en el programa principal, debido a la pérdida de líquido causada por la evaporación. Esta rutina estima la tasa de evaporación en el riego en función del flujo de riego, la temperatura y la presión que impera en la corona de la pila/botadero/columna. El valor actualizado de la concentración de oxígeno en el riego es el utilizado en la ecuación (107), designado como $[O_2]_{l,Ent}$.

La derivación de la condición de borde se obtiene al considerar que, en el primer nodo, los flujos difusivo y advectivo de transporte de oxígeno son iguales al flujo de oxígeno en el líquido que sale del riego. Lo anterior es equivalente a suponer que el transporte de oxígeno disuelto en el líquido en la corona se debe exclusivamente al flujo de riego que entra en el sistema [43].

Para la discretización de la ecuación (76) en el primer nodo se utiliza una metodología similar a la desarrollada en el capítulo anterior, aunque dada la posición de este nodo en el sistema, la

integración se realiza en medio volumen de control. El semi-volumen de control, asociado al nodo situado en el borde superior, se muestra en la siguiente figura. Una vez que la ecuación ha sido integrada en el espacio discreto, se acopla la condición de borde de la ecuación (107).

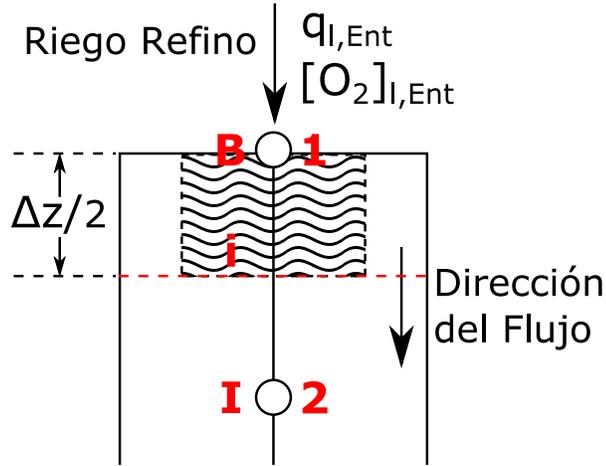


Figura 9. Semi-volumen de control definido en el borde superior de la pila, para el modelo de advección y dispersión del oxígeno en la solución.

El término de acumulación de la ecuación (76) se integra entre los instantes de tiempo discreto t_0 y $t = t_0 + \Delta t$, y se integra en el espacio entre la interfase i y la cara exterior B , definidas por el semi-volumen de control del nodo B .

$$\begin{aligned} \int_B^i \int_{t_0}^t \frac{\partial(\varepsilon_l [O_2]_l)}{\partial t} \partial t \partial z &= \int_B^i [(\varepsilon_l [O_2]_l) - (\varepsilon_l [O_2]_l)^0] \partial z \\ &= [(\varepsilon_l [O_2]_l) - (\varepsilon_l [O_2]_l)^0] 0,5 \Delta z \\ &= 0,5 \Delta z \varepsilon_{l,B} [O_2]_{l,B} - 0,5 \Delta z \varepsilon_{l,B}^0 [O_2]_{l,B}^0 \end{aligned} \quad (108)$$

Se utiliza la misma notación referida en la sección anterior: el superíndice cero denota que la variable se evalúa en el tiempo anterior t_0 .

A continuación se integra el término de dispersión (difusión) de la ecuación (76), utilizando el mismo procedimiento detallado en la discretización de los nodos interiores:

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^t \int_B^i \frac{\partial}{\partial z} \left(\varepsilon_l D_{H,O_2} \frac{\partial [O_2]_l}{\partial z} \right) \partial z \partial t \\ &= \int_{t_0}^t \left[\left(\varepsilon_l D_{H,O_2} \frac{\partial [O_2]_l}{\partial z} \right)_i - \left(\varepsilon_l D_{H,O_2} \frac{\partial [O_2]_l}{\partial z} \right)_B \right] \partial t \\ &= \left(\varepsilon_l D_{H,O_2} \frac{\partial [O_2]_l}{\partial z} \right)_i \Delta t - \left(\varepsilon_l D_{H,O_2} \frac{\partial [O_2]_l}{\partial z} \right)_B \Delta t \end{aligned} \quad (109)$$

$$\int_{t_0}^t \int_B \frac{\partial}{\partial z} \left(\varepsilon_l D_{H,O_2} \frac{\partial [O_2]_l}{\partial z} \right) \partial z \partial t$$

$$= \varepsilon_{l,i} D_{H,O_2,i} \Delta t \frac{[O_2]_{l,I} - [O_2]_{l,B}}{\Delta z} - \left(\varepsilon_l D_{H,O_2} \frac{\partial [O_2]_l}{\partial z} \right)_B \Delta t \quad (110)$$

$$\int_{t_0}^t \int_B \frac{\partial}{\partial z} \left(\varepsilon_l D_{H,O_2} \frac{\partial [O_2]_l}{\partial z} \right) \partial z \partial t$$

$$= \Gamma_i [O_2]_{l,I} - \Gamma_i [O_2]_{l,B} - \left(\varepsilon_l D_{H,O_2} \frac{\partial [O_2]_l}{\partial z} \right)_B \Delta t \quad (111)$$

Donde:

$$\Gamma_i = \frac{\varepsilon_{l,i} D_{H,O_2,i} \Delta t}{\Delta z} \quad (112)$$

Con:

$$\varepsilon_{l,i} = \frac{\varepsilon_{l,I} + \varepsilon_{l,B}}{2} \quad ; \quad D_{H,O_2,i} = \frac{D_{H,O_2,I} + D_{H,O_2,B}}{2} \quad (113)$$

Se incorpora la función del esquema ley de potencia, $A(Pe)$ (ver ecuación (73)), al término Γ_i . Finalmente, la discretización del término de dispersión resulta en:

$$\int_{t_0}^t \int_B \frac{\partial}{\partial z} \left(\varepsilon_l D_{H,O_2} \frac{\partial [O_2]_l}{\partial z} \right) \partial z \partial t$$

$$= \Gamma_i A(Pe_i) [O_2]_{l,I} - \Gamma_i A(Pe_i) [O_2]_{l,B}$$

$$- \left(\varepsilon_l D_{H,O_2} \frac{\partial [O_2]_l}{\partial z} \right)_B \Delta t \quad (114)$$

Donde:

$$Pe_i = \frac{q_{l,i} \Delta z}{\varepsilon_{l,i} D_{H,O_2,i}} \quad (115)$$

Además, la velocidad superficial en la interface i se define como:

$$q_{l,i} = \frac{q_{l,I} + q_{l,B}}{2} \quad (116)$$

La discretización del término de advección de la ecuación (76) sobre el semi-volumen de control resulta en:

$$\begin{aligned}
-\int_{t_0}^t \int_B^i \frac{\partial(q_l[O_2]_l)}{\partial z} \partial z \partial t &= -\int_{t_0}^t [(q_l[O_2]_l)_i - (q_l[O_2]_l)_B] \partial t \\
&= (q_l[O_2]_l)_B \Delta t - (q_l[O_2]_l)_i \Delta t
\end{aligned} \tag{117}$$

Para determinar el valor de la concentración de oxígeno en la interfase i , se aplica el esquema de diferencias en contracorriente. Entonces, la ecuación (117) se expresa como:

$$-\int_{t_0}^t \int_B^i \frac{\partial(q_l[O_2]_l)}{\partial z} \partial z \partial t = (q_l[O_2]_l)_B \Delta t - F_i[O_2]_{l,i} \tag{118}$$

Donde:

$$F_i = q_{l,i} \Delta t \tag{119}$$

En la ecuación anterior, la velocidad superficial evaluada en la interfase se define de acuerdo a la ecuación (116).

Por las propiedades del esquema de diferencias en contracorriente, definidas en las ecuaciones (44) y (45), la concentración en la interfase i se puede expresar en función de las concentraciones en los nodos I y B . Luego, se tiene:

$$\begin{aligned}
-\int_{t_0}^t \int_B^i \frac{\partial(q_l[O_2]_l)}{\partial z} \partial z \partial t \\
= (q_l[O_2]_l)_B \Delta t - [O_2]_{l,B} \|F_i, 0\| + [O_2]_{l,I} \|-F_i, 0\|
\end{aligned} \tag{120}$$

El término de reacción de la ecuación (76) se integra implícitamente respecto al tiempo (se evalúa en el tiempo presente), y las variables que lo componen se evalúan en el nodo B .

$$\int_{t_0}^t \int_B^i R_l \partial z \partial t = 0,5 R_{l,B} \Delta z \Delta t \tag{121}$$

Luego, al reunir los 4 términos integrados de la ecuación (76) (definidos en las ecuaciones (108), (114), (120) y (121)), se obtiene la ecuación general del balance de oxígeno en el líquido, discretizada en el semi-volumen de control asociado al nodo situado en el borde superior de la grilla.

$$\begin{aligned}
0,5 \Delta z \varepsilon_{l,B} [O_2]_{l,B} - 0,5 \Delta z \varepsilon_{l,B}^0 [O_2]_{l,B}^0 \\
= \Gamma_i A (Pe_i) [O_2]_{l,I} - \Gamma_i A (Pe_i) [O_2]_{l,B} \\
- \left(\varepsilon_l D_{H,O_2} \frac{\partial [O_2]_l}{\partial z} \right)_B \Delta t + (q_l [O_2]_l)_B \Delta t \\
- [O_2]_{l,B} \|F_i, 0\| + [O_2]_{l,I} \|-F_i, 0\| + 0,5 R_{l,B} \Delta z \Delta t
\end{aligned} \tag{122}$$

La ecuación anterior se compacta al agrupar los términos de advección y dispersión evaluados en el nodo B .

$$\begin{aligned}
& 0,5\Delta z\varepsilon_{l,B}[O_2]_{l,B} - 0,5\Delta z\varepsilon_{l,B}^0[O_2]_{l,B}^0 \\
& = \Gamma_i A(Pe_i)[O_2]_{l,I} - \Gamma_i A(Pe_i)[O_2]_{l,B} \\
& + \left[-\varepsilon_l D_{H,O_2} \frac{\partial [O_2]_l}{\partial z} + q_l [O_2]_l \right]_B \Delta t - [O_2]_{l,B} \|F_i, 0\| \\
& + [O_2]_{l,I} \| -F_i, 0\| + 0,5R_{l,B} \Delta z \Delta t
\end{aligned} \tag{123}$$

Se introduce la condición de borde en el nodo B , al notar que los términos dentro del paréntesis cuadrado corresponden a la expresión de la izquierda de la ecuación (107).

$$\begin{aligned}
& 0,5\Delta z\varepsilon_{l,B}[O_2]_{l,B} - 0,5\Delta z\varepsilon_{l,B}^0[O_2]_{l,B}^0 \\
& = \Gamma_i A(Pe_i)[O_2]_{l,I} - \Gamma_i A(Pe_i)[O_2]_{l,B} \\
& + q_{l,Ent}[O_2]_{l,Ent} \Delta t - [O_2]_{l,B} \|F_i, 0\| + [O_2]_{l,I} \| -F_i, 0\| \\
& + 0,5R_{l,B} \Delta z \Delta t
\end{aligned} \tag{124}$$

Al realizar el procedimiento de simplificación de la ecuación general discretizada, utilizando la ecuación de continuidad (ver las operaciones aritméticas descritas en las ecuaciones (96) a (99)), se obtiene:

$$\begin{aligned}
& 0,5\Delta z\varepsilon_{l,B}^0[O_2]_{l,B} - 0,5\Delta z\varepsilon_{l,B}^0[O_2]_{l,B}^0 \\
& = \Gamma_i A(Pe_i)[O_2]_{l,I} - \Gamma_i A(Pe_i)[O_2]_{l,B} \\
& + q_{l,Ent}[O_2]_{l,Ent} \Delta t - [O_2]_{l,B} \|F_i, 0\| + [O_2]_{l,I} \| -F_i, 0\| \\
& + 0,5R_{l,B} \Delta z \Delta t
\end{aligned} \tag{125}$$

Ordenando términos en la ecuación anterior:

$$\begin{aligned}
& (0,5\Delta z\varepsilon_{l,B}^0 + \Gamma_i A(Pe_i) + \|F_i, 0\|)[O_2]_{l,B} \\
& = (\Gamma_i A(Pe_i) + \| -F_i, 0\|)[O_2]_{l,I} + q_{l,Ent}[O_2]_{l,Ent} \Delta t \\
& + 0,5R_{l,B} \Delta z \Delta t + 0,5\Delta z\varepsilon_{l,B}^0[O_2]_{l,B}^0
\end{aligned} \tag{126}$$

Al utilizar la propiedad del operador $\|\cdot\|$, descrita en la ecuación (46), se modifica el paréntesis de la expresión a la izquierda de la igualdad anterior.

$$\begin{aligned}
& (0,5\Delta z\varepsilon_{l,B}^0 + \Gamma_i A(Pe_i) + \| -F_i, 0\| + F_i)[O_2]_{l,B} \\
& = (\Gamma_i A(Pe_i) + \| -F_i, 0\|)[O_2]_{l,I} + q_{l,Ent}[O_2]_{l,Ent} \Delta t \\
& + 0,5R_{l,B} \Delta z \Delta t + 0,5\Delta z\varepsilon_{l,B}^0[O_2]_{l,B}^0
\end{aligned} \tag{127}$$

Comparando con los coeficientes obtenidos del esquema ley de potencia (ver ecuaciones (71) y (72)), la ecuación (127) se reduce a:

$$\begin{aligned}
& (0,5\Delta z\varepsilon_{l,B}^0 + F_i + \Psi_I)[O_2]_{l,B} \\
& = \Psi_I[O_2]_{l,I} + q_{l,Ent}[O_2]_{l,Ent} \Delta t + 0,5R_{l,B} \Delta z \Delta t \\
& + 0,5\Delta z\varepsilon_{l,B}^0[O_2]_{l,B}^0
\end{aligned} \tag{128}$$

Donde:

$$\Psi_I = \Gamma_i A (Pe_i) + \|-F_i, 0\| \quad (129)$$

Definiendo nuevos términos:

$$a_{in} = 0,5\Delta z \varepsilon_{l,B}^0 + F_i + \Psi_I \quad (130)$$

$$b_{in} = q_{l,Ent} [O_2]_{l,Ent} \Delta t + 0,5R_{l,B} \Delta z \Delta t + 0,5\Delta z \varepsilon_{l,B}^0 [O_2]_{l,B}^0 \quad (131)$$

La ecuación (128) resulta en la siguiente expresión:

$$a_{in} [O_2]_{l,B} = \Psi_I [O_2]_{l,I} + b_{in} \quad (132)$$

5.1.3.3. Discretización de la Ecuación en el Borde Inferior

En el piso de la pila se impone que no existen gradientes de concentración de oxígeno en la solución. Esta condición es equivalente a suponer que en el último nodo, cuando se “termina” el sistema de lecho empacado, el transporte de oxígeno en el líquido se realiza exclusivamente por la fuerza advectiva: como el líquido no atraviesa un medio disperso (no existe dispersión), el flujo advectivo controla el transporte de oxígeno en la solución. Esta condición se expresa en la siguiente ecuación:

$$\varepsilon_l D_{H,O_2} \frac{\partial [O_2]_l}{\partial z} = 0 \quad (133)$$

Como en la sección anterior, la discretización de la ecuación (76) en el último nodo se realiza sobre medio volumen de control. El semi-volumen de control, asociado al nodo situado en el borde inferior, se muestra en la siguiente figura. Una vez que la ecuación ha sido integrada en el espacio discreto, se acopla la condición de borde de la ecuación (133).

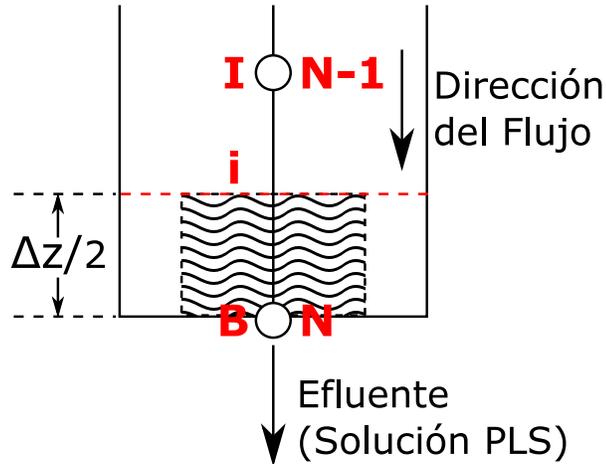


Figura 10. Semi-volumen de control definido en el borde inferior de la pila, para el modelo de advección y dispersión del oxígeno en la solución.

El término de acumulación de la ecuación (76) se integra entre los instantes de tiempo discreto t_0 y $t = t_0 + \Delta t$, y se integra en el espacio entre la cara exterior B y la interfase i , definidas por el semi-volumen de control del nodo B .

$$\begin{aligned}
\int_i^B \int_{t_0}^t \frac{\partial(\varepsilon_l [O_2]_l)}{\partial t} \partial t \partial z &= \int_i^B [(\varepsilon_l [O_2]_l) - (\varepsilon_l [O_2]_l)^0] \partial z \\
&= [(\varepsilon_l [O_2]_l) - (\varepsilon_l [O_2]_l)^0] 0,5 \Delta z \\
&= 0,5 \Delta z \varepsilon_{l,B} [O_2]_{l,B} - 0,5 \Delta z \varepsilon_{l,B}^0 [O_2]_{l,B}^0
\end{aligned} \tag{134}$$

Se utiliza la misma notación referida en la discretización de los nodos interiores: el superíndice cero denota que la variable se evalúa en el tiempo anterior t_0 .

A continuación se integra el término de dispersión (difusión) de la ecuación (76), utilizando el mismo procedimiento detallado en la discretización de los nodos interiores:

$$\begin{aligned}
\int_{t_0}^t \int_i^B \frac{\partial}{\partial z} \left(\varepsilon_l D_{H,O_2} \frac{\partial [O_2]_l}{\partial z} \right) \partial z \partial t \\
&= \int_{t_0}^t \left[\left(\varepsilon_l D_{H,O_2} \frac{\partial [O_2]_l}{\partial z} \right)_B - \left(\varepsilon_l D_{H,O_2} \frac{\partial [O_2]_l}{\partial z} \right)_i \right] \partial t \\
&= \left(\varepsilon_l D_{H,O_2} \frac{\partial [O_2]_l}{\partial z} \right)_B \Delta t - \left(\varepsilon_l D_{H,O_2} \frac{\partial [O_2]_l}{\partial z} \right)_i \Delta t
\end{aligned} \tag{135}$$

Se introduce la condición de borde en el nodo B , señalada en la ecuación (133). Luego la ecuación (135) se reduce a:

$$\begin{aligned}
\int_{t_0}^t \int_i^B \frac{\partial}{\partial z} \left(\varepsilon_l D_{H,O_2} \frac{\partial [O_2]_l}{\partial z} \right) \partial z \partial t \\
&= 0 - \varepsilon_{l,i} D_{H,O_2,i} \Delta t \frac{[O_2]_{l,B} - [O_2]_{l,I}}{\Delta z} \\
&= \varepsilon_{l,i} D_{H,O_2,i} \Delta t \frac{[O_2]_{l,I} - [O_2]_{l,B}}{\Delta z}
\end{aligned} \tag{136}$$

$$\int_{t_0}^t \int_i^B \frac{\partial}{\partial z} \left(\varepsilon_l D_{H,O_2} \frac{\partial [O_2]_l}{\partial z} \right) \partial z \partial t = \Gamma_i [O_2]_{l,I} - \Gamma_i [O_2]_{l,B} \tag{137}$$

Donde:

$$\Gamma_i = \frac{\varepsilon_{l,i} D_{H,O_2,i} \Delta t}{\Delta z} \tag{138}$$

Con:

$$\varepsilon_{l,i} = \frac{\varepsilon_{l,B} + \varepsilon_{l,I}}{2} \quad ; \quad D_{H,O_2,i} = \frac{D_{H,O_2,B} + D_{H,O_2,I}}{2} \tag{139}$$

Se incorpora la función del esquema ley de potencia, $A(Pe)$ (ver ecuación (73)), al término Γ_i . Finalmente, la discretización del término de dispersión resulta en:

$$\int_{t_0}^t \int_i^B \frac{\partial}{\partial z} \left(\varepsilon_l D_{H,O_2} \frac{\partial [O_2]_l}{\partial z} \right) \partial z \partial t = \Gamma_i A (Pe_i) [O_2]_{l,I} - \Gamma_i A (Pe_i) [O_2]_{l,B} \quad (140)$$

Donde:

$$Pe_i = \frac{q_{l,i} \Delta z}{\varepsilon_{l,i} D_{H,O_2,i}} \quad (141)$$

Además, la velocidad superficial en la interfase i se define como:

$$q_{l,i} = \frac{q_{l,B} + q_{l,I}}{2} \quad (142)$$

La discretización del término de advección de la ecuación (76) sobre el semi-volumen de control resulta en:

$$\begin{aligned} - \int_{t_0}^t \int_i^B \frac{\partial (q_l [O_2]_l)}{\partial z} \partial z \partial t &= - \int_{t_0}^t [(q_l [O_2]_l)_B - (q_l [O_2]_l)_i] \partial t \\ &= (q_l [O_2]_l)_i \Delta t - (q_l [O_2]_l)_B \Delta t \end{aligned} \quad (143)$$

Para determinar el valor de la concentración de oxígeno en la interfase i , se aplica el esquema de diferencias en contracorriente. Entonces, la ecuación (143) se expresa como:

$$- \int_{t_0}^t \int_i^B \frac{\partial (q_l [O_2]_l)}{\partial z} \partial z \partial t = F_i [O_2]_{l,i} - F_B [O_2]_{l,B} \quad (144)$$

Donde:

$$F_i = q_{l,i} \Delta t \quad ; \quad F_B = q_{l,B} \Delta t \quad (145)$$

En la ecuación anterior, la velocidad superficial evaluada en la interfase se define de acuerdo a la ecuación (142).

Por las propiedades del esquema de diferencias en contracorriente, definidas en las ecuaciones (44) y (45), la concentración en la interfase i se puede expresar en función de las concentraciones en los nodos B e I (recordar que la posición de los nodos se invierte respecto a la discretización de la condición de borde superior; ahora el nodo B se emplaza al sur del nodo I). Luego, se tiene:

$$\begin{aligned} - \int_{t_0}^t \int_i^B \frac{\partial (q_l [O_2]_l)}{\partial z} \partial z \partial t \\ = [O_2]_{l,I} \|F_i, 0\| - [O_2]_{l,B} \|-F_i, 0\| - F_B [O_2]_{l,B} \end{aligned} \quad (146)$$

El término de reacción de la ecuación (76) se integra implícitamente respecto al tiempo (se evalúa en el tiempo presente), y las variables que lo componen se evalúan en el nodo B .

$$\int_{t_0}^t \int_i^B R_l \partial z \partial t = 0,5R_{l,B} \Delta z \Delta t \quad (147)$$

Luego, al reunir los 4 términos integrados de la ecuación (76) (definidos en las ecuaciones (134), (140), (146) y (147)), se obtiene la ecuación general del balance de oxígeno en el líquido, discretizada en el semi-volumen de control asociado al nodo situado en el borde inferior de la grilla.

$$\begin{aligned} & 0,5\Delta z \varepsilon_{l,B} [O_2]_{l,B} - 0,5\Delta z \varepsilon_{l,B}^0 [O_2]_{l,B}^0 \\ & = \Gamma_i A(Pe_i) [O_2]_{l,I} - \Gamma_i A(Pe_i) [O_2]_{l,B} + [O_2]_{l,I} \|F_i, 0\| \\ & - [O_2]_{l,B} \|-F_i, 0\| - F_B [O_2]_{l,B} + 0,5R_{l,B} \Delta z \Delta t \end{aligned} \quad (148)$$

Al realizar el procedimiento de simplificación de la ecuación general discretizada, utilizando la ecuación de continuidad (ver las operaciones aritméticas descritas en las ecuaciones (96) a (99)), se obtiene:

$$\begin{aligned} & 0,5\Delta z \varepsilon_{l,B}^0 [O_2]_{l,B} - 0,5\Delta z \varepsilon_{l,B}^0 [O_2]_{l,B}^0 \\ & = \Gamma_i A(Pe_i) [O_2]_{l,I} - \Gamma_i A(Pe_i) [O_2]_{l,B} + [O_2]_{l,I} \|F_i, 0\| \\ & - [O_2]_{l,B} \|-F_i, 0\| - F_B [O_2]_{l,B} + 0,5R_{l,B} \Delta z \Delta t \end{aligned} \quad (149)$$

Ordenando términos en la ecuación anterior:

$$\begin{aligned} & (0,5\Delta z \varepsilon_{l,B}^0 + \Gamma_i A(Pe_i) + \|-F_i, 0\| + F_B) [O_2]_{l,B} \\ & = (\Gamma_i A(Pe_i) + \|F_i, 0\|) [O_2]_{l,I} + 0,5R_{l,B} \Delta z \Delta t \\ & + 0,5\Delta z \varepsilon_{l,B}^0 [O_2]_{l,B}^0 \end{aligned} \quad (150)$$

Al utilizar la propiedad del operador $\|\cdot\|$, descrita en la ecuación (46), se modifica el paréntesis de la expresión a la izquierda de la igualdad anterior.

$$\begin{aligned} & (0,5\Delta z \varepsilon_{l,B}^0 + \Gamma_i A(Pe_i) + \|F_i, 0\| - F_i + F_B) [O_2]_{l,B} \\ & = (\Gamma_i A(Pe_i) + \|F_i, 0\|) [O_2]_{l,I} + 0,5R_{l,B} \Delta z \Delta t \\ & + 0,5\Delta z \varepsilon_{l,B}^0 [O_2]_{l,B}^0 \end{aligned} \quad (151)$$

Al incorporar el balance de masa del flujo (ecuación (48)), se desprecia la diferencia entre F_i y F_B en la ecuación (151). Entonces, se tiene:

$$\begin{aligned} & (0,5\Delta z \varepsilon_{l,B}^0 + \Gamma_i A(Pe_i) + \|F_i, 0\|) [O_2]_{l,B} \\ & = (\Gamma_i A(Pe_i) + \|F_i, 0\|) [O_2]_{l,I} + 0,5R_{l,B} \Delta z \Delta t \\ & + 0,5\Delta z \varepsilon_{l,B}^0 [O_2]_{l,B}^0 \end{aligned} \quad (152)$$

Comparando con los coeficientes obtenidos del esquema ley de potencia (ver ecuaciones (71) y (72)), la ecuación (152) se reduce a:

$$\begin{aligned} & (0,5\Delta z \varepsilon_{l,B}^0 + \Psi_I) [O_2]_{l,B} \\ & = \Psi_I [O_2]_{l,I} + 0,5R_{l,B} \Delta z \Delta t + 0,5\Delta z \varepsilon_{l,B}^0 [O_2]_{l,B}^0 \end{aligned} \quad (153)$$

Donde:

$$\Psi_I = \Gamma_i A(Pe_i) + \|F_i, 0\| \quad (154)$$

Definiendo nuevos términos:

$$a_{fi} = 0,5\Delta z \varepsilon_{l,B}^0 + \Psi_I \quad (155)$$

$$b_{fi} = 0,5R_{l,B}\Delta z \Delta t + 0,5\Delta z \varepsilon_{l,B}^0 [O_2]_{l,B}^0 \quad (156)$$

La ecuación (153) resulta en la siguiente expresión:

$$a_{fi}[O_2]_{l,B} = \Psi_I [O_2]_{l,I} + b_{fi} \quad (157)$$

5.1.3.4. Coeficientes del Algoritmo de Thomas en los Nodos Interiores y en el Borde Inferior

Se reemplazan los subíndices de la concentración de oxígeno en los nodos de la ecuación (106) por valores numéricos consecutivos. En la Figura 8 se aprecia la conversión de la notación de los nodos: para un nodo interior k cualquiera, se tiene el nodo $k + 1$, situado al sur y el nodo $k - 1$, ubicado al norte. El subíndice k puede tomar los valores $2, 3, 4, \dots, N - 1$; donde N es el número de nodos definidos en la grilla. Los nodos 1 y N denotan los nodos situados en los bordes de la grilla.

$$a_P [O_2]_{l,k} = \Psi_S [O_2]_{l,k+1} + \Psi_N [O_2]_{l,k-1} + b_P \quad (158)$$

La ecuación (158) indica que la concentración de oxígeno en el nodo k está vinculada a la concentración en los nodos vecinos $k + 1$ y $k - 1$, es decir, las concentraciones en tres nodos consecutivos interiores están definidas por una sola ecuación. Interesa encontrar una expresión que permita relacionar la concentración de dos nodos vecinos, evitando la intervención de un tercer nodo.

El algoritmo de Thomas proporciona una expresión que vincula la concentración de un nodo interior con la concentración de un solo nodo vecino, utilizando la ecuación (158). El algoritmo de Thomas consiste en un proceso recursivo de eliminación o sustitución de variables, que busca establecer la siguiente relación entre las concentraciones de dos nodos contiguos [30, 32]:

$$[O_2]_{l,k} = R_k [O_2]_{l,k+1} + S_k \quad (159)$$

Los coeficientes R_k y S_k , asociados a la concentración del nodo k , son los coeficientes del algoritmo de Thomas.

Cuando se aplica la relación definida en la ecuación (159) para la concentración del nodo $k - 1$, se obtiene:

$$[O_2]_{l,k-1} = R_{k-1} [O_2]_{l,k} + S_{k-1} \quad (160)$$

Se introduce esta última expresión en la ecuación (158).

$$a_P [O_2]_{l,k} = \Psi_S [O_2]_{l,k+1} + \Psi_N (R_{k-1} [O_2]_{l,k} + S_{k-1}) + b_P \quad (161)$$

Al reordenar la ecuación anterior:

$$(a_P - \Psi_N R_{k-1})[O_2]_{l,k} = \Psi_S [O_2]_{l,k+1} + \Psi_N S_{k-1} + b_P \quad (162)$$

$$[O_2]_{l,k} = \frac{\Psi_S}{a_P - \Psi_N R_{k-1}} [O_2]_{l,k+1} + \frac{\Psi_N S_{k-1} + b_P}{a_P - \Psi_N R_{k-1}} \quad (163)$$

Cuando se compara la relación inicial planteada (ecuación (159)) con esta última expresión, se determinan los coeficientes de Thomas, expresados según los mismos coeficientes asociados al nodo $k - 1$ (nodo vecino norte) y los términos de la ecuación general discretizada, Ψ_S , Ψ_N , a_P y b_P .

$$R_k = \frac{\Psi_S}{a_P - \Psi_N R_{k-1}} \quad (164)$$

$$S_k = \frac{\Psi_N S_{k-1} + b_P}{a_P - \Psi_N R_{k-1}} \quad (165)$$

Las ecuaciones (164) y (165) son relaciones recursivas que permiten calcular los coeficientes asociados al nodo k , a partir de los coeficientes asociados a un nodo anterior $k - 1$. Los valores de los primeros coeficientes (R_1 y S_1) se determinan por medio de la discretización de la ecuación (76) y la incorporación de condiciones de borde. Una vez que se encuentran los coeficientes del primer nodo, se pueden obtener los coeficientes de los demás nodos en la grilla, R_k y S_k , utilizando las relaciones recursivas presentadas en las ecuaciones (164) y (165).

Luego que se calculan todos los coeficientes del algoritmo de Thomas, se utiliza la relación inicial (ecuación (159)) para determinar los valores de la concentración de oxígeno en el líquido, en el tiempo presente, asociados a todos los nodos de la grilla.

5.1.3.5. Coeficientes del Algoritmo de Thomas en el Borde Superior

Se reemplazan los subíndices de la concentración de oxígeno en los nodos de la ecuación (132) por valores numéricos. En la Figura 9 se aprecia la conversión de la notación, en donde a los nodos del borde superior y primer nodo interior se les asigna el valor 1 y 2, respectivamente.

$$a_{in}[O_2]_{l,1} = \Psi_I [O_2]_{l,2} + b_{in} \quad (166)$$

Al comparar la ecuación (166) con la relación planteada en la ecuación (159), se obtienen los valores de los primeros coeficientes del algoritmo de Thomas, R_1 y S_1 .

$$R_1 = \frac{\Psi_I}{a_{in}} \quad (167)$$

$$S_1 = \frac{b_{in}}{a_{in}} \quad (168)$$

Con las ecuaciones (167) y (168) se inicia el cálculo recursivo de los otros coeficientes, mediante el uso de las ecuaciones (164) y (165).

5.1.3.6. Inicio de Cálculo del Algoritmo de Thomas

Se reemplazan los subíndices de la concentración de oxígeno en los nodos de la ecuación (157) por valores numéricos. En la Figura 10 se aprecia la conversión de la notación, en donde a los nodos del borde inferior y último nodo interior se les asigna el valor N y $N - 1$, respectivamente, con N siendo un número natural cualquiera que representa la cantidad de nodos dispuestos en la grilla.

$$a_{fi}[O_2]_{l,N} = \Psi_I[O_2]_{l,N-1} + b_{fi} \quad (169)$$

Esta última ecuación nos permite relacionar las concentraciones de oxígeno del último y penúltimo nodo.

$$[O_2]_{l,N} = \frac{\Psi_I}{a_{fi}} [O_2]_{l,N-1} + \frac{b_{fi}}{a_{fi}} \quad (170)$$

Sin embargo, por la ecuación (159), también se tiene:

$$[O_2]_{l,N-1} = R_{N-1}[O_2]_{l,N} + S_{N-1} \quad (171)$$

Donde R_{N-1} y S_{N-1} se definen a partir de las ecuaciones (164) y (165).

Al introducir la ecuación (171) en la ecuación (170), resulta:

$$[O_2]_{l,N} = \frac{\Psi_I}{a_{fi}} (R_{N-1}[O_2]_{l,N} + S_{N-1}) + \frac{b_{fi}}{a_{fi}} \quad (172)$$

Donde se obtiene finalmente:

$$[O_2]_{l,N} = \frac{\Psi_I S_{N-1} + b_{fi}}{a_{fi} - \Psi_I R_{N-1}} \quad (173)$$

Con la ecuación (173) se encuentra la concentración de oxígeno en el último nodo y, mediante el uso de la ecuación (159), se inicia el cálculo de las concentraciones en los otros nodos. De este modo, se determinan progresivamente las concentraciones de los nodos vecinos superiores (localizados al norte) hasta llegar al primer nodo, situado en la corona.

5.1.3.7. Condición Adicional: Máxima Concentración de Oxígeno en el Líquido

En la fase líquida, por la saturación, se impone una concentración máxima del oxígeno disuelto. Por simplificaciones del modelo, se asume que el solvente líquido es agua pura.

A continuación se presenta una ecuación empírica que relaciona la concentración de saturación de oxígeno en agua destilada en función de la temperatura, la presión del sistema y la presión parcial del vapor del agua (que a su vez está vinculada con el contenido de humedad en el aire) [44].

$$[O_2]_l^{max} = \frac{(P - P_{H_2O}) * 0,51528}{35 + T} \quad (174)$$

Donde:

$[O_2]_l^{max}$: Concentración de saturación del oxígeno disuelto en agua destilada, $[\text{kg}/\text{m}^3]$.

P : Presión total del sistema, $[\text{atm}]$.

P_{H_2O} : Presión parcial del vapor de agua, [atm].

T : Temperatura del sistema, [°C].

La ecuación anterior es válida para el rango de temperatura $0^\circ C < T < 30^\circ C$, que es compatible con el rango de temperatura de operación de la mayoría de las pilas/botaderos industriales.

La presión parcial del vapor de agua se calcula utilizando la siguiente igualdad [28]:

$$P_{H_2O} = \phi P_{H_2O}^{sat} \quad (175)$$

Donde:

P_{H_2O} : Presión parcial del vapor de agua, [atm].

ϕ : Humedad relativa del aire, adimensional.

$P_{H_2O}^{sat}$: Presión de saturación del vapor de agua (presión de vapor en equilibrio), [atm].

En el modelo se considera que la humedad relativa al interior de la pila (humedad evaluada en los nodos interiores) es del 100 % (en la ecuación se ingresa con valor 1). La humedad relativa evaluada en la corona y en el piso es un dato de entrada.

La presión de saturación del vapor de agua se obtiene mediante la ecuación de Antoine [23, 28]:

$$P_{H_2O}^{sat} = 10^{\left(8,07 - \frac{1730}{T - 39,75}\right)} * 0,001316 \quad (176)$$

Donde:

T : Temperatura del sistema, [K].

La temperatura del sistema es calculada por el modelo de balance de energía, desarrollado previamente por BioSigma. La temperatura es un vector que se define en el tiempo y en el espacio discreto (su valor es determinado en cada nodo de la grilla).

Las concentraciones de oxígeno en el líquido, calculadas por el algoritmo de Thomas (ecuación (159) y (173)), se corrigen si es que superan el valor de la concentración de saturación del oxígeno disuelto, encontrado en la ecuación (174). El valor de saturación se calcula en cada nodo, por lo que puede tener valores diferentes a lo largo de la profundidad del lecho.

$$[O_2]_{l,k} = \begin{cases} [O_2]_{l,k}^* & , \quad si \quad [O_2]_l^{max} > [O_2]_{l,k}^* \\ [O_2]_{l,k}^{max} & , \quad si \quad [O_2]_l^{max} < [O_2]_{l,k}^* \end{cases} \quad (177)$$

Donde:

$[O_2]_{l,k}$: Concentración final calculada de oxígeno en la fase líquida, evaluada en el nodo k , [kg/m³].

$[O_2]_{l,k}^*$: Concentración de oxígeno en la fase líquida, calculada por el algoritmo de Thomas, evaluada en el nodo k , [kg/m³].

En la ecuación (177), el subíndice k de las concentraciones puede tomar los valores 1,2,3, ..., N .

5.1.3.8. Diagrama de Flujo del Algoritmo

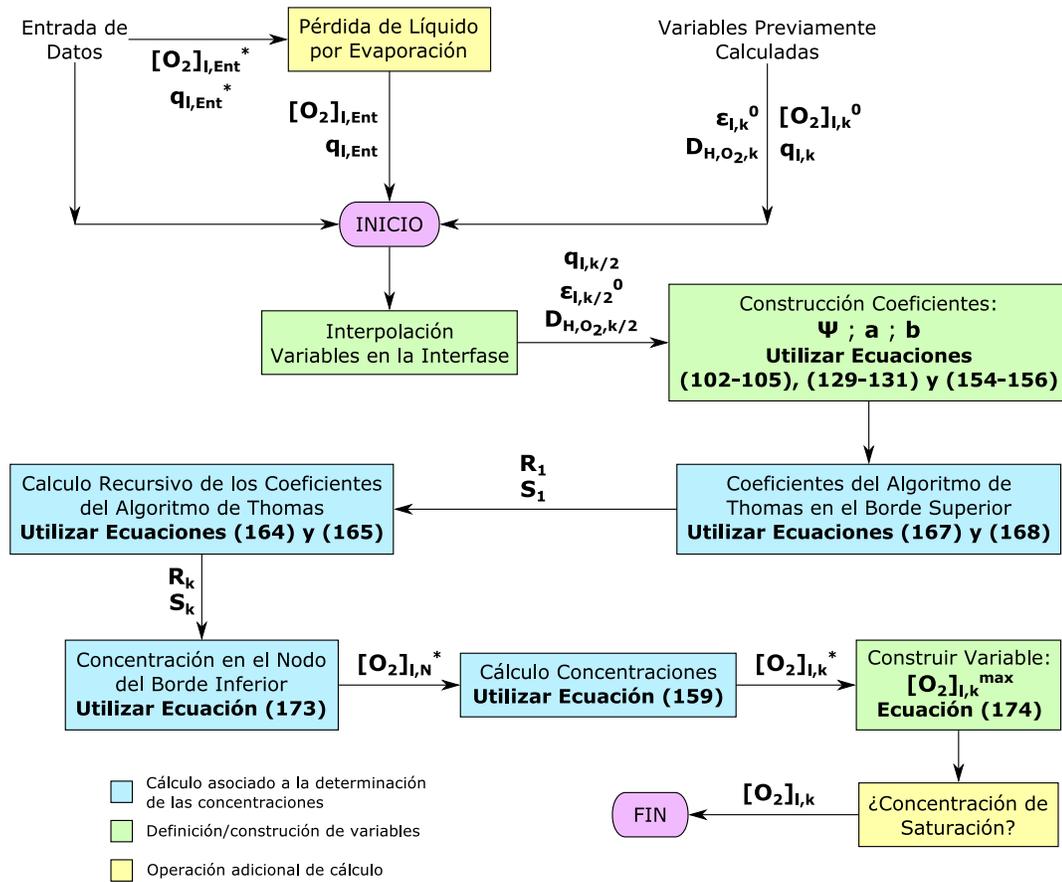


Figura 11. Diagrama de flujo del algoritmo del modelo de advección y dispersión del oxígeno en la fase líquida.

5.1.4. Estimación del Coeficiente de Difusión de Oxígeno en la Fase Gaseosa

Los coeficientes de difusión dependen de la masa y del volumen de las moléculas que difunden, la temperatura y el medio en el cual la difusión se realiza. El coeficiente de difusión de la especie gaseosa x en otro gas y , para presiones cercanas a la presión atmosférica y a temperaturas bajas o moderadas, puede ser estimado usando el método de Fuller-Schettler-Giddings [34, 45].

$$D_{x-y} = \frac{0,001T^{1,75}M_r^{1/2}}{P(V_y^{1/3} + V_x^{1/3})^2} \quad (178)$$

Con:

$$M_r = \frac{M_y + M_x}{M_y M_x} \quad (179)$$

$$V_i = \frac{M_i}{\rho_i} \quad (180)$$

Donde:

D_{x-y} : Coeficiente de Difusión de la especie gaseosa x en el gas y , [cm^2/s].

T : Temperatura del sistema, [K].

P : Presión total del sistema, [atm].

V_i : Volumen molar de la especie i , [L/mol].

M_i : Peso molecular de la especie i , [g/mol].

ρ_i : Densidad de la especie i , [g/L].

Considerando que los gases se comportan como gases ideales en el sistema, se puede utilizar la siguiente igualdad para determinar el volumen molar de cualquier especie i .

$$V_i = \frac{RT}{P} \quad (181)$$

Donde:

R : Constante de los gases ideales, 0,08206 [L·atm/(K·mol)].

Dado que el aire es una mezcla de gases (simplificado en este modelo a la mezcla de nitrógeno, oxígeno y vapor de agua), interesa relacionar los coeficientes de difusión entre las especies que lo componen para derivar el coeficiente de difusión de una especie x en el aire.

El coeficiente de difusión de una mezcla de gases (compuesta por n especies) puede estimarse al utilizar la siguiente expresión [46]:

$$D_{1-Mezcla} = \frac{1}{\frac{Y_2}{D_{1-2}} + \frac{Y_3}{D_{1-3}} + \dots + \frac{Y_n}{D_{1-n}}} \quad (182)$$

Con:

$$Y_n = \frac{y_n}{y_2 + y_3 + \dots + y_n} = \frac{y_n}{1 - y_1} \quad (183)$$

Reemplazando los subíndices de las ecuaciones (182) y (183) para la mezcla de gases considerada en el sistema, se tiene:

$$D_{O_2-Mezcla} = \frac{1}{\frac{Y_{N_2}}{D_{O_2-N_2}} + \frac{Y_{H_2O}}{D_{O_2-H_2O}}} \quad (184)$$

Con:

$$Y_{N_2} = \frac{y_{N_2}}{y_{H_2O} + y_{N_2}} = \frac{y_{N_2}}{1 - y_{O_2}} \quad (185)$$

$$Y_{H_2O} = \frac{y_{H_2O}}{y_{H_2O} + y_{N_2}} = \frac{y_{H_2O}}{1 - y_{O_2}} \quad (186)$$

Donde:

$D_{O_2-Mezcla}$: Coeficiente de difusión del oxígeno en la mezcla de gases (aire, considerando como componentes: oxígeno, vapor de agua y nitrógeno), [cm²/s].

$D_{1-Mezcla}$: Coeficiente de difusión del componente 1 en la mezcla de gases, [cm²/s].

D_{1-n} : Coeficiente de difusión de sistema binario: componente 1 difunde a través del componente n , [cm²/s].

Y_n : Razón entre la fracción molar del componente n en la mezcla de gases y la sumatoria de las fracciones molares de los componentes menos la fracción molar del componente 1, adimensional.

y_i : Fracción molar del componente i en la mezcla de gases, adimensional.

Los coeficientes de difusión binarios (oxígeno-nitrógeno y oxígeno-vapor de agua) de la ecuación (184) se determinan con la ecuación (178). Con la ecuación (184) se obtiene el coeficiente de difusión del oxígeno en la fase gaseosa.

$$D_{g,O_2} = D_{O_2-Mezcla} * \left(\frac{24 * 60 * 60}{10000} \right) \left[\frac{m^2}{d} \right] \quad (187)$$

Al introducir el resultado de la ecuación (187) en la ecuación (27), se obtiene el coeficiente de difusión efectiva del oxígeno en la fase gaseosa. Para simplificar la nomenclatura, este coeficiente se denominará D_{e,O_2} .

5.1.5. Modelo de Advección y Difusión del Oxígeno en la Fase Gaseosa

En el planteamiento de las ecuaciones de esta sección se utiliza el eje de referencia vertical que apunta hacia la corona de la pila. Con la definición de ecuación general de conservación de masa (ver ecuación (22)), se construye la expresión que describe el balance de oxígeno en la fase gaseosa.

$$\frac{\partial(\varepsilon_g [O_2]_g)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\varepsilon_g D_{e,O_2} \frac{\partial [O_2]_g}{\partial z} \right) - \frac{\partial(\varepsilon_g v_g [O_2]_g)}{\partial z} + R_g \quad (188)$$

Donde:

$[O_2]_g$: Concentración de oxígeno en la fase gaseosa, [kg/m³].

ε_g : Fracción volumétrica de gas en el lecho, [m³ gas / m³ lecho].

D_{e,O_2} : Coeficiente de difusión efectiva del oxígeno en la fase gaseosa, [m²/d].

v_g : Velocidad intersticial del gas en la dirección z , [$\text{m}^3/\text{d}/\text{m}^2 \equiv \text{m}/\text{d}$].

R_g : Tasa de aporte/consumo de la especie en la fase gaseosa, [$\text{kg}/(\text{m}^3 \cdot \text{d})$].

Se debe tomar en cuenta que en la ecuación (188), el término de advección tendría el signo opuesto respecto a la ecuación (74), si es que se considerase el mismo eje de referencia usado para el balance de oxígeno en el líquido. Lo anterior se debe a que la velocidad intersticial del gas, para los casos de aireación forzada y convección natural, tiene preferencialmente un sentido contrario al flujo del líquido (el aire se mueve desde el piso hasta la corona de la pila).

Empleando los mismos argumentos expuestos en el balance de oxígeno en la fase líquida, la velocidad intersticial del gas que atraviesa el lecho de mineral se define como:

$$v_g = \frac{Q_g}{A_{ef}} = \frac{Q_g}{A_r \varepsilon_g} = \frac{q_g}{\varepsilon_g} \quad (189)$$

Donde:

Q_g : Flujo del gas, [m^3/d].

A_{ef} : Área efectiva de circulación o escurrimiento del fluido, [m^2].

A_r : Área de riego (área transversal total del medio poroso atravesado por el fluido), [m^2].

q_g : Velocidad superficial (velocidad de Darcy) del gas [$\text{m}^3/\text{d}/\text{m}^2 \equiv \text{m}/\text{d}$].

Al reemplazar el término de la velocidad intersticial del gas de la ecuación (188) por la expresión definida en la ecuación (189), se obtiene:

$$\frac{\partial(\varepsilon_g [O_2]_g)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\varepsilon_g D_{e,O_2} \frac{\partial [O_2]_g}{\partial z} \right) - \frac{\partial(q_g [O_2]_g)}{\partial z} + R_g \quad (190)$$

En la ecuación anterior, las variables ε_g y q_g se determinan a través del modelo de fluidodinámica de la fase gaseosa, desarrollado posteriormente en este trabajo.

A continuación se discretizan los términos de acumulación, difusión, advección y reacción de la ecuación (190) para los nodos interiores de la grilla, definidos en la Figura 12.

El sentido de integración de los términos en el espacio se establece según el sentido de movimiento preferencial del gas (se integra desde la cara norte hasta la cara sur de cada volumen de control).

5.1.5.1. Discretización de la Ecuación en los Nodos Interiores

La discretización del espacio modelado en volúmenes de control de los nodos interiores se detalla en la siguiente figura. La metodología de discretización es similar a la presentada en la sección homónima del capítulo del balance de oxígeno en la fase líquida, por lo que se resumirán algunos procedimientos.

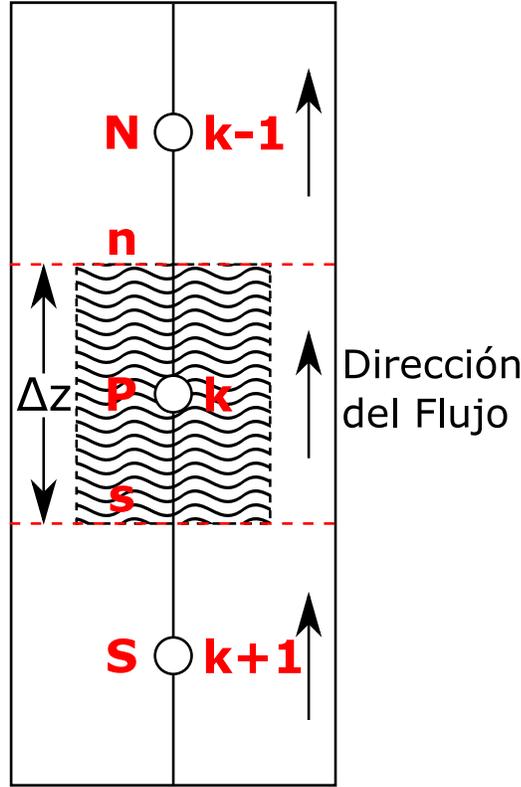


Figura 12. Volúmenes de control definidos en los nodos interiores, para el modelo de advección y dispersión del oxígeno en el aire.

Se presenta la discretización del término de acumulación de la ecuación (190):

$$\begin{aligned}
 \int_s^n \int_{t_0}^t \frac{\partial(\varepsilon_g [O_2]_g)}{\partial t} \partial t \partial z &= \int_s^n [(\varepsilon_g [O_2]_g) - (\varepsilon_g [O_2]_g)^0] \partial z \\
 &= [(\varepsilon_g [O_2]_g) - (\varepsilon_g [O_2]_g)^0] \Delta z \\
 &= \Delta z \varepsilon_{g,P} [O_2]_{g,P} - \Delta z \varepsilon_{g,P}^0 [O_2]_{g,P}^0
 \end{aligned} \tag{191}$$

Al integrar el término de difusión de la ecuación (190):

$$\begin{aligned}
 \int_{t_0}^t \int_s^n \frac{\partial}{\partial z} \left(\varepsilon_g D_{e,O_2} \frac{\partial [O_2]_g}{\partial z} \right) \partial z \partial t &= \int_{t_0}^t \left[\left(\varepsilon_g D_{e,O_2} \frac{\partial [O_2]_g}{\partial z} \right)_n - \left(\varepsilon_g D_{e,O_2} \frac{\partial [O_2]_g}{\partial z} \right)_s \right] \partial t \\
 &= \left(\varepsilon_g D_{e,O_2} \frac{\partial [O_2]_g}{\partial z} \right)_n \Delta t - \left(\varepsilon_g D_{e,O_2} \frac{\partial [O_2]_g}{\partial z} \right)_s \Delta t
 \end{aligned} \tag{192}$$

Utilizando expresiones similares a las definidas en las ecuaciones (73), (81), (82), (83) y (85), en donde se considera el cambio de sentido del eje de referencia para la integración numérica y se reemplazan los parámetros para la fase gaseosa, la ecuación (192) se reduce a:

$$\begin{aligned}
\int_{t_0}^t \int_s^n \frac{\partial}{\partial z} \left(\varepsilon_g D_{e,o_2} \frac{\partial [O_2]_g}{\partial z} \right) \partial z \partial t & \\
= \Gamma_n A(Pe_n) [O_2]_{g,N} + \Gamma_s A(Pe_s) [O_2]_{g,S} & \\
- (\Gamma_n A(Pe_n) + \Gamma_s A(Pe_s)) [O_2]_{g,P} &
\end{aligned} \tag{193}$$

El número de Péclet, evaluado en las interfases n y s , se define como (ver ecuaciones (52) y (57)):

$$Pe_n = \frac{q_{g,n} \Delta z}{\varepsilon_{g,n} D_{e,o_2,n}} \quad ; \quad Pe_s = \frac{q_{g,s} \Delta z}{\varepsilon_{g,s} D_{e,o_2,s}} \tag{194}$$

A continuación se discretiza el término de advección de la ecuación (190):

$$\begin{aligned}
- \int_{t_0}^t \int_s^n \frac{\partial (q_g [O_2]_g)}{\partial z} \partial z \partial t &= - \int_{t_0}^t [(q_g [O_2]_g)_n - (q_g [O_2]_g)_s] \partial t \\
&= (q_g [O_2]_g)_s \Delta t - (q_g [O_2]_g)_n \Delta t
\end{aligned} \tag{195}$$

Se incorporan expresiones similares a la ecuación (89), reemplazando los parámetros para la fase gaseosa.

$$- \int_{t_0}^t \int_s^n \frac{\partial (q_g [O_2]_g)}{\partial z} \partial z \partial t = F_s [O_2]_{g,S} - F_n [O_2]_{g,N} \tag{196}$$

Debido a que se invirtió el sentido del eje de referencia, el esquema de diferencias en contracorriente establece ahora las siguientes igualdades:

$$F_s [O_2]_{g,S} = [O_2]_{g,S} \|F_s, 0\| - [O_2]_{g,P} \|-F_s, 0\| \tag{197}$$

$$F_n [O_2]_{g,N} = [O_2]_{g,P} \|F_n, 0\| - [O_2]_{g,N} \|-F_n, 0\| \tag{198}$$

Utilizando las propiedades definidas en las ecuaciones (49), (197) y (198), se tiene:

$$\begin{aligned}
- \int_{t_0}^t \int_s^n \frac{\partial (q_g [O_2]_g)}{\partial z} \partial z \partial t & \\
= [O_2]_{g,S} \|F_s, 0\| + [O_2]_{g,N} \|-F_n, 0\| & \\
- [O_2]_{g,P} (\|F_s, 0\| + \|-F_n, 0\|) &
\end{aligned} \tag{199}$$

La discretización del término de reacción de la ecuación (190), resulta:

$$\int_{t_0}^t \int_s^n R_g \partial z \partial t = R_{g,P} \Delta z \Delta t \tag{200}$$

Luego, al reunir los 4 términos integrados de la ecuación (190) (definidos en las ecuaciones (191), (193), (199) y (200)), se obtiene la ecuación general del balance de oxígeno en el aire, discretizada en volúmenes de control para los nodos interiores de la grilla.

$$\begin{aligned}
& \Delta z \varepsilon_{g,P} [O_2]_{g,P} - \Delta z \varepsilon_{g,P}^0 [O_2]_{g,P}^0 \\
& = \Gamma_n A(Pe_n) [O_2]_{g,N} + \Gamma_s A(Pe_s) [O_2]_{g,S} \\
& - (\Gamma_n A(Pe_n) + \Gamma_s A(Pe_s)) [O_2]_{g,P} + [O_2]_{g,S} \|F_s, 0\| \\
& + [O_2]_{g,N} \|-F_n, 0\| - [O_2]_{g,P} (\|F_s, 0\| + \|-F_n, 0\|) \\
& + R_{g,P} \Delta z \Delta t
\end{aligned} \tag{201}$$

Al realizar el procedimiento de simplificación de la ecuación general discretizada, utilizando la ecuación de continuidad (ver las operaciones aritméticas descritas en las ecuaciones (96) a (99)), se obtiene:

$$\begin{aligned}
& \Delta z \varepsilon_{g,P}^0 [O_2]_{g,P} - \Delta z \varepsilon_{g,P}^0 [O_2]_{g,P}^0 \\
& = \Gamma_n A(Pe_n) [O_2]_{g,N} + \Gamma_s A(Pe_s) [O_2]_{g,S} \\
& - (\Gamma_n A(Pe_n) + \Gamma_s A(Pe_s)) [O_2]_{g,P} + [O_2]_{g,S} \|F_s, 0\| \\
& + [O_2]_{g,N} \|-F_n, 0\| - [O_2]_{g,P} (\|F_s, 0\| + \|-F_n, 0\|) \\
& + R_{g,P} \Delta z \Delta t
\end{aligned} \tag{202}$$

Ordenando términos en la ecuación anterior:

$$\begin{aligned}
& (\Delta z \varepsilon_{g,P}^0 + \Gamma_s A(Pe_s) + \|F_s, 0\| + \Gamma_n A(Pe_n) + \|-F_n, 0\|) [O_2]_{g,P} \\
& = (\Gamma_s A(Pe_s) + \|F_s, 0\|) [O_2]_{g,S} \\
& + (\Gamma_n A(Pe_n) + \|-F_n, 0\|) [O_2]_{g,N} + R_{g,P} \Delta z \Delta t \\
& - \Delta z \varepsilon_{g,P}^0 [O_2]_{g,P}^0
\end{aligned} \tag{203}$$

Comparando con los coeficientes obtenidos del esquema ley de potencia (ver ecuaciones (71) y (72)), la ecuación (203) se reduce a:

$$\begin{aligned}
& (\Delta z \varepsilon_{g,P}^0 + \Psi_S + \Psi_N) [O_2]_{g,P} \\
& = \Psi_S [O_2]_{g,S} + \Psi_N [O_2]_{g,N} + R_{g,P} \Delta z \Delta t \\
& + \Delta z \varepsilon_{g,P}^0 [O_2]_{g,P}^0
\end{aligned} \tag{204}$$

Donde:

$$\Psi_S = \Gamma_s A(Pe_s) + \|F_s, 0\| \tag{205}$$

$$\Psi_N = \Gamma_n A(Pe_n) + \|-F_n, 0\| \tag{206}$$

Definiendo nuevos términos:

$$a_P = \Delta z \varepsilon_{g,P}^0 + \Psi_S + \Psi_N \tag{207}$$

$$b_P = R_{g,P} \Delta z \Delta t + \Delta z \varepsilon_{g,P}^0 [O_2]_{g,P}^0 \tag{208}$$

La ecuación (204) resulta en la siguiente expresión:

$$a_P [O_2]_{g,P} = \Psi_S [O_2]_{g,S} + \Psi_N [O_2]_{g,N} + b_P \quad (209)$$

5.1.5.2. Discretización de la Ecuación en el Borde Superior

En el borde superior, a través de la convección, existe interacción entre el aire del exterior (atmósfera) con la superficie de la pila. La transferencia de masa por convección involucra el transporte de especies entre una superficie de frontera (la corona, que limita el flujo vertical de aire con la fase gaseosa externa) y un fluido en movimiento en régimen turbulento (aire exterior) [39, 47].

En la parte superior, por donde sale el flujo de aire que atraviesa la pila, se aplica la siguiente condición de borde.

$$-\varepsilon_g D_{e,O_2} \frac{\partial [O_2]_g}{\partial z} + q_g [O_2]_g = -h_{O_2} ([O_2]_{g,\infty} - [O_2]_g) \quad (210)$$

Donde:

h_{O_2} : Coeficiente de transferencia convectiva de oxígeno para un flujo turbulento, paralelo a una interfase plana, [m/d].

$[O_2]_{g,\infty}$: Concentración de oxígeno en la atmósfera (concentración invariante para una cierta distancia sobre la corona de la pila), [kg/m³].

Esta condición de borde impone que la concentración de oxígeno en la corona debe ser igual a la cantidad de oxígeno suministrado por el flujo, más la cantidad aportada por la atmósfera. El oxígeno es transportado gracias al movimiento del flujo exterior de aire (corriente de aire o viento sobre la corona) y la difusión. La fuerza impulsora de la transferencia de oxígeno es la diferencia de concentraciones entre la interfase y el seno de la fase (aire en el exterior).

En la ecuación (210) se asume que el transporte de oxígeno se realiza a través de la superficie horizontal del lecho (extensión de la corona, en donde la superficie se supone plana), y se considera que el flujo del aire es paralelo a la corona. Se establece que no existe transferencia de oxígeno en los taludes de la pila.

En la siguiente figura se esquematiza la condición de borde impuesta.

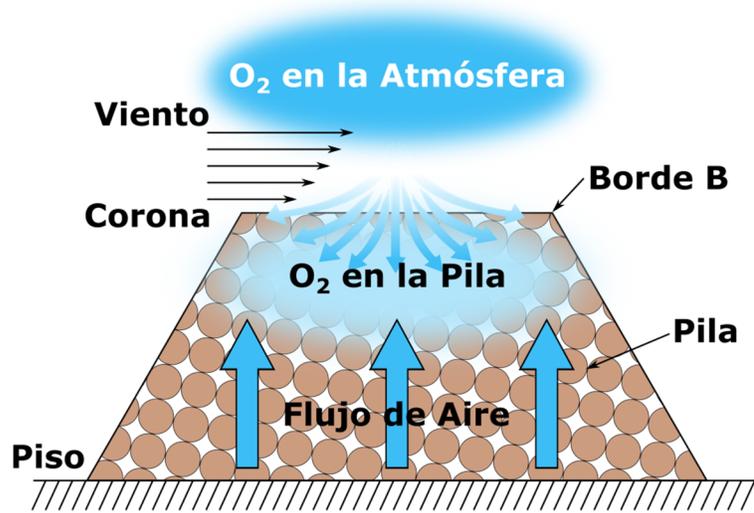


Figura 13. Transferencia de oxígeno por convección en la corona de la pila.

La concentración de oxígeno en la atmósfera se calcula utilizando la ley de los gases ideales [28]:

$$[O_2]_{g,\infty} = \frac{P_{O_2,amb} M_{O_2}}{R \overline{T}_{amb}} \quad (211)$$

Donde:

$P_{O_2,amb}$: Presión parcial de oxígeno en el ambiente, [atm].

M_{O_2} : Peso molecular del oxígeno, [g/mol].

R : Constante de los gases ideales, 0,08206 [L·atm/(K·mol)].

\overline{T}_{amb} : Temperatura ambiente promedio (calculado por la media aritmética de las temperaturas mínima y máxima ambientales), [K].

El coeficiente de transferencia h_{O_2} depende de las propiedades físicas relevantes del fluido, la geometría de la superficie de transferencia y la velocidad promedio del fluido. Gracias al análisis adimensional de las propiedades de los fluidos, es posible establecer relaciones que permitan estimar el coeficiente h_{O_2} .

Se definen los números adimensionales de Reynolds y de Schmidt [39, 47]:

$$Re = \frac{\overline{v}_{g,\infty} \rho_{air} L_{pila}}{\mu_{air}} \quad (212)$$

$$Sc = \frac{\mu_{air}}{\rho_{air} D_{g,O_2}} \quad (213)$$

Donde:

Re : Número de Reynolds, adimensional.

Sc : Número de Schmidt, adimensional.

$\overline{v_{g,\infty}}$: Velocidad promedio en el seno del fluido (velocidad del aire / viento), [m/s].

ρ_{air} : Densidad del aire situado sobre la corona, [kg/m³].

L_{pila} : Largo de la corona de la pila, [m].

μ_{air} : Viscosidad dinámica del aire situado sobre la corona, [kg/(m·s)].

D_{g,O_2} : Coeficiente de difusión del oxígeno en el aire situado sobre la corona, [m²/s].

Adicionalmente, para la convección dada por un flujo externo sobre una superficie plana, se tiene la siguiente expresión empírica [39]:

$$Sh = 0,0296Re^{4/5}Sc^{1/3} \quad (214)$$

Donde:

Sh : Número de Sherwood, adimensional.

La relación anterior es aplicable cuando el flujo está en régimen turbulento local y se cumplen las siguientes condiciones:

$$Re \leq 10^8 \quad ; \quad 0,6 \leq Sc \leq 50 \quad (215)$$

Estas restricciones se cumplen en condiciones normales de viento en una pila/botadero.

Además el número de Sherwood se define como [39, 47]:

$$Sh = \frac{h_{O_2}L_{pila}}{D_{e,O_2,air}} \quad (216)$$

El número de Reynolds representa la razón entre los términos inerciales y viscosos de la ecuación de conservación de cantidad de movimiento, que gobiernan el movimiento de un fluido. A su vez, el número de Schmidt representa el cociente entre la difusión de cantidad de movimiento y la difusión de masa de un fluido, y el número de Sherwood el cociente entre la transferencia de masa total (convectiva) y la transferencia de masa por difusión en un fluido [28, 31, 39].

De esta forma, con las ecuaciones (212), (213), (214) y (216) es posible determinar el coeficiente de transferencia convectiva de oxígeno. Se debe realizar la conversión de unidades, de segundo a día, para utilizar h_{O_2} en la ecuación (210).

El semi-volumen de control, asociado al nodo situado en el borde superior, se muestra en la siguiente figura. Una vez que la ecuación (190) ha sido integrada en el espacio discreto, se acopla la condición de borde de la ecuación (210).

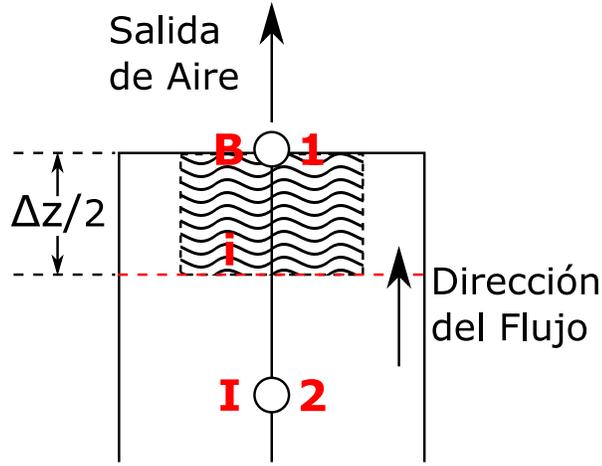


Figura 14. Semi-volumen de control definido en el borde superior de la pila, para el modelo de advección y dispersión del oxígeno en el aire.

Se presenta la discretización del término de acumulación de la ecuación (190):

$$\begin{aligned}
 \int_i^B \int_{t_0}^t \frac{\partial(\varepsilon_g [O_2]_g)}{\partial t} \partial t \partial z &= \int_i^B [(\varepsilon_g [O_2]_g) - (\varepsilon_g [O_2]_g)^0] \partial z \\
 &= [(\varepsilon_g [O_2]_g) - (\varepsilon_g [O_2]_g)^0] 0,5 \Delta z \\
 &= 0,5 \Delta z \varepsilon_{g,B} [O_2]_{g,B} - 0,5 \Delta z \varepsilon_{g,B}^0 [O_2]_{g,B}^0
 \end{aligned} \tag{217}$$

Al integrar el término de difusión de la ecuación (190):

$$\begin{aligned}
 \int_{t_0}^t \int_i^B \frac{\partial}{\partial z} \left(\varepsilon_g D_{e,O_2} \frac{\partial [O_2]_g}{\partial z} \right) \partial z \partial t &= \\
 &= \left(\varepsilon_g D_{e,O_2} \frac{\partial [O_2]_g}{\partial z} \right)_B \Delta t - \left(\varepsilon_g D_{e,O_2} \frac{\partial [O_2]_g}{\partial z} \right)_i \Delta t
 \end{aligned} \tag{218}$$

Utilizando expresiones similares a las definidas en las ecuaciones (73), (112) y (113), en donde se considera el cambio de sentido del eje de referencia para la integración numérica y se reemplazan los parámetros para la fase gaseosa, la ecuación (218) se reduce a:

$$\begin{aligned}
 \int_{t_0}^t \int_i^B \frac{\partial}{\partial z} \left(\varepsilon_g D_{e,O_2} \frac{\partial [O_2]_g}{\partial z} \right) \partial z \partial t &= \\
 &= \left(\varepsilon_g D_{e,O_2} \frac{\partial [O_2]_g}{\partial z} \right)_B \Delta t - \Gamma_i A (Pe_i) [O_2]_{g,B} \\
 &\quad + \Gamma_i A (Pe_i) [O_2]_{g,I}
 \end{aligned} \tag{219}$$

Donde:

$$Pe_i = \frac{q_{g,i}\Delta z}{\varepsilon_{g,i}D_{e,O_2,i}} \quad (220)$$

A continuación se discretiza el término de advección de la ecuación (190):

$$\begin{aligned} - \int_{t_0}^t \int_i^B \frac{\partial(q_g[O_2]_g)}{\partial z} \partial z \partial t &= - \int_{t_0}^t [(q_g[O_2]_g)_B - (q_g[O_2]_g)_i] \partial t \\ &= (q_g[O_2]_g)_i \Delta t - (q_g[O_2]_g)_B \Delta t \end{aligned} \quad (221)$$

Se incorpora una expresión similar a la ecuación (119), reemplazando los parámetros para la fase gaseosa, y se ocupan las propiedades del esquema de diferencias en contracorriente para el eje de referencia invertido, definidas en las ecuaciones (197) y (198).

$$\begin{aligned} - \int_{t_0}^t \int_i^B \frac{\partial(q_g[O_2]_g)}{\partial z} \partial z \partial t \\ = [O_2]_{g,I} \|F_i, 0\| - [O_2]_{g,B} \| -F_i, 0\| - (q_g[O_2]_g)_B \Delta t \end{aligned} \quad (222)$$

La discretización del término de reacción de la ecuación (190), resulta:

$$\int_{t_0}^t \int_i^B R_g \partial z \partial t = 0,5R_{g,B}\Delta z \Delta t \quad (223)$$

Luego, al reunir los 4 términos integrados de la ecuación (190) (definidos en las ecuaciones (217), (219), (222) y (223)), se obtiene la ecuación general del balance de oxígeno en el aire, discretizada en el semi-volumen de control asociado al nodo situado en el borde superior de la grilla.

$$\begin{aligned} 0,5\Delta z \varepsilon_{g,B} [O_2]_{g,B} - 0,5\Delta z \varepsilon_{g,B}^0 [O_2]_{g,B}^0 \\ = \left(\varepsilon_g D_{e,O_2} \frac{\partial [O_2]_g}{\partial z} \right)_B \Delta t - \Gamma_i A (Pe_i) [O_2]_{g,B} \\ + \Gamma_i A (Pe_i) [O_2]_{g,I} + [O_2]_{g,I} \|F_i, 0\| - [O_2]_{g,B} \| -F_i, 0\| \\ - (q_g [O_2]_g)_B \Delta t + 0,5R_{g,B} \Delta z \Delta t \end{aligned} \quad (224)$$

La ecuación anterior se compacta al agrupar los términos de advección y difusión evaluados en el nodo B .

$$\begin{aligned} 0,5\Delta z \varepsilon_{g,B} [O_2]_{g,B} - 0,5\Delta z \varepsilon_{g,B}^0 [O_2]_{g,B}^0 \\ = \Gamma_i A (Pe_i) [O_2]_{g,I} - \Gamma_i A (Pe_i) [O_2]_{g,B} \\ - \left[-\varepsilon_g D_{e,O_2} \frac{\partial [O_2]_g}{\partial z} + q_g [O_2]_g \right]_B \Delta t + [O_2]_{g,I} \|F_i, 0\| \\ - [O_2]_{g,B} \| -F_i, 0\| + 0,5R_{g,B} \Delta z \Delta t \end{aligned} \quad (225)$$

Se introduce la condición de borde en el nodo B , al notar que los términos dentro del paréntesis cuadrado corresponden a la expresión de la izquierda de la ecuación (210).

$$\begin{aligned}
& 0,5\Delta z\varepsilon_{g,B}[O_2]_{g,B} - 0,5\Delta z\varepsilon_{g,B}^0[O_2]_{g,B}^0 \\
& = \Gamma_i A(Pe_i)[O_2]_{g,I} - \Gamma_i A(Pe_i)[O_2]_{g,B} \\
& + h_{O_2}([O_2]_{g,\infty} - [O_2]_{g,B})\Delta t + [O_2]_{g,I}\|F_i, 0\| \\
& - [O_2]_{g,B}\|-F_i, 0\| + 0,5R_{g,B}\Delta z\Delta t
\end{aligned} \tag{226}$$

Al realizar el procedimiento de simplificación de la ecuación general discretizada, utilizando la ecuación de continuidad (ver las operaciones aritméticas descritas en las ecuaciones (96) a (99)), se obtiene:

$$\begin{aligned}
& 0,5\Delta z\varepsilon_{g,B}^0[O_2]_{g,B} - 0,5\Delta z\varepsilon_{g,B}^0[O_2]_{g,B}^0 \\
& = \Gamma_i A(Pe_i)[O_2]_{g,I} - \Gamma_i A(Pe_i)[O_2]_{g,B} \\
& + h_{O_2}([O_2]_{g,\infty} - [O_2]_{g,B})\Delta t + [O_2]_{g,I}\|F_i, 0\| \\
& - [O_2]_{g,B}\|-F_i, 0\| + 0,5R_{g,B}\Delta z\Delta t
\end{aligned} \tag{227}$$

Ordenando términos en la ecuación anterior:

$$\begin{aligned}
& (0,5\Delta z\varepsilon_{g,B}^0 + \Gamma_i A(Pe_i) + \|-F_i, 0\| + h_{O_2}\Delta t)[O_2]_{g,B} \\
& = (\Gamma_i A(Pe_i) + \|F_i, 0\|)[O_2]_{g,I} + h_{O_2}\Delta t[O_2]_{g,\infty} \\
& + 0,5R_{g,B}\Delta z\Delta t + 0,5\Delta z\varepsilon_{g,B}^0[O_2]_{g,B}^0
\end{aligned} \tag{228}$$

Al utilizar la propiedad del operador $\|\cdot\|$, descrita en la ecuación (46), se modifica el paréntesis de la expresión a la izquierda de la igualdad anterior.

$$\begin{aligned}
& (0,5\Delta z\varepsilon_{g,B}^0 + \Gamma_i A(Pe_i) + \|F_i, 0\| - F_i + h_{O_2}\Delta t)[O_2]_{g,B} \\
& = (\Gamma_i A(Pe_i) + \|F_i, 0\|)[O_2]_{g,I} + h_{O_2}\Delta t[O_2]_{g,\infty} \\
& + 0,5R_{g,B}\Delta z\Delta t + 0,5\Delta z\varepsilon_{g,B}^0[O_2]_{g,B}^0
\end{aligned} \tag{229}$$

Comparando con los coeficientes obtenidos del esquema ley de potencia (ver ecuaciones (71) y (72)), la ecuación (229) se reduce a:

$$\begin{aligned}
& (0,5\Delta z\varepsilon_{g,B}^0 + \Psi_I - F_i + h_{O_2}\Delta t)[O_2]_{g,B} \\
& = \Psi_I[O_2]_{g,I} + h_{O_2}\Delta t[O_2]_{g,\infty} + 0,5R_{g,B}\Delta z\Delta t \\
& + 0,5\Delta z\varepsilon_{g,B}^0[O_2]_{g,B}^0
\end{aligned} \tag{230}$$

Donde:

$$\Psi_I = \Gamma_i A(Pe_i) + \|F_i, 0\| \tag{231}$$

Definiendo nuevos términos:

$$a_{in} = 0,5\Delta z\varepsilon_{g,B}^0 + \Psi_I - F_i + h_{O_2}\Delta t \tag{232}$$

$$b_{in} = h_{O_2}\Delta t[O_2]_{g,\infty} + 0,5R_{g,B}\Delta z\Delta t + 0,5\Delta z\varepsilon_{g,B}^0[O_2]_{g,B}^0 \tag{233}$$

La ecuación (230) resulta en la siguiente expresión:

$$a_{in}[O_2]_{g,B} = \Psi_I[O_2]_{g,I} + b_{in} \quad (234)$$

5.1.5.3. Discretización de la Ecuación en el Borde Inferior

Se aplica la siguiente condición de borde en el piso de la pila/botadero/columna:

$$-\varepsilon_g D_{e,O_2} \frac{\partial [O_2]_g}{\partial z} + q_g [O_2]_g = q_{g,Ent} [O_2]_{g,Ent} \quad (235)$$

El término a la derecha de la igualdad representa al flujo de aire inyectado (o flujo de entrada del aire por convección natural) en la pila/botadero/columna. Tanto el término $q_{g,Ent}$ como $[O_2]_{g,Ent}$ son valores conocidos para cualquier tiempo t modelado. Los términos situados a la izquierda de la igualdad están evaluados en el último nodo de la grilla, situado en el piso.

La derivación de la condición de borde se obtiene al considerar que, en el último nodo, los flujos difusivo y advectivo de transporte de oxígeno son iguales al flujo de oxígeno inyectado en la base del lecho (para convección natural se supone un flujo de inyección de aire muy pequeño o nulo). Lo anterior es equivalente a suponer que el transporte de oxígeno por el aire, en el piso de la pila, se debe exclusivamente al flujo inyectado que entra en el sistema [43].

El semi-volumen de control, asociado al nodo situado en el borde inferior, se muestra en la siguiente figura. Una vez que la ecuación (190) ha sido integrada en el espacio discreto, se acopla la condición de borde definida en la ecuación (235).

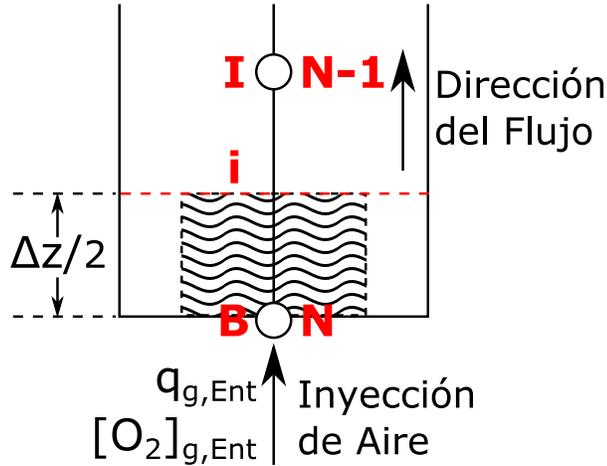


Figura 15. Semi-volumen de control definido en el borde inferior de la pila, para el modelo de advección y dispersión del oxígeno en el aire.

Se presenta la discretización del término de acumulación de la ecuación (190):

$$\begin{aligned} \int_B^i \int_{t_0}^t \frac{\partial (\varepsilon_g [O_2]_g)}{\partial t} \partial t \partial z &= \int_B^i [(\varepsilon_g [O_2]_g) - (\varepsilon_g [O_2]_g)^0] \partial z \\ &= [(\varepsilon_g [O_2]_g) - (\varepsilon_g [O_2]_g)^0] 0,5\Delta z \\ &= 0,5\Delta z \varepsilon_{g,B} [O_2]_{g,B} - 0,5\Delta z \varepsilon_{g,B}^0 [O_2]_{g,B}^0 \end{aligned} \quad (236)$$

Se integra el término de difusión de la ecuación (190). Se emplean expresiones similares a las definidas en las ecuaciones (73), (138), (139) y (220), en donde se considera el cambio de sentido

del eje de referencia para la integración numérica y se reemplazan los parámetros para la fase gaseosa.

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^t \int_B^i \frac{\partial}{\partial z} \left(\varepsilon_g D_{e,O_2} \frac{\partial [O_2]_g}{\partial z} \right) \partial z \partial t = \\ = \Gamma_i A(Pe_i) [O_2]_{g,I} - \Gamma_i A(Pe_i) [O_2]_{g,B} \\ - \left(\varepsilon_g D_{e,O_2} \frac{\partial [O_2]_g}{\partial z} \right)_B \Delta t \end{aligned} \quad (237)$$

A continuación se discretiza el término de advección de la ecuación (190). Se incorpora una expresión similar a la ecuación (119), reemplazando los parámetros para la fase gaseosa, y se ocupan las propiedades del esquema de diferencias en contracorriente para el eje de referencia invertido, definidas en las ecuaciones (197) y (198) (recordar que la posición de los nodos se invierte respecto a la discretización de la condición de borde superior; ahora el nodo B se emplaza al sur del nodo I).

$$\begin{aligned} - \int_{t_0}^t \int_B^i \frac{\partial (q_g [O_2]_g)}{\partial z} \partial z \partial t \\ = (q_g [O_2]_g)_B \Delta t - [O_2]_{g,B} \|F_i, 0\| + [O_2]_{g,I} \|-F_i, 0\| \end{aligned} \quad (238)$$

La discretización del término de reacción de la ecuación (190), resulta:

$$\int_{t_0}^t \int_B^i R_g \partial z \partial t = 0,5 R_{g,B} \Delta z \Delta t \quad (239)$$

Luego, al reunir los 4 términos integrados de la ecuación (190) (definidos en las ecuaciones (236), (237), (238) y (239)), se obtiene la ecuación general del balance de oxígeno en el aire, discretizada en el semi-volumen de control asociado al nodo situado en el borde inferior de la grilla.

$$\begin{aligned} 0,5 \Delta z \varepsilon_{g,B} [O_2]_{g,B} - 0,5 \Delta z \varepsilon_{g,B}^0 [O_2]_{g,B}^0 \\ = \Gamma_i A(Pe_i) [O_2]_{g,I} - \Gamma_i A(Pe_i) [O_2]_{g,B} \\ - \left(\varepsilon_g D_{e,O_2} \frac{\partial [O_2]_g}{\partial z} \right)_B \Delta t + (q_g [O_2]_g)_B \Delta t \\ - [O_2]_{g,B} \|F_i, 0\| + [O_2]_{g,I} \|-F_i, 0\| + 0,5 R_{g,B} \Delta z \Delta t \end{aligned} \quad (240)$$

La ecuación anterior se compacta al agrupar los términos de advección y difusión evaluados en el nodo B .

$$\begin{aligned}
& 0,5\Delta z \varepsilon_{g,B} [O_2]_{g,B} - 0,5\Delta z \varepsilon_{g,B}^0 [O_2]_{g,B}^0 \\
& = \Gamma_i A(Pe_i) [O_2]_{g,I} - \Gamma_i A(Pe_i) [O_2]_{g,B} \\
& + \left[-\varepsilon_g D_{e,O_2} \frac{\partial [O_2]_g}{\partial z} + q_g [O_2]_g \right]_B \Delta t - [O_2]_{g,B} \|F_i, 0\| \\
& + [O_2]_{g,I} \|-F_i, 0\| + 0,5R_{g,B} \Delta z \Delta t
\end{aligned} \tag{241}$$

Se introduce la condición de borde en el nodo B , al notar que los términos dentro del paréntesis cuadrado corresponden a la expresión de la izquierda de la ecuación (235). También se realiza el procedimiento de simplificación de la ecuación general discretizada, utilizando la ecuación de continuidad (ver las operaciones aritméticas descritas en las ecuaciones (96) a (99)).

$$\begin{aligned}
& 0,5\Delta z \varepsilon_{g,B}^0 [O_2]_{g,B} - 0,5\Delta z \varepsilon_{g,B}^0 [O_2]_{g,B}^0 \\
& = \Gamma_i A(Pe_i) [O_2]_{g,I} - \Gamma_i A(Pe_i) [O_2]_{g,B} \\
& + q_{g,Ent} [O_2]_{g,Ent} \Delta t - [O_2]_{g,B} \|F_i, 0\| \\
& + [O_2]_{g,I} \|-F_i, 0\| + 0,5R_{g,B} \Delta z \Delta t
\end{aligned} \tag{242}$$

Al ordenar términos en la ecuación anterior y utilizar la propiedad del operador $\|\cdot\|$, descrita en la ecuación (46), se tiene:

$$\begin{aligned}
& (0,5\Delta z \varepsilon_{g,B}^0 + \Gamma_i A(Pe_i) + \|-F_i, 0\| + F_i) [O_2]_{g,B} \\
& = (\Gamma_i A(Pe_i) + \|-F_i, 0\|) [O_2]_{g,I} + q_{g,Ent} [O_2]_{g,Ent} \Delta t \\
& + 0,5R_{g,B} \Delta z \Delta t + 0,5\Delta z \varepsilon_{g,B}^0 [O_2]_{g,B}^0
\end{aligned} \tag{243}$$

Comparando con los coeficientes obtenidos del esquema ley de potencia (ver ecuaciones (71) y (72)), la ecuación (243) se reduce a:

$$\begin{aligned}
& (0,5\Delta z \varepsilon_{g,B}^0 + \Psi_I + F_i) [O_2]_{g,B} \\
& = \Psi_I [O_2]_{g,I} + q_{g,Ent} [O_2]_{g,Ent} \Delta t + 0,5R_{g,B} \Delta z \Delta t \\
& + 0,5\Delta z \varepsilon_{g,B}^0 [O_2]_{g,B}^0
\end{aligned} \tag{244}$$

Donde:

$$\Psi_I = \Gamma_i A(Pe_i) + \|-F_i, 0\| \tag{245}$$

Definiendo nuevos términos:

$$a_{fi} = 0,5\Delta z \varepsilon_{g,B}^0 + \Psi_I + F_i \tag{246}$$

$$b_{fi} = q_{g,Ent} [O_2]_{g,Ent} \Delta t + 0,5R_{g,B} \Delta z \Delta t + 0,5\Delta z \varepsilon_{g,B}^0 [O_2]_{g,B}^0 \tag{247}$$

La ecuación (244) resulta en la siguiente expresión:

$$a_{fi} [O_2]_{g,B} = \Psi_I [O_2]_{g,I} + b_{fi} \tag{248}$$

5.1.5.4. Coeficientes del Algoritmo de Thomas en los Nodos Interiores y en el Borde Inferior

Se reemplazan los subíndices de la concentración de oxígeno en los nodos de la ecuación (209) por valores numéricos consecutivos. En la Figura 12 se aprecia la conversión de la notación de los nodos: para un nodo interior k cualquiera, se tiene el nodo $k + 1$, situado al sur y el nodo $k - 1$, ubicado al norte.

Se sigue el mismo orden de numeración que el usado en el modelo de advección y dispersión del oxígeno en la fase líquida. Lo anterior se debe a que las concentraciones de oxígeno en las fases líquidas y gaseosa interactúan en las ecuaciones de balance de masa.

Dado que la tasa de transferencia de oxígeno entre las fases requiere de la determinación de la concentración en el líquido y en el gas para un mismo nodo, resulta más simple definir los vectores con los mismos subíndices de posición; es decir, los elementos del vector $[O_2]_l$ se ordenan (respecto a la posición en el espacio vertical) tal como se arreglan los elementos del vector $[O_2]_g$. Con esto, la escritura del código se simplifica y la simulación (cálculo computacional) se vuelve más eficiente.

$$a_P [O_2]_{g,k} = \Psi_S [O_2]_{g,k+1} + \Psi_N [O_2]_{g,k-1} + b_P \quad (249)$$

El algoritmo de Thomas establece la siguiente relación para las concentraciones de dos nodos contiguos:

$$[O_2]_{g,k} = R_k [O_2]_{g,k+1} + S_k \quad (250)$$

De manera análoga a como se desarrolló la determinación de los coeficientes del algoritmo de Thomas para la concentración de oxígeno en la solución, se utiliza la relación de la ecuación (250) y se repiten los procedimientos para obtener expresiones similares a las ecuaciones (160), (161), (162) y (163). Posteriormente, se tiene:

$$R_k = \frac{\Psi_S}{a_P - \Psi_N R_{k-1}} \quad (251)$$

$$S_k = \frac{\Psi_N S_{k-1} + b_P}{a_P - \Psi_N R_{k-1}} \quad (252)$$

Una vez que se encuentran los coeficientes del primer nodo, se pueden obtener los coeficientes de los demás nodos en la grilla, R_k y S_k , utilizando las relaciones recursivas presentadas en las ecuaciones (251) y (252).

Luego de calcular todos los coeficientes del algoritmo de Thomas, se utiliza la relación inicial (ecuación (250)) para determinar los valores de la concentración de oxígeno en el gas, en el tiempo presente, asociados a todos los nodos de la grilla.

5.1.5.5. Coeficientes del Algoritmo de Thomas en el Borde Superior

Se reemplazan los subíndices de la concentración de oxígeno en los nodos de la ecuación (234) por valores numéricos. En la Figura 14 se aprecia la conversión de la notación, en donde a los nodos del borde superior y primer nodo interior se les asigna el valor 1 y 2, respectivamente.

$$a_{in}[O_2]_{g,1} = \Psi_I[O_2]_{g,2} + b_{in} \quad (253)$$

Al comparar la ecuación (253) con la relación planteada en la ecuación (250), se obtienen los valores de los primeros coeficientes del algoritmo de Thomas, R_1 y S_1 .

$$R_1 = \frac{\Psi_I}{a_{in}} \quad (254)$$

$$S_1 = \frac{b_{in}}{a_{in}} \quad (255)$$

Con las ecuaciones (254) y (255) se inicia el cálculo recursivo de los otros coeficientes.

5.1.5.6. Inicio de Cálculo del Algoritmo de Thomas

Se reemplazan los subíndices de la concentración de oxígeno en los nodos de la ecuación (224) por valores numéricos. En la Figura 15 se aprecia la conversión de la notación, en donde a los nodos del borde inferior y último nodo interior se les asigna el valor N y $N - 1$, respectivamente, con N siendo un número natural cualquiera que representa la cantidad de nodos dispuestos en la grilla.

$$a_{fi}[O_2]_{g,N} = \Psi_I[O_2]_{g,N-1} + b_{fi} \quad (256)$$

Rehaciendo las mismas operaciones de cálculo usadas para obtener las ecuaciones (170) y (172), se obtiene el valor de la concentración de oxígeno en el último nodo.

$$[O_2]_{g,N} = \frac{\Psi_I S_{N-1} + b_{fi}}{a_{fi} - \Psi_I R_{N-1}} \quad (257)$$

Con la ecuación (250) se inicia el cálculo de las concentraciones en los otros nodos. De este modo, se determinan progresivamente las concentraciones de los nodos vecinos superiores (localizados al norte) hasta llegar al primer nodo, situado en la corona.

5.1.5.7. Diagrama de Flujo del Algoritmo

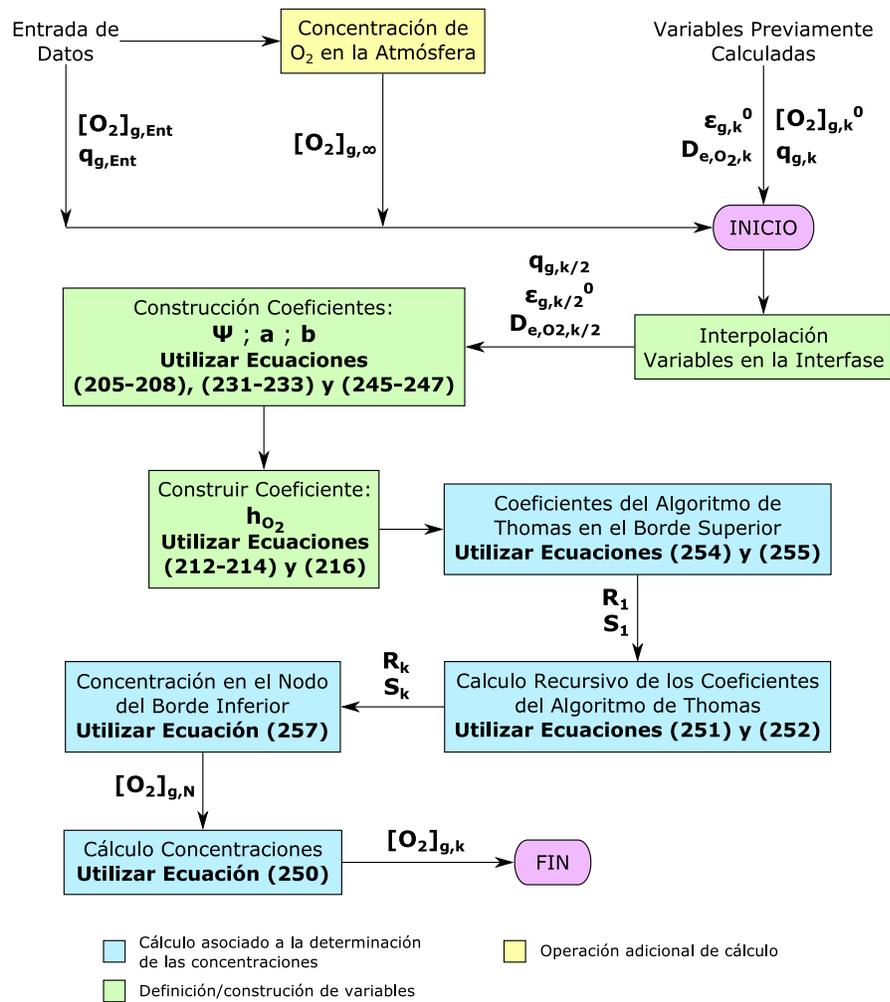


Figura 16. Diagrama de flujo del algoritmo del modelo de advección y difusión del oxígeno en la fase gaseosa.

5.2. Modelo de la Fluidodinámica de la Fase Gaseosa

Como se puede apreciar en las ecuaciones (74) y (188), las velocidades de los fluidos líquido y gaseoso (solución que percola y aire en movimiento al interior de la pila) deben ser conocidas para determinar la concentración de oxígeno en la fase respectiva.

La velocidad del líquido es determinada por el modelo de fluidodinámica de la fase líquida, desarrollado por BioSigma. Este modelo, además de estimar la velocidad con la que desciende el líquido en cada posición al interior de la pila, calcula el contenido de humedad (ϵ_l , también requerido en la ecuación (74)) y la carga capilar (siendo ambos vectores, se determinan sus valores en el espacio vertical).

Para encontrar el valor de v_g se requiere modelar la fluidodinámica de la fase gaseosa al interior del lecho. La modelación de la fluidodinámica de la fase gaseosa se realiza utilizando la ecuación de conservación de movimiento y la ecuación de continuidad, aplicadas al flujo aire. Este modelo

también permite obtener el campo de presión del sistema, el cual es relevante para calcular otros parámetros de interés en el modelo general de biolixiviación.

Se consideran los mismos supuestos planteados en el modelamiento del balance de oxígeno, por lo que la modelación se realiza en una dimensión, en donde ocurre el mayor movimiento del gas. También se asume que la presión, y el roce de las partículas y la fase líquida con el aire (resistencia del medio poroso a la circulación del gas, representado por la permeabilidad del lecho), afectan el movimiento del fluido gaseoso.

El modelo no reconoce cambios de velocidad del flujo de aire en el sentido axial o en la orientación horizontal. Tampoco considera pérdidas o aportes del flujo de aire a través de los taludes de la pila. Se supone que el flujo de aire se mueve preferencialmente, en la dirección vertical, desde el piso hacia la corona de la pila. El sentido de avance del flujo de aire se toma de referencia para el signo positivo en el eje de vertical.

El modelo realiza la distinción para dos tipos de regímenes de movimiento del flujo de aire: movimiento por convección forzada (presencia de gradiente de presión por la inyección de aire; el roce del lecho poroso no saturado, que afecta el flujo de aire, es importante y disminuye la velocidad del gas) y movimiento por convección natural (presencia de gradiente de presión por diferencias de temperatura entre distintas secciones de volúmenes de aire localizadas en el eje vertical de la pila; el roce del lecho poroso no saturado es menos relevante que la fuerza de movimiento generada por las diferencias de densidad de la masa de aire).

La discretización de las ecuaciones diferenciales parciales se realiza a través del método de volúmenes de control, aplicado en una grilla desplazada (el espacio de cálculo se sitúa entre dos nodos adyacentes de la grilla original). La solución de la ecuación discretizada de conservación de movimiento se obtiene mediante el algoritmo SIMPLER, considerando conjuntamente el algoritmo de Thomas.

5.2.1. Ecuación de Conservación de Movimiento del Flujo de Aire

De forma similar a como se definió la ecuación de conservación de masa, el balance de la cantidad de movimiento de un fluido Newtoniano que atraviesa un volumen de control infinitesimal fijo en el espacio permite obtener la ecuación diferencial general de conservación de movimiento [30, 31].

La ecuación de conservación de movimiento para el flujo de aire, expresada en notación tensorial-cartesiana y considerando el balance en una dimensión (en la dirección vertical), se define como [25, 31]:

$$\frac{\partial(\rho_g v_g)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_g \frac{\partial v_g}{\partial z} \right) - \frac{\partial(\rho_g v_g v_g)}{\partial z} - \frac{\partial P}{\partial z} + B_z \quad (258)$$

Donde:

v_g : Velocidad intersticial del flujo de aire (densidad de flujo de gas) en la dirección z, [$\text{m}^3/\text{s}/\text{m}^2 \equiv \text{m/s}$].

ρ_g : Densidad del aire en el lecho, [kg/m^3].

μ_g : Viscosidad dinámica del aire (para una temperatura dada), [$\text{kg}/(\text{m}\cdot\text{s})$].

P : Presión del sistema, [$\text{kg}/(\text{m}\cdot\text{s}^2)$].

B_z : Componente de fuerza de cuerpo en la dirección vertical, [kg/(m²·s²)].

Para mantener la coherencia con el planteamiento de la ecuación de advección y difusión del oxígeno en el aire, la expresión anterior se ha escrito considerando que el sentido del eje de referencia vertical apunta hacia la corona (el valor del campo de velocidad del aire siempre es positivo). Esto implica que la dirección preferencial de avance del fluido, establece la dirección positiva de la velocidad. De esta forma, el postulado de respetar el sentido preferencial del flujo como la dirección de integración también es aplicado en la resolución de la ecuación de conservación de movimiento.

En la ecuación (258) el primer término denota la tasa de variación en el tiempo de la cantidad de movimiento del fluido por unidad de volumen. El término $\frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_i \frac{\partial v_i}{\partial z} \right)$ es la variación de cantidad de movimiento por transporte viscoso o fuerza “difusional” de movimiento (fuerza viscosa). El término $\frac{\partial P}{\partial z}$ representa la fuerza de presión ejercida, que genera movimiento en el fluido, y $\frac{\partial(\rho_i v_i v_i)}{\partial z}$ es la variación de cantidad de movimiento por advección (efecto del espacio de movimiento en la aceleración del fluido). El último término de la ecuación (258) representa la fuerza de cuerpo que actúa a través del fluido, y que contribuye en el movimiento de éste. Haciendo una comparación con la ecuación (19), el gradiente de presión y el componente de fuerza de cuerpo se pueden considerar como los términos de reacción, es decir, aportan o consumen cantidad de movimiento por fuentes internas o externas al fluido. La ecuación (258) también pertenece a la familia de ecuaciones de Navier-Stokes que describen el movimiento de fluidos viscosos.

El campo de velocidades y de presiones del flujo de aire, presentes al interior de una pila (lecho poroso), están gobernados por la ecuación (258) y por la ecuación de continuidad (definida en la ecuación (25)). Al emplear la ecuación de conservación de movimiento, se asume que el flujo de aire se comporta como un fluido newtoniano.

El componente de fuerza de cuerpo considera el efecto de la resistencia de Darcy inducida por el medio poroso (la permeabilidad del lecho se opone al flujo aire) y la gravedad del fluido, los cuales se expresan en la siguiente ecuación [25, 48]:

$$B_z = -\frac{\varepsilon_g \mu_g}{K} v_g + \rho_g g \quad (259)$$

Donde:

ε_g : Fracción volumétrica de gas en el lecho, [m³ gas / m³ lecho].

K : Permeabilidad gaseosa efectiva del lecho, [m²].

g : Vector constante de aceleración gravitacional, [m/s²].

La fracción volumétrica de gas puede determinarse a través de la siguiente relación:

$$\varepsilon_g = 1 - \varepsilon_s - \varepsilon_l \quad (260)$$

Con:

$$\varepsilon_s = 1 - Por \quad (261)$$

Donde:

ε_s : Fracción volumétrica del sólido en el lecho, [m^3 gas / m^3 lecho].

ε_l : Contenido de humedad (hold up de líquido), [m^3 líquido / m^3 lecho].

Por: Porosidad del lecho seco [m^3 vacío / m^3 lecho].

La igualdad de la ecuación (260) se establece por la definición conceptual del parámetro ε_g . El valor de porosidad del lecho es un dato de entrada, y se considera constante a lo largo de la pila y en todo el tiempo de simulación (se asume una distribución uniforme de poros en el lecho, simulando la situación observada en pilas aglomeradas, considerando también que no se produce movimiento o arrastre de partículas sólidas por la solución de riego).

La viscosidad dinámica del aire, en función de la temperatura, se puede calcular con la siguiente expresión empírica [49].

$$\mu_g = (17,1 + 0,067T - 0,0004T^2) * 10^{-6} \quad (262)$$

Donde:

T : Temperatura del sistema, [$^{\circ}\text{C}$].

La fórmula anterior tiene un error menor a 10^{-7} [$\text{kg}/(\text{m}\cdot\text{s})$], con una validez en el rango de temperatura de 0 a 54 $^{\circ}\text{C}$ (suficiente para las condiciones encontradas en la operación de una pila de biolixiviación).

La permeabilidad gaseosa efectiva del lecho, K , describe la capacidad de una zona no saturada de conducir un flujo de gas. La permeabilidad gaseosa se define como [6, 50]:

$$K = k_{int}k_{rg} \quad (263)$$

Donde:

k_{int} : Permeabilidad intrínseca del lecho, [m^2].

k_{rg} : Permeabilidad relativa gaseosa del lecho, adimensional.

La permeabilidad intrínseca del lecho es un dato de entrada, que debe ser determinado experimentalmente (es un parámetro característico de cada pila).

En un medio no saturado, el espacio de poro generalmente contiene las fases líquida y gaseosa. Debido a que el área transversal del lecho, disponible para el movimiento de cada fluido, se ve reducido en comparación a cuando el sistema se encuentra saturado con un solo fluido, la permeabilidad con respecto a ese fluido también es menor. La permeabilidad relativa gaseosa del lecho define la pérdida de disponibilidad del espacio de poro en el lecho para la circulación del flujo de gas, por efecto del contenido de líquido en los poros (grado de saturación de líquido en el lecho) [50].

La permeabilidad relativa gaseosa del lecho se puede estimar a partir de la siguiente fórmula empírica, propuesta por Corey y Van Genuchten [23, 50, 51, 52]:

$$k_{rg} = (1 - S_{ef}^2)(1 - S_{ef})^2 \quad (264)$$

Con:

$$S_{ef} = \frac{\varepsilon_l - \varepsilon_{l,r}}{\varepsilon_{l,sat} - \varepsilon_{l,r}} \quad (265)$$

Donde:

S_{ef} : Saturación efectiva del líquido, adimensional.

$\varepsilon_{l,r}$: Contenido volumétrico de líquido residual, [m^3 líquido / m^3 lecho].

$\varepsilon_{l,sat}$: Contenido volumétrico de líquido en el lecho saturado de líquido ($\varepsilon_{l,sat} \equiv Por$), [m^3 líquido / m^3 lecho].

El parámetro $\varepsilon_{l,r}$ es un dato de entrada. Por definición, $\varepsilon_{l,sat}$ es conocido.

En general, la densidad es una función de la presión (composición de especies) y la temperatura (como se aprecia en la ley de los gases ideales, descrita en la ecuación (211)). De esta forma, la presencia de especies químicas y/o la variación de la temperatura pueden cambiar la densidad de un fluido. Si las variaciones de densidad no son significativas, entonces la densidad puede ser considerada constante en todos los términos que componen la ecuación de conservación de movimiento, excepto en el término asociado a la fuerza de gravedad, ya que la multiplicación por g (la aceleración de gravedad) hace que las diferencias de densidad sean relevantes. Este enfoque de simplificación, reconocido como la aproximación de Boussinesq, considera que la diferencia de densidad asociada a los términos de velocidad (términos de inercia) es despreciable, pero cuando hay pequeñas variaciones de la densidad causadas por la temperatura, la gravedad es lo suficientemente fuerte como para provocar que el peso específico del fluido sea perceptiblemente diferente. La aproximación de Boussinesq establece que la densidad asociada al peso del fluido varía linealmente con la temperatura, despreciando la variación de presión en el sistema [3,25]:

$$\rho_g = \rho_{g,0} \left(1 - \frac{1}{T_0} (T - T_0) \right) \quad (266)$$

Donde:

$\rho_{g,0}$: Densidad del aire en condiciones de temperatura constante (referencia), [kg/m^3].

T_0 : Temperatura de referencia de flotabilidad (temperatura para la cual se define el valor $\rho_{g,0}$), [K].

T : Temperatura del sistema, [K].

La aproximación de Boussinesq asume que la fuerza de flotabilidad del fluido gobierna el movimiento de éste. De esta forma, cuando los fluidos se mueven muy lentamente y presentan variaciones de densidad con la temperatura (condiciones de régimen de movimiento del fluido por convección natural) también es posible aplicar el enfoque de Boussinesq para modelar el campo de velocidades con buenos resultados [30].

La derivación de la ecuación (266) proviene del desarrollo de la serie de Taylor de la densidad entorno a un valor referencial de temperatura [31]:

$$\rho_g = \rho_g \Big|_{T=T_0} + \frac{\partial \rho_g}{\partial T} \Big|_{T=T_0} (T - T_0) + \dots \quad (267)$$

En donde la derivada de la densidad respecto a la temperatura se determina por medio a la ley de los gases ideales (ver ecuación (211)).

$$\frac{\partial \rho_g}{\partial T} \Big|_{T=T_0} = -\frac{P_g M_g}{RT_0^2} = -\rho_g \frac{1}{T_0} \quad (268)$$

Considerando los dos primeros términos de la serie de Taylor e introduciendo la igualdad de la ecuación (268), se obtiene la aproximación de Boussinesq para la densidad.

De las ecuaciones (267) y (268) se puede notar que la aplicación de la aproximación de Boussinesq es factible solo cuando existen pequeñas variaciones de temperatura en el sistema [53]. Dado que en el paso temporal y espacial en donde se integra la ecuación (258), las variaciones de la densidad no son extremas, es posible utilizar la aproximación de la ecuación (266) sin comprometer mucho la precisión de cálculo.

La densidad del aire, en función de las concentraciones de sus componentes (recordando que en este modelo se considera la simplificación de que el aire se compone de oxígeno, nitrógeno y vapor de agua) y en condiciones de temperatura constante (para una temperatura de referencia fija, T_0), puede calcularse utilizando la ley de los gases ideales.

$$\rho_{g,0} = \frac{P_{O_2} M_{O_2} + P_{N_2} M_{N_2} + P_{H_2O} M_{H_2O}}{RT_0} \quad (269)$$

Donde:

R : Constante de los gases ideales, $8,314 \text{ [(Pa} \cdot \text{m}^3)/(\text{K} \cdot \text{mol)]}$.

P_i : Presión parcial del componente i , $[\text{Pa} \equiv \text{N/m}^2]$.

M_i : Peso molecular del componente i , $[\text{kg/mol}]$.

El cálculo de la densidad de referencia, por la ecuación (269), se realiza para cada paso de tiempo discreto, donde se toma en cuenta las variaciones de concentración de los componentes del aire, temperatura y presión en ese intervalo de tiempo.

La simplificación aportada por la ecuación de Boussinesq, respecto a la variación de la densidad en el sistema, permite resolver de manera mucho más simple la ecuación (258). Introduciendo la aproximación de Boussinesq e incorporando los términos del componente de fuerza de cuerpo, la ecuación de conservación de movimiento en el flujo de aire resulta:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho_{g,0}v_g)}{\partial t} = & \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_g \frac{\partial v_g}{\partial z} \right) - \frac{\partial(\rho_{g,0}v_g v_g)}{\partial z} - \frac{\partial P}{\partial z} - \frac{\varepsilon_g \mu_g}{K} v_g \\ & + \rho_{g,0} \left(1 - \frac{1}{T_0} (T - T_0) \right) g \end{aligned} \quad (270)$$

Para el caso en que el flujo de aire que entra en el piso de la pila es generado por un gradiente de presión externo (inyección de aire), la temperatura de referencia T_0 , requerida en la aproximación de Boussinesq, se define como la temperatura del sistema evaluada en la corona (nodo del borde superior).

Por razones de simplificación en el manejo matemático, la ecuación (270) se reduce a:

$$\frac{\partial(\rho_{g,0}v_g)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_g \frac{\partial v_g}{\partial z} \right) - \frac{\partial(\rho_{g,0}v_g v_g)}{\partial z} - \frac{\partial P}{\partial z} + B_m v_g + B_c \quad (271)$$

Donde se agrupan los términos pertenecientes al componente de fuerza de cuerpo, de manera que queda expresado como una función lineal de la velocidad:

$$B_m = -\frac{\varepsilon_g \mu_g}{K} \quad (272)$$

$$B_c = \rho_{g,0} \left(1 - \frac{1}{T_0} (T - T_0) \right) g \quad (273)$$

5.2.2. Método de Discretización

La solución de la ecuación (271) presenta dos nuevos problemas, en comparación a la discretización de la ecuación general de conservación de masa [32]:

- Los términos advectivos de la ecuación de conservación de movimiento contienen cantidades no lineales: el segundo término a la derecha de la igualdad es la derivada en z de $\rho_{g,0}v_g^2$.
- La velocidad puede determinarse al acoplar la ecuación de continuidad con la ecuación (271), sin embargo, para la presión no existe otra ecuación de transporte o de cualquier otro tipo que pueda ser acoplada con la ecuación (271). Este es el problema más complejo a resolver: idear un procedimiento de cálculo que permita determinar el campo de presiones, en conjunto con el campo de velocidades, sin requerir de ecuaciones adicionales.

Si el gradiente de presión es conocido, el proceso de obtención de la ecuación discretizada de conservación de movimiento es bastante parecido al desarrollado para las ecuaciones de advección y difusión del oxígeno. Pero dado que se desea calcular el campo de presión como parte de la solución, el término de la fuerza de presión (gradiente) no es conocido de antemano. Si el flujo de aire es compresible, la ecuación de continuidad puede ser utilizada como una ecuación de transporte para la densidad. Luego la presión puede ser obtenida por la densidad y la temperatura, al usar la ecuación de estado $P = P(\rho, T)$. Sin embargo, si el flujo es incompresible, la densidad

es constante y por tanto (dada su definición) no puede ser vinculada a la presión. En este caso, el acoplamiento entre la presión y la velocidad induce una restricción en la solución del campo de flujo: si el campo de presión correcto es aplicado en la ecuación de conservación de movimiento, el campo de velocidad resultante debe satisfacer la ecuación de continuidad.

Los problemas asociados con la no linealidad de la ecuación (271) y el vínculo presión-velocidad pueden resolverse al adoptar una estrategia de solución iterativa, tal como el algoritmo SIMPLE (Método Semi-Implícito para las Ecuaciones Vinculadas con la Presión, por sus siglas en inglés) de Patankar y Spalding [30]. En este algoritmo, los flujos advectivos a través de las caras de los volúmenes de control, F , son evaluados por componentes de velocidad supuestos. Adicionalmente, se usa un campo de presión supuesto para resolver las ecuaciones de conservación de movimiento, y una ecuación de corrección de presión (deducida de la ecuación de continuidad) para obtener un campo de presión corregido, el cual a su vez es utilizado para actualizar los campos de presión y de velocidad del sistema. Para iniciar el proceso de iteración se suponen variables iniciales para la presión y velocidad del flujo de aire. A medida que el algoritmo avanza, el objetivo es mejorar progresivamente los valores supuestos de la presión y velocidad.

Uno de los inconvenientes del algoritmo SIMPLE es su tasa de convergencia, ya que para encontrar un resultado satisfactorio para los campos de presión y velocidad, el algoritmo requiere de muchas iteraciones de cálculo. Para mejorar la eficiencia, Patankar desarrolló una nueva versión de este algoritmo.

El algoritmo SIMPLER (SIMPLE - Revisado) es una versión mejorada del algoritmo original SIMPLE [30]. En este algoritmo, la ecuación discretizada de continuidad es usada para derivar una ecuación discretizada de la presión, en vez de usar una ecuación de corrección de la presión como en el algoritmo SIMPLE. De esta forma, el campo de presión intermedio es obtenido directamente, sin la necesidad de utilizar una operación adicional correctiva. No obstante, las velocidades se obtienen a través de una ecuación de corrección [32].

La discretización de la ecuación (271) se realiza en volúmenes de control, pero a diferencia de la integración numérica de las ecuaciones de advección y difusión del oxígeno, los volúmenes de control se emplazan en torno a nodos situados en una grilla desplazada. La utilización de una grilla de nodos desplazada se explica en la siguiente sección.

Las ecuaciones discretizadas vinculan la velocidad y la presión de tres nodos contiguos. Entonces, para expresar los valores de la velocidad/presión de un nodo a partir de la variable evaluada en su nodo vecino, se utiliza el algoritmo de Thomas.

El procedimiento de resolución de la ecuación de conservación de movimiento, realizada por el algoritmo SIMPLER, se revisa en detalle en secciones posteriores.

5.2.3. Dificultades en la Discretización de la Ecuación

En comparación a la ecuación (22), uno de los nuevos términos que deben ser integrados en el volumen de control es el gradiente de presión $-\frac{\partial P}{\partial z}$. La discretización de este término, considerando el eje de referencia vertical que apunta hacia la corona (ver Figura 6), resulta en la caída de presión $P_s - P_n$, el cual es la fuerza de presión neta ejercida sobre el volumen de control. Para expresar $P_s - P_n$ en términos de los nodos de la grilla, se asume una interpolación lineal simple, considerando que las interfaces n y s se sitúan a igual distancia de cada nodo. Luego se tiene:

$$P_s - P_n = \frac{P_P + P_S}{2} - \frac{P_N + P_P}{2} = \frac{P_S - P_N}{2} \quad (274)$$

Lo anterior significa que la ecuación de conservación de movimiento contendrá la diferencia de presión entre dos nodos “alternados” de la grilla, y no entre dos nodos adyacentes. La implicancia de esto es que la presión en la ecuación es evaluada desde una grilla más gruesa de la que se definió en un comienzo. Esto haría disminuir la precisión de la solución. Pero existe otra implicación que es aún más seria. Si se supone un campo de presión como el expuesto en la Figura 17, donde se tiene un campo de presión en “zig-zag” o “en serie alternado”, el valor de $P_s - P_n$ es nulo, dado que los valores alternados de las presiones son iguales para cualquier posición definida. De esta forma, para la ecuación de conservación de movimiento, un campo de presión “ondulatorio” será estimado como un campo de presión uniforme [30].

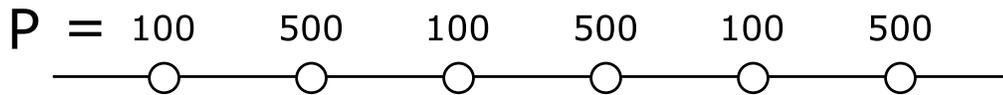


Figura 17. Campo de presión en serie alternado.

Se genera una dificultad similar cuando se intenta construir la forma discretizada de la ecuación de continuidad. Para el caso en que se tiene un sistema en estado estacionario y con densidad constante, la ecuación de continuidad se simplifica a:

$$\frac{\partial v_g}{\partial z} = 0 \quad (275)$$

Si se integra sobre el volumen de control mostrado en la Figura 6, se tiene:

$$v_{g,n} - v_{g,s} = 0 \quad (276)$$

Nuevamente, si se asume una interpolación lineal simple, la ecuación (276) resulta:

$$\frac{v_{g,N} + v_{g,P}}{2} - \frac{v_{g,P} + v_{g,S}}{2} = v_{g,N} - v_{g,S} = 0 \quad (277)$$

Como en el caso del campo de presión, si se asumen valores alternados de la velocidad en los nodos (haciendo la analogía a como se visualiza en la Figura 17), las velocidades satisfacen la ecuación (277), sin embargo estos valores difícilmente pueden ser aceptados como una solución razonable o con sentido físico real.

Estas dificultades deben ser resueltas antes de formular un método numérico que resuelva la ecuación (271). Para evitar aceptar campos de presión o de velocidad del tipo mostrado en la Figura 17 como soluciones satisfactorias, sin incorporar algoritmos especiales adicionales, se plantea utilizar un nuevo sistema de disposición de los nodos: la grilla desplazada.

5.2.4. La Grilla Desplazada

Para construir las ecuaciones discretizadas de la ecuación (271), se utiliza una grilla de nodos desplazada. La grilla desplazada permite la presencia de gradientes de presión reales no nulos para cualquier condición establecida, incluso en el caso de imponer un campo de presión en serie alternado en los nodos. La grilla desplazada también asegura un comportamiento realista de las ecuaciones discretizadas para presiones espacialmente oscilantes, es decir, no acepta campos de presión o de velocidad alternados como soluciones factibles. Además, con este nuevo esquema, las

velocidades evaluadas en las interfases de los volúmenes de control (de la grilla original) pueden ser determinadas sin requerir ninguna interpolación.

En la siguiente figura se presenta un esquema comparativo entre el espacio de integración de la grilla desplazada y de la grilla original. Se aprecia el desplazamiento en “medio volumen de control” de la grilla desplazada respecto a la grilla original. Los nodos de la grilla desplazada (no visualizados en la Figura 18 por simplificación) se localizan en las caras (interfases) de los volúmenes de control definidos por los nodos de la grilla tradicional.

Se debe destacar que los valores discretos de los parámetros utilizados en el modelamiento de la fluidodinámica del aire se definen espacialmente por los nodos situados en la grilla original, y no respecto a los nodos de la grilla desplazada.

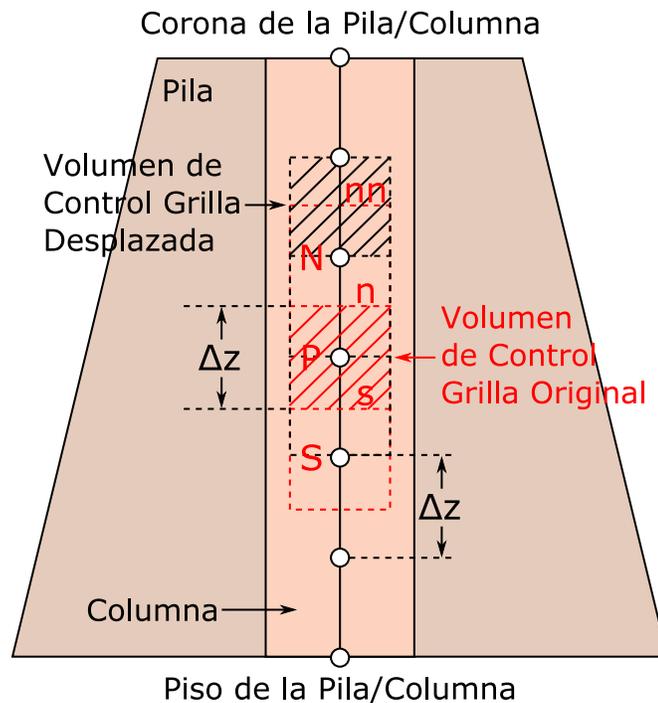


Figura 18. Comparación entre los volúmenes de control definidos en la grilla desplazada y en la grilla original, usados para discretizar el espacio modelado.

5.2.5. Discretización de la Ecuación en los Nodos Interiores

A continuación se discretizan los términos de acumulación, difusión, advección, fuerza de presión y componente de fuerza de cuerpo de la ecuación (271) para los nodos interiores.

El sentido de integración de los términos en el espacio se establece según el sentido de movimiento preferencial del gas (se integra desde la cara norte hasta la cara sur de cada volumen de control).

Al contrario de cómo se planteó la numeración espacial de los nodos en la grilla en los modelos de advección y difusión de oxígeno, la solución discreta de la fluidodinámica de la fase gaseosa asigna un orden inverso de los nodos. De esta manera (tomando de referencia los nodos de la grilla original) el nodo en el borde inferior representa el primer nodo, y el nodo del borde superior es el último nodo de la grilla. Este cambio implica que el algoritmo de Thomas desarrolla la determinación de la presión y de la velocidad en cada punto discreto desde el nodo ubicado en la corona hasta el nodo en el piso la pila.

El cambio de subíndices de posición de los nodos se realiza para adaptar la estructura de las ecuaciones al algoritmo SIMPLER. Si bien este procedimiento demanda un mayor gasto computacional (se deben reordenar las posiciones de los vectores de presión y de velocidad, para que puedan ser utilizados por otros módulos de modelamiento -en los otros módulos el orden de numeración de los nodos siempre considera el primer nodo en la corona y el último en el piso-), la decisión de modificar el arreglo espacial de los nodos obedece a un motivo práctico, ya que la estructura del código escrita en los antiguos módulos de modelamiento de BioSigma restringe la flexibilidad en cómo se diseñan las rutinas de cálculo y en cómo se crean las matrices y vectores que definen las variables relevantes.

La discretización del espacio modelado en volúmenes de control de los nodos interiores, pertenecientes a la grilla desplazada, se detalla en la siguiente figura. Para no generar confusión, en la Figura 19 solo se muestran los nodos de la grilla original (designados por las letras N , P y S); los nodos de la grilla desplazada no se indican, pero sus posiciones se denotan por las interfaces de los volúmenes de control de la grilla original: norte-norte (nn), norte (n) y sur (s).

Como se puede apreciar en la figura, los términos de la ecuación de conservación de movimiento se integran en el espacio entre los nodos N y P , los cuales pertenecen al arreglo original de nodos (usados para discretizar la concentración de oxígeno en la solución y en el aire).

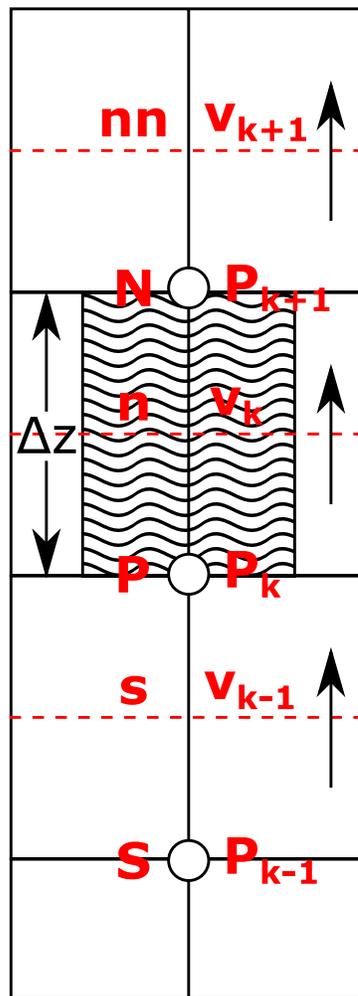


Figura 19. Volúmenes de control definidos en los nodos interiores de la grilla desplazada.

La metodología de discretización es similar a la presentada en las secciones homónimas de los capítulos del modelo de advección y difusión del oxígeno en la fase líquida y en la fase gaseosa, por lo que se resumirán algunos procedimientos.

Se presenta la discretización del término de acumulación de la ecuación (271):

$$\begin{aligned} \int_P^N \int_{t_0}^t \frac{\partial(\rho_{g,0}v_g)}{\partial t} \partial t \partial z &= \int_P^N [(\rho_{g,0}v_g) - (\rho_{g,0}v_g)^0] \partial z \\ &= [(\rho_{g,0}v_g) - (\rho_{g,0}v_g)^0] \Delta z \\ &= \rho_{g,0,n}v_{g,n}\Delta z - \rho_{g,0,n}^0v_{g,n}^0\Delta z \end{aligned} \quad (278)$$

Similar a lo mostrado en el ejemplo de la ecuación (38), la densidad de referencia del aire en la interfase (o nodo de la grilla desplazada) n se calcula al considerar el promedio de los nodos vecinos:

$$\rho_{g,0,n} = \frac{\rho_{g,0,N} + \rho_{g,0,P}}{2} \quad (279)$$

Al integrar el término de difusión de la ecuación (271):

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^t \int_P^N \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_g \frac{\partial v_g}{\partial z} \right) \partial z \partial t &= \int_{t_0}^t \left[\left(\mu_g \frac{\partial v_g}{\partial z} \right)_N - \left(\mu_g \frac{\partial v_g}{\partial z} \right)_P \right] \partial t \\ &= \left(\mu_g \frac{\partial v_g}{\partial z} \right)_N \Delta t - \left(\mu_g \frac{\partial v_g}{\partial z} \right)_P \Delta t \end{aligned} \quad (280)$$

El valor de v_g , en los nodos N y P , también se define a partir del promedio de las velocidades evaluadas en las interfaces nn , n y s . Con lo anterior se acepta, en primera instancia, que es factible aplicar una interpolación lineal para la velocidad del flujo de aire. Teniendo en cuenta el cambio de sentido del eje de referencia para la integración numérica, la ecuación (280) resulta entonces:

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^t \int_P^N \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_g \frac{\partial v_g}{\partial z} \right) \partial z \partial t \\ = \mu_{g,N} \Delta t \frac{v_{g,nn} - v_{g,n}}{\Delta z} - \mu_{g,P} \Delta t \frac{v_{g,n} - v_{g,s}}{\Delta z} \end{aligned} \quad (281)$$

Para agrupar términos, se utiliza el símbolo Γ de manera similar a como se definió en la ecuación (41), con la salvedad de que esta nueva expresión reemplaza los parámetros ε_i y $D_{m,i}$ por la viscosidad dinámica del aire, μ_g . El término Γ representa la conductividad de la difusión de movimiento [30]. Luego, la ecuación (281) equivale a:

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^t \int_P^N \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_g \frac{\partial v_g}{\partial z} \right) \partial z \partial t \\ = \Gamma_N \Delta t v_{g,nn} + \Gamma_P \Delta t v_{g,s} - (\Gamma_N + \Gamma_P) \Delta t v_{g,n} \end{aligned} \quad (282)$$

Donde:

$$\Gamma_N = \frac{\mu_{g,N}}{\Delta Z} \quad ; \quad \Gamma_P = \frac{\mu_{g,P}}{\Delta Z} \quad (283)$$

En la sección 5.1.2. se demostró que la interpolación de las concentraciones de oxígeno en las interfases puede generar soluciones de la ecuación discretizada sin sentido físico real. Para la velocidad (que cuantifica la cantidad de movimiento) también ocurre el mismo problema. Para discretizar correctamente el término de difusión, se adopta la función del esquema ley de potencia, $A(Pe)$ (ver ecuación (73)), el cual pondera correctamente la importancia de los fenómenos de advección y difusión en la variación de la velocidad del flujo de aire en los nodos. Finalmente, la discretización del término de difusión resulta en:

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^t \int_P^N \frac{\partial}{\partial Z} \left(\mu_g \frac{\partial v_g}{\partial Z} \right) \partial z \partial t \\ = \Gamma_N A(Pe_N) \Delta t v_{g,nn} + \Gamma_P A(Pe_P) \Delta t v_{g,s} \\ - (\Gamma_N A(Pe_N) + \Gamma_P A(Pe_P)) \Delta t v_{g,n} \end{aligned} \quad (284)$$

El número de Péclet, definido como la razón entre las fuerzas de advección y difusión, para la versión del balance de cantidad de movimiento en el flujo de aire, se expresa como:

$$Pe_N = \frac{\rho_{g,0,N} v_{g,N} \Delta Z}{\mu_{g,N}} \quad ; \quad Pe_P = \frac{\rho_{g,0,P} v_{g,P} \Delta Z}{\mu_{g,P}} \quad (285)$$

A continuación se discretiza el término de advección de la ecuación (271):

$$\begin{aligned} - \int_{t_0}^t \int_P^N \frac{\partial(\rho_{g,0} v_g v_g)}{\partial Z} \partial z \partial t = - \int_{t_0}^t \left[(\rho_{g,0} v_g v_g)_N - (\rho_{g,0} v_g v_g)_P \right] \partial t \\ = (\rho_{g,0} v_g v_g)_P \Delta t - (\rho_{g,0} v_g v_g)_N \Delta t \end{aligned} \quad (286)$$

De forma equivalente a la ecuación (40), se define el término de fuerza advectiva de movimiento F , donde se reemplaza el parámetro ε_i por la densidad referencial del aire, $\rho_{g,0}$ [30]. Entonces, la ecuación (286) se expresa como:

$$- \int_{t_0}^t \int_P^N \frac{\partial(\rho_{g,0} v_g v_g)}{\partial Z} \partial z \partial t = \Delta t F_P v_{g,P} - \Delta t F_N v_{g,N} \quad (287)$$

Donde:

$$F_N = \rho_{g,0,N} v_{g,N} \quad ; \quad F_P = \rho_{g,0,P} v_{g,P} \quad (288)$$

Por las propiedades del esquema de diferencias en contracorriente, definidas en las ecuaciones (49), (197) y (198), las velocidades en los nodos N y P se pueden expresar en función de las velocidades en las interfases nn , n y s . Luego, se tiene:

$$\begin{aligned}
& - \int_{t_0}^t \int_P^N \frac{\partial(\rho_{g,0} v_g v_g)}{\partial z} \partial z \partial t \\
& = \Delta t v_{g,s} \|F_P, 0\| + \Delta t u_{nn} \|-F_N, 0\| \\
& \quad - \Delta t v_{g,n} (\|F_P, 0\| + \|-F_N, 0\|)
\end{aligned} \tag{289}$$

La discretización de los términos de fuerza de presión y componente de fuerza de cuerpo de la ecuación (271) resulta en la siguiente expresión:

$$\begin{aligned}
& \int_{t_0}^t \int_P^N \left(-\frac{\partial P}{\partial z} + B_m v_g + B_c \right) \partial z \partial t \\
& = (P_P - P_N) \Delta t + (B_m v_{g,n} + B_c) \Delta z \Delta t
\end{aligned} \tag{290}$$

Luego, al reunir los 5 términos integrados de la ecuación (271) (definidos en las ecuaciones (278), (284), (289) y (290)), se obtiene la ecuación de conservación de movimiento del flujo de aire, discretizada en volúmenes de control para los nodos interiores de la grilla desplazada.

$$\begin{aligned}
& \rho_{g,0,n} v_{g,n} \Delta z - \rho_{g,0,n}^0 v_{g,n}^0 \Delta z \\
& = \Gamma_N A(Pe_N) \Delta t v_{g,nn} + \Gamma_P A(Pe_P) \Delta t v_{g,s} \\
& \quad - (\Gamma_N A(Pe_N) + \Gamma_P A(Pe_P)) \Delta t v_{g,n} + \Delta t v_{g,s} \|F_P, 0\| \\
& \quad + \Delta t u_{nn} \|-F_N, 0\| - \Delta t v_{g,n} (\|F_P, 0\| + \|-F_N, 0\|) \\
& \quad + (P_P - P_N) \Delta t + (B_m v_{g,n} + B_c) \Delta z \Delta t
\end{aligned} \tag{291}$$

Al dividir la ecuación (291) por Δt y realizar el procedimiento de simplificación utilizando la ecuación de continuidad (ver las operaciones aritméticas descritas en las ecuaciones (96) a (99), donde la ecuación de continuidad, en la forma de la ecuación (25), se integra en el mismo volumen de control definido por los nodos N y P), se obtiene:

$$\begin{aligned}
& \frac{\rho_{g,0,n} v_{g,n} \Delta z}{\Delta t} - \frac{\rho_{g,0,n}^0 v_{g,n}^0 \Delta z}{\Delta t} \\
& = \Gamma_N A(Pe_N) v_{g,nn} + \Gamma_P A(Pe_P) v_{g,s} \\
& \quad - (\Gamma_N A(Pe_N) + \Gamma_P A(Pe_P)) v_{g,n} + v_{g,s} \|F_P, 0\| \\
& \quad + u_{nn} \|-F_N, 0\| - v_{g,n} (\|F_P, 0\| + \|-F_N, 0\|) \\
& \quad + (P_P - P_N) + (B_m v_{g,n} + B_c) \Delta z
\end{aligned} \tag{292}$$

Ordenando términos en la ecuación anterior:

$$\begin{aligned}
& \left(\frac{\rho_{g,0,n}^0 \Delta Z}{\Delta t} + \Gamma_N A(Pe_N) + \|-F_N, 0\| + \Gamma_P A(Pe_P) + \|F_P, 0\| \right. \\
& \quad \left. - B_m \Delta Z \right) v_{g,n} \\
& = (\Gamma_N A(Pe_N) + \|-F_N, 0\|) v_{g,nn} \\
& \quad + (\Gamma_P A(Pe_P) + \|F_P, 0\|) v_{g,s} + (P_P - P_N) + B_c \Delta Z \\
& \quad + \frac{\rho_{g,0,n}^0 v_{g,n}^0 \Delta Z}{\Delta t}
\end{aligned} \tag{293}$$

Comparando con los coeficientes obtenidos del esquema ley de potencia (ver ecuaciones (71) y (72)), la ecuación (293) se reduce a:

$$\begin{aligned}
& \left(\frac{\rho_{g,0,n}^0 \Delta Z}{\Delta t} + \Omega_N + \Omega_P - B_m \Delta Z \right) v_{g,n} \\
& = \Omega_N v_{g,nn} + \Omega_P v_{g,s} + (P_P - P_N) + B_c \Delta Z \\
& \quad + \frac{\rho_{g,0,n}^0 v_{g,n}^0 \Delta Z}{\Delta t}
\end{aligned} \tag{294}$$

Donde:

$$\Omega_N = \Gamma_N A(Pe_N) + \|-F_N, 0\| \tag{295}$$

$$\Omega_P = \Gamma_P A(Pe_P) + \|F_P, 0\| \tag{296}$$

En las ecuaciones (295) y (296), el cambio de símbolo del coeficiente del esquema ley de potencia se realiza para denotar la construcción de éste en el volumen de control de la grilla desplazada, donde los parámetros Γ , F y Pe no se evalúan en las interfases, sino que en los nodos de la grilla original.

Definiendo los nuevos términos:

$$a_n = \frac{\rho_{g,0,n}^0 \Delta Z}{\Delta t} + \Omega_N + \Omega_P - B_m \Delta Z \tag{297}$$

$$b_n = B_c \Delta Z + \frac{\rho_{g,0,n}^0 v_{g,n}^0 \Delta Z}{\Delta t} \tag{298}$$

La ecuación (294) resulta en la siguiente expresión:

$$a_n v_{g,n} = \Omega_N v_{g,nn} + \Omega_P v_{g,s} + b_n + (P_P - P_N) \tag{299}$$

5.2.6. Discretización de la Ecuación en el Borde Inferior

Se aplica la siguiente condición de borde en el piso de la pila/botadero/columna:

$$-\mu_g \frac{\partial v_g}{\partial z} + \rho_{g,0} v_g v_g = \rho_{g,Ent} v_{g,Ent} v_{g,Ent} \quad (300)$$

El término a la derecha de la igualdad representa al flujo de aire inyectado (o flujo de entrada del aire por convección natural) en la pila/botadero/columna. Tanto el término $\rho_{g,Ent}$ como $v_{g,Ent}$ son valores conocidos para cualquier tiempo t modelado. Los términos situados a la izquierda de la igualdad están evaluados en el primer nodo de la grilla, situado en el piso.

La derivación de la condición de borde se obtiene al considerar que, en el primer nodo (recordando que se estableció invertir el orden los nodos en el desarrollo de este modelo), los flujos difusivo y advectivo de transporte de movimiento son iguales al flujo inyectado en la base del lecho (para convección natural se supone un flujo de inyección de aire muy pequeño o nulo). Lo anterior es equivalente a suponer que la generación de movimiento del aire, en el piso de la pila, se debe exclusivamente al flujo inyectado que entra en el sistema.

El volumen de control situado en el borde inferior de la grilla desplazada se muestra en la siguiente figura. Este volumen de control queda definido por el primer y segundo nodo de la grilla original. Una vez que la ecuación (271) ha sido integrada en el espacio discreto, se acopla la condición de borde definida en la ecuación (300).

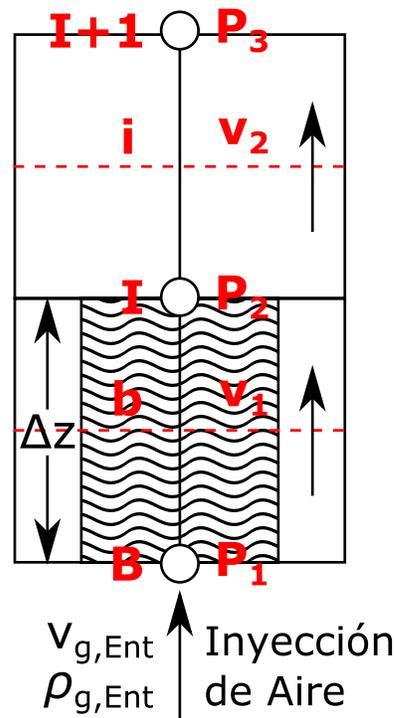


Figura 20. Volumen de control definido en el borde inferior de la grilla desplazada.

Se presenta la discretización del término de acumulación de la ecuación (271):

$$\begin{aligned}
\int_B \int_{t_0}^t \frac{\partial(\rho_{g,0}v_g)}{\partial t} \partial t \partial z &= \int_B [(\rho_{g,0}v_g) - (\rho_{g,0}v_g)^0] \partial z \\
&= [(\rho_{g,0}v_g) - (\rho_{g,0}v_g)^0] \Delta z \\
&= \rho_{g,0,b}v_{g,b}\Delta z - \rho_{g,0,b}^0v_{g,b}^0\Delta z
\end{aligned} \tag{301}$$

En la ecuación anterior, $\rho_{g,0,b}$ se define por una expresión similar a la ecuación (279).

A continuación se integra el término de difusión de la ecuación (271), utilizando el mismo procedimiento detallado en la discretización de los nodos interiores:

$$\begin{aligned}
\int_{t_0}^t \int_B \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_g \frac{\partial v_g}{\partial z} \right) \partial z \partial t &= \\
&= \Gamma_I A (Pe_I) \Delta t v_{g,i} - \Gamma_I A (Pe_I) \Delta t v_{g,b} - \left(\mu_g \frac{\partial v_g}{\partial z} \right)_B \Delta t
\end{aligned} \tag{302}$$

Donde:

$$\Gamma_I = \frac{\mu_{g,I}}{\Delta z} \tag{303}$$

$$Pe_I = \frac{\rho_{g,0,I}v_{g,I}\Delta z}{\mu_{g,I}} \tag{304}$$

La discretización del término de advección de la ecuación (271) sobre el volumen de control, incorporando las propiedades del esquema de diferencias en contracorriente para el eje de referencia invertido, resulta en:

$$\begin{aligned}
- \int_{t_0}^t \int_B \frac{\partial(\rho_{g,0}v_g v_g)}{\partial z} \partial z \partial t &= \\
&= (\rho_{g,0}v_g v_g)_B \Delta t - \Delta t v_{g,b} \|F_I, 0\| + \Delta t v_{g,i} \|-F_I, 0\|
\end{aligned} \tag{305}$$

Donde:

$$F_I = \rho_{g,0,I}v_{g,I} \tag{306}$$

La discretización de los términos de fuerza de presión y componente de fuerza de cuerpo de la ecuación (271) resulta en la siguiente expresión:

$$\begin{aligned}
\int_{t_0}^t \int_B \left(-\frac{\partial P}{\partial z} + B_m v_g + B_c \right) \partial z \partial t &= \\
&= (P_B - P_I) \Delta t + (B_m v_{g,b} + B_c) \Delta z \Delta t
\end{aligned} \tag{307}$$

Luego, al reunir los 5 términos integrados de la ecuación (271) (definidos en las ecuaciones (301), (302), (305) y (307)), se obtiene la ecuación de conservación de movimiento del flujo de aire, discretizada en el volumen de control del borde inferior de la grilla desplazada.

$$\begin{aligned}
& \rho_{g,0,b} v_{g,b} \Delta Z - \rho_{g,0,b}^0 v_{g,b}^0 \Delta Z \\
& = \Gamma_I A (Pe_I) \Delta t v_{g,i} - \Gamma_I A (Pe_I) \Delta t v_{g,b} - \left(\mu_g \frac{\partial v_g}{\partial z} \right)_B \Delta t \\
& + \left(\rho_{g,0} v_g v_g \right)_B \Delta t - \Delta t v_{g,b} \|F_I, 0\| + \Delta t v_{g,i} \|-F_I, 0\| \\
& + (P_B - P_I) \Delta t + (B_m v_{g,b} + B_c) \Delta Z \Delta t
\end{aligned} \tag{308}$$

Al dividir la ecuación (308) por Δt y agrupar los términos de advección y difusión evaluados en el nodo B , se obtiene:

$$\begin{aligned}
& \frac{\rho_{g,0,b} v_{g,b} \Delta Z}{\Delta t} - \frac{\rho_{g,0,b}^0 v_{g,b}^0 \Delta Z}{\Delta t} \\
& = \Gamma_I A (Pe_I) v_{g,i} - \Gamma_I A (Pe_I) v_{g,b} \\
& + \left[-\mu_g \frac{\partial v_g}{\partial z} + \rho_{g,0} v_g v_g \right]_B - v_{g,b} \|F_I, 0\| + v_{g,i} \|-F_I, 0\| \\
& + (P_B - P_I) + (B_m v_{g,b} + B_c) \Delta Z
\end{aligned} \tag{309}$$

Se introduce la condición de borde en el nodo B , al notar que los términos dentro del paréntesis cuadrado corresponden a la expresión de la izquierda de la ecuación (300). También se realiza el procedimiento de simplificación utilizando la ecuación de continuidad (ver las operaciones aritméticas descritas en las ecuaciones (96) a (99), donde la ecuación de continuidad, en la forma de la ecuación (25), se integra en el mismo volumen de control definido por los nodos I y B).

$$\begin{aligned}
& \frac{\rho_{g,0,b} v_{g,b} \Delta Z}{\Delta t} - \frac{\rho_{g,0,b}^0 v_{g,b}^0 \Delta Z}{\Delta t} \\
& = \Gamma_I A (Pe_I) v_{g,i} - \Gamma_I A (Pe_I) v_{g,b} + \rho_{g,Ent} v_{g,Ent} v_{g,Ent} \\
& - v_{g,b} \|F_I, 0\| + v_{g,i} \|-F_I, 0\| + (P_B - P_I) \\
& + (B_m v_{g,b} + B_c) \Delta Z
\end{aligned} \tag{310}$$

Al ordenar términos en la ecuación anterior y utilizar la propiedad del operador $\|\cdot\|$, descrita en la ecuación (46), se tiene:

$$\begin{aligned}
& \left(\frac{\rho_{g,0,b}^0 \Delta Z}{\Delta t} + \Gamma_I A (Pe_I) + \|-F_I, 0\| + F_I - B_m \Delta Z \right) v_{g,b} \\
& = (\Gamma_I A (Pe_I) + \|-F_I, 0\|) v_{g,i} + (P_B - P_I) \\
& + \rho_{g,Ent} v_{g,Ent} v_{g,Ent} + B_c \Delta Z + \frac{\rho_{g,0,b}^0 v_{g,b}^0 \Delta Z}{\Delta t}
\end{aligned} \tag{311}$$

Comparando con los coeficientes obtenidos del esquema ley de potencia (ver ecuaciones (71) y (72)), la ecuación (311) se reduce a:

$$\begin{aligned}
& \left(\frac{\rho_{g,0,b}^0 \Delta Z}{\Delta t} + \Omega_I + F_I - B_m \Delta Z \right) v_{g,b} \\
& = \Omega_I v_{g,i} + (P_B - P_I) + \rho_{g,Ent} v_{g,Ent} v_{g,Ent} + B_c \Delta Z \\
& + \frac{\rho_{g,0,b}^0 v_{g,b}^0 \Delta Z}{\Delta t}
\end{aligned} \tag{312}$$

Donde:

$$\Omega_I = \Gamma_I A (P e_I) + \|-F_I, 0\| \tag{313}$$

Definiendo los nuevos términos:

$$a_{in} = \frac{\rho_{g,0,b}^0 \Delta Z}{\Delta t} + \Omega_I + F_I - B_m \Delta Z \tag{314}$$

$$b_{in} = \rho_{g,Ent} v_{g,Ent} v_{g,Ent} + B_c \Delta Z + \frac{\rho_{g,0,b}^0 v_{g,b}^0 \Delta Z}{\Delta t} \tag{315}$$

La ecuación (312) resulta en la siguiente expresión:

$$a_{in} v_{g,b} = \Omega_I v_{g,i} + b_{in} + (P_B - P_I) \tag{316}$$

5.2.7. Discretización de la Ecuación en el Borde Superior

En la corona, la parte superior por donde surge el flujo de aire que atraviesa a la pila, se aplica la siguiente condición de borde.

$$\mu_g \frac{\partial v_g}{\partial z} = 0 \tag{317}$$

La condición de borde de la ecuación (317) representa la ausencia de gradientes de velocidad del flujo de aire, en el eje vertical, cuando éste sale por la superficie de la pila hacia el exterior. Lo anterior implica que la velocidad del aire en la corona y en el exterior se mantiene constante, es decir, los factores físicos/químicos/biológicos del sistema modelado solo afectan la velocidad del flujo de aire al interior de la pila/botadero/columna.

También se impone, como condición de borde, que la presión en la corona (o la presión evaluada en el último nodo de la grilla original) es conocida. Su valor se define por la presión atmosférica (P_{atm}), que es un dato de entrada.

El volumen de control situado en el borde superior de la grilla desplazada se muestra en la siguiente figura. Este volumen de control queda definido por el último y penúltimo nodo de la grilla original, dado que si se considera la sección que llega hasta la interfase ubicada sobre la corona, el espacio de integración se sale del espacio definido para la modelación (el sistema solo abarca el lecho de mineral). Una vez que la ecuación (271) ha sido integrada en el espacio discreto, se acopla la condición de borde definida en la ecuación (317).

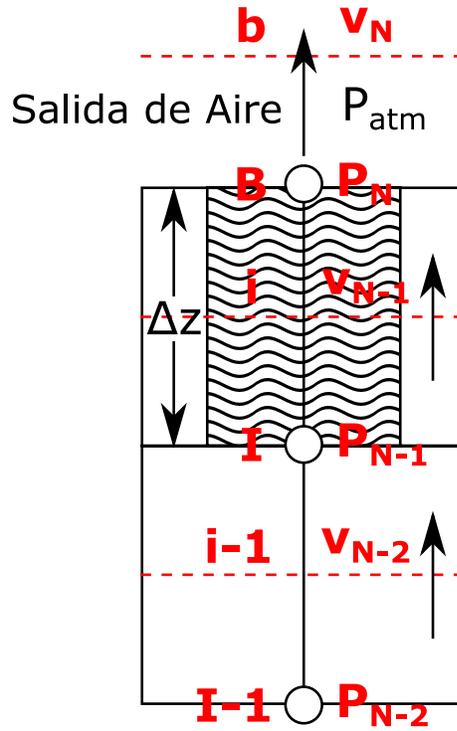


Figura 21. Volumen de control definido en el borde superior de la grilla desplazada.

Se presenta la discretización del término de acumulación de la ecuación (271):

$$\begin{aligned}
 \int_I^B \int_{t_0}^t \frac{\partial(\rho_{g,0}v_g)}{\partial t} \partial t \partial z &= \int_I^B [(\rho_{g,0}v_g) - (\rho_{g,0}v_g)^0] \partial z \\
 &= [(\rho_{g,0}v_g) - (\rho_{g,0}v_g)^0] \Delta z \\
 &= \rho_{g,0,i}v_{g,i}\Delta z - \rho_{g,0,i}^0v_{g,i}^0\Delta z
 \end{aligned} \tag{318}$$

En la ecuación anterior, $\rho_{g,0,i}$ se define por una expresión similar a la ecuación (279).

A continuación se integra el término de difusión de la ecuación (271), utilizando el mismo procedimiento detallado en la discretización de los nodos interiores:

$$\begin{aligned}
 \int_{t_0}^t \int_I^B \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_g \frac{\partial v_g}{\partial z} \right) \partial z \partial t &= \\
 &= \left(\mu_g \frac{\partial v_g}{\partial z} \right)_B \Delta t - \Gamma_I A(Pe_I) \Delta t v_{g,i} + \Gamma_I A(Pe_I) \Delta t v_{g,i-1}
 \end{aligned} \tag{319}$$

Donde:

$$\Gamma_I = \frac{\mu_{g,I}}{\Delta z} \tag{320}$$

$$Pe_I = \frac{\rho_{g,0,I} v_{g,I} \Delta z}{\mu_{g,I}} \quad (321)$$

En la ecuación anterior, la velocidad $v_{g,i-1}$ denota a la velocidad evaluada en la interface situada entre el penúltimo y antepenúltimo nodo de la grilla original, I e $I - 1$, respectivamente.

Se introduce la condición de borde en el nodo B , señalada en la ecuación (317). Luego la ecuación (319) se reduce a:

$$\int_{t_0}^t \int_I^B \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_g \frac{\partial v_g}{\partial z} \right) dz dt = -\Gamma_I A (Pe_I) \Delta t v_{g,i} + \Gamma_I A (Pe_I) \Delta t v_{g,i-1} \quad (322)$$

La discretización del término de advección de la ecuación (271) sobre el volumen de control, incorporando las propiedades del esquema de diferencias en contracorriente para el eje de referencia invertido, resulta en:

$$\begin{aligned} - \int_{t_0}^t \int_I^B \frac{\partial (\rho_{g,0} v_g v_g)}{\partial z} dz dt \\ = \Delta t v_{g,i-1} \|F_I, 0\| - \Delta t v_{g,i} \| -F_I, 0\| - \Delta t v_{g,i} \|F_B, 0\| \\ + \Delta t v_{g,b} \| -F_B, 0\| \end{aligned} \quad (323)$$

Donde:

$$F_B = \rho_{g,0,B} v_{g,B} \quad ; \quad F_I = \rho_{g,0,I} v_{g,I} \quad (324)$$

La discretización de los términos de fuerza de presión y componente de fuerza de cuerpo de la ecuación (271) resulta en la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^t \int_I^B \left(-\frac{\partial P}{\partial z} + B_m v_g + B_c \right) dz dt \\ = (P_I - P_B) \Delta t + (B_m v_{g,i} + B_c) \Delta z \Delta t \end{aligned} \quad (325)$$

Luego, al reunir los 5 términos integrados de la ecuación (271) (definidos en las ecuaciones (318), (322), (323) y (325)), se obtiene la ecuación de conservación de movimiento del flujo de aire, discretizada en el volumen de control del borde superior de la grilla desplazada.

$$\begin{aligned} \rho_{g,0,i} v_{g,i} \Delta z - \rho_{g,0,i}^0 v_{g,i}^0 \Delta z \\ = -\Gamma_I A (Pe_I) \Delta t v_{g,i} + \Gamma_I A (Pe_I) \Delta t v_{g,i-1} \\ + \Delta t v_{g,i-1} \|F_I, 0\| - \Delta t v_{g,i} \| -F_I, 0\| - \Delta t v_{g,i} \|F_B, 0\| \\ + \Delta t v_{g,b} \| -F_B, 0\| + (P_I - P_B) \Delta t \\ + (B_m v_{g,i} + B_c) \Delta z \Delta t \end{aligned} \quad (326)$$

Al dividir la ecuación (326) por Δt y realizar el procedimiento de simplificación utilizando la ecuación de continuidad (ver las operaciones aritméticas descritas en las ecuaciones (96) a (99), donde la ecuación de continuidad, en la forma de la ecuación (25), se integra en el mismo volumen de control definido por los nodos B y I), se obtiene:

$$\begin{aligned}
\frac{\rho_{g,0,i}^0 v_{g,i} \Delta Z}{\Delta t} - \frac{\rho_{g,0,i}^0 v_{g,i}^0 \Delta Z}{\Delta t} &= -\Gamma_I A(Pe_I) v_{g,i} + \Gamma_I A(Pe_I) v_{g,i-1} + v_{g,i-1} \|F_I, 0\| \\
&- v_{g,i} \|-F_I, 0\| - v_{g,i} \|F_B, 0\| + v_{g,b} \|-F_B, 0\| \\
&+ (P_I - P_B) + (B_m v_{g,i} + B_c) \Delta Z
\end{aligned} \quad (327)$$

Se establece la siguiente aproximación, deducida a partir de la condición de borde (ecuación (317)).

$$v_{g,b} \approx v_{g,B} \approx v_{g,i} \quad (328)$$

Se ordenan los términos de la ecuación (327). Además, se introduce la aproximación de la ecuación (328) y se utiliza la propiedad del operador $\|\cdot\|$, incorporando también el balance de masa del flujo (ver ecuaciones (46) y (48)). Luego, se tiene:

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\rho_{g,0,i}^0 \Delta Z}{\Delta t} + \Gamma_I A(Pe_I) + \|F_I, 0\| - B_m \Delta Z \right) v_{g,i} &= (\Gamma_I A(Pe_I) + \|F_I, 0\|) v_{g,i-1} + (P_I - P_B) + B_c \Delta Z \\
+ \frac{\rho_{g,0,i}^0 v_{g,i}^0 \Delta Z}{\Delta t} &
\end{aligned} \quad (329)$$

Comparando con los coeficientes obtenidos del esquema ley de potencia (ver ecuaciones (71) y (72)), la ecuación (329) se reduce a:

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\rho_{g,0,i}^0 \Delta Z}{\Delta t} + \Omega_I - B_m \Delta Z \right) v_{g,i} &= \Omega_I v_{g,i-1} + (P_I - P_B) + B_c \Delta Z + \frac{\rho_{g,0,i}^0 v_{g,i}^0 \Delta Z}{\Delta t}
\end{aligned} \quad (330)$$

Donde:

$$\Omega_I = \Gamma_I A(Pe_I) + \|F_I, 0\| \quad (331)$$

Definiendo los nuevos términos:

$$a_{fi} = \frac{\rho_{g,0,i}^0 \Delta Z}{\Delta t} + \Omega_I - B_m \Delta Z \quad (332)$$

$$b_{fi} = B_c \Delta Z + \frac{\rho_{g,0,i}^0 v_{g,i}^0 \Delta Z}{\Delta t} \quad (333)$$

La ecuación (330) resulta en la siguiente expresión:

$$a_{fi} v_{g,i} = \Omega_I v_{g,i-1} + b_{fi} + (P_I - P_B) \quad (334)$$

5.2.8. Discretización de la Ecuación de Presión

A continuación se describe el procedimiento de obtención de la ecuación que determina el campo de presión imperante en el sistema.

Se manipula la ecuación discretizada de conservación de movimiento para los nodos interiores de la grilla desplazada, definida en la ecuación (299).

$$v_{g,n} = \frac{\Omega_N v_{g,nn} + \Omega_P v_{g,s} + b_n}{a_n} + \frac{1}{a_n} (P_P - P_N) \quad (335)$$

Se define la variable de “seudo” velocidad para los nodos interiores, realizando una simplificación de términos en la ecuación (335).

$$\hat{v}_{g,n} = \frac{\Omega_N v_{g,nn} + \Omega_P v_{g,s} + b_n}{a_n} \quad (336)$$

Como se puede ver en la ecuación anterior, la seudo velocidad $\hat{v}_{g,n}$ se compone únicamente por las velocidades vecinas $v_{g,nn}$ y $v_{g,s}$, sin requerir la determinación de valores para la presión.

Con la definición de la seudo velocidad, la ecuación (335) puede escribirse como:

$$v_{g,n} = \hat{v}_{g,n} + \frac{1}{a_n} (P_P - P_N) \quad (337)$$

De manera similar, para las ecuaciones discretizadas en los bordes de la grilla desplazada (ecuaciones (316) y (334)), se tienen las siguientes expresiones:

$$v_{g,b} = \hat{v}_{g,b} + \frac{1}{a_{in}} (P_B - P_I) \quad (338)$$

$$v_{g,i} = \hat{v}_{g,i} + \frac{1}{a_{fi}} (P_I - P_B) \quad (339)$$

Donde:

$$\hat{v}_{g,b} = \frac{\Omega_I v_{g,i} + b_{in}}{a_{in}} \quad (340)$$

$$\hat{v}_{g,i} = \frac{\Omega_I v_{g,i-1} + b_{fi}}{a_{fi}} \quad (341)$$

Las ecuaciones (337), (338) y (339) también se denominan ecuaciones de corrección de la velocidad: permiten corregir el campo de velocidad del flujo de gas, estimado a partir de un campo de presión supuesto, utilizando un campo de presión con valores actualizados (que posee valores de presión más cercanos a la solución del problema).

Integrando la ecuación de continuidad (ecuación (25)) en un volumen de control definido para los nodos interiores de la grilla original (ver Figura 12), se tiene:

$$\int_S^n \int_{t_0}^t \frac{\partial(\rho_{g,0})}{\partial t} \partial t \partial z + \int_{t_0}^t \int_S^n \frac{\partial(\rho_{g,0} v_g)}{\partial z} \partial z \partial t = 0 \quad (342)$$

$$\int_S^n [\rho_{g,0} - \rho_{g,0}^0] \partial z + \int_{t_0}^t [(\rho_{g,0} v_g)_n - (\rho_{g,0} v_g)_s] \partial t = 0 \quad (343)$$

$$\frac{(\rho_{g,0,P} - \rho_{g,0,P}^0) \Delta z}{\Delta t} + \rho_{g,0,n} v_{g,n} - \rho_{g,0,s} v_{g,s} = 0 \quad (344)$$

Para obtener la ecuación (344) se utilizó la convención de integración y supuestos de interpolación de las variables comentado en secciones anteriores. Se debe remarcar que la integración en el espacio discreto de la ecuación de continuidad se realizó en la grilla original, sin desplazar el volumen de control.

Considerando la ecuación (337), se sustituyen los términos de velocidad en la expresión de la ecuación (344). La construcción de $v_{g,s}$ se logra al integrar los términos en el volumen de control definido por la interfase S , siguiendo la misma lógica empleada para $v_{g,n}$.

$$\begin{aligned} & \frac{(\rho_{g,0,P} - \rho_{g,0,P}^0) \Delta z}{\Delta t} + \rho_{g,0,n} \left(\hat{v}_{g,n} + \frac{1}{a_n} (P_P - P_N) \right) \\ & - \rho_{g,0,s} \left(\hat{v}_{g,s} + \frac{1}{a_s} (P_S - P_P) \right) = 0 \end{aligned} \quad (345)$$

Reordenando la ecuación anterior:

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\rho_{g,0,n}}{a_n} + \frac{\rho_{g,0,s}}{a_s} \right) P_P \\ & = \left(\frac{\rho_{g,0,n}}{a_n} \right) P_N + \left(\frac{\rho_{g,0,s}}{a_s} \right) P_S + \frac{(\rho_{g,0,P}^0 - \rho_{g,0,P}) \Delta z}{\Delta t} \\ & - \rho_{g,0,n} \hat{v}_{g,n} + \rho_{g,0,s} \hat{v}_{g,s} \end{aligned} \quad (346)$$

Al agrupar términos, la ecuación (346) se modifica en la siguiente ecuación:

$$a_P P_P = a_N P_N + a_S P_S + B \quad (347)$$

Donde:

$$a_P = a_N + a_S \quad (348)$$

$$a_N = \frac{\rho_{g,0,n}}{a_n} \quad (349)$$

$$a_S = \frac{\rho_{g,0,s}}{a_s} \quad (350)$$

$$B = \frac{(\rho_{g,0,P}^0 - \rho_{g,0,P})\Delta Z}{\Delta t} - \rho_{g,0,n}\hat{v}_{g,n} + \rho_{g,0,s}\hat{v}_{g,s} \quad (351)$$

De forma análoga, al integrar la ecuación de continuidad en el semi-volumen de control del borde inferior de la grilla original (entre la interfase b y el nodo B), se obtiene:

$$\frac{(\rho_{g,0,B} - \rho_{g,0,B}^0)0,5\Delta Z}{\Delta t} + \rho_{g,0,b}v_{g,b} - \rho_{g,0,B}v_{g,B} = 0 \quad (352)$$

Se reemplaza el valor de $v_{g,B}$ por el dato conocido de velocidad de entrada, $v_{g,Ent}$, descrito en la condición de borde. También se utiliza a ecuación (338) para reemplazar la velocidad $v_{g,b}$. La ecuación (352) se convierte en:

$$a_b P_B = a_b P_I + B_{in} \quad (353)$$

Donde:

$$a_b = \frac{\rho_{g,0,b}}{a_{in}} \quad (354)$$

$$B_{in} = \frac{(\rho_{g,0,B}^0 - \rho_{g,0,B})0,5\Delta Z}{\Delta t} - \rho_{g,0,b}\hat{v}_{g,b} + \rho_{g,0,B}v_{g,Ent} \quad (355)$$

Se realiza un desarrollo similar para el borde de la corona. Integrando la ecuación de continuidad en el semi-volumen de control del borde superior de la grilla original:

$$\int_i^B [\rho_{g,0} - \rho_{g,0}^0] \partial Z + \int_{t_0}^t [(\rho_{g,0}v_g)_B - (\rho_{g,0}v_g)_i] \partial t = 0 \quad (356)$$

Se utiliza la aproximación señalada en la ecuación (328):

$$\frac{(\rho_{g,0,B} - \rho_{g,0,B}^0)0,5\Delta Z}{\Delta t} + (\rho_{g,0,B} - \rho_{g,0,i})v_{g,i} = 0 \quad (357)$$

Luego, al utilizar la ecuación (339), se obtiene:

$$a_B P_I = a_B P_B + B_{fi} \quad (358)$$

Donde:

$$a_B = \frac{\rho_{g,0,B} - \rho_{g,0,i}}{a_{fi}} \quad (359)$$

$$B_{fi} = \frac{(\rho_{g,0,B}^0 - \rho_{g,0,B})0,5\Delta z}{\Delta t} - (\rho_{g,0,B} - \rho_{g,0,i})\hat{v}_{g,i} \quad (360)$$

Las ecuaciones (347), (353) y (358) son las ecuaciones discretizadas de la presión para los nodos interiores, el borde inferior y el borde superior, respectivamente. Por medio de estas ecuaciones se calcula el campo de presiones en los nodos de la grilla original, usando valores conocidos de pseudo velocidades.

5.2.9. Coeficientes del Algoritmo de Thomas para las Ecuaciones de Velocidad

En esta sección se explica la metodología de cálculo de los coeficientes del algoritmo de Thomas para las ecuaciones discretizadas de conservación de movimiento. Estas ecuaciones son utilizadas para obtener un campo de velocidad estimado, definido a partir de valores de presión conocidos (el campo de presión usado también es estimado, y se determina inicialmente por un campo de pseudo velocidad conocido).

Como se mencionó anteriormente, en este modelo los nodos siguen un orden de numeración inverso al usado por los modelos de advección y difusión de oxígeno. De este modo, el nodo en el borde inferior se le asigna la primera posición y de forma ascendente se van contando los nodos hasta llegar al borde superior, en donde se asigna el último índice.

Se reemplazan los subíndices de la velocidad y de la presión en la ecuación (299) por valores numéricos consecutivos. En la Figura 19 se aprecia la conversión de la notación para cada una de estas variables: para un nodo interior k cualquiera, se tiene el nodo $k + 1$, situado al norte y el nodo $k - 1$, ubicado al sur.

$$a_n v_{g,k} = \Omega_N v_{g,k+1} + \Omega_P v_{g,k-1} + b_n + (P_k - P_{k+1}) \quad (361)$$

Se define la relación para las velocidades de dos nodos contiguos, propuesta por el algoritmo de Thomas:

$$v_{g,k} = R_k v_{g,k+1} + S_k \quad (362)$$

Tomando en cuenta la relación de la ecuación (362), se repiten los procedimientos para obtener expresiones similares a las ecuaciones (160), (161), (162) y (163). Posteriormente, se tiene:

$$R_k = \frac{\Omega_N}{a_n - \Omega_P R_{k-1}} \quad (363)$$

$$S_k = \frac{\Omega_P S_{k-1} + b_n + (P_k - P_{k+1})}{a_n - \Omega_P R_{k-1}} \quad (364)$$

Se reemplazan los subíndices de la velocidad y de la presión en la ecuación (316) por valores numéricos consecutivos. En la Figura 20 se aprecia la conversión de la notación, en donde el nodo del borde inferior y el primer nodo interior se les asigna el valor 1 y 2, respectivamente.

$$a_{in}v_{g,1} = \Omega_I v_{g,2} + b_{in} + (P_1 - P_2) \quad (365)$$

Al comparar la ecuación (365) con la relación planteada en la ecuación (362), se obtienen los valores de los primeros coeficientes del algoritmo de Thomas, R_1 y S_1 .

$$R_1 = \frac{\Omega_I}{a_{in}} \quad (366)$$

$$S_1 = \frac{b_{in} + (P_1 - P_2)}{a_{in}} \quad (367)$$

Una vez que se encuentran los coeficientes del primer nodo, se pueden obtener los coeficientes de los demás nodos en la grilla, R_k y S_k , utilizando las relaciones recursivas presentadas en las ecuaciones (363) y (364).

Se reemplazan los subíndices de la velocidad y de la presión en la ecuación (334) por valores numéricos. En la Figura 21 se aprecia la conversión de la notación, en donde el último, penúltimo y antepenúltimo nodo se le asigna el valor N , $N - 1$ y $N - 2$, respectivamente, con N siendo un número natural cualquiera que representa la cantidad de nodos dispuestos en la grilla.

$$a_{fi}v_{g,N-1} = \Omega_I v_{g,N-2} + b_{fi} + (P_{N-1} - P_N) \quad (368)$$

Rehaciendo las mismas operaciones de cálculo usadas para obtener expresiones similares a las ecuaciones (170) y (172), se obtiene el valor de la velocidad del flujo de aire en el penúltimo nodo.

$$v_{g,N-1} = \frac{\Omega_I S_{N-2} + b_{fi} + (P_{N-1} - P_N)}{a_{fi} - \Omega_I R_{N-2}} \quad (369)$$

La última velocidad, $v_{g,N}$, se calcula utilizando la aproximación señalada en la ecuación (328).

Con la ecuación (369) se inicia el cálculo de las velocidades en las interfases de los volúmenes de control de la grilla original, empleando la relación inicial de la ecuación (362). De este modo, se determinan progresivamente las velocidades en las interfases vecinas inferiores (localizadas al sur) hasta llegar a la primera interfase, situada entre el nodo del piso de la pila y el primer nodo interior.

Las ecuaciones (362), (363), (364), (366), (367) y (369) también permiten determinar las pseudo velocidades, donde se debe asignar un valor nulo al gradiente de presión que aparece en las expresiones referidas.

5.2.10. Coeficientes del Algoritmo de Thomas para las Ecuaciones de Presión

A continuación se detalla el procedimiento de cálculo de los coeficientes del algoritmo de Thomas para las ecuaciones discretizadas de presión y la determinación de los valores de presión en los nodos de la grilla.

Se reemplazan los subíndices de la presión en la ecuación (347) por valores numéricos consecutivos, como se indica en la Figura 19.

$$a_P P_k = a_N P_{k+1} + a_S P_{k-1} + B \quad (370)$$

Se define la relación para las presiones de dos nodos contiguos, propuesta por el algoritmo de Thomas:

$$P_k = R_k P_{k+1} + S_k \quad (371)$$

Tomando en cuenta la relación de la ecuación (371), se repiten los procedimientos para obtener expresiones similares a las ecuaciones (160), (161), (162) y (163). Posteriormente, se tiene:

$$R_k = \frac{a_N}{a_P - a_S R_{k-1}} \quad (372)$$

$$S_k = \frac{a_S S_{k-1} + B}{a_P - a_S R_{k-1}} \quad (373)$$

Se reemplazan los subíndices de la presión en la ecuación (353) por valores numéricos consecutivos, como se indica en la Figura 20.

$$a_b P_1 = a_b P_2 + B_{in} \quad (374)$$

Al comparar la ecuación (374) con la relación planteada en la ecuación (371), se obtienen los valores de los primeros coeficientes del algoritmo de Thomas, R_1 y S_1 .

$$R_1 = 1 \quad (375)$$

$$S_1 = \frac{B_{in}}{a_b} \quad (376)$$

Una vez que se encuentran los coeficientes del primer nodo, se pueden obtener los coeficientes de los demás nodos en la grilla, R_k y S_k , utilizando las relaciones recursivas presentadas en las ecuaciones (372) y (373).

Recordando la condición de borde adicional, se tiene la siguiente igualdad:

$$P_N = P_{atm} \quad (377)$$

Donde P_{atm} es la presión atmosférica sobre la corona de la pila. Con la ecuación (377) se inicia el cálculo de las presiones en los nodos, empleando la relación inicial de la ecuación (371).

5.2.11. Algoritmo SIMPLER

A continuación se presenta la secuencia de operaciones del algoritmo SIMPLER [30].

1. Se inicia con un campo de presión y velocidad supuesto. Se pueden utilizar los valores de la presión y la velocidad estimados en el tiempo anterior como valores supuestos.
2. Se calculan los coeficientes de la ecuación de conservación de movimiento, y en consecuencia, también se calculan las pseudo velocidades a través de las ecuaciones (336), (340) y (341).
3. Con los valores calculados de \hat{v}_g , se determinan los coeficientes de la ecuación de presión, y se resuelve esta ecuación para obtener un campo de presión P .

4. Este campo de presión se renombra a P^* (campo de presión estimado). Se resuelve la ecuación de conservación de movimiento, incorporando la presión P^* , y se obtiene un campo de velocidad estimado v_g^* .
5. Se determina el coeficiente B (ecuaciones (351), (355) y (360)) con la velocidad v_g^* (en las ecuaciones se realiza el cambio de \hat{v}_g por v_g^*), y se resuelve nuevamente la ecuación de presión. Se obtiene un campo de presión intermedio, denominado P' . Este campo de presión representa la cantidad de presión requerida para que P^* pueda satisfacer las ecuaciones de conservación de movimiento y de continuidad. Para calcular P' se modifica la condición de borde en la corona, donde se impone $P_N' = 0$ (no se recalcula el valor de la presión en el último nodo, ya que es un dato de entrada).
6. Utilizando las velocidades v_g^* y el campo de presión intermedio P' , se corrige el campo de velocidad mediante el uso de las ecuaciones (337), (338) y (339) (se reemplaza \hat{v}_g por v_g^* y P por P'). Se obtiene el campo de velocidad actualizado v_g . La presión no se modifica, por lo que el campo de presión actualizado es $P = P^*$.
7. Se retorna al paso 2 y se repite el procedimiento hasta que se logre la convergencia. Se cumple el criterio de convergencia cuando la diferencia de cálculo entre una iteración con otra sea menor que un valor de tolerancia dado, es decir:

$$\max(|v_{g,k}^0 - v_{g,k}|) < Tol \quad (378)$$

Donde $v_{g,k}^0$ y $v_{g,k}$ representan la velocidad, en un nodo k cualquiera, calculada en la iteración anterior y la iteración actual, respectivamente. En la desigualdad anterior, la función $\max(|\cdot|)$ es el máximo, en valor absoluto de una serie de elementos.

5.2.12. Modificación del Modelo para Convección Natural

Cuando el valor de la velocidad estimada, v_g^* , cumple la condición señalada en la ecuación (379), se procede a realizar una modificación en la determinación del campo de velocidad del flujo de aire al interior de una pila de biolixiviación.

$$v_{g,k} \leq v_{g,\xi} \quad , \forall k \in \{1, \dots, N\} \quad (379)$$

Con:

$$0 < v_{g,\xi} \ll 10^{-4} \quad [m/s] \quad (380)$$

Donde:

$v_{g,\xi}$: Velocidad mínima de transición del flujo de aire (velocidad que establece una alteración del modelo original para calcular de forma idónea el campo de velocidad y de presión en condiciones de convección natural), [m/s].

En el modelo desarrollado se impone una velocidad mínima de transición con un valor de 10^{-10} [m/s].

En la iteración de cálculo, si la velocidad v_g^* cumple la condición señalada en la ecuación (379) en alguno de los nodos de la grilla, entonces se considera que el movimiento del flujo de aire está controlado por la convección natural (o convección libre) en la posición de ese nodo. En este escenario se asume que el fluido se mueve muy lentamente en el interior del lecho, y que, en primera instancia, la fuerza motriz del fluido es el gradiente de temperatura presente en los nodos.

La variación de temperatura entre dos secciones de volumen del fluido (delimitados por el volumen de control establecido en torno a cada nodo) genera una ganancia de velocidad causada por la fuerza de flotabilidad [31]. La fuerza de flotabilidad, que actúa en sentido contrario a la fuerza de gravedad, levanta las secciones superiores de aire (en el caso general de las pilas de biolixiviación, las secciones superiores de la pila están, en promedio, a una temperatura menor en comparación a las secciones inferiores), generando un vector de velocidad positivo, debido a la presión de empuje que ejercen las secciones inferiores de aire. La presión de empuje se produce cuando una sección de aire más liviana (caliente) se sitúa inmediatamente debajo de una sección de aire más pesada (fría).

Por lo mencionado anteriormente, la variación de la densidad del flujo de aire, en función de la temperatura, toma un rol protagónico en las ecuaciones de movimiento, lo que justifica modificar la ecuación (271) para tener en cuenta los efectos de la fuerza de flotación (despreciados, en un primer momento, por el gradiente de presión impuesto en el sistema por la convección forzada).

Como se mencionó previamente, se supone que el fluido se mueve muy lentamente, y que además, la temperatura de éste varía alrededor de un valor medio del sistema, \bar{T}_0 . Si todas las partes del fluido estuviesen a esta temperatura media (simplificación del problema) el gradiente de presión del sistema es definido a partir de la ecuación de conservación de movimiento, imponiendo que la velocidad del fluido en cada punto es cero. Lo anterior es equivalente a considerar la aproximación de que el gradiente de presión, para un volumen de gas “estancado” en el interior de la pila, es el peso del flujo de aire a una temperatura promedio del sistema [31]:

$$\frac{\partial P}{\partial z} = \overline{\rho_{g,0}} g \quad (381)$$

En la ecuación anterior el término $\overline{\rho_{g,0}}$ denota la media aritmética de las densidades referenciales, calculadas a partir de una temperatura referencial promedio, evaluadas en cada nodo al interior de la pila. Esta nueva densidad será denominada como densidad media referencial, y se define a partir de la siguiente ecuación.

$$\overline{\rho_{g,0}} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \sum_{j=1}^M \frac{P_{j,k} M_{j,k}}{R \bar{T}_0} \quad (382)$$

Con:

$$\bar{T}_0 = \frac{1}{N+1} \sum_{k=1}^N T_k + \frac{T_{amb}}{N+1} \quad (383)$$

Donde:

$\overline{\rho_{g,0}}$: Densidad media referencial del sistema, en condiciones de temperatura constante (evaluada a una temperatura media referencial), [kg/m³].

$P_{j,k}$: Presión parcial del componente j , evaluada en el nodo k , [Pa \equiv N/m²].

$M_{j,k}$: Peso molecular del componente j , evaluado en el nodo k , [kg/mol].

R : Constante de los gases ideales, 8,314 [(Pa· m³)/(K·mol)].

$\overline{T_0}$: Temperatura media referencial del sistema (temperatura para la cual se define el valor $\overline{\rho_{g,0}}$), [K].

N : Número total de nodos en la dirección z (eje vertical de la pila), adimensional.

M : Número total de componentes (considerados por el modelo) que conforman el flujo de aire, adimensional.

T_k : Temperatura del sistema evaluada en el nodo k , [K].

T_{amb} : Temperatura ambiente (sobre la corona de la pila), [K].

La aproximación de Boussinesq, usada para calcular la densidad en el término de la fuerza gravitacional, presente en el componente de fuerza del cuerpo (ver ecuación (270)), también se utiliza para modelar el flujo en condiciones de convección natural. Ahora la aproximación considera a $\overline{\rho_{g,0}}$ como la densidad de referencia.

Al insertar la ecuación (381) en la ecuación (270), se tiene:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho_{g,0}v_g)}{\partial t} = & \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_g \frac{\partial v_g}{\partial z} \right) - \frac{\partial(\rho_{g,0}v_gv_g)}{\partial z} - \overline{\rho_{g,0}}g - \frac{\varepsilon_g\mu_g}{K}v_g \\ & + \overline{\rho_{g,0}} \left(1 - \frac{1}{\overline{T_0}}(T - \overline{T_0}) \right) g \end{aligned} \quad (384)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho_{g,0}v_g)}{\partial t} = & \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_g \frac{\partial v_g}{\partial z} \right) - \frac{\partial(\rho_{g,0}v_gv_g)}{\partial z} - \frac{\varepsilon_g\mu_g}{K}v_g \\ & - \frac{\overline{\rho_{g,0}}}{\overline{T_0}}(T - \overline{T_0})g \end{aligned} \quad (385)$$

La ecuación (385) es la ecuación modificada de conservación de movimiento, que es usada para determinar la velocidad de un flujo de aire inducido por convección natural, considerando una temperatura media referencial, $\overline{T_0}$, en el flujo. Esta es una ecuación aproximada, con aplicaciones para fluidos con bajas velocidades y pequeñas diferencias de temperatura.

Debido a que una gran variación de temperatura es crítica en la funcionalidad de la ecuación (385), la temperatura de referencia en la ecuación (382) es calculada a partir de la media aritmética de las temperaturas presentes en todos los nodos y de la temperatura en el ambiente; no se usa de referencia la temperatura del último nodo (temperatura de la corona) como en el caso original de

la ecuación de conservación de movimiento, donde se asume que la convección forzada domina el movimiento del aire.

El último término a la derecha de la ecuación (385) representa la fuerza de flotación, responsable de generar un incremento de la velocidad del fluido, mientras éste asciende por la pila, cuando existe una temperatura relativa mayor en los estratos inferiores del lecho en comparación a la corona.

La velocidad estimada v_g^* es calculada a partir de la integración de la ecuación (385) en los volúmenes de control definidos por la grilla desplazada.

Para los nodos centrales, v_g^* se determina con el siguiente set de ecuaciones (las ecuaciones se obtuvieron con el procedimiento detallado en las secciones anteriores):

$$a_n v_{g,n}^* = \Omega_N v_{g,nn}^* + \Omega_P v_{g,s}^* + b_n \quad (386)$$

Con:

$$\Omega_N = \Gamma_N A(Pe_N) + \|-F_N, 0\| \quad (387)$$

$$\Omega_P = \Gamma_P A(Pe_P) + \|F_P, 0\| \quad (388)$$

$$a_n = \frac{\rho_{g,0,n}^0 \Delta Z}{\Delta t} + \Omega_N + \Omega_P - B_m \Delta Z \quad (389)$$

$$b_n = -\frac{\overline{\rho_{g,0}}}{\overline{T_0}} (T_n - \overline{T_0}) g \Delta Z + \frac{\rho_{g,0,n}^0 v_{g,n}^0 \Delta Z}{\Delta t} \quad (390)$$

En la condición de borde inferior, la velocidad v_g^* se determina con el siguiente set de ecuaciones:

$$a_{in} v_{g,b}^* = \Omega_I v_{g,i}^* + b_{in} \quad (391)$$

Con:

$$\Omega_I = \Gamma_I A(Pe_I) + \|-F_I, 0\| \quad (392)$$

$$a_{in} = \frac{\rho_{g,0,b}^0 \Delta Z}{\Delta t} + \Omega_I + F_I - B_m \Delta Z \quad (393)$$

$$b_{in} = \rho_{g,Ent} v_{g,Ent} v_{g,Ent} - \frac{\overline{\rho_{g,0}}}{\overline{T_0}} (T_b - \overline{T_0}) g \Delta Z + \frac{\rho_{g,0,b}^0 v_{g,b}^0 \Delta Z}{\Delta t} \quad (394)$$

En la condición de borde superior, la velocidad v_g^* se determina con el siguiente set de ecuaciones:

$$a_{fi} v_{g,i}^* = \Omega_I v_{g,i-1}^* + b_{fi} \quad (395)$$

Con:

$$\Omega_I = \Gamma_I A(Pe_I) + \|F_I, 0\| \quad (396)$$

$$a_{fi} = \frac{\rho_{g,0,i}^0 \Delta Z}{\Delta t} + \Omega_I - B_m \Delta Z \quad (397)$$

$$b_{fi} = -\frac{\overline{\rho_{g,0}}}{\overline{T_0}} (T_i - \overline{T_0}) g \Delta Z + \frac{\rho_{g,0,i}^0 v_{g,i}^0 \Delta Z}{\Delta t} \quad (398)$$

Para las velocidades \hat{v}_g y v_g (velocidad actualizada), independiente de si se cumple la condición de la ecuación (379), siempre se calculan por medio de la ecuación original de conservación de movimiento (ecuación (271)). Como la pseudo velocidad es utilizada para calcular el primer valor estimado de la presión en el sistema, la presión también puede estimarse con el procedimiento original de cálculo. El cálculo de P' , que representa el delta de presión del valor estimado de presión (P^*) requerido para satisfacer las ecuaciones de movimiento, utiliza el valor modificado de la velocidad v_g^* (la ecuación (385) también altera el valor de la presión). Dado que las velocidades obtenidas por la ecuación (385) tienen valores muy pequeños, los valores de v_g^* , que fueron recalculados, no distorsionan el campo de presión P' . Esto permite estimar el campo de presión, cuando la dinámica del flujo se rige bajo convección natural, mediante la ecuación (271) y la ecuación (25), sin afectar el resultado final del campo de velocidad en convección natural.

El primer valor supuesto de presión (“first guess”) utilizado en el algoritmo, tiene una gran relevancia en el modelo de fluidodinámica para convección natural (impacta en el resultado final de los campos de presión y de velocidad). Para obtener una aproximación numérica de la presión supuesta en cada nodo al interior de la pila, se aplica el método de Euler en la ecuación diferencial descrita en la ecuación (381) [54].

$$P_{k+1} = (\overline{\rho_{g,0}} g + P_k) \Delta Z \quad (399)$$

Donde:

P_{k+1} : Presión supuesta en la entrada del algoritmo del modelo (“first guess”) evaluada en el nodo $k + 1$, situado al norte del nodo k , [Pa].

P_k : Presión supuesta en la entrada del algoritmo del modelo (“first guess”) evaluada en el nodo k , situado al sur del nodo $k + 1$, [Pa].

Dado que no existe un valor supuesto de presión en el último nodo (el valor de presión siempre es conocido y es igual a la presión atmosférica), con la ecuación (399) se tienen buenos valores tentativos para iniciar los cálculos de las velocidades y de las presiones.

Es importante mencionar que, al despreciar los términos de la fuerza viscosa y advectiva en la ecuación modificada de movimiento para el caso de convección natural, y asumir el estado estacionario en el movimiento del fluido, la ecuación (385) se transforma en la ley de Darcy. La ley de Darcy es utilizada para estimar de forma muy aproximada la velocidad del gas que atraviesa un lecho poroso en estado estacionario y en régimen de flujo laminar [31, 34, 35].

$$v_g = \frac{Kg\overline{\rho_{g,0}}}{\varepsilon_g\mu_g} \left(\frac{T}{\overline{T}_0} - 1 \right) \quad (400)$$

5.2.13. Diagrama de Flujo del Algoritmo

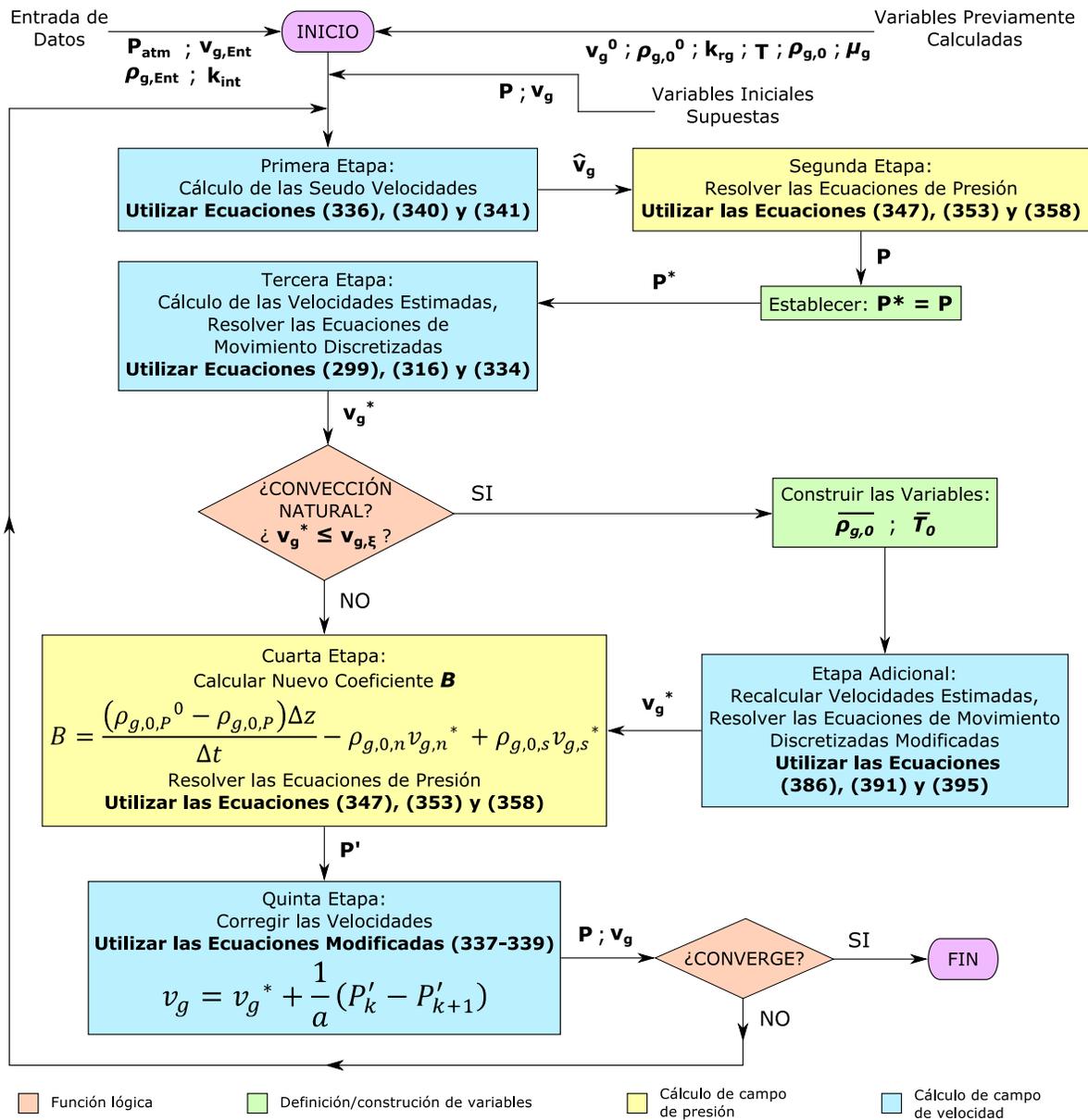


Figura 22. Diagrama de flujo del algoritmo del Modelo de fluidodinámica de la fase gaseosa.

5.3. Determinación del Coeficiente Global Volumétrico de Transferencia de Oxígeno entre las Fases Líquida y Gaseosa

Para modelar el balance de oxígeno se debe estimar la tasa de transferencia de esta especie entre las fases líquida y gaseosa. El parámetro fundamental que define el flujo de transferencia entre el aire y la solución es el coeficiente global volumétrico de transferencia de oxígeno. Este coeficiente

se compone de dos términos: el área interfacial de transferencia y el coeficiente global de transferencia.

Interesa calcular un coeficiente variable, evaluado en el tiempo y en el espacio, donde su valor es afectado por la tasa de riego, el tamaño de partícula, la concentración de oxígeno y la temperatura en la pila, principalmente. De esta forma, se introduce una mayor complejidad en el modelo general de biolixiviación, mejorando su grado de predicción.

Cuando se modifican las variables de operación en el sistema, los cálculos del área interfacial y el coeficiente global de transferencia pueden sufrir diferentes variaciones, lo cual repercute en que el coeficiente global volumétrico de transferencia tenga un resultado más cercano a la realidad para las condiciones locales y temporales impuestas. A modo de ejemplo, si se incrementa la tasa de riego, el área interfacial puede aumentar, pero también puede disminuir el coeficiente global de transferencia; lo relevante sería saber en qué grado aumenta o disminuye cada uno de estos parámetros para poder determinar un incremento o disminución neto en el coeficiente global volumétrico de transferencia de oxígeno.

5.3.1. Área Interfacial Efectiva de Transferencia

Se determina el área interfacial al suponer que la pila está conformada por un lecho empacado de esferas sólidas de igual diámetro. Las esferas no modifican su tamaño en el tiempo, y no son desplazadas por los flujos de líquido o gas que las atraviesa. El espacio generado entre las esferas es ocupado por el líquido y el gas. Se establece que el gas fluye entre estos espacios, en la dirección vertical, a través de canales cilíndricos con una longitud y diámetro definidos. En cada sección del lecho poroso hay un número fijo de canales presentes, los cuales poseen iguales dimensiones. Un grupo de canales, localizado en otra sección del lecho, puede tener diferentes tamaños de cilindros y números de cilindros, los que son definidos por los parámetros fluidodinámicos del sistema.

El área total interfacial efectiva de transferencia, en cada sección de lecho, se define como:

$$a_k = N_{c,k} \pi d_{c,k} \Delta z \tau_k, \forall k \in \{1, \dots, N\} \quad (401)$$

Donde:

a_k : Área total interfacial efectiva entre las fases líquida y gaseosa en el nodo k , [m^2 / m^3 lecho].

$N_{c,k}$: Número de canales de aire presentes en cada nodo k por unidad de volumen de lecho (estratos con un espesor igual a la longitud del volumen de control en el eje vertical), [$1 / m^3$ lecho].

$d_{c,k}$: Diámetro del canal de aire en el nodo k , [m].

Δz : Distancia entre cada nodo (paso en el espacio). Longitud del volumen de control, [m].

τ_k : Tortuosidad de los canales de aire en el nodo k , adimensional (generalmente valor mayor o igual a 1).

La tortuosidad, aplicada al caso de un flujo gaseoso que atraviesa un lecho poroso no saturado, se estima mediante la siguiente fórmula empírica [55]:

$$\tau_k = (\varepsilon_{l,k} + \varepsilon_{g,k})^2 \left[(\varepsilon_{l,k} + \varepsilon_{g,k}) (1 - S_{h,k}) \right]^{-\frac{7}{3}}, \forall k \in \{1, \dots, N\} \quad (402)$$

Con:

$$S_{h,k} = \frac{\varepsilon_{l,k}}{\varepsilon_{l,k} + \varepsilon_{g,k}} \quad (403)$$

Donde:

$\varepsilon_{l,k}$: Contenido de humedad (hold up de líquido) en el nodo k , [m^3 líquido / m^3 lecho].

$\varepsilon_{g,k}$: Porosidad de la fase gaseosa (fracción volumétrica de gas en el lecho) en el nodo k , [m^3 gas / m^3 lecho].

$S_{h,k}$: Grado de saturación (saturación de agua) en el nodo k , adimensional.

El número de canales de aire en cada nodo se determina por medio de la siguiente igualdad:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{g,k} &= \frac{\text{Volumen de gas en la sección } k \text{ del lecho}}{\text{Volumen de lecho}} \\ &= \frac{N_{c,k} * \text{Volumen Canal}}{1 [\text{m}^3 \text{ lecho}]} = N_{c,k} \left(\frac{\pi d_{c,k}^2}{4} \Delta z \tau_k \right) \end{aligned} \quad (404)$$

Luego, se tiene:

$$N_{c,k} = \frac{4\varepsilon_{g,k}}{\pi d_{c,k}^2 \Delta z \tau_k}, \forall k \in \{1, \dots, N\} \quad (405)$$

El número de canales en cada sección se determina con los parámetros evaluados en el tiempo inicial (día cero) de la simulación. El valor de $N_{c,k}$ se mantiene constante para toda la simulación, es decir, el número de canales que existe en cada sección de lecho es invariante para un tiempo posterior.

Para estimar el diámetro de los canales en cada sección k se utiliza el cálculo de la permeabilidad gaseosa efectiva por medio del modelo de tubos capilares en un lecho empacado de partículas esféricas (modelo de Blake-Kozeny) [31].

Se define la ley de Darcy para flujos monofásicos laminares a través de un medio poroso [31, 35].

$$q_g = \frac{Q_g}{A_r} = - \frac{K \Delta P}{\mu_g \Delta z} \quad (406)$$

Con:

$$\Delta P = P_0 - \rho_g g \quad (407)$$

Donde:

q_g : Velocidad superficial (velocidad de Darcy) del gas [$\text{m}^3/\text{s}/\text{m}^2 \equiv \text{m}/\text{s}$].

Q_g : Flujo de gas, [m^3/s].

A_r : Área de riego (área transversal total del medio poroso atravesado por el fluido), [m^2].

K : Permeabilidad gaseosa efectiva del lecho, asumiendo que el medio poroso está compuesto de partículas esféricas, [m²].

μ_g : Viscosidad dinámica del aire (para una temperatura dada), [kg/(m·s)].

P_0 : Presión referencial del sistema, evaluada a una distancia ΔZ , [kg/(m·s²)].

ρ_g : Densidad del aire en el lecho, [kg/m³].

g : Vector constante de aceleración gravitacional, [m/s²].

Se utiliza la ley de Hagen-Poiseuille para obtener la velocidad promedio de un fluido en un canal cilíndrico de igual altura que la separación entre cada nodo, ΔZ [56].

$$\overline{v_{g,c}} = \frac{R_c^2 (\rho_g g - P_0)}{8\mu_g \Delta Z} \quad (408)$$

Donde:

$\overline{v_{g,c}}$: Velocidad promedio del flujo de gas al interior de los canales, [m³/s/m² \equiv m/s].

R_c : Radio de los canales de aire en una sección del lecho, [m].

La velocidad promedio al interior del conjunto de canales es mayor que la velocidad promedio en el espacio intergranular (espacio de poro) debido a que la longitud del canal considera la tortuosidad; por el contrario, el fluido en el medio poroso recorre una distancia menor, definida solo por el espesor del lecho.

$$v_g = \frac{\overline{v_{g,c}} \Delta Z}{L_c} \quad (409)$$

Con:

$$L_c = \Delta Z \tau \quad (410)$$

Donde:

v_g : Velocidad intersticial del gas, [m³/s/m² \equiv m/s].

L_c : Longitud de los canales, [m].

Si el medio poroso es aleatorio, entonces la velocidad promedio del fluido en los poros (velocidad intersticial), v_g , está relacionada al flujo que atraviesa el lecho a través de la porosidad del medio poroso (ver ecuaciones (75) y (189)).

$$Q_g = v_g A_r \varepsilon_g \quad (411)$$

Donde:

Q_g : Flujo del gas, [m³/s].

Luego, la velocidad superficial del flujo de aire se puede expresar como:

$$q_g = \frac{Q_g}{A_r} = v_g \varepsilon_g \quad (412)$$

Utilizando la igualdad señalada en la ecuación (409), se tiene:

$$q_g = \frac{\overline{v_{g,c}} \Delta z \varepsilon_g}{L_c} \quad (413)$$

Introduciendo las ecuaciones (408) y (410) en la expresión anterior, se tiene la siguiente relación:

$$q_g = \frac{R_c^2 (\rho_g g - P_0) \varepsilon_g}{8 \mu_g \Delta z \tau} = - \frac{R_c^2 \varepsilon_g \Delta P}{8 \mu_g \Delta z \tau} \quad (414)$$

Al comparar esta última ecuación con la ley de Darcy (ecuación (406)), se tiene:

$$K = \frac{R_c^2 \varepsilon_g}{8 \tau} \quad (415)$$

Ordenando esta igualdad, e incorporando los subíndices que denotan la posición de los parámetros en el eje vertical (espacio discreto, representado por los nodos), se tiene finalmente:

$$R_{c,k} = \sqrt{\frac{8 K_k \tau_k}{\varepsilon_{g,k}}}, \forall k \in \{1, \dots, N\} \quad (416)$$

La igualdad anterior es una expresión para definir el radio equivalente de poro en el nodo k , que es representativo del conjunto de poros que existen en el medio poroso, cuando se considera el modelo de tubos (canales) en un lecho empacado de partículas esféricas.

El “radio hidráulico” se define como [31]:

$$R_h = \frac{\text{Sección transversal disponible para el fluido}}{\text{Perímetro mojado}} \quad (417)$$

Para el flujo al interior de un canal cilíndrico, el radio hidráulico está ligado al radio del canal de la siguiente forma:

$$R_h = \frac{\pi R_c^2}{2 \pi R_c} = \frac{R_c}{2} \quad (418)$$

Tanto el contenido de gas como la aireación de la superficie de un medio poroso pueden vincularse a la permeabilidad y porosidad, al introducir el concepto de radio hidráulico, expandido para el volumen total de fluido que puede circular a través de una sección del medio poroso y la superficie total en contacto con el fluido (suma de los volúmenes y superficies aireadas de todos los canales definidos en un nodo). Cambiando la notación para referir los parámetros a un nodo k (o a una sección horizontal de lecho), se tiene:

$$\begin{aligned}
R_{h,k} &= R_{h,k} \frac{N_{c,k} L_c}{N_{c,k} L_c} \\
&= \frac{\text{Volumen disponible para el flujo a través del lecho}}{\text{Superficie total aireada}} \\
&= \frac{(\text{Volumen de gas})/(\text{Volumen del lecho})}{(\text{Superficie aireada})/(\text{Volumen del lecho})} = \frac{\varepsilon_{g,k}}{A_{esp,k}^{air}}
\end{aligned} \tag{419}$$

Donde:

$A_{esp,k}^{air}$: Área específica aireada en el nodo k , [m^2 / m^3 lecho].

Al reemplazar la ecuación (418) en la ecuación (419), se tiene:

$$R_{c,k} = \frac{2\varepsilon_{g,k}}{A_{esp,k}^{air}} \tag{420}$$

Al introducir la ecuación (420) en la expresión derivada en la ecuación (414):

$$q_{g,k} = - \frac{\varepsilon_{g,k}^3 \Delta P}{2A_{esp,k}^{air}{}^2 \mu_{g,k} \Delta z \tau_k} \tag{421}$$

Comparando la igualdad anterior con la ley de Darcy (ecuación (406)), permite obtener las siguientes expresiones:

$$K_k = \frac{\varepsilon_{g,k}^3}{2A_{esp,k}^{air}{}^2 \tau_k}, \forall k \in \{1, \dots, N\} \tag{422}$$

$$A_{esp,k}^{air} = \sqrt{\frac{\varepsilon_{g,k}^3}{2K_k \tau_k}}, \forall k \in \{1, \dots, N\} \tag{423}$$

Esta última ecuación relaciona el área específica aireada del medio poroso con la fracción volumétrica gaseosa y la permeabilidad del lecho.

Es posible asumir que la superficie total aireada en una sección del medio poroso es muy similar al área específica del lecho: el flujo de aire está en contacto con una delgada película de líquido, impregnada en la superficie de la mayoría de las partículas del lecho.

A su vez, el área específica de un lecho empacado, con una porosidad gaseosa ε_g y compuesto por esferas de diámetro d_p , se define como:

$$A_{esp,k} = \frac{N^\circ \text{ partículas} * \text{Superficie partícula}}{\text{Volumen de lecho}} \tag{424}$$

$$A_{esp} = \frac{(1 - \varepsilon_{g,k} - \varepsilon_{l,k}) * 1 [m^3 \text{ lecho}]}{\frac{\pi d_p^3}{6}} * \frac{\text{Superficie partícula}}{1 [m^3 \text{ lecho}]} = \frac{(1 - \varepsilon_{g,k} - \varepsilon_{l,k}) \pi d_p^2}{\frac{\pi d_p^3}{6}} \quad (425)$$

$$A_{esp} = \frac{6(1 - \varepsilon_{g,k} - \varepsilon_{l,k})}{d_p} \quad (426)$$

Donde:

A_{esp} : Área específica del lecho [m^2 / m^3 lecho].

d_p : Diámetro promedio de las partículas de mineral que componen el lecho (consideradas esferas), [m].

Reemplazando la expresión anterior en la ecuación (422), finalmente se tiene:

$$K_k = \frac{\varepsilon_{g,k}^3 d_p^2}{72(1 - \varepsilon_{g,k} - \varepsilon_{l,k})^2 \tau_k}, \forall k \in \{1, \dots, N\} \quad (427)$$

La igualdad anterior es una versión modificada de la ecuación de Carman-Kozeny [57], que es usada para estimar la permeabilidad de un lecho empacado de esferas cuando un fluido en régimen laminar intenta fluir a través de éste. A continuación se presenta la ecuación de Carman-Kozeny.

$$K = \frac{\varepsilon_g^3 d_p^2}{36\kappa(1 - \varepsilon_g)^2} \quad (428)$$

Donde:

κ : Constante de Carman-Kozeny. Tiene un valor $\kappa = 5$ para lechos empacados con partículas esféricas, adimensional.

Con las ecuaciones (416) y (427) se calcula el diámetro de los canales en el nodo k ($d_{c,k} = 2R_{c,k}$), y por consiguiente se determina el área total interfacial efectiva definida en esa sección de lecho.

Los valores de a_k representan un área por unidad de volumen de lecho, ya que en las ecuaciones de balance de oxígeno (ecuaciones de conservación de masa), la variación de la concentración de oxígeno se registra por la unidad [kg / m^3 lecho].

5.3.2. Coeficiente Global Volumétrico de Transferencia de Oxígeno

El coeficiente global de transferencia de oxígeno entre las fases líquida y gaseosa (referido para concentraciones de oxígeno en la fase líquida), se calcula mediante el uso de los números adimensionales que caracterizan el movimiento de la solución.

Para un flujo líquido que percola a través de un lecho empacado no saturado de partículas esféricas, los números de Reynolds y Schmidt se establecen como [39]:

$$Re = \frac{d_p q_l \rho_l}{\mu_l} \quad (429)$$

$$Sc = \frac{\mu_l}{\rho_l D_{l,O_2}} \quad (430)$$

Donde:

q_l : Velocidad superficial (velocidad de Darcy) del líquido [$m^3/s/m^2 \equiv m/s$].

ρ_l : Densidad del líquido, [kg/m^3].

μ_l : Viscosidad dinámica del líquido, evaluada a una temperatura T , [$Pa \cdot s \equiv kg/(m \cdot s)$].

D_{l,O_2} : Coeficiente de difusión del oxígeno en la fase líquida (difusión molecular), [m^2/s].

Los valores de ρ_l , μ_l y D_{l,O_2} son datos de entrada.

Para estimar la variación del coeficiente de difusión de oxígeno en el líquido con la temperatura, se utiliza la relación de Stokes-Einstein, que define la siguiente igualdad [58]:

$$D_l|_{T_2} = \frac{D_l|_{T_1} T_2 \mu_l|_{T_1}}{T_1 \mu_l|_{T_2}} \quad (431)$$

Donde:

$D_l|_{T_i}$: Coeficiente de difusión en la fase líquida, evaluado a una temperatura T_i , [m^2/s].

T_i : Temperatura a un valor i ($T_1 \neq T_2$), [K].

$\mu_l|_{T_i}$: Viscosidad dinámica del líquido, evaluada a una temperatura T_i , [$Pa \cdot s \equiv kg/(m \cdot s)$].

Se puede aproximar la ecuación (431) en la siguiente expresión, si se considera que la variación de la viscosidad de la solución con la temperatura es pequeña (viscosidades evaluadas en un rango de temperatura acotado).

$$D_l|_{T_2} \approx \frac{D_l|_{T_1} T_2}{T_1} \quad (432)$$

Adicionalmente, se tiene la siguiente expresión empírica para el número de Sherwood [39]:

$$Sh = ReSc^{1/3}j_D \quad (433)$$

Donde:

j_D : Factor adimensional de grupo de transferencia de masa, adimensional.

A su vez, el factor adimensional de grupo de transferencia de masa se calcula por medio de la siguiente formula experimental [39, 59]:

$$j_D = \frac{1,09Re^{-2/3}}{\varepsilon_g + \varepsilon_l} \quad (434)$$

La relación anterior es aplicable cuando el líquido que atraviesa el lecho empacado de partículas esféricas se mueve a velocidad constante (estado estacionario) y está en régimen laminar. Para que la ecuación (434) sea válida, se deben cumplir las siguientes condiciones en el régimen del flujo:

$$0,0016 \leq Re \leq 55 \quad ; \quad 168 \leq Sc \leq 70600 \quad (435)$$

Considerando que la transferencia de oxígeno en la solución se realiza a través de una capa de líquido que rodea la partícula, el número de Sherwood se define como [39, 40]:

$$Sh = \frac{k_L d_p}{D_{l,o_2}} \quad (436)$$

Donde:

k_L : Coeficiente global de transferencia de oxígeno entre las fases líquida y gaseosa (referido para concentraciones de oxígeno en la fase líquida), [moles transferidos/((área)·(tiempo)·(moles/vol.)) \equiv m/s].

Con las ecuaciones (429), (430), (433), (434) y (436) se determina el coeficiente global de transferencia de oxígeno entre las fases líquida y gaseosa. El coeficiente k_L se calcula para cada nodo de la grilla, por lo que los parámetros que componen las ecuaciones previamente mencionadas deben evaluarse según la posición en el eje vertical.

Para bajas tasas de riego (flujos volumétricos menores a 3 L/h/m², aproximadamente), una de las condiciones señaladas en la ecuación (435) es transgredida: los valores del número de Reynolds se ubican por debajo del límite inferior plausible para validar la definición empírica de la ecuación (434).

Cuando el número de Reynolds calculado es inferior a un valor de 0,0016, se realiza un procedimiento diferente para estimar el coeficiente global de transferencia k_L (coeficiente de transferencia local en el caso que el flujo tiende a ser despreciable).

Se asume que la difusión es el mecanismo de transferencia de oxígeno entre ambas fases, es decir, se desprecia el movimiento del líquido. Por lo tanto, se supone que la solución (volumen residual de líquido retenido por la pila) se adhiere a las partículas en una fina película que se mantiene inmóvil. También se considera que la resistencia de la fase gaseosa en la transferencia de oxígeno es nula (la difusividad del oxígeno en el aire es mucho mayor que la difusividad de oxígeno en el líquido), por lo que la transferencia al interior del lecho es controlada por la fase líquida.

Luego, el flujo de oxígeno en el líquido se puede simplificar a [28, 31, 41]:

$$J_{O_2} = -D_{l,O_2} \frac{\partial [O_2]_l}{\partial x} \Big|_{x=0} \approx \frac{D_{l,O_2}}{\delta} ([O_2]_{sup} - [O_2]_{l,int}) \quad (437)$$

Donde:

δ : Espesor de la capa de líquido que recubre las partículas en el lecho, [m].

$[O_2]_{sup}$: Concentración de oxígeno en el líquido, evaluado en la superficie de las partículas de mineral, [kg/m³].

$[O_2]_{l,int}$: Concentración de oxígeno en el líquido, evaluado en la interfase líquido-gas, [kg/m³].

La expresión anterior es la ecuación de difusión molecular (primera ley de Fick), que representa la difusión de oxígeno en una capa de líquido sin movimiento. El film de líquido recubre cada partícula del lecho y tiene un espesor característico δ , definido por el hold up de líquido. El movimiento de oxígeno al interior de la capa de líquido se realiza desde la interfase líquido-gas hasta la superficie de la partícula. Como no hay movimiento de la solución, se supone que los microorganismos se concentran mayoritariamente en la superficie de la partícula, de esta forma es factible asumir que existe un gradiente de la concentración de oxígeno hasta la superficie del sólido.

Cuando se compara la ecuación (31) con la ecuación (437), recordando que se impone el escenario de que no hay gradientes de concentración en la fase gaseosa, se tiene:

$$k_L = \frac{D_{l,O_2}}{\delta} \quad (438)$$

El valor del coeficiente D_{l,O_2} en la ecuación (438) también es ajustado por la temperatura mediante la aproximación de la ecuación (432).

En la siguiente imagen se ilustra la situación generada cuando el flujo de riego es muy bajo (número de Reynolds inferior a 0,0016). Se puede apreciar el recubrimiento de las partículas por una película de líquido.

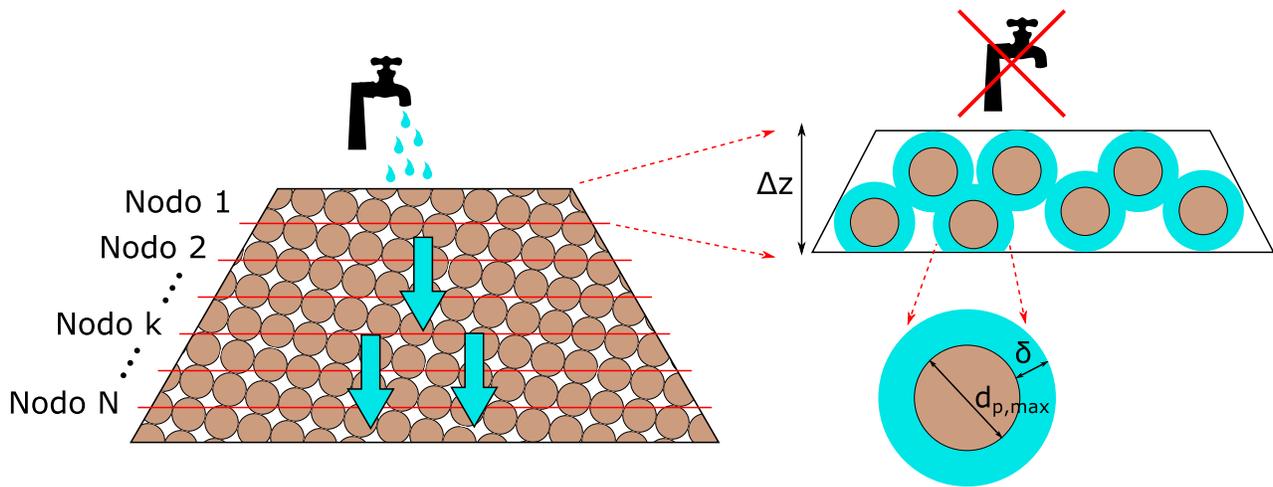


Figura 23. Escenario de transferencia de oxígeno para bajas tasas de riego.

Asumiendo que el film de líquido sólo recubre las partículas más gruesas (intervalo granulométrico con mayor diámetro promedio) presentes en una sección k del lecho, estando aglomeradas las partículas más pequeñas entorno a los sólidos de mayor tamaño, el volumen del conjunto de películas de líquido en cada nodo se obtiene a partir de la siguiente relación.

$$\begin{aligned} Vol_{film,k} &= N_{p,max} f_{a,k} A_r \Delta Z \frac{4\pi}{3} \left[\left(\frac{d_{p,max}}{2} + \delta_k \right)^3 - \frac{d_{p,max}^3}{8} \right] \\ &= \varepsilon_{l,k} A_r \Delta Z \end{aligned} \quad (439)$$

Ordenando términos:

$$\left(\frac{d_{p,max}}{2} + \delta_k \right)^3 = \frac{3\varepsilon_{l,k}}{4\pi N_{p,max} f_{a,k}} + \frac{d_{p,max}^3}{8} \quad (440)$$

$$\delta_k = \sqrt[3]{\frac{3\varepsilon_{l,k}}{4\pi N_{p,max} f_{a,k}} + \frac{d_{p,max}^3}{8} - \frac{d_{p,max}}{2}}, \forall k \in \{1, \dots, N\} \quad (441)$$

Donde:

$Vol_{film,k}$: Sumatoria de los volúmenes de film que recubren las partículas en cada sección k del lecho, [m^3].

$N_{p,max}$: Número de partículas del intervalo granulométrico de mayor tamaño en cada sección de lecho, [$1 / m^3$ lecho].

A_r : Área de riego de la pila/botadero/columna, [m^2].

$f_{a,k}$: Factor de corrección, aplicado para considerar el número efectivo de partículas que presentan un recubrimiento completo por el film líquido (representa el efecto tamaño del aglomerado), adimensional.

$d_{p,max}$: Diámetro promedio de partículas del intervalo granulométrico de mayor tamaño, [m].

El factor de corrección evaluado en cada nodo k se calcula mediante la siguiente igualdad [60].

$$f_{a,k} = \left[1 + \frac{2,37}{\varepsilon_{g,k}^{0,278}} \right]^{-3}, \forall k \in \{1, \dots, N\} \quad (442)$$

La ecuación (441) permite calcular el espesor de la capa de líquido en función del contenido volumétrico de líquido en cada sección de lecho, del tamaño y del número de partículas.

A continuación se expresa el coeficiente global de transferencia de oxígeno para las diferentes condiciones de riego.

$$k_L = \begin{cases} \frac{ShD_{l,O_2}}{d_p}, & 0,0016 \leq Re \leq 55 \\ \frac{D_{l,O_2}}{\delta}, & 0,0016 < Re \end{cases} \quad (443)$$

Finalmente, el coeficiente global volumétrico de transferencia de oxígeno se calcula por la siguiente operación aritmética:

$$k_L a = k_L * a \quad (444)$$

Donde:

$k_L a$: Coeficiente global volumétrico de transferencia de oxígeno entre las fases líquida y gaseosa (referido para concentraciones de oxígeno en la fase líquida), [1/s].

Se debe realizar la conversión de unidades, de segundo a día, para utilizar $k_L a$ en las ecuaciones de balance de oxígeno.

5.4. Modelo de Determinación de la Tasa de Consumo y Aporte de Oxígeno en las Fases Líquida y Gaseosa

En las secciones anteriores se han planteado las ecuaciones de balance de oxígeno, sin determinar la composición del término de reacción. El término de reacción involucra la transferencia de oxígeno entre las fases líquida y gaseosa y el consumo de oxígeno realizado por los microorganismos. Utilizando el método operator splitting (ver Anexo A), se resuelve de forma separada las ecuaciones diferenciales que definen la variación de la concentración de oxígeno por los términos de reacción.

5.4.1. Determinación del Consumo y Aporte de Oxígeno en las Fases Líquida y Gaseosa

En las ecuaciones (74) y (188) se definieron las expresiones que modelan el balance de oxígeno en las fases líquida y gaseosa, respectivamente. En estas ecuaciones el término de reacción se denotó con el parámetro R_i , sin especificar en detalle cómo se formula y cuáles son las variables que lo componen.

A continuación, se expande la definición de las ecuaciones (74) y (188), introduciendo los términos que componen R_i en cada fase.

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\varepsilon_l [O_2]_l)}{\partial t} = & \frac{\partial}{\partial z} \left(\varepsilon_l D_{H,O_2} \frac{\partial [O_2]_l}{\partial z} \right) - \frac{\partial(\varepsilon_l v_l [O_2]_l)}{\partial z} \\ & - k_L a ([O_2]_l - H_e [O_2]_g) \\ & - \sigma_{O_2,f} \left(\frac{\mu_f}{Y_{Fe}} + m_{Sf} \right) (X_{l,f} \varepsilon_l + X_{a,f} A_{esp}) \\ & - \sigma_{O_2,t} \left(\frac{\mu_t}{Y_S} + m_{St} \right) (X_{a,t} A_{esp}) \end{aligned} \quad (445)$$

$$\frac{\partial(\varepsilon_g[O_2]_g)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\varepsilon_g D_{e,O_2} \frac{\partial[O_2]_g}{\partial z} \right) - \frac{\partial(\varepsilon_g v_g [O_2]_g)}{\partial z} + k_L a ([O_2]_l - H_e [O_2]_g) \quad (446)$$

Donde:

μ_f : Velocidad específica de crecimiento de ferrooxidantes, [1/d].

μ_t : Velocidad específica de crecimiento de thiooxidantes, [1/d].

$\sigma_{O_2,f}$: Coeficiente estequiométrico de consumo de oxígeno por ferrooxidantes, [kg O₂ / kg Fe].

$\sigma_{O_2,t}$: Coeficiente estequiométrico de consumo de oxígeno por thiooxidantes, [kg O₂ / kg S].

Y_{Fe} : Rendimiento de ferrooxidantes en ferroso, [cel / kg Fe].

Y_S : Rendimiento de thiooxidantes en azufre, [cel / kg S].

ms_f : Coeficiente de mantención de ferrooxidantes en ferroso, [kg Fe / (cel·d)].

ms_t : Coeficiente de mantención de thiooxidantes en azufre, [kg S / (cel·d)].

$X_{l,f}$: Concentración de ferrooxidantes en la fase líquida, [cel/m³].

$X_{a,f}$: Concentración de ferrooxidantes adheridas a la superficie de las partículas, [cel/m²].

$X_{a,t}$: Concentración de thiooxidantes adheridas a la superficie de las partículas, [cel/m²].

A_{esp} : Área superficial total expuesta de las partículas (área específica del lecho), [m² / m³ de lecho].

En las ecuaciones anteriores, $k_L a ([O_2]_l - H_e [O_2]_g)$ representa la tasa de transferencia de oxígeno entre las fases líquida y gaseosa [8, 24, 25].

El consumo de oxígeno realizado por los microorganismos en la fase líquida se modela a través de los últimos dos términos de la ecuación (445). Estas expresiones son derivadas a partir de las ecuaciones (1) y (2), y de las ecuaciones que describen la tasa de consumo del ion ferroso y del azufre elemental [8, 12, 18, 61]. Se asume que las bacterias ferrooxidantes oxidan el ion ferroso cuando éstas están adheridas a las partículas o cuando están libres en la solución. En cambio, para las bacterias thiooxidantes, se asume que éstas solo oxidan el azufre elemental cuando están adheridas al mineral. Estas consideraciones se establecieron de acuerdo a resultados experimentales obtenidos por BioSigma [62].

En la ecuación (445), las variables $X_{l,f}$, $X_{a,f}$ y $X_{a,t}$ se determinan por el modelo de balance de masa de microorganismos, desarrollado por BioSigma. Este modelo se compone de dos submodelos: la advección y dispersión de bacterias en el líquido, que describe el movimiento de los microorganismos libres en solución al interior de la pila, y la actividad bacteriana, que describe el crecimiento, la adherencia y la desorción de las bacterias.

Las velocidades específicas de crecimiento de los microorganismos se calculan mediante ecuaciones modificadas de Michaelis-Menten, las cuales consideran las duplas ferroso-oxígeno y azufre-oxígeno como sustratos limitantes para el crecimiento de las bacterias ferrooxidantes y thiooxidantes, respectivamente [8, 18, 23, 24, 25, 29]. Estas expresiones también denotan la dependencia de la velocidad específica de crecimiento con la temperatura.

$$\mu_f = \mu_{max,f} \left(\frac{[Fe^{2+}]_l}{K_{Fe} + [Fe^{2+}]_l} \right) \left(\frac{[O_2]_l}{K_{O_2,f} + [O_2]_l} \right) F_f(T) \quad (447)$$

$$\mu_t = \mu_{max,t} \left(\frac{[S^0]_s}{K_S + [S^0]_s} \right) \left(\frac{[O_2]_l}{K_{O_2,t} + [O_2]_l} \right) F_t(T) \quad (448)$$

Donde:

$\mu_{max,f}$: Velocidad específica máxima de crecimiento de ferrooxidantes, [1/d].

$\mu_{max,t}$: Velocidad específica máxima de crecimiento de thiooxidantes, [1/d].

K_{Fe} : Constante de saturación respecto a la concentración de ferroso [kg/m³].

K_S : Constante de saturación respecto a la concentración de azufre [kg/m³].

$K_{O_2,f}$: Constante de saturación respecto a la concentración de oxígeno para las ferrooxidantes, [kg/m³].

$K_{O_2,t}$: Constante de saturación respecto a la concentración de oxígeno para las thiooxidantes, [kg/m³].

$[Fe^{2+}]_l$: Concentración de ferroso en la fase líquida, [kg/m³].

$[S^0]_s$: Concentración de azufre elemental extraído del mineral, [kg azufre / m³ mineral].

$[O_2]_l$: Concentración de oxígeno en la fase líquida, [kg/m³].

$F_f(T)$: Factor de corrección de la velocidad específica máxima de crecimiento de ferrooxidantes en función de la temperatura, adimensional (toma valores entre 0 y 1).

$F_t(T)$: Factor de corrección de la velocidad específica máxima de crecimiento de thiooxidantes en función de la temperatura, adimensional (toma valores entre 0 y 1).

En las ecuaciones (447) y (448), las variables $[Fe^{2+}]_l$ y $[S^0]_s$ se determinan por el modelo de advección y dispersión de especies químicas en solución, desarrollado por BioSigma.

Los factores de corrección en función de la temperatura, $F_f(T)$ y $F_t(T)$, son calculados por medio del modelo modificado Ratkowsky, donde se realiza una normalización a la velocidad de crecimiento máxima evaluada a 30 °C [63, 64]. La normalización con las velocidades evaluadas a esta temperatura particular obedece a que los datos de velocidad específica máxima de crecimiento, utilizados en este trabajo, fueron obtenidos por pruebas realizadas a temperaturas cercanas a 30 °C (las mediciones experimentales se realizaron en BioSigma [62]).

$$F_i(T) = \left[\frac{\mathcal{B}_i(T - T_{min,i}) [1 - \exp(-C_i(T - T_{max,i}))]}{\mathcal{B}_i(30 - T_{min,i}) [1 - \exp(-C_i(30 - T_{max,i}))]} \right]^2 \quad (449)$$

Donde ($i = \{f, t\}$; los subíndices f y t denotan los microorganismos ferrooxidantes y thiooxidantes, respectivamente):

\mathcal{B}_i : Coeficiente de ajuste del microorganismo i , adimensional.

C_i : Coeficiente de ajuste del microorganismo i , adimensional

$T_{min,i}$: Temperatura teórica mínima extrapolada del microorganismo i , [°C].

$T_{max,i}$: Temperatura teórica máxima extrapolada del microorganismo i , [°C].

T : Temperatura del sistema, [°C].

Con la ecuación (449) se obtienen los factores de corrección en cada posición al interior de la pila (recordar que T es un vector definido en el espacio vertical).

Con las ecuaciones (1) y (2) es posible determinar los coeficientes estequiométricos de consumo de oxígeno por ferrooxidantes, $\sigma_{O_2,f}$, y por thiooxidantes, $\sigma_{O_2,t}$.

$$\sigma_{O_2,f} = \frac{M_{O_2}}{4PA_{Fe}} = \frac{32 \left[\frac{g}{mol}\right]}{4 * 55,85 \left[\frac{g}{mol}\right]} = 0,1432 \quad (450)$$

$$\sigma_{O_2,t} = \frac{3M_{O_2}}{2PA_S} = \frac{3 * 32 \left[\frac{g}{mol}\right]}{2 * 32,06 \left[\frac{g}{mol}\right]} = 1,4972 \quad (451)$$

Donde:

M_{O_2} : Peso molecular del oxígeno en solución, [g/mol].

PA_{Fe} : Peso atómico del hierro, [g/mol].

PA_S : Peso atómico del azufre, [g/mol].

La constante de Henry del oxígeno disuelto varía con la temperatura. Para poder estimar este parámetro se utiliza la siguiente ecuación, obtenida por una regresión polinomial realizada a datos experimentales [28]:

$$H_e = 0,0523 - 0,0012T + 1,55 \times 10^{-5}T^2 - 7,0 \times 10^{-8}T^3 \quad (452)$$

Donde

T : Temperatura del sistema, [°C].

Los parámetros Y_{Fe} , Y_S , ms_f , ms_t , $\mu_{max,f}$, $\mu_{max,t}$, K_{Fe} , K_S , $K_{O_2,f}$, $K_{O_2,t}$, B_i , C_i , $T_{min,i}$ y $T_{max,i}$, que aparecen en las ecuaciones (445), (446) (447), (448) Y (449), son datos de entrada.

Al emplear el método operator splitting para resolver numéricamente las ecuaciones (445) y (446), se dividen las expresiones originales complejas. Seleccionando convenientemente las expresiones que componen los términos de reacción, se obtiene el siguiente conjunto de ecuaciones.

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\varepsilon_l[O_2]_l)}{\partial t} = & -k_L a([O_2]_l - H_e[O_2]_g) \\ & - \sigma_{O_2,f} \left(\frac{\mu_f}{Y_{Fe}} + ms_f \right) (X_{l,f} \varepsilon_l + X_{a,f} A_{esp}) \\ & - \sigma_{O_2,t} \left(\frac{\mu_t}{Y_S} + ms_t \right) (X_{a,t} A_{esp}) \end{aligned} \quad (453)$$

$$\frac{\partial(\varepsilon_g[O_2]_g)}{\partial t} = k_L a([O_2]_l - H_e[O_2]_g) \quad (454)$$

Estas ecuaciones solo modelan la tasa de consumo y aporte de oxígeno en las fases líquida y gaseosa, es decir, no pueden determinar las variaciones de concentración causadas por el movimiento advectivo o difusional del oxígeno en la solución o en el aire.

Para calcular una concentración actualizada del oxígeno en el líquido y en el gas, generada por el consumo o la transferencia, se debe resolver conjuntamente las ecuaciones (453) y (454). Se propone determinar una solución aproximada utilizando la siguiente metodología.

Sean $[O_2]_l^0$ y $[O_2]_g^0$ las concentraciones de oxígeno en un tiempo anterior t_0 determinado. Para calcular las concentraciones $[O_2]_l$ y $[O_2]_g$ en un tiempo posterior $t = t_0 + \Delta t$, se utiliza el método de Euler implícito para integrar numéricamente las ecuaciones (453) y (454) [54].

$$\begin{aligned} [O_2]_l = & [O_2]_l^0 \\ & - \left[\frac{k_L a}{\varepsilon_l} ([O_2]_l - H_e[O_2]_g) \right. \\ & + \sigma_{O_2,f} \left(\frac{\mu_f}{Y_{Fe}} + ms_f \right) \left(X_{l,f} + \frac{X_{a,f} A_{esp}}{\varepsilon_l} \right) \\ & \left. + \sigma_{O_2,t} \left(\frac{\mu_t}{Y_S} + ms_t \right) \left(\frac{X_{a,t} A_{esp}}{\varepsilon_l} \right) \right] \Delta t \end{aligned} \quad (455)$$

$$[O_2]_g = [O_2]_g^0 + \left[\frac{k_L a}{\varepsilon_g} ([O_2]_l - H_e[O_2]_g) \right] \Delta t \quad (456)$$

Se debe mencionar que en las ecuaciones anteriores, los términos agrupados en el paréntesis cuadrado se evalúan en el tiempo presente $t_0 + \Delta t$. Por lo tanto, para determinar las concentraciones en el tiempo actual, se debe resolver el sistema no lineal formado por las

ecuaciones (455) y (456). Para encontrar las soluciones de este sistema se aplica el método de Newton-Raphson (ver Anexo B), como se indica a continuación.

Las ecuaciones (455) y (456) se pueden expresar de la siguiente forma:

$$\mathfrak{R}_l = [O_2]_l^0 + f_l([O_2]_l, [O_2]_g)\Delta t - [O_2]_l \quad (457)$$

$$\mathfrak{R}_g = [O_2]_g^0 + f_g([O_2]_l, [O_2]_g)\Delta t - [O_2]_g \quad (458)$$

Donde:

$$\begin{aligned} f_l([O_2]_l, [O_2]_g) &= -\frac{k_L a}{\varepsilon_l} ([O_2]_l - H_e [O_2]_g) \\ &\quad - \sigma_{O_2, f} \left(\frac{\mu_f}{Y_{Fe}} + m s_f \right) \left(X_{l, f} + \frac{X_{a, f} A_{esp}}{\varepsilon_l} \right) \\ &\quad - \sigma_{O_2, t} \left(\frac{\mu_t}{Y_S} + m s_t \right) \left(\frac{X_{a, t} A_{esp}}{\varepsilon_l} \right) \end{aligned} \quad (459)$$

$$f_g([O_2]_l, [O_2]_g) = \frac{k_L a}{\varepsilon_g} ([O_2]_l - H_e [O_2]_g) \quad (460)$$

Los valores de los residuos \mathfrak{R}_l y \mathfrak{R}_g deben ser iguales o muy cercanos a cero para que las ecuaciones (457) y (458) correspondan a las ecuaciones (455) y (456).

Se desarrolla la expansión de Taylor de los residuos entorno a un valor desconocido de la concentración de oxígeno en la solución y en el gas, considerando solo las primeras derivadas. La aproximación por la serie de Taylor de primer orden permite obtener una nueva estimación de los residuos.

$$\begin{aligned} \mathfrak{R}_{l, n+1} &= \mathfrak{R}_{l, n} + \left. \frac{\partial \mathfrak{R}_l}{\partial [O_2]_l} \right|_{[O_2]_i=[O_2]_{i, n}} \Delta [O_2]_l \\ &\quad + \left. \frac{\partial \mathfrak{R}_l}{\partial [O_2]_g} \right|_{[O_2]_i=[O_2]_{i, n}} \Delta [O_2]_g \end{aligned} \quad (461)$$

$$\begin{aligned} \mathfrak{R}_{g, n+1} &= \mathfrak{R}_{g, n} + \left. \frac{\partial \mathfrak{R}_g}{\partial [O_2]_l} \right|_{[O_2]_i=[O_2]_{i, n}} \Delta [O_2]_l \\ &\quad + \left. \frac{\partial \mathfrak{R}_g}{\partial [O_2]_g} \right|_{[O_2]_i=[O_2]_{i, n}} \Delta [O_2]_g \end{aligned} \quad (462)$$

Donde:

$$\Delta[O_2]_l = \Delta[O_2]_{l,n+1} - [O_2]_{l,n} \quad (463)$$

$$\Delta[O_2]_g = \Delta[O_2]_{g,n+1} - [O_2]_{g,n} \quad (464)$$

En las ecuaciones anteriores, los subíndices n y $n + 1$ hacen referencia a las estimaciones sucesivas que se hacen de los residuos (no confundir con la notación usada para denotar la posición de las variables en los nodos). Las derivadas de los residuos se evalúan en las concentraciones $([O_2]_{l,n}, [O_2]_{g,n})$.

Como los residuos deben valer cero, se impone que la estimación $n + 1$ es cero, lo que transforma las ecuaciones (461) y (462) en:

$$-\mathfrak{R}_{l,n} = \left. \frac{\partial \mathfrak{R}_l}{\partial [O_2]_l} \right|_{[O_2]_i=[O_2]_{i,n}} \Delta[O_2]_l + \left. \frac{\partial \mathfrak{R}_l}{\partial [O_2]_g} \right|_{[O_2]_i=[O_2]_{i,n}} \Delta[O_2]_g \quad (465)$$

$$-\mathfrak{R}_{g,n} = \left. \frac{\partial \mathfrak{R}_g}{\partial [O_2]_l} \right|_{[O_2]_i=[O_2]_{i,n}} \Delta[O_2]_l + \left. \frac{\partial \mathfrak{R}_g}{\partial [O_2]_g} \right|_{[O_2]_i=[O_2]_{i,n}} \Delta[O_2]_g \quad (466)$$

Dado que los términos Δ son comunes para las ecuaciones (465) y (466), se pueden definir estas expresiones en forma matricial:

$$-\begin{bmatrix} \mathfrak{R}_l \\ \mathfrak{R}_g \end{bmatrix}_n = \begin{bmatrix} \left. \frac{\partial \mathfrak{R}_l}{\partial [O_2]_l} \right|_n & \left. \frac{\partial \mathfrak{R}_l}{\partial [O_2]_g} \right|_n \\ \left. \frac{\partial \mathfrak{R}_g}{\partial [O_2]_l} \right|_n & \left. \frac{\partial \mathfrak{R}_g}{\partial [O_2]_g} \right|_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta[O_2]_l \\ \Delta[O_2]_g \end{bmatrix} \quad (467)$$

La matriz de cuatro elementos de la ecuación anterior recibe el nombre de matriz jacobiana. Para simplificar la notación, en la matriz se reemplazan los subíndices de evaluación de la concentración por n .

Reordenando la ecuación anterior, e insertando las ecuaciones (463) y (464), se obtiene:

$$\begin{bmatrix} [O_2]_l \\ [O_2]_g \end{bmatrix}_{n+1} = \begin{bmatrix} [O_2]_l \\ [O_2]_g \end{bmatrix}_n - \begin{bmatrix} \left. \frac{\partial \mathfrak{R}_l}{\partial [O_2]_l} \right|_n & \left. \frac{\partial \mathfrak{R}_l}{\partial [O_2]_g} \right|_n \\ \left. \frac{\partial \mathfrak{R}_g}{\partial [O_2]_l} \right|_n & \left. \frac{\partial \mathfrak{R}_g}{\partial [O_2]_g} \right|_n \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \mathfrak{R}_l \\ \mathfrak{R}_g \end{bmatrix}_n \quad (468)$$

El superíndice -1 en la matriz de la ecuación (468), indica que se invierte la matriz jacobiana.

A continuación se derivan los residuos por las concentraciones de oxígeno en las fases líquida y gaseosa. Estos términos derivados son los elementos que constituyen la matriz jacobiana.

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \mathfrak{R}_l}{\partial [O_2]_l} &= \frac{\partial f_l([O_2]_l, [O_2]_g)}{\partial [O_2]_l} \Delta t - 1 \\
&= - \left[\frac{k_L a}{\varepsilon_l} + \sigma_{O_2, f} \frac{\partial \mu_f}{\partial [O_2]_l} \frac{1}{Y_{Fe}} \left(X_{l, f} + \frac{X_{a, f} A_{esp}}{\varepsilon_l} \right) \right. \\
&\quad \left. + \sigma_{O_2, t} \frac{\partial \mu_t}{\partial [O_2]_l} \frac{1}{Y_S} \left(\frac{X_{a, t} A_{es}}{\varepsilon_l} \right) \right] \Delta t - 1
\end{aligned} \tag{469}$$

$$\frac{\partial \mathfrak{R}_l}{\partial [O_2]_g} = \frac{\partial f_l([O_2]_l, [O_2]_g)}{\partial [O_2]_g} \Delta t = \frac{k_L a}{\varepsilon_l} H_e \Delta t \tag{470}$$

$$\frac{\partial \mathfrak{R}_g}{\partial [O_2]_l} = \frac{\partial f_g([O_2]_l, [O_2]_g)}{\partial [O_2]_l} \Delta t = \frac{k_L a}{\varepsilon_g} \Delta t \tag{471}$$

$$\frac{\partial \mathfrak{R}_g}{\partial [O_2]_g} = \frac{\partial f_g([O_2]_l, [O_2]_g)}{\partial [O_2]_g} \Delta t - 1 = - \frac{k_L a}{\varepsilon_g} H_e \Delta t - 1 \tag{472}$$

Empleando las ecuaciones (447) y (448), las derivadas de las velocidades específicas de crecimiento de los microorganismos, en función de la concentración de oxígeno disuelto en la solución (que se exhiben en la ecuación (469)), se expresan como:

$$\frac{\partial \mu_f}{\partial [O_2]_l} = \mu_{max, f} \left(\frac{[Fe^{2+}]_l}{K_{Fe} + [Fe^{2+}]_l} \right) \left(\frac{K_{O_2, f}}{(K_{O_2, f} + [O_2]_l)^2} \right) F_f(T) \tag{473}$$

$$\frac{\partial \mu_t}{\partial [O_2]_l} = \mu_{max, t} \left(\frac{[S^0]_s}{K_S + [S^0]_s} \right) \left(\frac{K_{O_2, t}}{(K_{O_2, t} + [O_2]_l)^2} \right) F_t(T) \tag{474}$$

Luego, las nuevas estimaciones “n-ésimas + 1” ($n + 1$) de las concentraciones se calculan iterativamente a través del algoritmo de Newton-Raphson, por medio de la ecuación (468).

La iteración del algoritmo finaliza cuando el mayor de los componentes, en valor absoluto, del vector residuo es menor que un valor definido de tolerancia, es decir, cuando se cumple que:

$$error = \max(|\mathfrak{R}_{l, n+1}|, |\mathfrak{R}_{g, n+1}|) < Tol \tag{475}$$

El procedimiento de cálculo iterativo debe realizarse para cada punto del espacio discreto considerado en la simulación. A causa de esto, el costo computacional de este modelo es elevado, aportando una buena porción del tiempo total de cómputo del modelo general de biolixiviación.

Para mejorar la eficiencia de este modelo se introducen factores de sub-relajación y sobre-relajación, que incrementan la velocidad de convergencia del algoritmo. La implementación de los

factores se realiza al registrar “el grado de avance” del error de los residuos, respecto al error calculado en la iteración anterior. Si el error calculado de los residuos en la iteración actual es mayor en comparación al error de la iteración anterior, entonces se introduce un factor de relajación menor a uno (se disminuye la variación para la actualización del nuevo valor de residuo, reduciendo la inestabilidad para encontrar las raíces en iteraciones posteriores); por el contrario, cuando el error actual calculado es menor, se le asigna un valor mayor al factor de relajación (se incrementa el grado de corrección). El factor de relajación varía en un rango de valores comprendido entre 0,1 y 1,1. El factor de relajación, *relax*, se inserta en la ecuación del algoritmo, multiplicando el vector resultante del producto de la matriz jacobiana y el vector de nuevos residuos.

$$\begin{bmatrix} [O_2]_l \\ [O_2]_g \end{bmatrix}_{n+1} = \begin{bmatrix} [O_2]_l \\ [O_2]_g \end{bmatrix}_n - \begin{bmatrix} \frac{\partial \mathcal{R}_l}{\partial [O_2]_l} & \frac{\partial \mathcal{R}_l}{\partial [O_2]_g} \\ \frac{\partial \mathcal{R}_g}{\partial [O_2]_l} & \frac{\partial \mathcal{R}_g}{\partial [O_2]_g} \end{bmatrix}_n^{-1} \begin{bmatrix} \mathcal{R}_l \\ \mathcal{R}_g \end{bmatrix}_n \textit{ relax} \quad (476)$$

Dado que la diferencia en las concentraciones para un intervalo de tiempo discreto Δt es relativamente baja (considerando los valores típicos usados en las simulaciones), casi no hay problemas de inestabilidad al aplicar el método de Newton-Raphson con factores de relajación en la resolución del sistema de las ecuaciones (453) y (454). Lo anterior se explica porque el valor inicial de la raíz supuesta de los residuos es cercano a la raíz verdadera del sistema.

Cuando finaliza el algoritmo, se revisan los valores obtenidos de las concentraciones. Se asignan valores nulos a las concentraciones que tengan valores negativos y, si se supera el valor de concentración de saturación, se procede a corregir la concentración de oxígeno en el líquido (ver ecuación (174)).

5.4.2. Diagrama de Flujo del Algoritmo

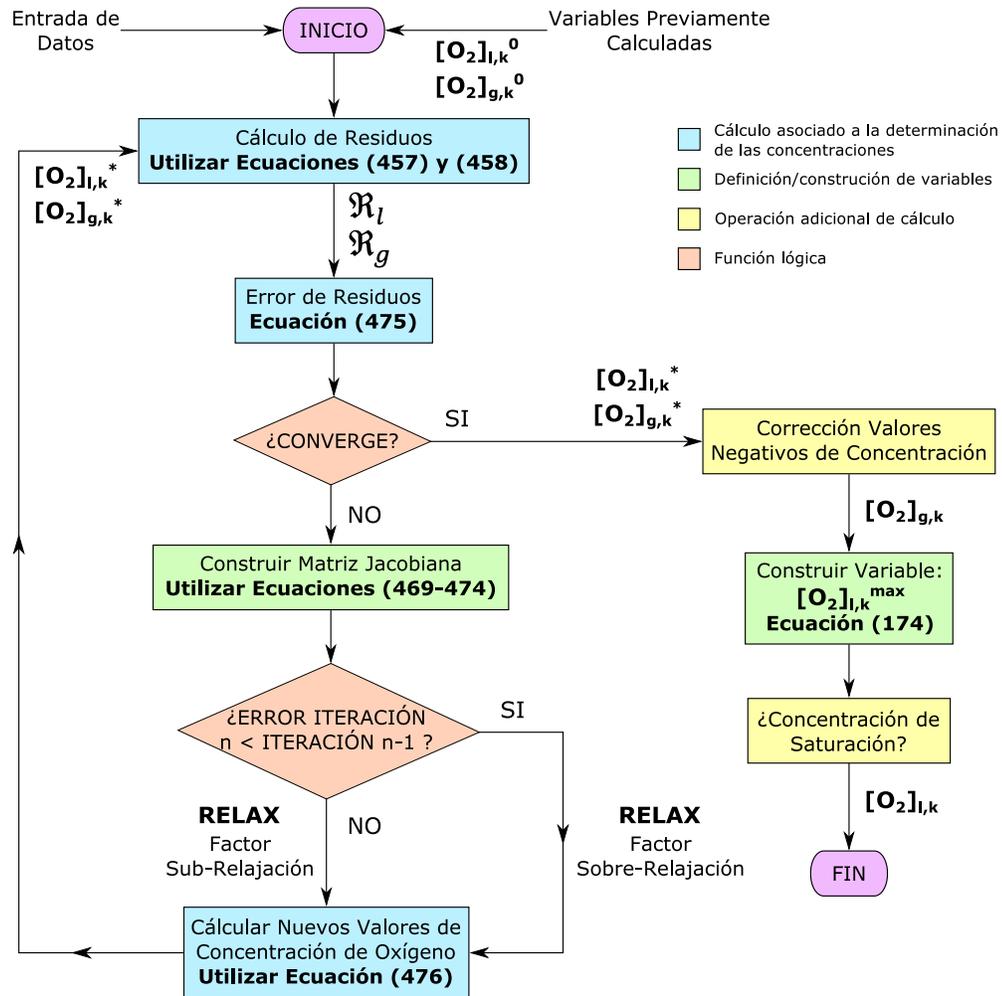


Figura 24. Diagrama de flujo del algoritmo del modelo de determinación de la tasa de consumo y aporte de oxígeno en las fases líquida y gaseosa.

5.5. Solución Numérica General del Balance de Oxígeno

Los modelos de advección y dispersión de oxígeno en las fases líquida y gaseosa también se resuelven utilizando el método operator splitting. De esta forma, para tener consistencia con la separación de operadores realizada en las ecuaciones (453) y (454), en las ecuaciones (74) y (188) se impone un valor cero a los términos de reacción (R_l y R_g).

Las ecuaciones antes mencionadas se resuelven en el paso de tiempo seleccionado, considerando sólo los fenómenos de transporte de advección y difusión (dispersión). Los resultados de concentración obtenidos al resolver estas sub-ecuaciones son valores transitorios, denominados “seudo” concentraciones, $[\widehat{O}_2]_{l,k}$ y $[\widehat{O}_2]_{g,k}$. De este modo, las concentraciones de oxígeno en las fases líquida y gaseosa deben ser actualizadas o recalculadas para considerar los términos de reacción, excluidos en un primer momento.

Como los resultados obtenidos de las concentraciones en los primeros modelos simplificados (advección y difusión/dispersión) se calcularon en un tiempo $t_0 + \Delta t$, siguiendo la formulación

del método operator splitting, estas pseudo concentraciones son trasladadas de forma simbólica hacia el tiempo t_0 para poder resolver el sistema de ecuaciones (453) y (454). Esto significa que las pseudo concentraciones son usadas como los valores conocidos de concentración en el tiempo anterior, requeridos para resolver la ecuación (476) mediante el algoritmo de Newton-Raphson.

En la siguiente figura se presenta un diagrama teórico del procedimiento de reevaluación de las concentraciones, cuando se sigue el enfoque de resolución enunciado por el método operator splitting.

Como se puede apreciar, el orden de cálculo computacional (o secuencia de resolución definida por el código computacional escrito en el programa) establece que la solución numérica de las concentraciones se realiza en serie, resolviendo primero los modelos de advección y difusión (dispersión), para luego actualizar el valor de la pseudo concentración con el modelo de determinación de la tasa de consumo y aporte de oxígeno en las fases. Se observa también que, al integrar numéricamente las ecuaciones diferenciales parciales de los primeros modelos, las pseudo concentraciones son evaluadas a un intervalo de tiempo posterior, por lo que para determinar el valor actualizado de las concentraciones, se deben evaluar las pseudo concentraciones en el tiempo previo t_0 . Así, en el balance de oxígeno de ambas fases, el cálculo global realizado para determinar las concentraciones en cada tiempo de simulación no considera la integración numérica en dos intervalos de tiempo, ocasionada por la solución de los modelos involucrados.

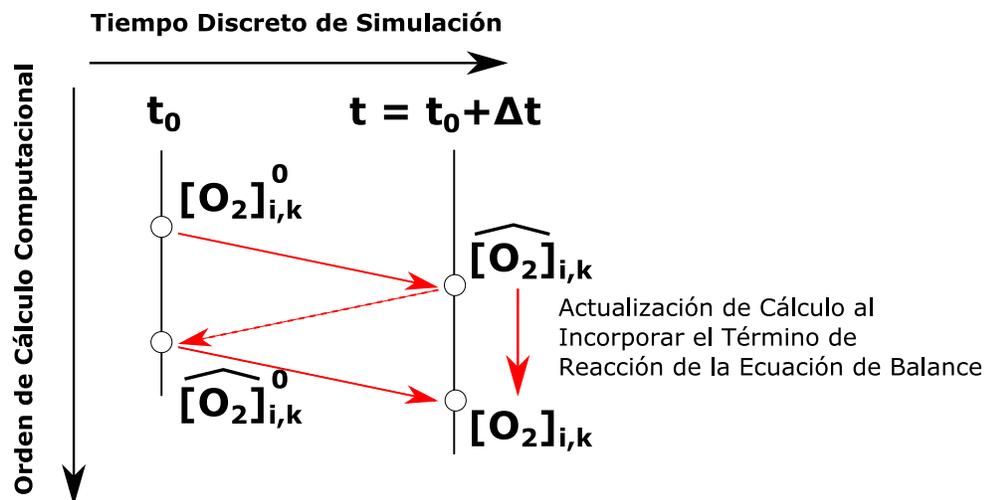


Figura 25. Procedimiento de cálculo de las concentraciones de oxígeno por el método operator splitting.

En la Figura 26 se presenta un esquema general del cálculo realizado en el modelamiento del balance de oxígeno y de la fluidodinámica de la fase gaseosa, donde se detallan las fases de cálculo de las concentraciones de oxígeno y el fraccionamiento/simplificación de las ecuaciones de balance originado por el método operator splitting. En esta figura se ordenan las distintas etapas de cálculo según su orden de cómputo en el código del programa y según la fase presente en el sub-proceso modelado. También se aprecia la orgánica de los diferentes módulos o programas (definidos por las cápsulas de color), donde se indican las conexiones que existen entre cada uno (principales vínculos de variables calculadas y requeridas) y su contexto en el fenómeno general modelado.

Se puede señalar la siguiente estructura de los modelos y entornos de cálculo: el modelo de balance de oxígeno incluye el modelo de advección y dispersión en el líquido, el modelo de advección y difusión en el gas y el modelo de determinación de los términos de reacción; además este último

modelo incluye de forma tácita el programa de determinación del coeficiente $k_L a$ (dado que este parámetro es fundamental para calcular la transferencia de oxígeno entre cada fase); finalmente, los modelos de fluidodinámica de la fase líquida y gaseosa se mantienen al margen del fenómeno global del balance de oxígeno (ya que modelan el comportamiento de los fluidos correspondientes), sin embargo, estos modelos aportan los parámetros esenciales v_l , ε_L y v_g , requeridos por los módulos de modelación del balance de oxígeno.

El proceso de cálculo, detallado en la Figura 26, se repite para el número de intervalos de tiempo discreto elegidos para el periodo de simulación (razón entre el tiempo de simulación del proceso y el paso de tiempo Δt).

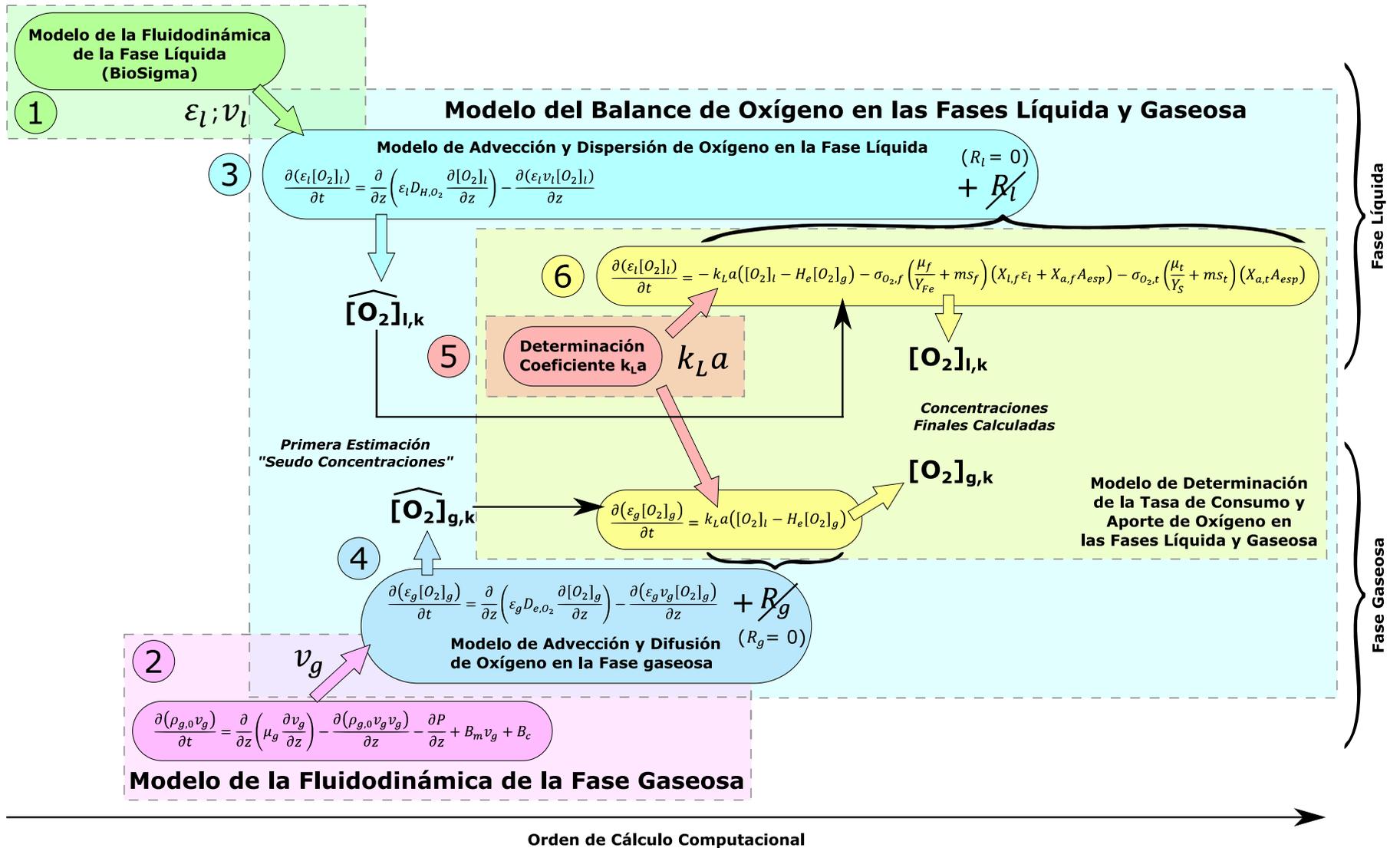


Figura 26. Esquema general del modelamiento del balance de oxígeno y de la fluidodinámica de la fase gaseosa al interior de una pila de biolixiviación. Se ordenan los diferentes sub-procesos según su orden de cómputo en el código del programa y según la fase del fenómeno modelado.

6. INTERFAZ GRÁFICA DE USUARIO

Se desarrolló un módulo de interfaz gráfica del modelo general de biolixiviación. Esta interfaz tiene el objetivo de ayudar al usuario a ingresar información y recibir los resultados proporcionados por el modelo general, además de facilitar el empleo a usuarios externos, no vinculados con su diseño y programación.

En la versión anterior del modelo, el ingreso de parámetros se realizaba a través de la copia de datos desde una hoja de cálculo a archivos de formatos especiales que pueden interactuar con el software Scilab. Esta tarea, además de ser tediosa, generaba una fuente de error importante, dado que el usuario introducía los datos de forma poco intuitiva y sin herramientas que verificasen incompatibilidades en el ingreso de dígitos.

El programa de interfaz gráfica despliega una ventana principal que da acceso a las principales operaciones del modelo general de biolixiviación: ingreso de datos de entrada, ingreso de parámetros de ajuste, calibración del modelo, ploteo de gráficos y simulación (Figura 27). Además permite seleccionar de forma individual los módulos de modelamiento en una simulación, de modo que se puedan realizar simulaciones simplificadas y rápidas, modelando fenómenos específicos, o realizar simulaciones del proceso global, donde se considera la interacción de todos los fenómenos del modelo general.

La ventana principal también otorga un rápido acceso a la visualización de gráficos, sin requerir de iniciar un módulo externo para cargar el ploteo de datos. También entrega información respecto al avance de simulación (herramienta de gran utilidad para identificar errores o saber el nivel de precisión de la simulación con los gráficos dinámicos), funcionalidad que no existía al correr el modelo desde la consola de Scilab.

Los botones de datos de entrada y parámetros de ajuste despliegan ventanas separadas, que permiten editar los datos deseados sin necesidad de modificar los archivos especiales (Figura 28). Estas ventanas poseen herramientas de aviso y corrección para señalar errores en el ingreso de datos. El programa de interfaz gráfica facilita el proceso de calibración del modelo, permitiendo la elección de los parámetros a calibrar y las opciones de ajuste de manera conveniente (Figura 29).



Figura 27. Ventana principal del modelo general de biolixiviación.

Editar los Datos de Entrada

Editar los Datos de Entrada

Dato de Entrada			Dato de Entrada				
1	Altura de pila o columna	4	m	27	Temperatura mínima del cielo	-60	°C
2	Área de riego	500	m ²	28	Temperatura máxima del cielo	30	°C
3	Ley de hierro total	0.67	%	29	Coefficiente transf. calor aire - pila	1728	kJ/m ² /d/°K
4	Ley de hierro de pirita	0.2	%	30	Permeabilidad intrínseca pila	5	darcy
5	Ley elemento I de ganga	1	%	31	Índice distribución tamaño poros (n)	1.9	
6	Porosidad de lecho seco	0.32	m ³ /m ³ lecho	32	Inverso carga presión aire (alfa)	-0.2	1/m
7	Densidad del mineral	2700	kg/m ³	33	Humedad residual pila	1.2	% base hum.
8	Temperatura inicial en el lecho	20	°C	34	Contenido líquido saturación pila	0.32	m ³ liq/m ³
9	Paso en el tiempo	0.2	días	35	Humedad inicial pila	1.7	% base hum.
10	Paso en el espacio	0.5	m	36	Viscosidad fase líquida	0.0025	kg/m/s
11	Concentración inicial H ⁺	0.01	g/L	37	Densidad fase líquida	1020	kg/m ³
12	Concentración inicial Cu ²⁺	0.01	g/L	38	Tasa de evaporación	10	L/día/m ²
13	Concentración inicial Fe ²⁺	0.01	g/L	39	Tolerancia Convergencia Hidrodinámica	0.001	
14	Concentración inicial Fe ³⁺	0.01	g/L	40	Temperatura promedio lecho	20	°C
15	Concentración inicial NH ₄ ⁺	0.0001	g/L	41	Contenido líquido promedio lecho	8	% base hum.
16	Conc. inicial oxígeno en la fase líquida	0.004	g/L	42	Fracción de H ⁺ libre	0.75	
17	Presión parcial de oxígeno en el aire	0.126	atm				
18	Conc. inicial ferroxidantes libres	10000	ce/lmL				
19	Conc. inicial ferroxidantes adheridas	200	ce/lm ²				
20	Conc. inicial thiooxidantes libres	10000	ce/lmL				
21	Conc. inicial thiooxidantes adheridas	100	ce/lm ²				
22	Presión atmosférica	0.6	atm				
23	Humedad relativa en el aire ambiente	0.3	fracción				
24	Humedad relativa en el aire inyectado	0.3	fracción				
25	Temperatura ambiente mínima	0	°C				
26	Temperatura ambiente máxima	20	°C				

Finalizar Modificación

Figura 28. Ventana de ingreso de los datos de entrada del modelo.

Scilab Multiple Values Request

Modifique los valores de las opciones para la optimización del modelo

Gráfico dinámico de la optimización: 1

Número máximo de iteraciones realizadas: 100

Número máximo de veces que se evalúa FnObj: 100

Tolerancia en el valor de la función: 0.01

Tolerancia en el tamaño del simplex: 0.01

Ponderador de ajuste para la recuperación de Cu: 1

OK Cancel

Figura 29. Ventana de opciones de calibración.

7. CALIBRACIÓN DEL MODELO

Los datos de entrada, requeridos por el modelo general, se desglosan en datos operacionales, parámetros y parámetros teóricos. Los datos operacionales (por ejemplo, temperatura de la solución de riego, flujo del riego, concentración de iones en la solución de riego, etc.) y parámetros (por ejemplo, leyes de especies mineralógicas, altura de la pila, temperatura inicial del lecho, etc.) no suponen un mayor problema en la calidad de la simulación realizada, sin embargo, los parámetros teóricos afectan de forma sustancial los resultados de la simulación.

Los parámetros teóricos pueden ser muchos (factores de ajuste de algún coeficiente, los valores de las constantes cinéticas y órdenes de reacción, concentración inicial de bacterias, etc.), dependiendo de la complejidad del sistema que se requiera modelar.

El modelo general contiene un módulo de optimización automática, que permite ejecutar el ajuste automático de los parámetros, de manera tal que el error causado entre la diferencia de los resultados de la simulación y los resultados experimentales sea el mínimo posible.

El módulo de optimización utiliza una función que determina el mínimo no restringido de una función compleja adicional (que contiene operaciones booleanas, controles de flujo e incorpora otras funciones), empleando el algoritmo de Nelder-Mead. El algoritmo de Nelder-Mead es un método de optimización iterativo e intensivo en gasto computacional [65].

La función compleja adicional representa la función objetivo que se debe minimizar para encontrar un mínimo local, según la variación de un conjunto de parámetros de entrada especificado por el usuario mediante la interfaz gráfica. La función objetivo consiste en una réplica exacta del código encontrado en el programa principal, pero además agrega una rutina de “swaping”, es decir, intercambia el valor del parámetro que está siendo optimizando por el valor entregado en el ciclo $i-1$ de cálculo (iteración de cálculo anterior) de la función de minimización aplicada a la función objetivo, y adiciona nuevas líneas de código que realizan el cálculo de la diferencia entre las variables determinadas por el modelo (por ejemplo, recuperación de cobre, recuperación de hierro, consumo de ácido, etc.) y los datos experimentales, calculando posteriormente una sumatoria de estas diferencias para cada ciclo de cálculo (operaciones que determinan los residuos). En la función objetivo también se incorporan ponderadores en la sumatoria de los residuos, que permiten modificar la magnitud de la optimización de un parámetro, según la significancia o peso de la variable contrastada con los datos reales. Los ponderadores son parámetros definidos por el usuario, y sus valores pueden establecerse en la interface diseñada para el ingreso de datos en las opciones de calibración.

La calibración del modelo general de biolixiviación se realizó utilizando datos experimentales obtenidos de una pila de biolixiviación operada por BioSigma. Los resultados de la simulación se ajustaron contra las curvas experimentales de recuperación de cobre y hierro, consumo de ácido, férrico y ferroso en el efluente, y pH y Eh en el efluente.

La calibración consideró el ajuste de parámetros teóricos, cinéticos y biológicos (que definen la actividad bacteriana al interior de la pila), los cuales pueden identificarse con la inscripción “Ajustado” en la columna “Referencia” de las Tablas 2 y 3.

8. DATOS DE ENTRADA

Se presentan los datos de entrada utilizados en las simulaciones. Se consideró como caso base las condiciones de operación y parámetros de la pila de biolixiviación manejada por BioSigma.

Tabla 1. Datos de entrada para el caso base, parte I.

Dato de Entrada	Símbolo	Valor	Unidades	Referencia
Altura de pila/botadero/columna	-	9,5	m	-
Área de riego	A_r	500	m ²	-
Ley de hierro total	-	0,83	%	-
Ley de hierro como pirita	-	0,2	%	-
Ley elemento I de ganga (aluminio)	-	1	%	-
Porosidad de lecho seco	P_{or}	0,32	m ³ / m ³ lecho	[62]
Densidad del mineral	ρ_{min}	2700	kg/m ³	[62]
Temperatura inicial en el lecho	T	20	°C	-
Paso en el tiempo	Δt	0,2	d	-
Paso en el espacio	Δz	0,5	m	-
Concentración inicial H ⁺	-	1,00E-02	g/L	[62]
Concentración inicial Cu ²⁺	-	1,00E-02	g/L	[62]
Concentración inicial Fe ²⁺	-	1,00E-02	g/L	[62]
Concentración inicial Fe ³⁺	-	1,00E-02	g/L	[62]
Concentración inicial NH ₄ ⁺	-	1,00E-04	g/L	[62]
Conc. inicial oxígeno en la fase líquida	$[O_2]_l$	4,00E-03	g/L	[62]
Presión parcial de oxígeno en el aire	$P_{O_2,amb}$	0,1257	atm	-
Velocidad del viento	$\overline{v_{g,\infty}}$	10	km/h	-
Largo de la corona	-	22,36	m	-
Conc. inicial ferroxidantes libres	$X_{l,f}$	10000	cel/mL	[62]
Conc. inicial ferroxidantes adheridas	$X_{a,f}$	100	cel/m ²	[62]
Conc. inicial thiooxidantes libres	$X_{l,t}$	10000	cel/mL	[62]
Conc. inicial thiooxidantes adheridas	$X_{a,t}$	100	cel/m ²	[62]
Temp. min. de crecimiento ferrox.	$T_{min,f}$	7,8	°C	[63]
Temp. max. de crecimiento ferrox.	$T_{max,f}$	44,6	°C	[63]
Coefficiente de ajuste B ferrox.	B_f	1,117E-02	-	[63]
Coefficiente de ajuste C ferrox.	C_f	2,767E-01	-	[63]
Temp. min. de crecimiento thioox.	$T_{min,t}$	-4,2	°C	[63]
Temp. max. de crecimiento thioox.	$T_{max,t}$	39,7	°C	[63]
Coefficiente de ajuste B thioox.	B_t	2,930E-03	-	[63]
Coefficiente de ajuste C thioox.	C_t	3,089E-01	-	[63]
Presión atmosférica	P_{atm}	0,6	atm	-
Humedad relativa en el aire ambiente	ϕ_1	0,3	-	[62]
Humedad relativa en el aire inyectado	ϕ_N	0,3	-	[62]

Tabla 2. Datos de entrada para el caso base, parte II.

Dato de Entrada	Símbolo	Valor	Unidades	Referencia
Temperatura ambiente mínima	T_{min}	5	°C	-
Temperatura ambiente máxima	T_{max}	25	°C	-
Temperatura mínima del cielo	-	-60	°C	[66]
Temperatura máxima del cielo	-	40	°C	[66]
Coeficiente de transferencia de calor aire-pila	-	1728	kJ/(m ² ·d·K)	[66]
Permeabilidad intrínseca pila	k_{int}	70	darcy	[62]
Humedad residual pila	$\varepsilon_{l,r}$	1,2	% base hum.	[62]
Contenido líquido saturación pila	$\varepsilon_{l,sat}$	0,32	m ³ liq / m ³	[62]
Humedad inicial pila	ε_l	1,7	% base hum.	[62]
Viscosidad fase líquida	μ_l	2,50E-03	kg/(m·s)	[28]
Densidad fase líquida	ρ_l	1020	kg/m ³	[28]
Tasa de evaporación	-	10	L/d/m ²	[62]
Calor de reacción de especies	-	-	kJ/mol	[8, 62]
Energía de activación de reacción	$E_{A,j}$	-	kJ/mol	[8, 62]
Difusividad efectiva del ion Fe ³⁺	$D_{e,l,Fe^{3+}}$	4,00E-05	m ² /d	[62]
Difusividad efectiva del ion H ⁺	D_{e,l,H^+}	4,00E-05	m ² /d	[62]
Factor del segundo cobre de la calcosina, covelina secundaria, Cu ₂ S (2/2)	-	2,222	-	Ajustado
Factor de los cobres 1 y 2 de la bornita, pseudo calcosina, Cu ₅ FeS ₄ (1, 2/5)	-	0,909	-	Ajustado
Factor de los cobres 3 y 4 de la bornita, covelina secundaria, Cu ₅ FeS ₄ (3, 4/5)	-	2,333	-	Ajustado
Factor del cobre 5 de la bornita, calcopirita secundaria, Cu ₅ FeS ₄ (5/5)	-	3,571	-	Ajustado
Constante cinética intrínseca Cu rápidos	$k_{0,Cu\ rap}$	0,13	m/d	Ajustado
Orden de reacción Cu rápidos	$m_{Cu\ rap}$	1,57	-	Ajustado
Constante cinética intrínseca Cu lentos	$k_{0,Cu\ len}$	1,63E-02	m/d	Ajustado
Orden de reacción Cu lentos	$m_{Cu\ len}$	0,88	-	Ajustado
Constante cinética intrínseca Cu calcopiríticos	$k_{0,Cu\ cpy}$	1,80E-03	m/d	Ajustado
Orden de reacción Cu calcopiríticos	$m_{Cu\ cpy}$	0,27	-	Ajustado
Constante cinética intrínseca pirita	k_{0,FeS_2}	6,67E-06	m/d	Ajustado
Orden de reacción pirita	m_{FeS_2}	0,5	-	[62]
Constante cinética intrínseca óxidos de Cu	$k_{0,CuO}$	1,80E-01	m/d	Ajustado
Orden de reacción óxidos de Cu	m_{CuO}	0,77	-	Ajustado
Constante cinética intrínseca ganga que aporta Fe ²⁺	$k_{0,Gg-Fe}$	4,30E-03	m/d	Ajustado
Orden de reacción ganga que aporta Fe ²⁺	m_{Gg-Fe}	1,029	-	Ajustado
Constante cinética intrínseca ganga general	$k_{0,Gg-I}$	1,00E-02	m/d	Ajustado
Orden de reacción ganga general	m_{Gg-I}	1,42	-	Ajustado
Fracción de hierro contenido en la ganga que se aporta como ferroso	-	0,5	-	[62]

Tabla 3 Datos de entrada para el caso base, parte III.

Dato de Entrada	Símbolo	Valor	Unidades	Referencia
Velocidad específica de crecimiento máxima ferroox.	$\mu_{max,f}$	7,3	1/d	Ajustado
Coefficiente de mantención ferroox.	mS_f	7E-16	kg Fe ²⁺ /(d·cel)	Ajustado
Constante de saturación respecto al Fe ²⁺ ferroox.	K_{Fe}	7,10E-02	kg/m ³	Ajustado
Constante de saturación respecto al O ₂ ferroox.	$K_{O_2,f}$	1,60E-03	kg/m ³	[8, 24]
Rendimiento de bacterias en Fe ²⁺ ferroox.	Y_{Fe}	3,7E+13	cel / kg Fe ²⁺	[8]
Constante de adherencia ferroox.	-	2,06	1/d	Ajustado
Constante de desorción ferroox.	-	0,035	1/d	[8]
Concentración máxima de bacterias adheridas ferroox.	-	2E+11	cel/m ²	[62]
Tiempo de fase de latencia ferroox.	-	20	d	[62]
Velocidad específica de crecimiento máxima thioox.	$\mu_{max,t}$	1	1/d	Ajustado
Coefficiente de mantención thioox.	mS_t	0	kg S ⁰ / (d·cel)	[62]
Constante de saturación respecto al S ⁰ thioox.	K_S	0,67	kg/m ³	[62]
Constante de saturación respecto al O ₂ thioox.	$K_{O_2,t}$	1,60E-03	kg/m ³	[8, 24]
Rendimiento de bacterias en S ⁰ thioox.	Y_S	6E+14	cel / kg S ⁰	[62]
Constante de adherencia thioox.	-	9,29	1/d	Ajustado
Constante de desorción thioox.	-	0,012	1/d	Ajustado
Concentración máxima de bacterias adheridas thioox.	-	2E+12	cel/m ²	[62]
Tiempo de fase de latencia thioox.	-	50	d	[62]
Coefficiente de modelo de precipitación de hierro, m_{ppt}	-	-1,4319	-	[67]
Coefficiente de modelo de precipitación de hierro, C_{ppt}	-	2,6149	-	[67]
Constante cinética de precipitación de hierro	-	0,173	1/d	[67]
Factor talud (aporte de los taludes respecto al mineral bajo la corona)	-	1,18	-	[62]

En la siguiente tabla se presentan los datos de ley, mineralogía y granulometría de la pila de BioSigma.

Tabla 4. Ley, mineralogía y granulometría para el caso base.

		Fracción de Tamaño			
		-1" +1/2"	-1/2" +1/4"	-1/4" +30#	-30# +100#
Diámetro Promedio (mm)		21,997	8,980	4,619	0,580
Peso por Fracción (%)		53	13	9	25
Ley de Cobre (%)		0,439	0,439	0,439	0,439
Contenido de Cobre Asociado por Especie	Óxido Cu (%)	4,3	4,3	4,3	4,3
	Calcosina (%)	4,5	4,5	4,5	4,5
	Covelina (%)	3,7	3,7	3,7	3,7
	Bornita (%)	51,8	51,8	51,8	51,8
	Calcopirita (%)	35,7	35,7	35,7	35,7
Fracción Liberada de Cobre por Especie	Óxido Cu (-)	1	1	1	1
	Calcosina (-)	1	1	1	1
	Covelina (-)	1	1	1	1
	Bornita (-)	1	1	1	1
	Calcopirita (-)	1	1	1	1

En la Tabla 5 se detallan las condiciones de operación de la pila de BioSigma. Los datos de riego y aireación de la pila son vectores, los cuales poseen valores de la variable para cada día de operación. Los valores de los datos que no son informados como promedios corresponden a valores constantes durante todo el tiempo de operación.

Tabla 5. Condiciones de operación para el caso base.

		Valor	Unidades
Tiempo de Operación		449	días
Tasa de Riego Promedio		5,58	L/h/m ²
Concentración Promedio de Especies en el Riego	Ácido	8,2	g/L
	Cobre	0,45	g/L
	Ferroso	0,08	g/L
	Férrico	0,3	g/L
	Amonio	0,1	g/L
	M. O. Ferrooxidantes	2,20E+06	cel/mL
	M. O. Thiooxidantes	7,18E+05	cel/mL
	Oxígeno	5	ppm
Temperatura Promedio del Riego		16,5	°C
Tasa de Aireación (q_g)		0,6	Nm ³ /m ² /h
Temperatura del Aire Inyectado		10	°C

9. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

9.1. Modelo Calibrado / Caso Base

A continuación se presentan los resultados de simulación del modelo calibrado, usando los datos experimentales de la pila de BioSigma. Los datos de entrada utilizados en esta simulación se detallan en las Tablas 1, 2, 3, 4 y 5.

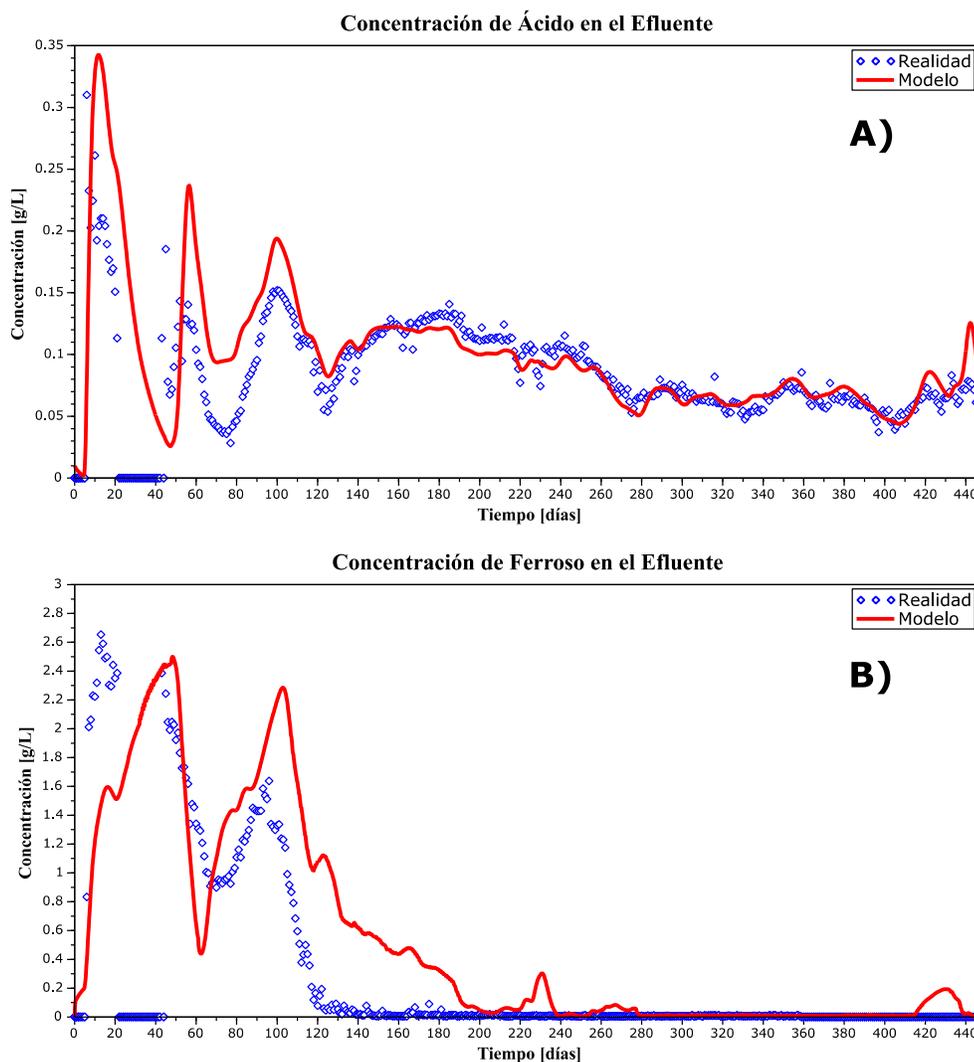


Gráfico 1. A) Concentración de ácido en el efluente vs tiempo. B) Concentración de ferroso en el efluente vs tiempo.

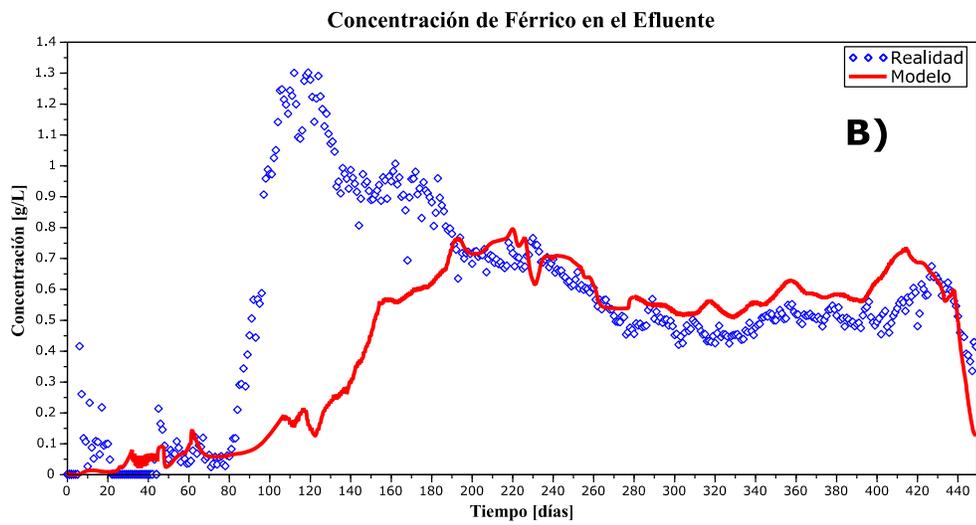
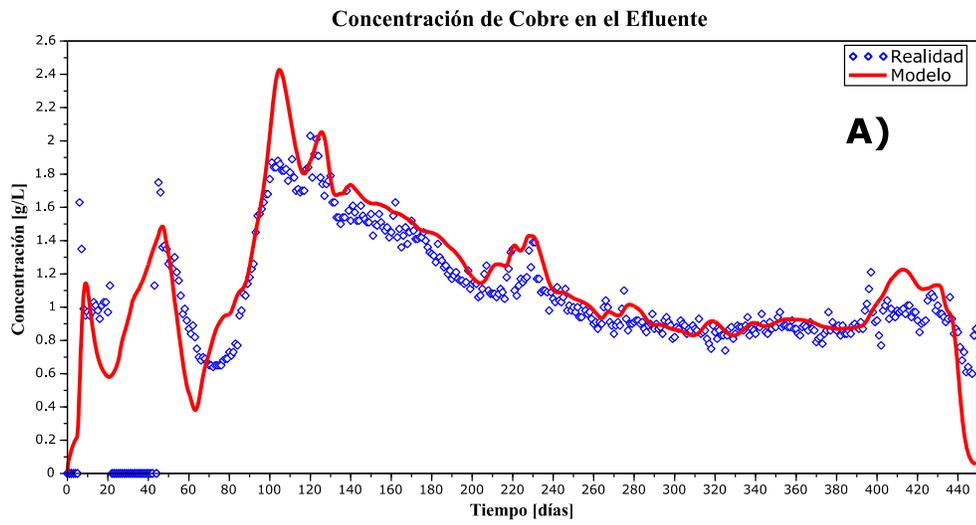


Gráfico 2. A) Concentración de cobre en el efluente vs tiempo. B) Concentración de férrico en el efluente vs tiempo.

Concentración de Hierro Total y Férrico en el Efluente

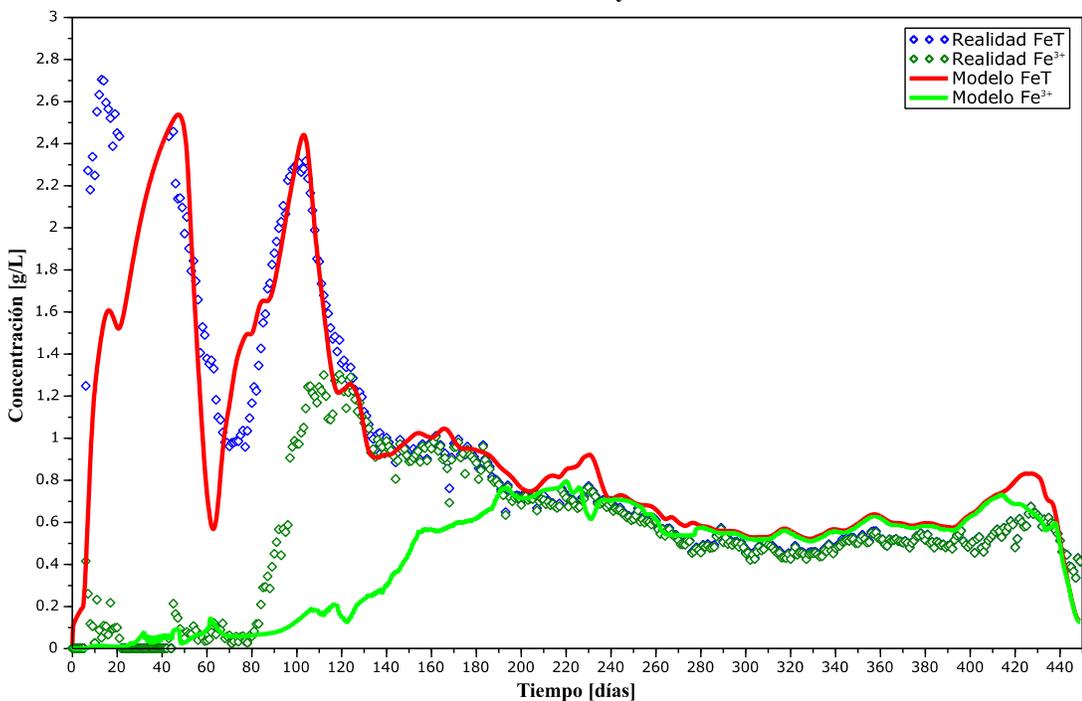


Gráfico 3. Comparación entre las concentraciones de hierro total y férrico en el efluente.

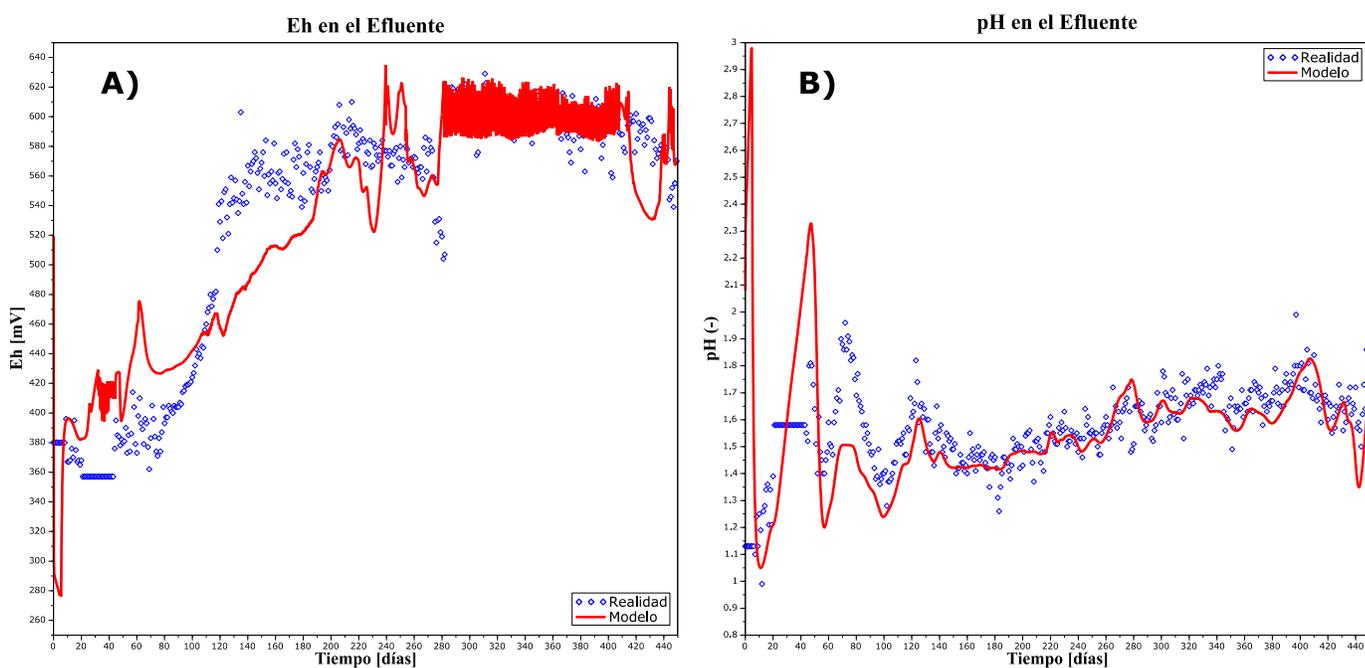


Gráfico 4. A) Potencial redox (E_h) en el efluente vs tiempo. B) pH en el efluente vs tiempo.

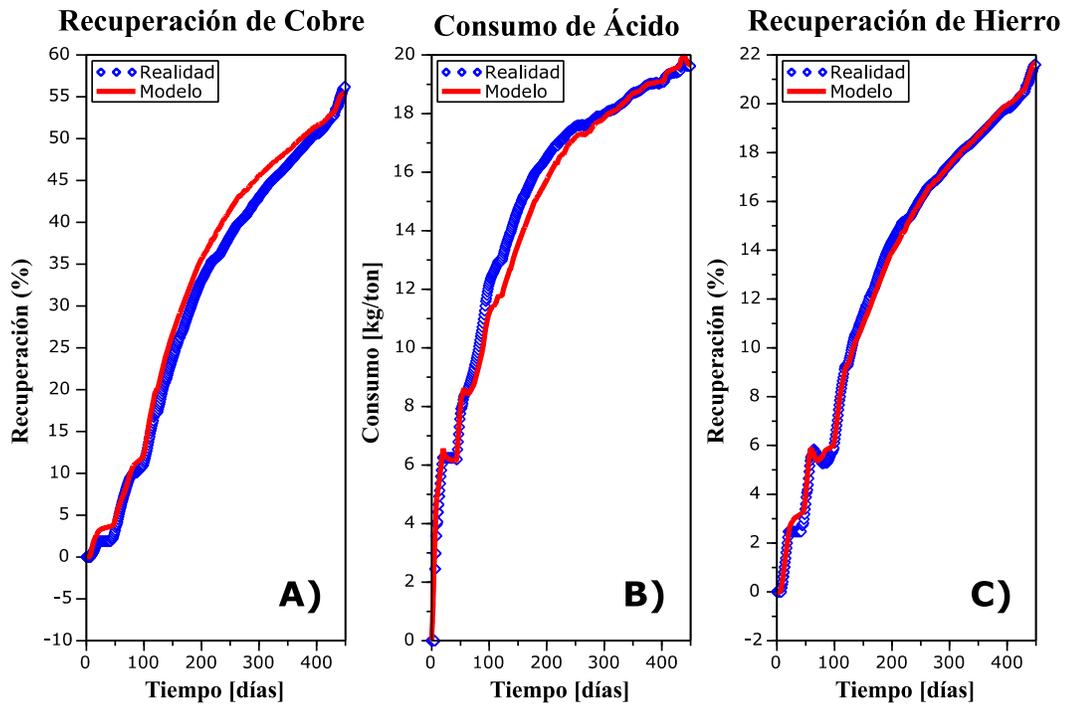


Gráfico 5. A) Recuperación de cobre vs tiempo. B) Consumo de ácido vs tiempo. C) Recuperación de hierro vs tiempo.

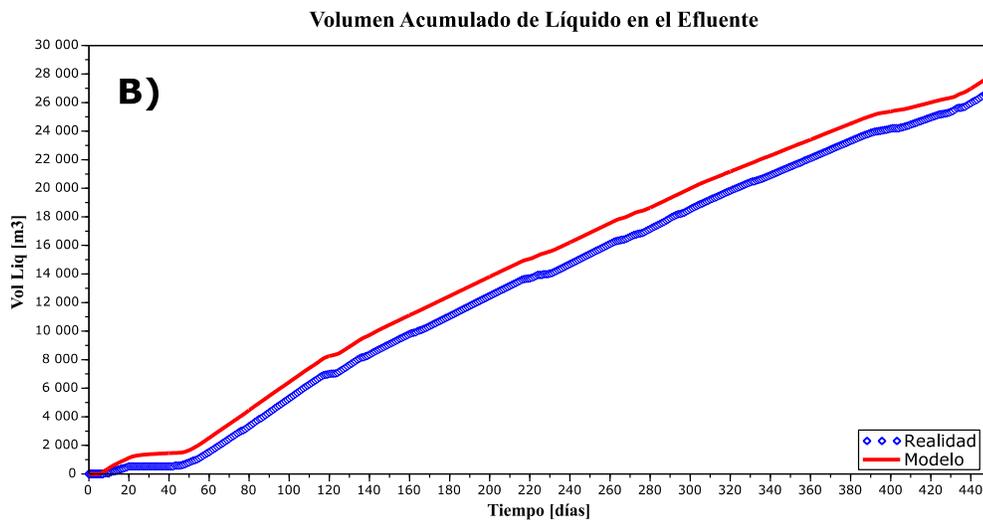
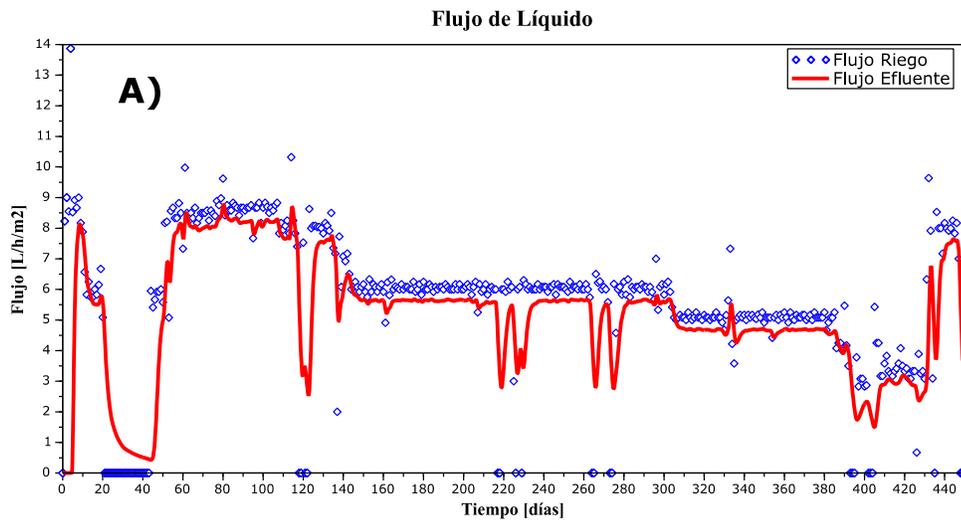


Gráfico 6. A) Flujo de líquido (solución lixiviante alimentada y efluente) vs tiempo. B) Volumen acumulado de líquido en el efluente vs tiempo. Los datos experimentales se demarcan en azul y las variables generadas por el modelo en rojo.

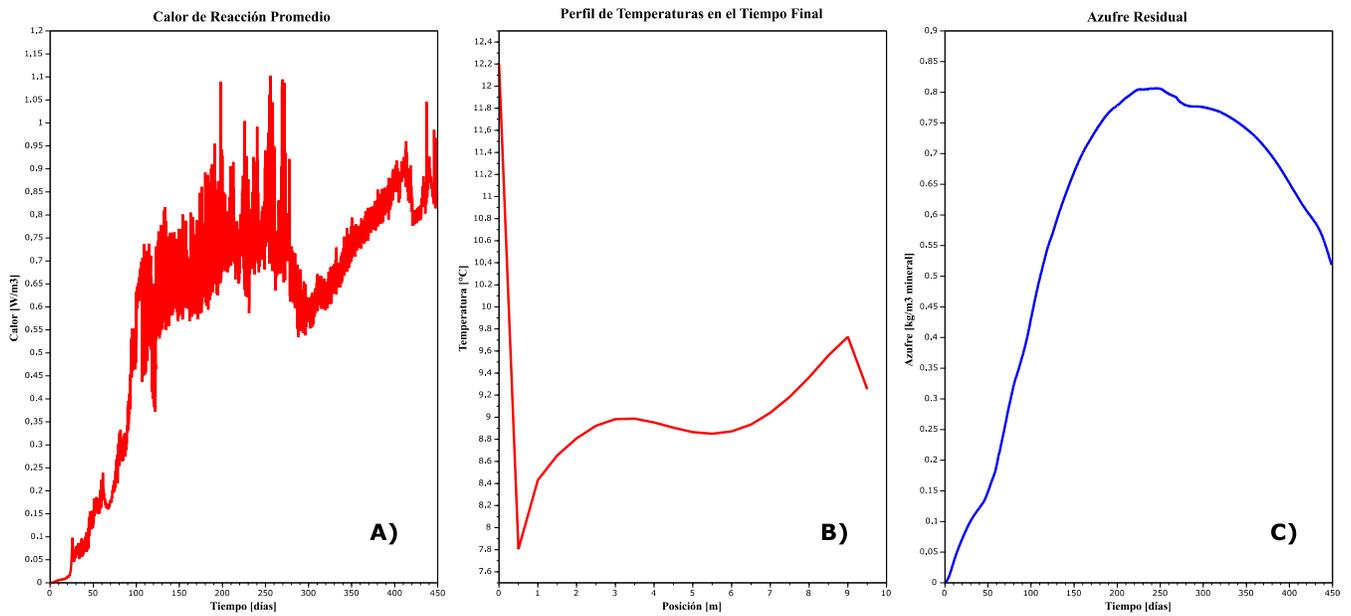


Gráfico 7. A) Calor de reacción promedio vs tiempo. B) Perfil de temperaturas en el tiempo final de simulación vs posición (0 señala la corona). C) Azufre residual vs tiempo.

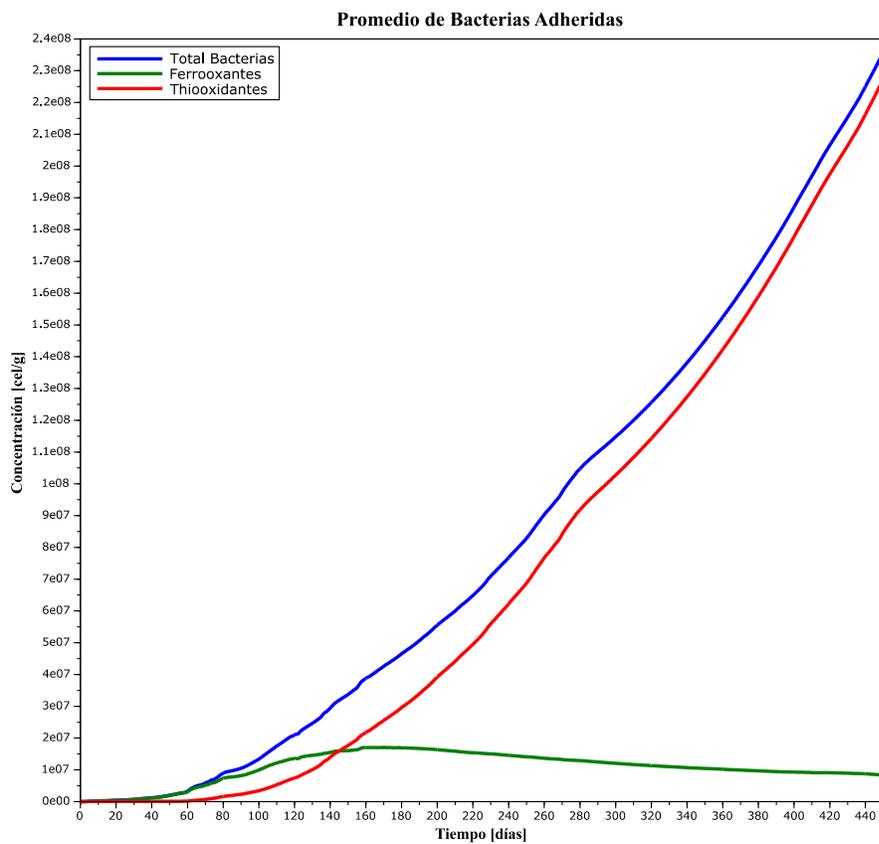


Gráfico 8. Promedio de bacterias adheridas vs tiempo.

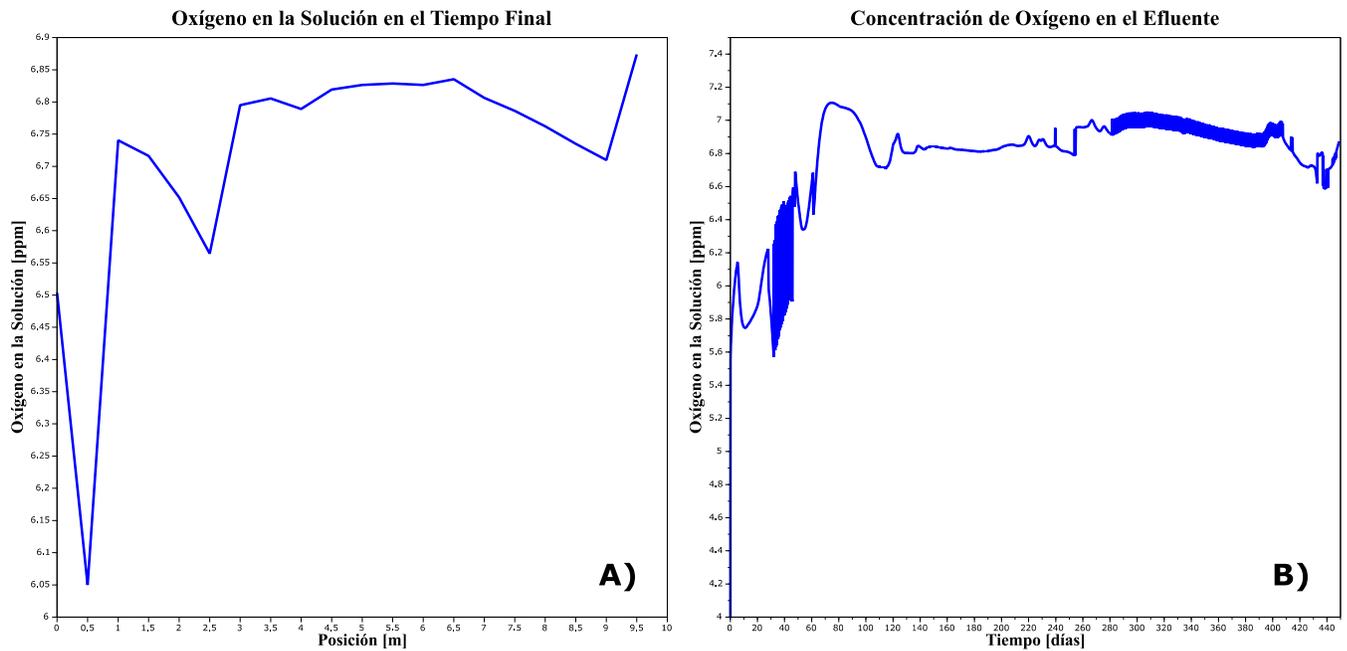


Gráfico 9. A) Oxígeno en la solución en el tiempo final de simulación vs posición (0 señala la corona). B) Concentración de oxígeno en el efluente vs tiempo.

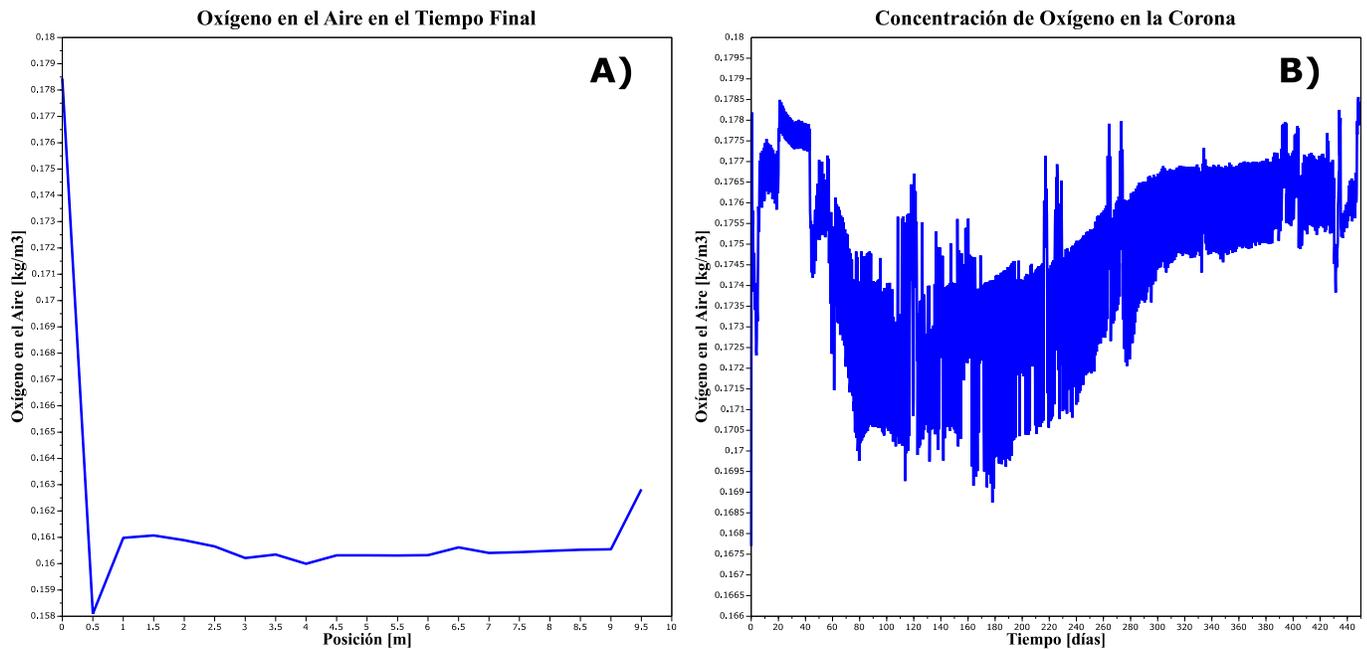


Gráfico 10. A) Oxígeno en el aire en el tiempo final de simulación vs posición (0 señala la corona). B) Concentración de oxígeno en el aire, evaluado en la corona vs tiempo.

En los Anexos C a J se presenta información adicional, en la forma de gráficos en 3D, de las variables de salida generadas por el modelo general calibrado. En los gráficos expuestos, la posición 0 designa la corona de la pila.

Como se puede observar en los Gráficos 1, 2, 3, 4, 5 y 6 la calidad de los resultados entregados por el modelo general, en comparación a las mediciones experimentales, es bastante buena, considerando que este es un modelo planteado en una dimensión.

Los Gráficos 7, 8, 9 y 10 exhiben curvas de variables calculadas por el modelo general (no existen mediciones experimentales).

El módulo de modelamiento del balance de calor utiliza una función sinusoidal para estimar las variaciones de temperatura durante el día. De esta manera se explica la forma accidentada de la superficie de la temperatura, generada en el gráfico del Anexo C, en las proximidades de la corona. De este gráfico también se puede observar el efecto de aislante térmico de la pila: la variación de temperatura en las secciones inferiores es suave, donde se amortigua el cambio brusco de temperatura experimentado en la parte superior de la pila. Del Gráfico 7-B) y del Anexo C se desprende que la temperatura promedio al interior de la pila ronda entre los 7,5 a 10 °C, en donde las secciones inferiores mantienen una temperatura mayor respecto a la parte superior de la pila al final del tiempo de operación. Este comportamiento coincide con los datos publicados por otros investigadores [8, 17, 66]. Considerando la información aportada por el Gráfico 6-A) y el Anexo C, se concluye que la tasa de riego es la variable que produce un mayor cambio en la temperatura al interior de la pila, sobre todo en los primeros días de operación; la temperatura promedio en el lecho cae cuando se corta el riego o se tienen bajos flujos de riego en largos periodos. Esto último también sugiere que el calor generado por las reacciones de lixiviación, fomentado por la actividad bacteriana, aporta un incremento marginal en la temperatura del sistema.

Aun cuando la cantidad de microorganismos ferrooxidantes aportados en la pila es mayor en comparación a los microorganismos consumidores de azufre (ver Tabla 5), estos últimos prevalecen en las condiciones de operación de la pila de BioSigma, incrementando exponencialmente su población en el último periodo de operación. De acuerdo al Gráfico 8, las bacterias thiooxidantes sobrepasan en un orden de magnitud la población de las bacterias ferrooxidantes a partir del día 400 del proceso de biolixiviación. El incremento de la población de microorganismos thiooxidantes aumenta el promedio de temperatura al interior de la pila, considerando el calor de reacción aportado por las reacciones (la oxidación de azufre es por un gran margen la reacción más exotérmica del sistema). Esta última afirmación se sustenta en la información presentada por los gráficos 7-A) y 7-B), en donde se aprecia que el periodo en el cual disminuye la cantidad de azufre generado por las reacciones de lixiviación coincide con el periodo de incremento del calor de reacción y concentración de bacterias thiooxidantes adheridas a las partículas. Se puede observar del gráfico del Anexo D la distribución de la población de microorganismos ferrooxidantes y thiooxidantes adheridos a las partículas. Por los parámetros ingresados de la ecuación de Ratkowsky, las bacterias thiooxidantes tienen una mayor resistencia al efecto de la temperatura. De esta forma, la mayoría de las bacterias thiooxidantes se concentra en la parte superior de la pila, donde si bien la temperatura es en promedio menor, la disponibilidad de oxígeno en solución es mayor. Por otro lado, las bacterias ferrooxidantes se desplazan desde la corona (en los primeros días de operación) hacia el fondo de la pila, donde la temperatura es, en promedio, superior. Este comportamiento de los microorganismos también está asociado al grado de consumo de oxígeno: la oxidación de azufre requiere de una mayor cantidad de oxígeno (ver estequiometría en la ecuación (2)). Según la información expuesta por los gráficos, la temperatura es el factor preponderante en la baja tasa de crecimiento de los microorganismos ferrooxidantes.

En los gráficos del Anexo D y F y el Gráfico 2-B), se puede apreciar la gran correlación que existe entre la concentración de bacterias ferrooxidantes adheridas y la concentración de férrico en solución. Con el gráfico del Anexo F, se visualiza el nivel de consumo de férrico en cada sección

de la pila, provocado por la oxidación del mineral. La regeneración del stock de férrico en cada sección del lecho, durante los primeros 200 días de operación, está limitado por una baja concentración de bacterias ferrooxidantes en las secciones inferiores de la pila [68].

El aporte de oxígeno realizado por la atmosfera está fuertemente influenciado por la temperatura, como se puede apreciar en el gráfico 10-B). La gran oscilación de la concentración de oxígeno en el aire, evaluado en la corona, también afecta la concentración de oxígeno en la solución, como se puede ver en los gráficos del Anexo G y H. De acuerdo a estos gráficos, para la tasa de aireación utilizada en esta pila, la concentración de oxígeno no es un factor limitante en la cinética global de biolixiviación. Solo en los primeros días de operación y por un corto lapso, posterior al tiempo de fase de latencia de los microorganismos ferrooxidantes, se hace notoria una demanda de oxígeno por sobre lo que puede aportar el flujo de aire. Incluso para una concentración elevada de microorganismos adheridos, como se registra después de los 300 días de operación, la caída de la concentración de oxígeno en solución es casi imperceptible. La gran disponibilidad de oxígeno y la alta tasa de transferencia, como lo señala el gráfico del Anexo I, producen el incremento de la población bacteriana ferrooxidante y thiooxidante en el piso de la pila. De acuerdo a esta información, la concentración de ferroso, en conjunto con la temperatura en el sistema, serían los principales factores que limitarían el crecimiento de los microorganismos ferrooxidantes en la pila. Por la gran disponibilidad de oxígeno en la solución, tampoco se ve una competencia por el consumo de este sustrato entre las bacterias thiooxidantes y ferrooxidantes.

La variación del coeficiente global volumétrico de transferencia de oxígeno parece estar gobernada por los cambios en el flujo de líquido, dado que la disminución de su valor se asocia directamente con los periodos en donde la tasa de riego disminuye o el flujo de solución es cortado. La disminución abrupta del coeficiente, observado en el gráfico del anexo I, obedece al cambio en el cálculo del coeficiente k_L , definido en la ecuación (443). En este gráfico también se aprecia que los máximos valores del coeficiente se obtienen en la corona, lo que puede señalar que la temperatura o el contenido volumétrico de gas en el lecho incrementan su valor. Por un lado la temperatura aumentaría la transferencia de oxígeno en el líquido (incremento de la velocidad de transporte por difusión), mientras que el hold up de gas incrementaría el área interfacial de transferencia.

La velocidad superficial de gas aumenta o disminuye dependiendo de la temperatura en el exterior de la pila. La reducción de velocidad, cuando el gradiente de temperatura no es favorable, se explica por el roce con el lecho poroso no saturado y por el peso de las secciones de volumen de aire frío localizadas en la parte superior. Cuando la temperatura de la pila es mayor que la temperatura exterior, el aumento de velocidad generada por la convección natural se impone a la pérdida provocada por el esfuerzo viscoso, provocando una ganancia neta de la velocidad del flujo de aire a medida que este asciende por la pila. La dinámica generada por los cambios de temperatura en el exterior, respecto al interior del lecho, producen en la pila una suerte de ciclo de respiración, donde el transporte de oxígeno, dependiendo de las horas del día, puede aumentar o disminuir de forma importante para flujos menores de inyección de aire o en convección natural. En el anexo J se visualiza el efecto flujo pistón, en los instantes en que se reanuda el riego en la pila, luego de ciclos de reposo. El efecto de flujo pistón produce un aumento importante, en un muy corto periodo de tiempo, de la velocidad superficial del flujo de aire, propiciado por una reducción rápida del contenido volumétrico de gas en el lecho. Por el contrario, con una tasa de riego continua, se observa que la velocidad superficial del gas disminuye.

Del gráfico 7-B) y Anexo C se advierte que la inyección de aire tiene un efecto negativo en el balance de calor local del piso de la pila, produciendo una leve disminución de la temperatura en

la posición inferior. A partir de los gráficos presentados, no es posible asociar una relación entre velocidad superficial del flujo de aire y la disponibilidad de oxígeno en la solución para las condiciones de operación de la pila de BioSigma.

Lamentablemente, BioSigma no realizó mediciones experimentales para contrastar los datos de simulación obtenidos para la concentración de oxígeno, temperatura y concentración de bacterias adheridas en cada sección de la pila.

9.2. Análisis de Sensibilidad

En esta sección se analiza el efecto del flujo de inyección de aire en la recuperación de cobre, la concentración de oxígeno disuelto, la concentración de microorganismos biolixivantes adheridos a las partículas y la temperatura al interior de la pila. También se realiza el análisis de la variación de la granulometría del mineral, la temperatura, los ciclos de riego y reposo, y el tamaño de pila (altura) sobre la recuperación, la concentración de oxígeno en la solución, el coeficiente global volumétrico de transferencia de oxígeno y la velocidad superficial del flujo de aire.

9.2.1. Efecto del Flujo de Inyección de Aire

Los siguientes gráficos se obtuvieron al modificar la velocidad superficial de inyección de aire en la pila de BioSigma, estableciendo los otros parámetros según la condición base. En la leyenda de algunos gráficos, la condición base se distingue con el rótulo “C. B.”.

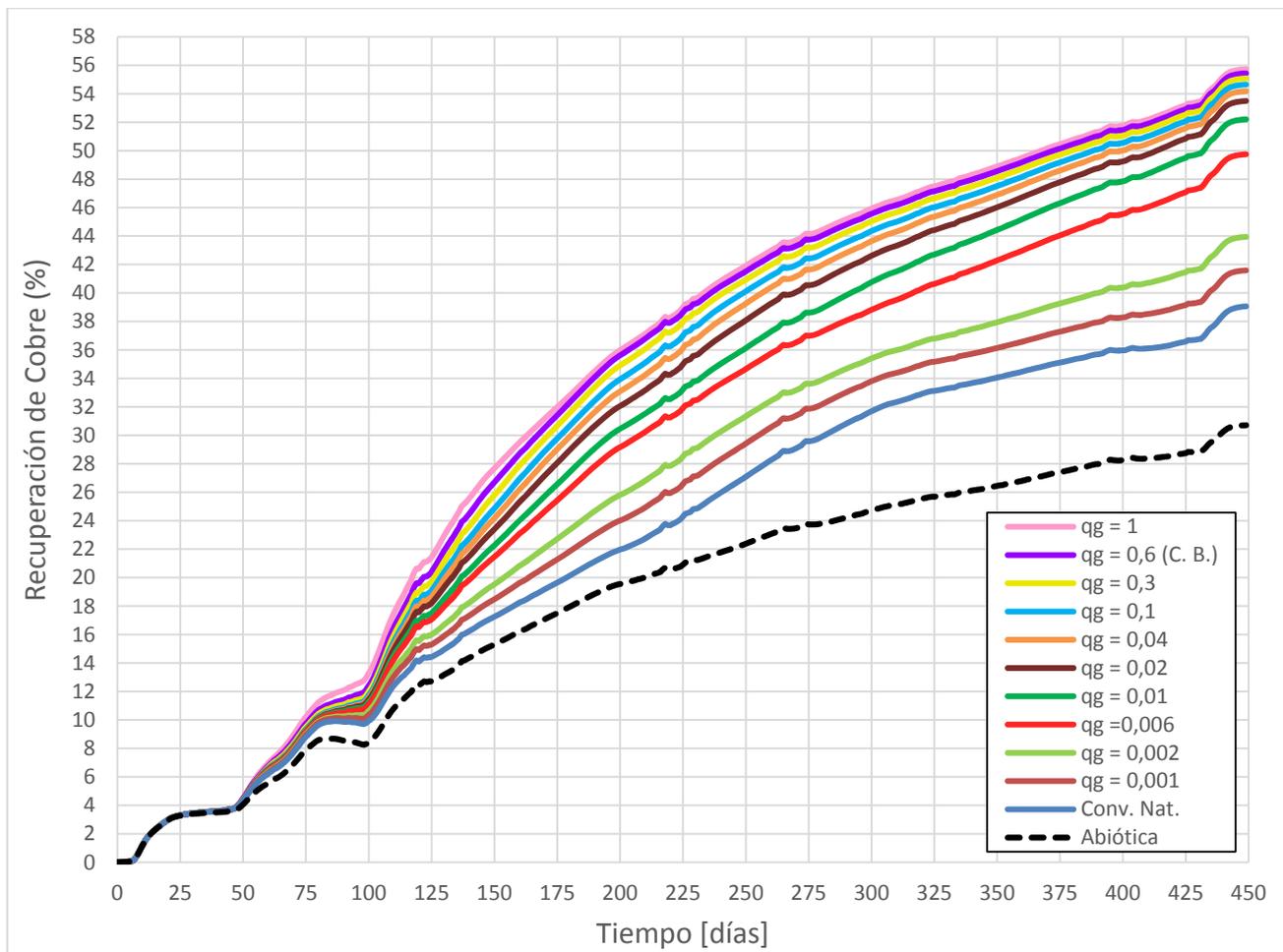


Gráfico 11. Recuperación de cobre en la pila BioSigma a diferentes velocidades superficiales de inyección de aire.

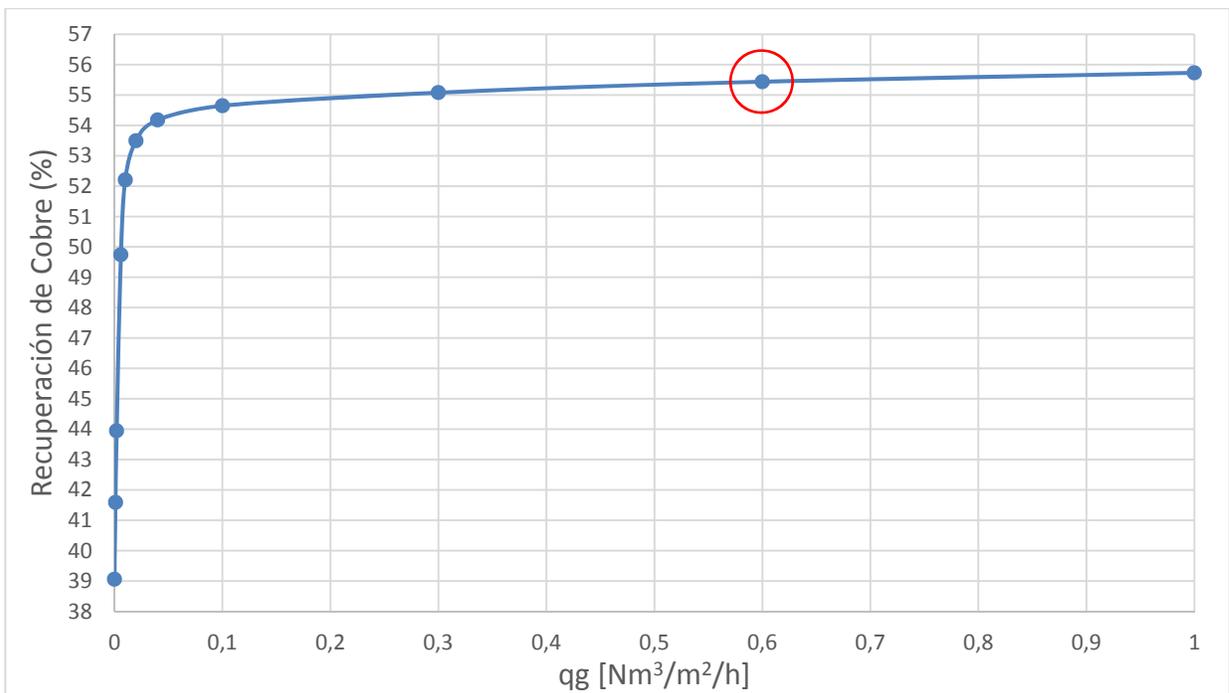


Gráfico 12. Recuperación final de cobre vs velocidad superficial de aire inyectado en la pila BioSigma. Se destaca el valor de recuperación asociado a la velocidad superficial de aire definido en el caso base.

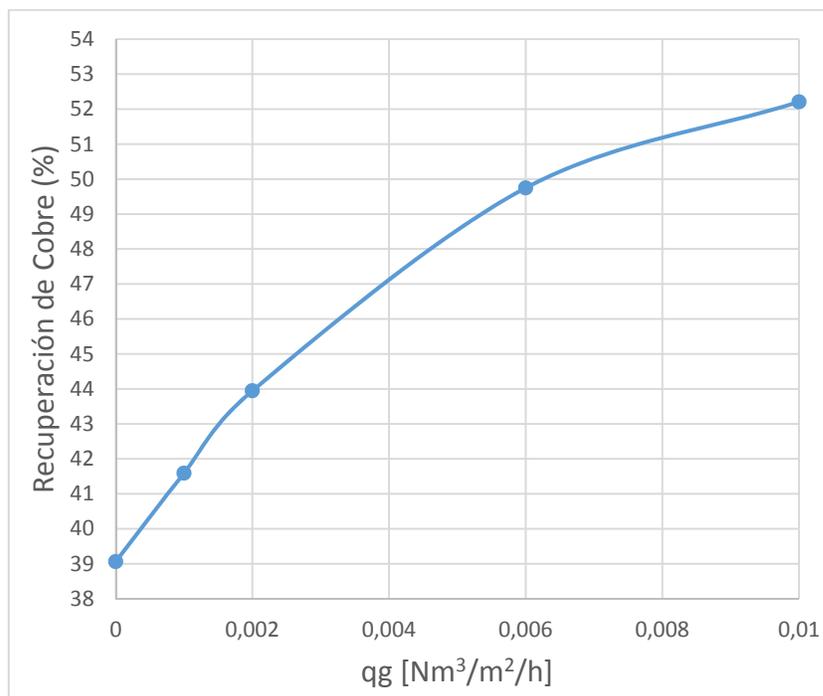


Gráfico 13. Detalle del Gráfico 12 para los primeros valores de velocidad superficial de aire inyectado en la pila BioSigma.

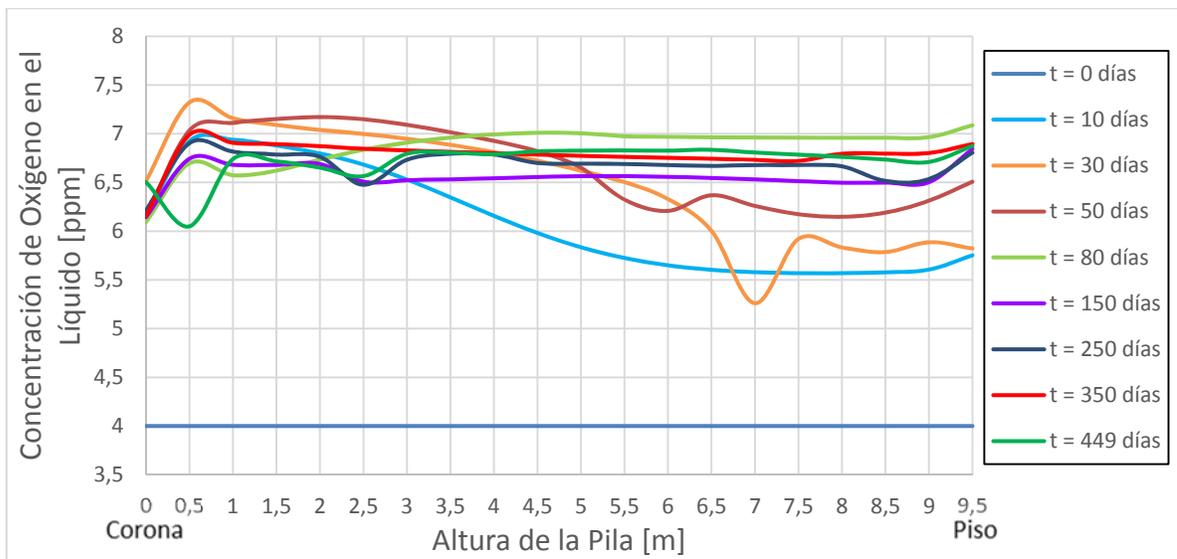


Gráfico 14. Concentración de oxígeno en solución en la pila BioSigma con $q_g = 0,6 \text{ [Nm}^3\text{/m}^2\text{/h]}$ (C. B.) a diferentes tiempos de biolixiviación.

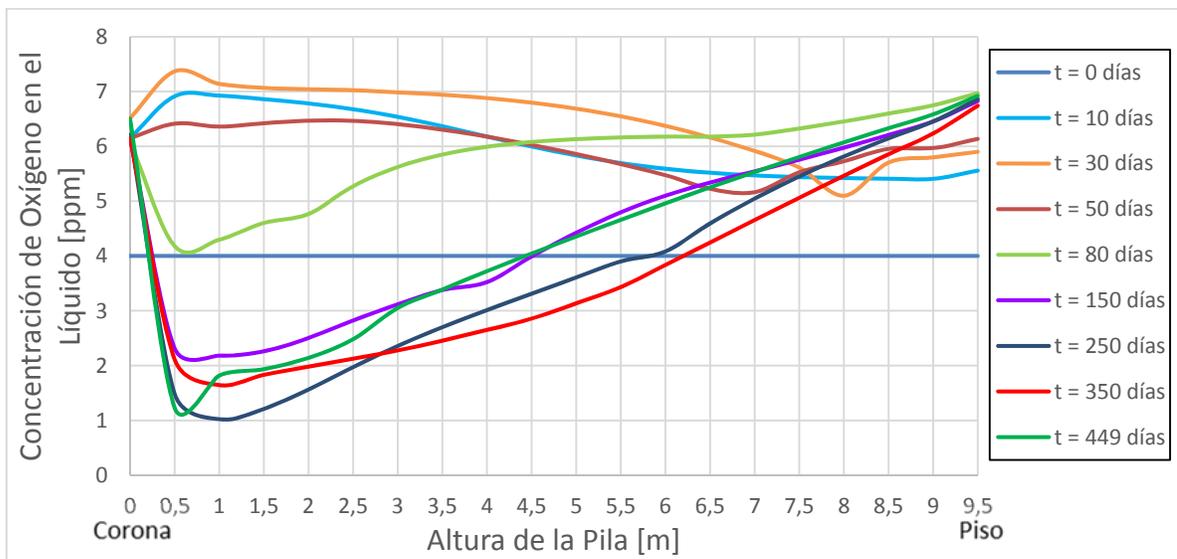


Gráfico 15. Concentración de oxígeno en solución en la pila BioSigma con $q_g = 0,006 \text{ [Nm}^3\text{/m}^2\text{/h]}$ a diferentes tiempos de biolixiviación.

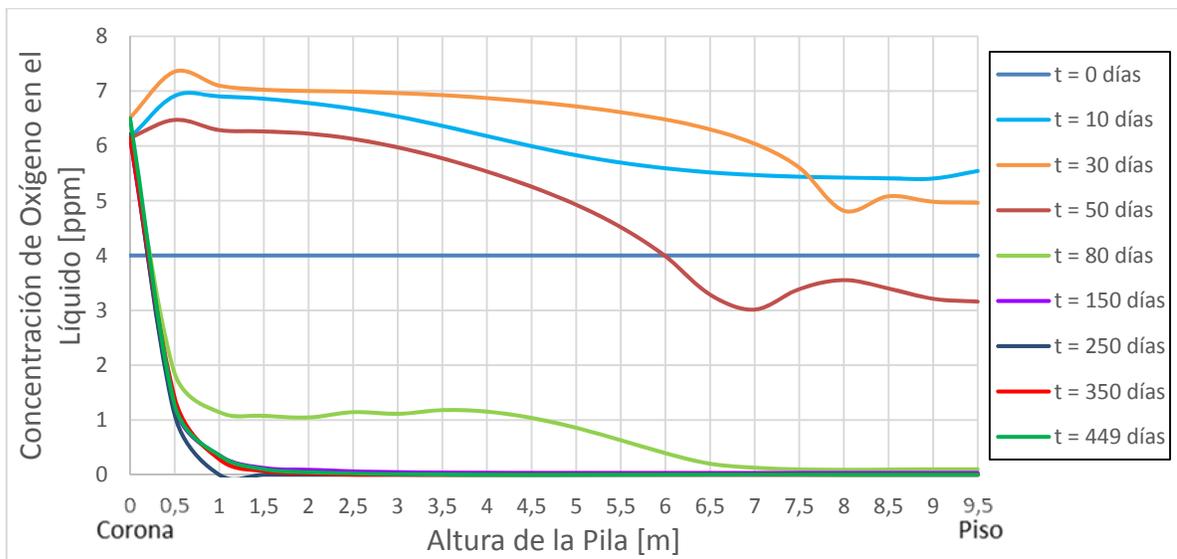


Gráfico 16. Concentración de oxígeno en solución en la pila BioSigma con convección natural a diferentes tiempos de biolixiviación.

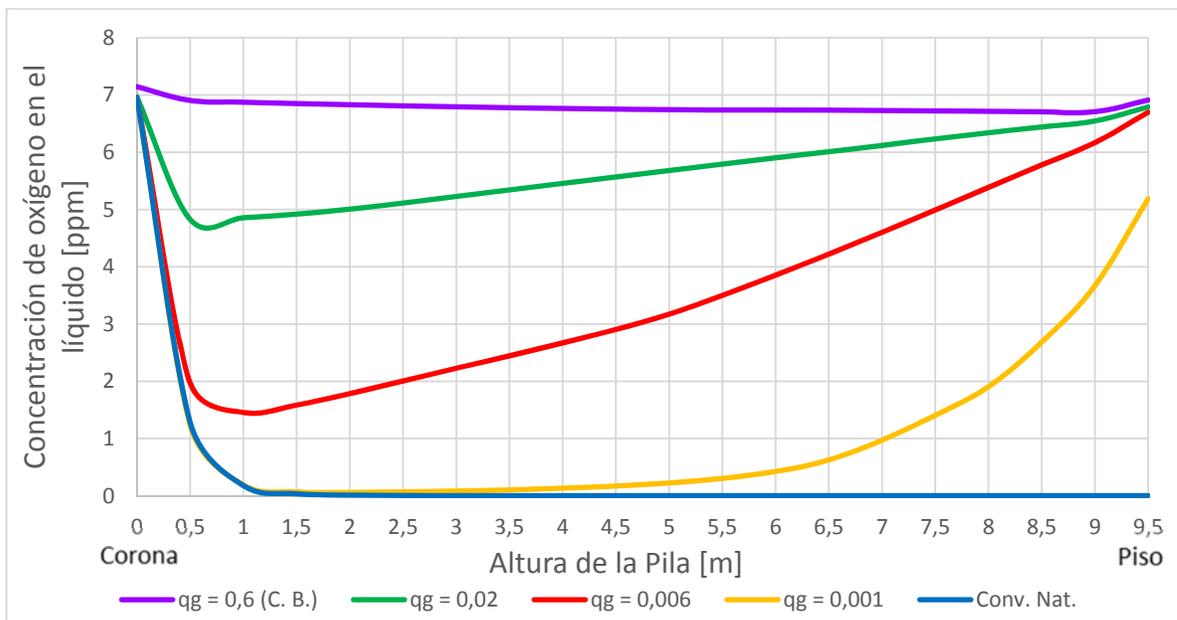
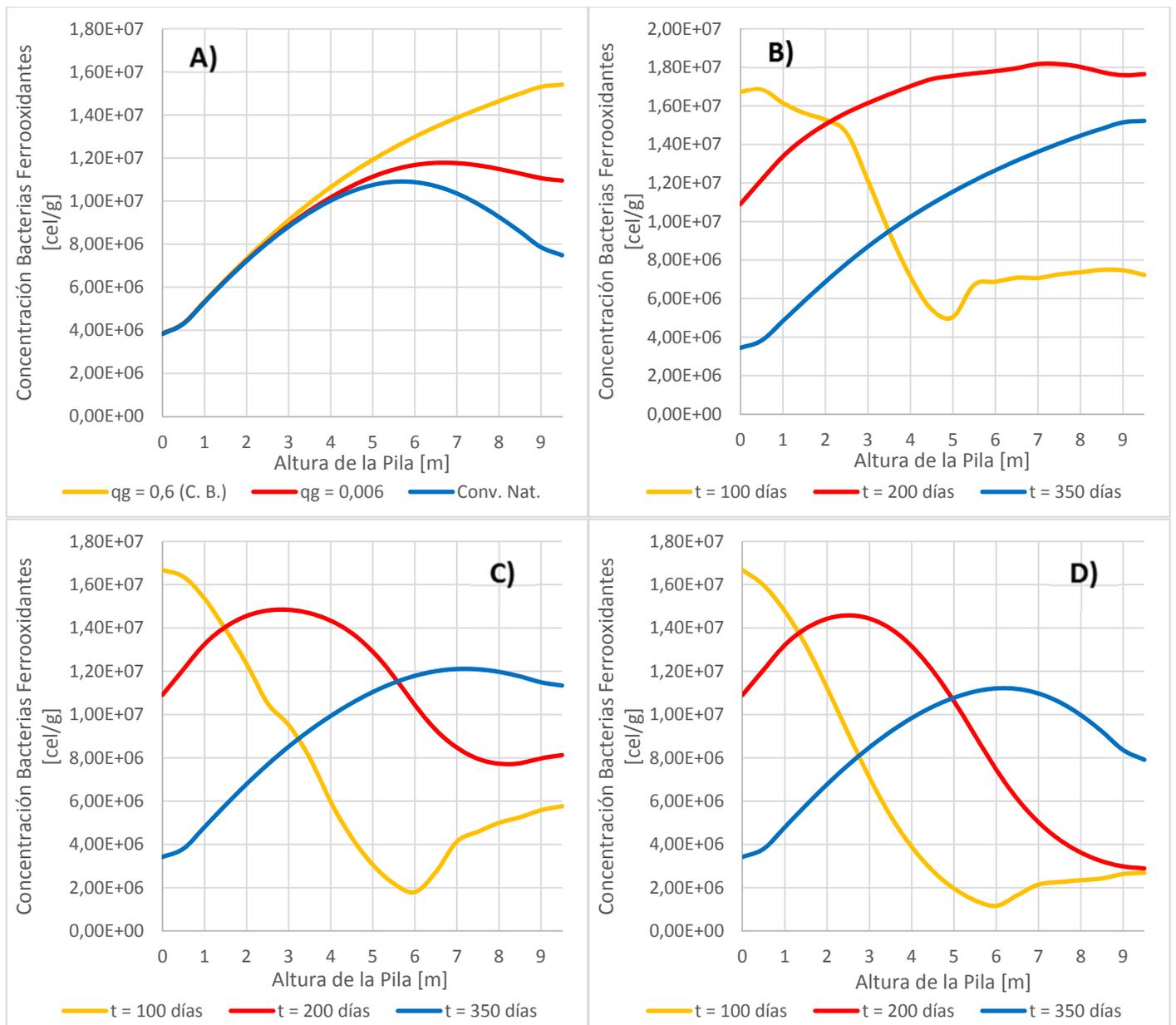


Gráfico 17. Promedio de concentración de oxígeno en solución (últimos 200 días) en la pila BioSigma a diferentes velocidades superficiales de inyección de aire.



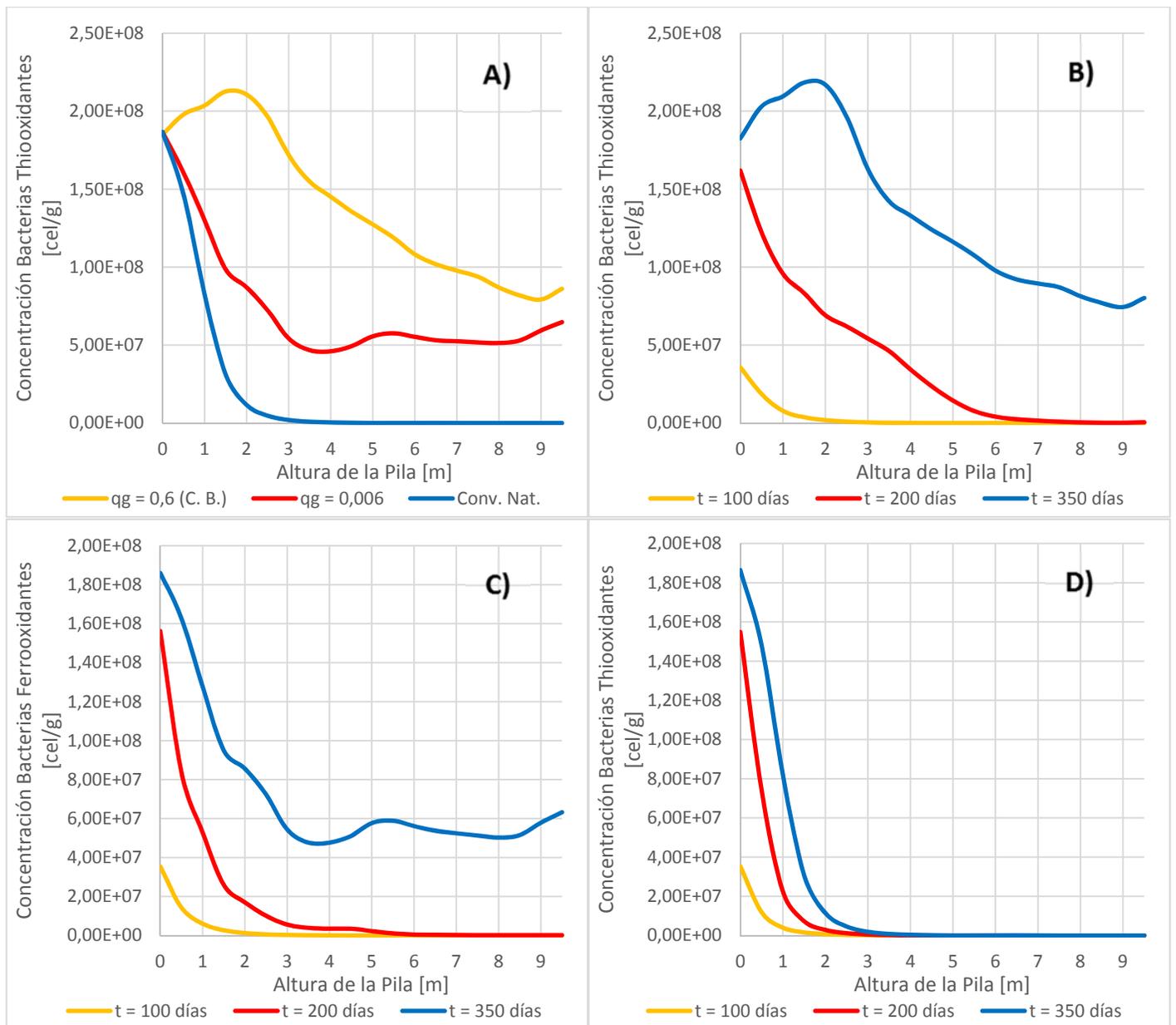


Gráfico 19. A) Promedio de concentración de bacterias thiooxidantes adheridas (últimos 200 días) en la pila BioSigma a diferentes velocidades superficiales de inyección de aire. B) Concentración de bacterias thiooxidantes adheridas en la pila BioSigma con $qg = 0,6$ [$\text{Nm}^3/\text{m}^2/\text{h}$] (C. B.) a diferentes tiempos de biolixiviación. C) Concentración de bacterias thiooxidantes adheridas en la pila BioSigma con $qg = 0,006$ [$\text{Nm}^3/\text{m}^2/\text{h}$] a diferentes tiempos de biolixiviación. D) Concentración de bacterias thiooxidantes adheridas en la pila BioSigma con convección natural a diferentes tiempos de biolixiviación. En los gráficos anteriores la altura 0 señala la corona.

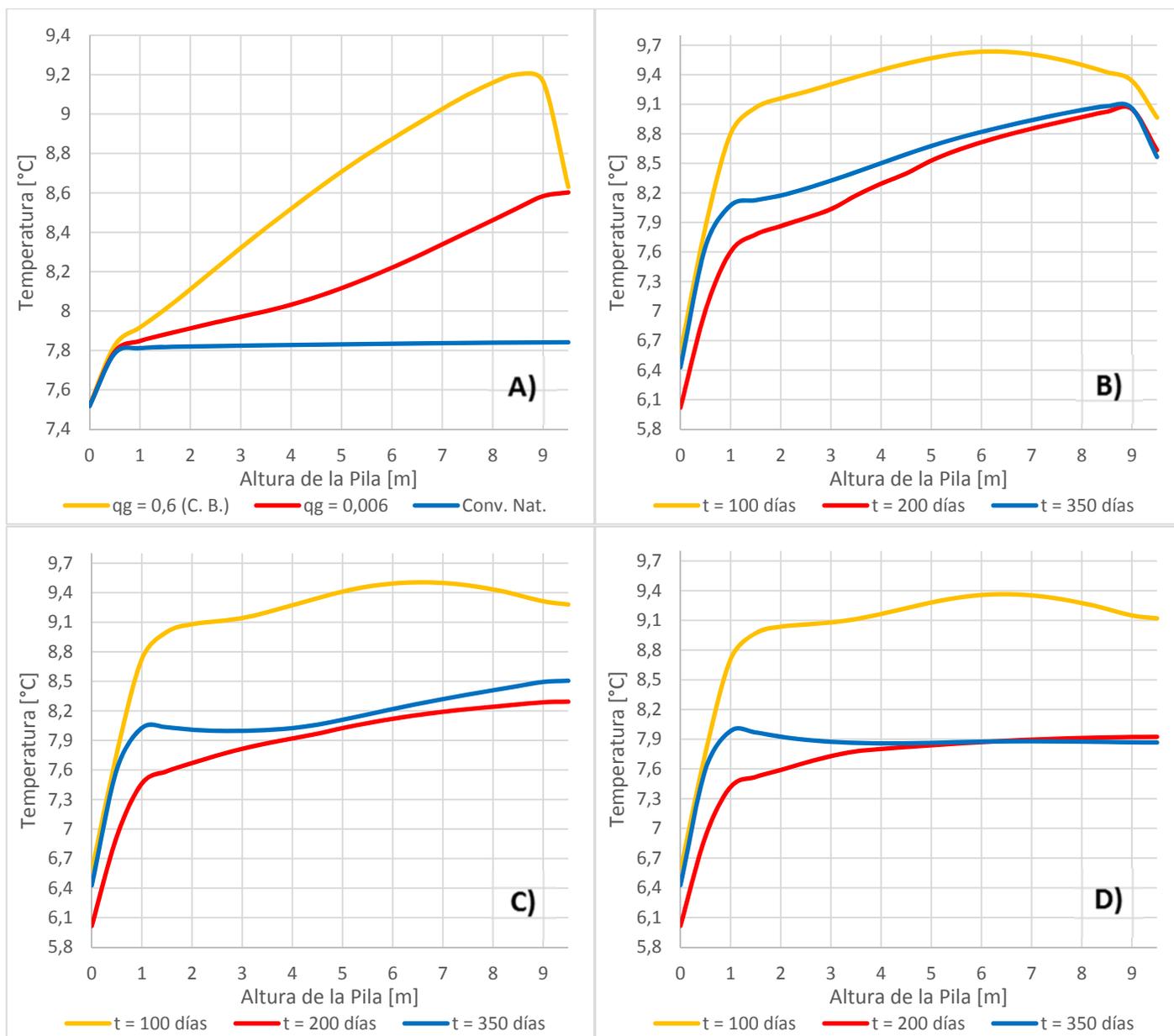


Gráfico 20. A) Promedio de temperatura (últimos 200 días) en la pila BioSigma a diferentes velocidades superficiales de inyección de aire. B) Temperatura en la pila BioSigma con $qg = 0,6$ [$\text{Nm}^3/\text{m}^2/\text{h}$] (C. B.) a diferentes tiempos de biolixiviación. C) Temperatura en la pila BioSigma con $qg = 0,006$ [$\text{Nm}^3/\text{m}^2/\text{h}$] a diferentes tiempos de biolixiviación. D) Temperatura en la pila BioSigma con convección natural a diferentes tiempos de biolixiviación. En los gráficos anteriores la altura 0 señala la corona.

En el Gráfico 11 la línea discontinua señala la simulación realizada a la pila de BioSigma sin la presencia de microorganismos. De este gráfico se puede observar que la tasa de aireación empleada en la condición base se encuentra casi en el límite de saturación de oxígeno en la solución. Esto coincide con el análisis desarrollado en la sección anterior. Según el modelo, BioSigma utiliza un flujo bastante elevado para airear la pila, obteniendo resultados poco eficientes considerando la razón costo/beneficio en la implementación del sistema de aireación. Cuando se compara el desempeño de la pila en el caso base con el caso abiótico, la diferencia de los valores de recuperación final es de más de 25 puntos. La curva de recuperación lograda en la lixiviación

abiótica permite apreciar el aporte de los microorganismos en la renovación del agente oxidante, en la despasivación de la superficie de las partículas lixiviadas y en la elevación de la temperatura en el sistema.

En los Gráficos 12 y 13 se puede apreciar que se obtiene una ganancia de más de 15 puntos en la recuperación, al comparar la inyección de aire del caso base con el escenario de convección natural. El detalle de la recuperación final obtenida, presentado por el Gráfico 13, permite cuantificar el grado de mejora en la recuperación con los incrementos del flujo de inyección de aire. Se puede ver que basta con tener un flujo de aire 100 veces menor que el caso base para obtener un desempeño aproximado del 90% en la recuperación, respecto al logrado por la pila de BioSigma en los 449 días de operación. Esto supone que pequeños incrementos en la tasa de aireación, cuando se tienen flujos muy pequeños o cuando la pila es aireada por convección natural, mejoran rotundamente el grado de extracción de cobre (para las características mineralógicas y las propiedades fluidodinámicas de la pila BioSigma, considerada en este análisis).

En el Gráfico 14, donde se analiza el caso base de aireación, el perfil de concentración de oxígeno en solución a lo largo de la pila se mantiene relativamente constante luego de los 150 días de operación. En el Gráfico 15, con un flujo de inyección 100 veces menor respecto al caso base, se puede visualizar un escenario de transición en la concentración de oxígeno: posterior al día 150, la concentración mínima (de aproximadamente 1 ppm) se alcanza entre los 0,5 y 2 metros de profundidad en la pila, que de acuerdo a los Gráficos 18-C) y 19-C), es donde se acumula más de la mitad de los microorganismos adheridos a las partículas. Para la condición de convección natural, la concentración de oxígeno en el líquido bajo los 2 metros de profundidad es casi cero. El Gráfico 17 resume la situación señalada para las diferentes velocidades superficiales de inyección de aire, considerando el promedio de los últimos 200 días de operación (para ese periodo se asume una normalización de la temperatura, reacciones mineral-solución y actividad bacteriana en la pila, generando pocas variaciones en los parámetros fundamentales del sistema). Como se puede observar, en convección natural y flujos muy bajos de inyección de aire, la concentración de oxígeno en solución desciende rápidamente hasta valores inferiores a 0,5 ppm para profundidades mayores a 1 m desde la corona, sin que se pueda reponer la concentración de oxígeno en las secciones inferiores de la pila. Pero con un flujo 600 veces menor al definido en el caso base ($q_g = 0,001$), el perfil de concentración promedio varía, produciéndose un aporte importante de oxígeno, desde el flujo de aire hacia el líquido, en el piso de la pila.

Con los gráficos 18 y 19 se puede desglosar el comportamiento de la actividad bacteriana con la variación del flujo de aire. En el caso base (referido en el apartado B) de los gráficos antes mencionados), la distribución de microorganismos en el espacio vertical es bastante homogénea. Como se señaló anteriormente, la mayor resistencia de las bacterias thiooxidantes en bajas temperaturas les permite prosperar en las secciones superiores de la pila; en el caso contrario, las bacterias ferrooxidantes, al preferir un entorno estable de temperatura, se concentran en las secciones inferiores del lecho en el tramo final de operación. La dinámica de crecimiento de población de las bacterias ferrooxidantes también puede estar asociada a una concentración limitada de ferroso en la posición superior de la pila para los primeros días de operación (el cual es consumido por los sulfuros) y a los parámetros de adherencia de los microorganismos (las bacterias consumidoras de ferroso tienen una menor capacidad de agarre a las partículas de mineral). Para todos los escenarios de aireación, se replica en general el mismo patrón de desarrollo poblacional de los microorganismos, con las bacterias thiooxidantes desarrollándose en la parte superior del lecho, y las ferrooxidantes concentrándose en las secciones inferiores. Con la disminución del flujo de aireación se reduce notablemente la población de microorganismos. Esto implica que la menor

disponibilidad de oxígeno en solución (aportado por el flujo de aire) restringe el potencial de crecimiento de las bacterias. Los microorganismos thiooxidantes son los más afectados con la disminución del caudal de aire, lo que se puede explicar por un mayor requerimiento de oxígeno para su crecimiento (por condiciones más idóneas de temperatura y disponibilidad de sustrato), aun cuando su consumo está limitado solo para las bacterias adheridas. Ambos tipos de microorganismos, cuando el oxígeno condiciona su crecimiento, modifican su perfil de concentración, incrementando su presencia cerca de la corona.

En el gráfico 20-A) se observa que, en promedio, a mayor flujo de aireación, mayor es la temperatura al interior de la pila, que se replica en una mayor tasa de reacción entre el mineral y la solución. Como se había comentado anteriormente, el flujo de aire con alta velocidad superficial, en promedio más frío que la solución de riego y la temperatura inicial de la pila, enfría la base de la pila (gráfico 20-B)). Se deduce de la información aportada por estos gráficos que una buena tasa de aireación no solo incrementa la disponibilidad de oxígeno en solución, sino que además mejora el balance de calor en la pila (incrementa la temperatura promedio del lecho), generando sinergias positivas en los procesos de biolixiviación que ocurren en el lecho.

9.2.2. Efecto de la Granulometría

En esta sección se modificó el porcentaje en peso de la fracción de tamaño de las partículas de mineral y el tipo de convección de la condición base de la pila BioSigma. Se consideraron los casos “granulometría -20%” y “granulometría +20%”. La granulometría -20% señala una granulometría más fina en la pila, donde se modifica el peso por fracción de tamaño: se resta un 20% del peso en el mayor intervalo de tamaño, y se adiciona un 20% a los dos menores intervalos granulométricos (10% a cada uno). La granulometría +20% define la modificación contraria, generando una granulometría más gruesa. En la Tabla 6 se detallan las modificaciones realizadas en la distribución granulométrica.

Tabla 6. Datos de granulometría modificados.

	Fracción de Tamaño			
	-1"+1/2"	-1/2"+1/4"	-1/4" +30#	-30# +100#
Diámetro Promedio (mm)	21,997	8,980	4,619	0,580
Peso por Fracción (%) Caso Base	53	13	9	25
Peso por Fracción (%) Gran. -20%	33	13	19	35
Peso por Fracción (%) Gran. +20%	63	23	9	5

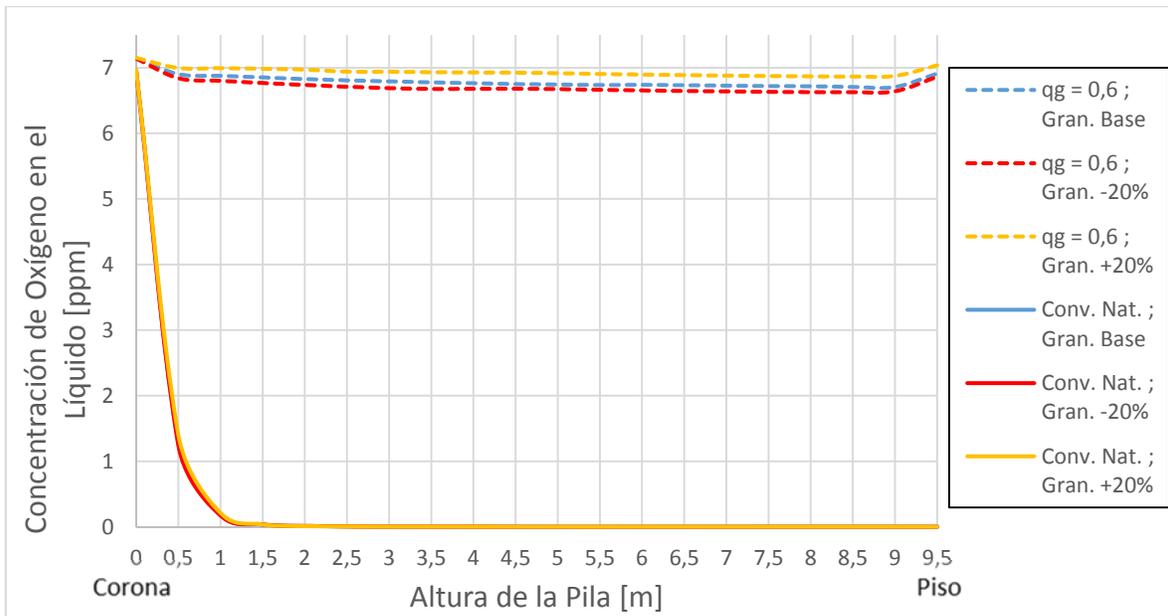


Gráfico 21. Promedio de concentración de oxígeno en solución (últimos 200 días) en la pila BioSigma a diferentes granulometrías del mineral y escenarios de convección.

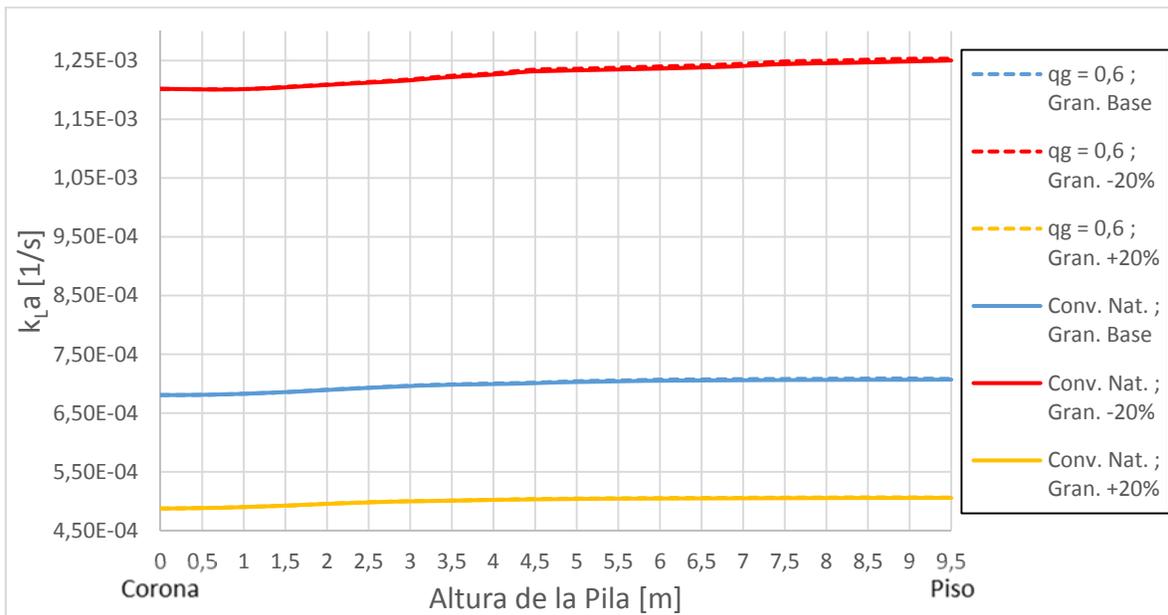


Gráfico 22. Promedio del k_{La} (últimos 200 días) en la pila BioSigma a diferentes granulometrías del mineral y escenarios de convección.

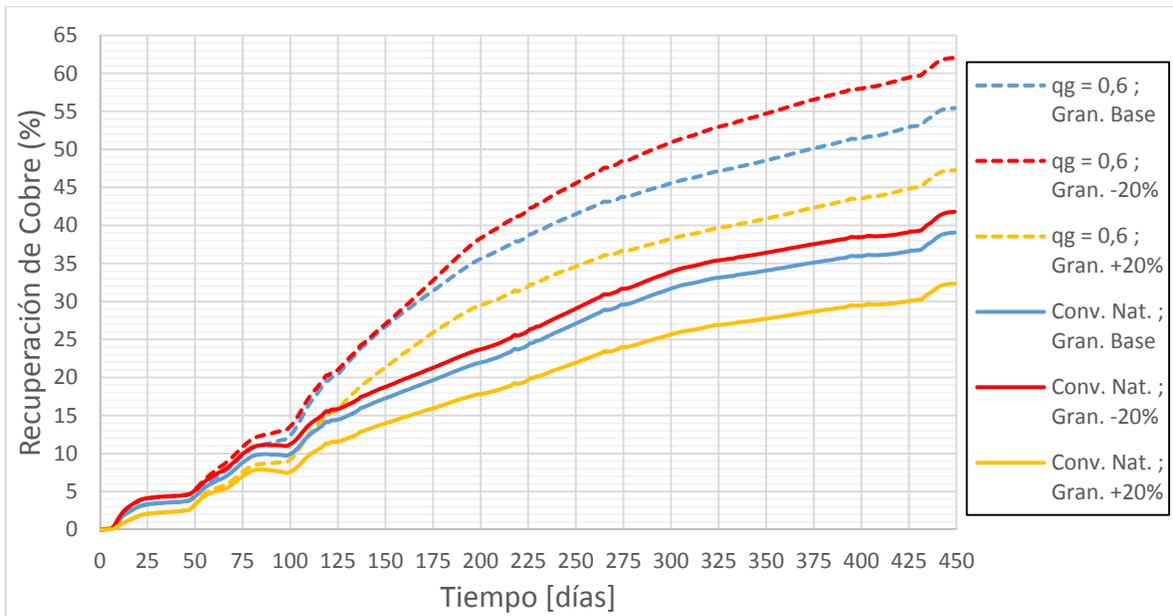


Gráfico 23. Recuperación de cobre en la pila BioSigma a diferentes granulometrías del mineral y escenarios de convección.

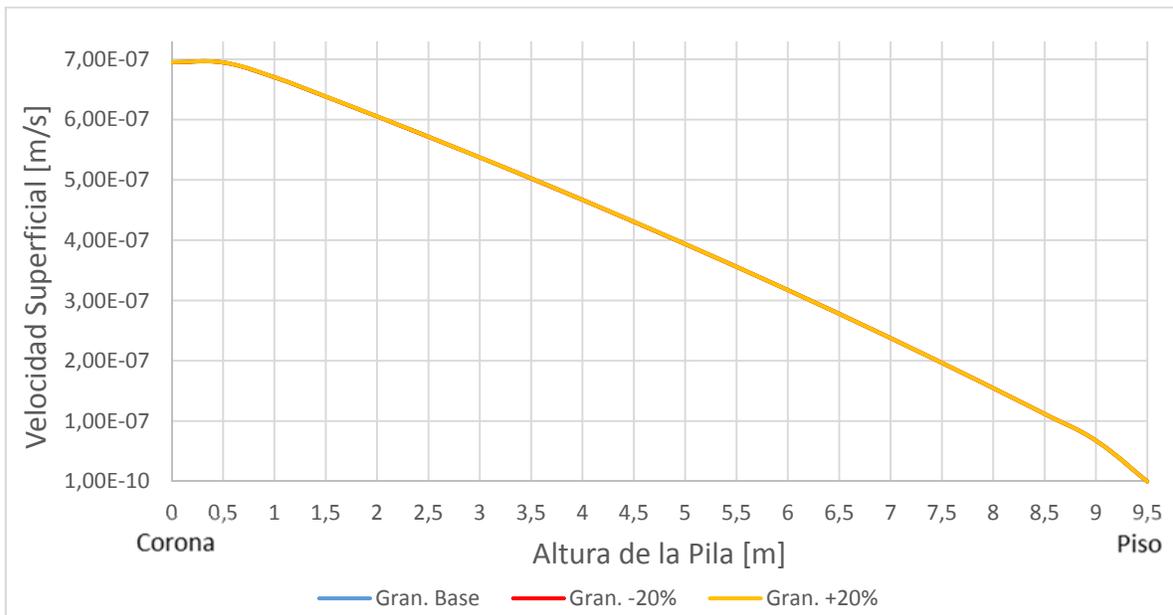


Gráfico 24. Promedio de las velocidades superficiales del flujo de aire (últimos 200 días) en la pila BioSigma con convección natural a diferentes granulometrías del mineral.

El cambio en la granulometría del mineral no genera una variación significativa en la concentración de oxígeno en el líquido. Del Gráfico 21 se puede apreciar que, para la velocidad superficial del caso base, la modificación de la distribución de tamaño de las partículas provoca una mayor alteración en la concentración, siendo la simulación con el caso granulometría +20% la con mayor disponibilidad de oxígeno. La menor cinética de lixiviación de las partículas de mineral más gruesas explicaría esta mayor concentración de oxígeno.

El coeficiente de transferencia se incrementa en casi el doble cuando se utiliza la granulometría -20%. La pérdida en la transferencia de oxígeno no es tan significativa, respecto al caso base, cuando se lixivia la pila con la granulometría del caso +20%. Según el Gráfico 22, en promedio, el coeficiente de transferencia es poco sensible respecto a los diferentes tipos de convección, para las diferentes distribuciones granulométricas analizadas.

La granulometría más fina tiene un mayor efecto en la recuperación cuando se considera la tasa de aireación del caso base. De esta forma, para una pila sin inyección de aire, si se disminuye fuertemente la granulometría, el potencial incremento de la recuperación sería relativamente menor en comparación al caso de implementar la inyección de aire en conjunto con una moderada disminución del tamaño promedio de partícula del material.

La velocidad superficial promedio del flujo de aire, en convección natural, es invariante a los cambios de granulometría en la pila.

9.2.3. Efecto de la Temperatura

Para el análisis de la temperatura se establecieron los casos “temperatura -5 °C” y “temperatura +5 °C”, los cuales reducen o incrementan la temperatura del riego y del aire, y la temperatura ambiente mínima del caso base en 5 grados Celsius, respectivamente.

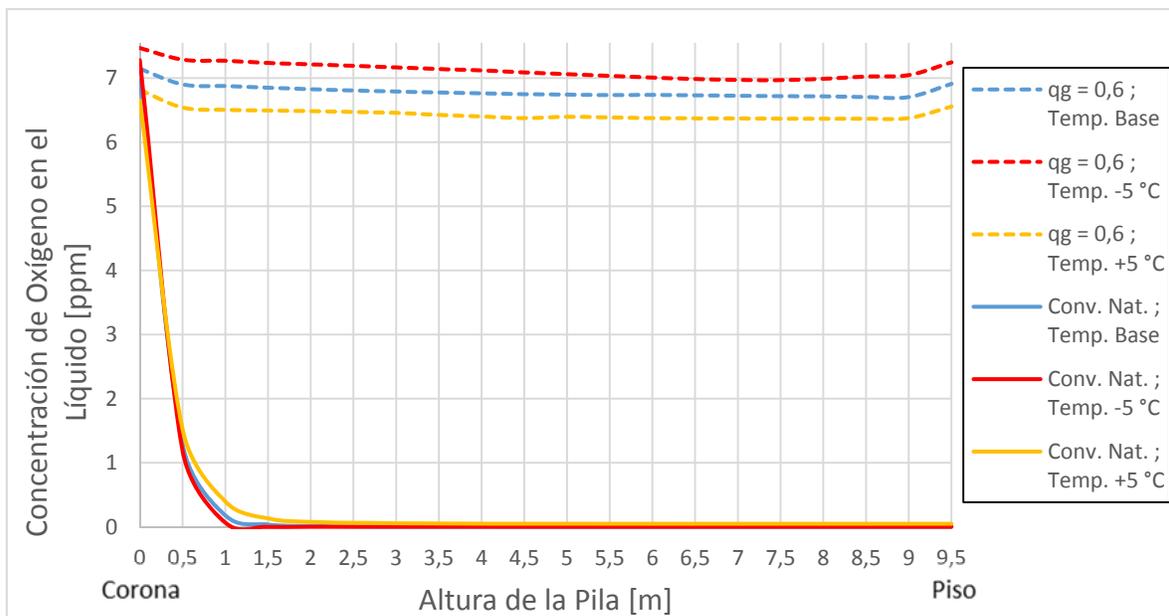


Gráfico 25. Promedio de concentración de oxígeno en solución (últimos 200 días) en la pila BioSigma a diferentes temperaturas y escenarios de convección.

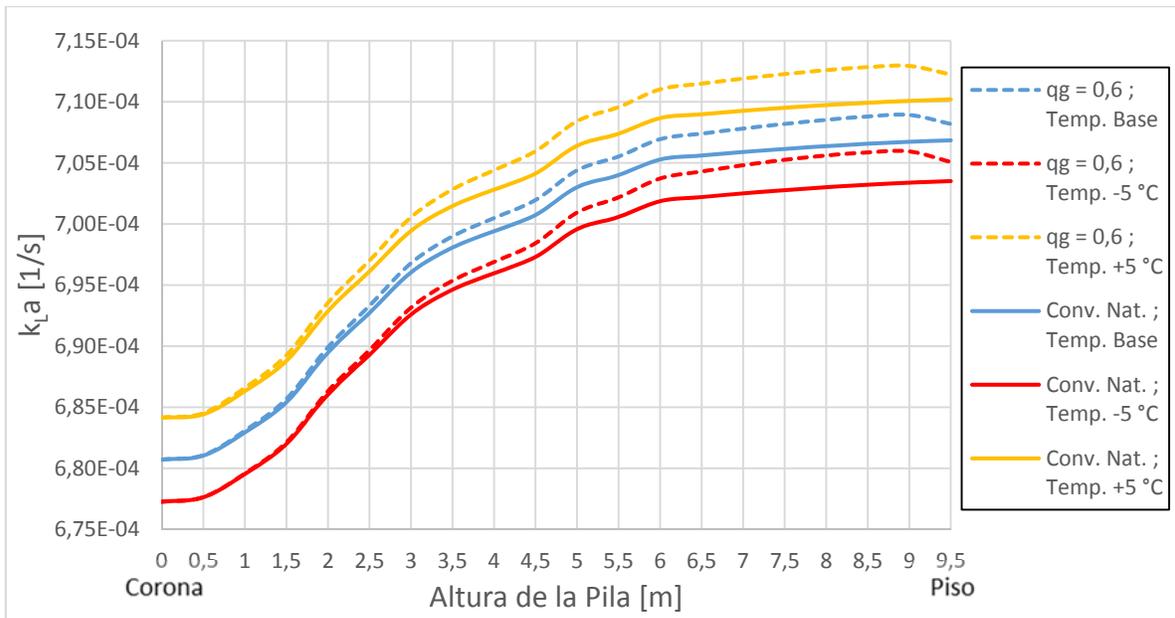


Gráfico 26. Promedio del k_{La} (últimos 200 días) en la pila BioSigma a diferentes temperaturas y escenarios de convección.

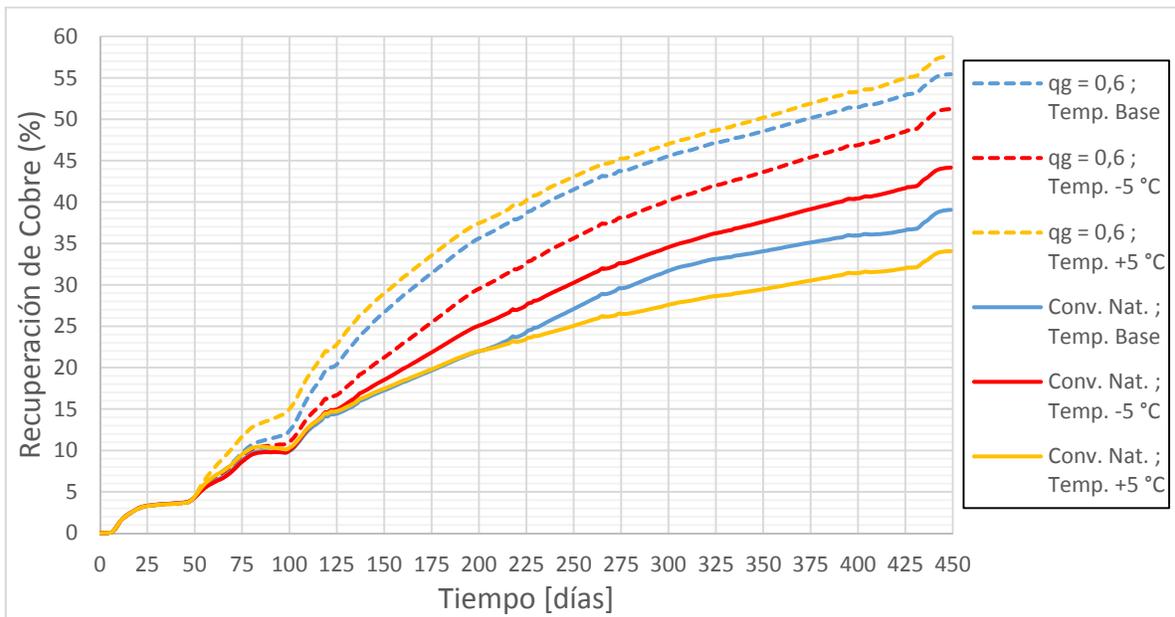


Gráfico 27. Recuperación de cobre en la pila BioSigma a diferentes temperaturas y escenarios de convección.

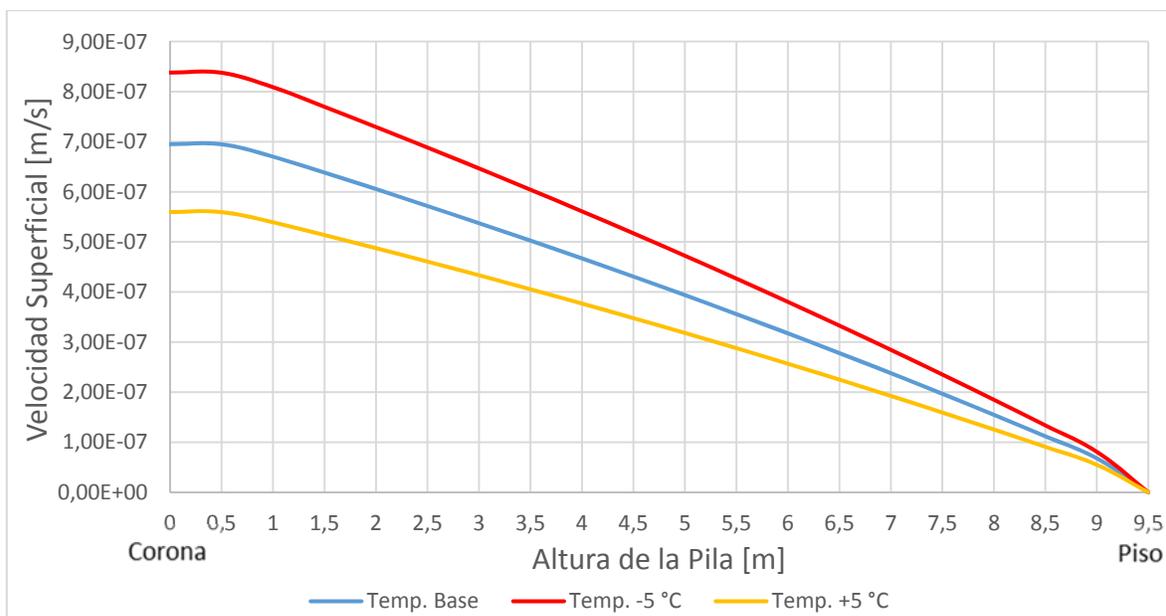


Gráfico 28. Promedio de las velocidades superficiales del flujo de aire (últimos 200 días) en la pila BioSigma con convección natural a diferentes temperaturas.

La menor concentración de oxígeno en el líquido se obtiene con las condiciones de menor temperatura y convección natural. Sin embargo, la menor temperatura en convección forzada logra la mayor concentración promedio de oxígeno en solución. Este resultado se puede entender al considerar la información expuesta por el Gráfico 26. En este gráfico se observa que el coeficiente de transferencia aumenta con la temperatura y con la tasa de aireación; además, al comparar los cambios con la temperatura, se tiene un incremento en la misma proporción para la inyección forzada y la convección natural. Luego, por una menor tasa de transferencia, aun cuando se presenta un consumo reducido del oxígeno (por una menor actividad bacteriana para bajas temperaturas), la concentración de oxígeno en solución, en el caso de convección natural, es menor. Para la condición de convección forzada, la concentración de saturación de oxígeno en solución limita los niveles de oxígeno disuelto, reduciendo su concentración a mayores temperaturas. Además se debe considerar que, de acuerdo a los Gráficos 18 y 19, la actividad bacteriana se incrementa con la inyección de aire a la pila, lo que intensifica el consumo de oxígeno a altas temperaturas.

La velocidad superficial en convección natural, informada por el Gráfico 28, aumenta con la disminución de temperatura. Al bajar la temperatura mínima del ambiente, aumenta la diferencia de temperatura promedio entre el interior de la pila y el exterior, lo que provoca un incremento en la fuerza de flotación, que a su vez genera un aumento en la velocidad superficial del gas. Si bien la disminución de temperatura del líquido y del aire afecta el balance de calor al interior de la pila, el calor de reacción permite mantener una temperatura promedio en el lecho lo suficientemente alta para garantizar un mayor gradiente de temperatura con el exterior, en comparación con el caso base y el caso +5 °C.

El efecto neto de la temperatura en la tasa de transferencia, actividad bacteriana, tasa de reacción entre el mineral y la solución, y flujo de aire en el escenario de convección natural, se visualiza en el Gráfico 27. Para el caso de convección forzada, se ve un incremento de la recuperación con el aumento de la temperatura. Para la convección natural, dado que a bajas temperaturas ambientales se favorece la ventilación al interior de la pila, la recuperación aumenta al disminuir la temperatura. Esto hace explícito que en convección natural, un aumento de la temperatura global en el sistema

no implica necesariamente una mayor recuperación, si no está acompañado de un incremento del flujo de aire por convección libre. Así, con las condiciones usadas para la pila BioSigma en convección natural, la mejora en la capacidad de transporte de oxígeno desde el aire hacia el líquido es más relevante que un incremento en la cinética de las reacciones de lixiviación y las condiciones de desarrollo de los microorganismos, provocado por un alza en la temperatura.

9.2.4. Efecto del Régimen de Riego y del Tamaño de Pila

Por la variabilidad de los datos reales de riego de la pila BioSigma, se construyen datos sintéticos para las condiciones de operación de una pila de biolixiviación. De esta forma se analiza el efecto de los ciclos de riego y reposo sin la interferencia del cambio constante de los valores de las concentraciones de las especies y del flujo de líquido.

Se definen 3 tamaños de pila para estos nuevos datos sintéticos. Considerando el área de riego original de la pila BioSigma, estas pilas tienen una altura de 6, 9 y 12 m. Las pilas sintéticas poseen nuevos datos de ley, mineralogía y granulometría, detallados en la Tabla 7.

Tabla 7. Ley, mineralogía y granulometría para las pilas sintéticas.

		Fracción de Tamaño			
		-2" +1"	-1" +1/4"	-1/4" +100#	-100# +140#
Diámetro Promedio (mm)		41,934	20,264	5,040	0,132
Peso por Fracción (%)		6,8	67,9	22	3,3
Ley de Cobre (%)		0,62	0,62	0,62	0,62
Contenido de Cobre Asociado por Especie	Óxido Cu (%)	4,3	4,3	4,3	4,3
	Calcosina (%)	4,5	4,5	4,5	4,5
	Covelina (%)	3,7	3,7	3,7	3,7
	Bornita (%)	51,8	51,8	51,8	51,8
	Calcopirita (%)	35,7	35,7	35,7	35,7
Fracción Liberada de Cobre por Especie	Óxido Cu (-)	1	1	1	1
	Calcosina (-)	1	1	1	1
	Covelina (-)	1	1	1	1
	Bornita (-)	1	1	1	1
	Calcopirita (-)	1	1	1	1

Las condiciones de operación de las pilas sintéticas se especifican en la Tabla 8. Para definir los ciclos de riego y reposo en estas pilas, se programan fases de biolixiviación. En la Tabla 9 se informa que la variación de los ciclos de riego y reposo se realiza en un lapso de 195 días. Se definen tres casos diferentes de ciclos de riego y reposo para la fase “segunda etapa de biolixiviación”: un día riego y dos días de reposo, un día riego y cuatro días de reposo, y riego continuo. Para estos tres casos, el resto de los días de operación (las cuatro fases restantes de biolixiviación) se mantienen constantes. Los parámetros informados en las Tablas 8 y 9 son fijos para los 365 días de operación. Para mantener constante la razón de lixiviación en las tres pilas, se utiliza una tasa de riego (que es fija en todo el periodo de operación, salvo los días de reposo estipulados en la segunda etapa de biolixiviación, en donde el flujo es cero) de 5,3, 8 y 10,7 L/h/m² en las pilas de 6, 9 y 12 m, respectivamente.

Todas las simulaciones de las pilas sintéticas consideraron el escenario de convección natural, y utilizaron los datos de entrada de las Tablas 1, 2 y 3.

Tabla 8. Condiciones de operación para las pilas sintéticas.

		Valor	Unidades
Tiempo de Operación		365	días
Tasa de Riego		-	L/h/m ²
Concentración de Especies en el Riego	Ácido	-	g/L
	Cobre	0,2	g/L
	Ferroso	1,5	g/L
	Férrico	1,5	g/L
	Amonio	0,1	g/L
	M. O. Ferrooxidantes	-	cel/mL
	M. O. Thiooxidantes	-	cel/mL
	Oxígeno	5	ppm
Temperatura del Riego		22,1	°C
Tasa de Aireación (q_g)		0	Nm ³ /m ² /h
Temperatura del Aire Inyectado		10	°C

Tabla 9. Concentración de ácido y de microorganismos en el riego para cada fase de biolixiviación

Fases de Biolixiviación	Tipo de Riego	Duración de la Fase (días)	Concentración de Ácido (g/L)	Concentración M. O. F. y T. (cel/mL)
Acondicionamiento Ácido	Continuo	26	63,7	1,00E+04
Inoculación	Continuo	26	10	2,00E+07
Primera Etapa Biolix.	Continuo	80	10	1,00E+05
Segunda Etapa Biolix.	Variable	195	10	1,00E+04
Lavado	Continuo	38	10	1,00E+04

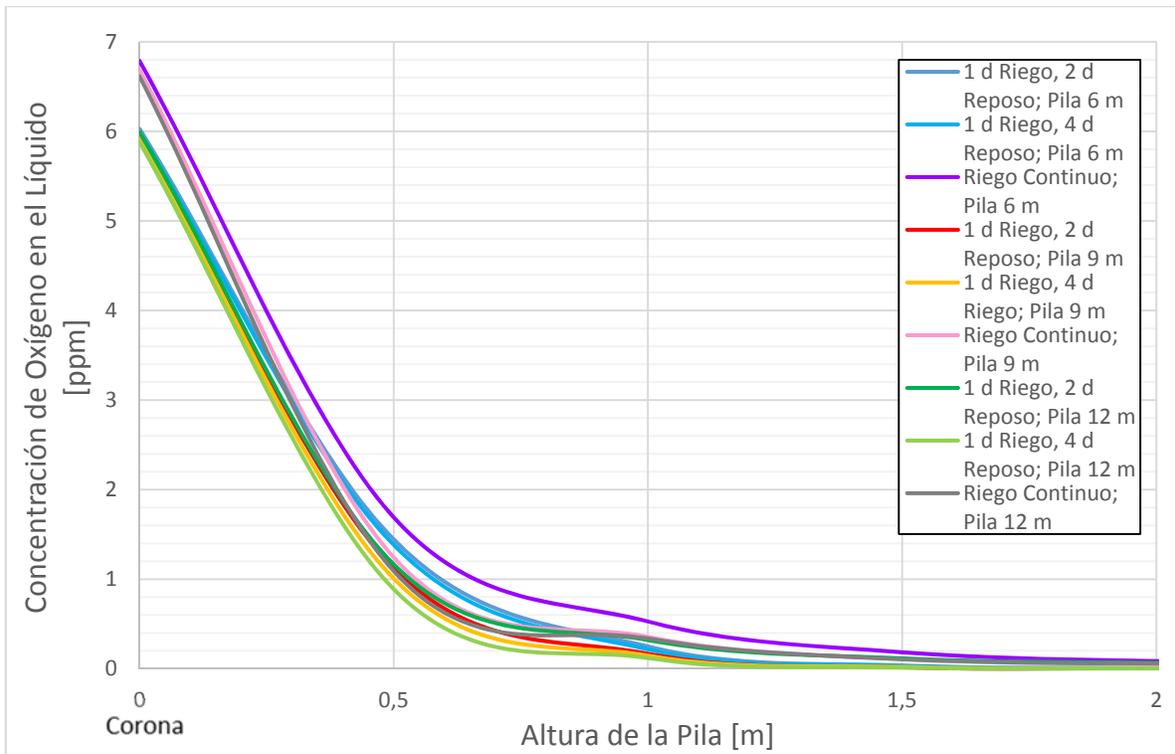


Gráfico 29. Promedio de concentración de oxígeno en solución (últimos 200 días) a diferentes ciclos de riego y reposo y tamaños de pila con convección natural.

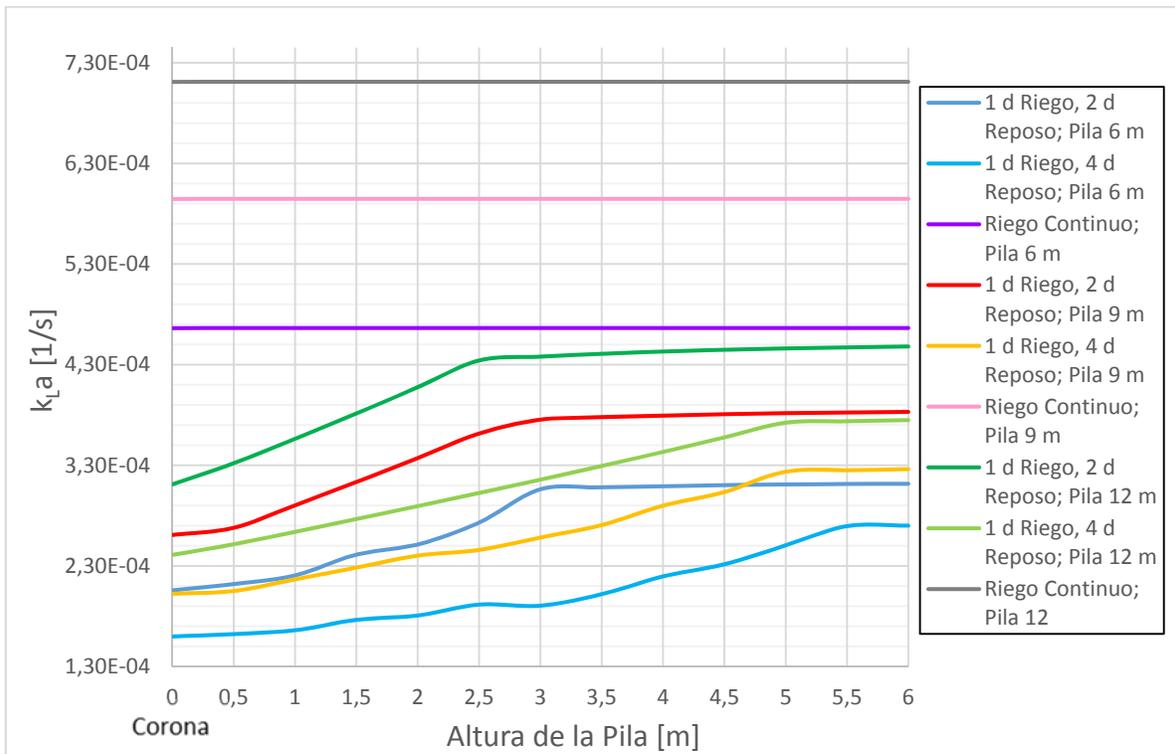


Gráfico 30. Promedio del k_{La} (últimos 200 días) a diferentes ciclos de riego y reposo y tamaños de pila con convección natural.

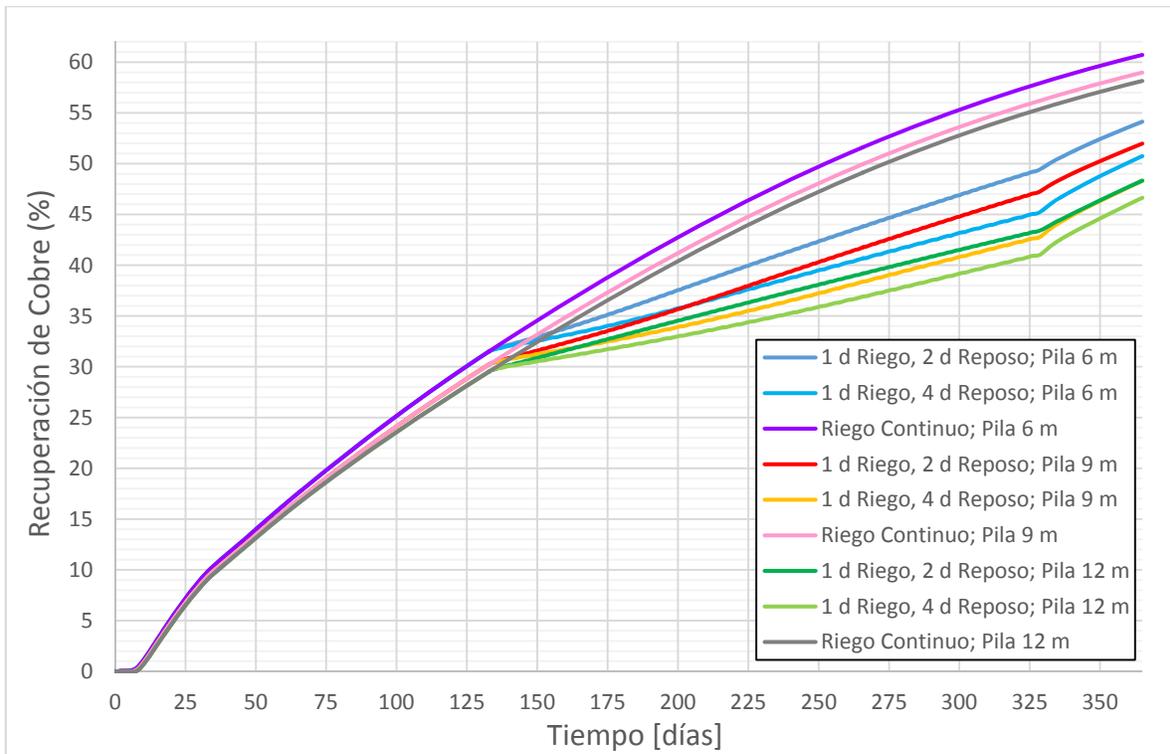


Gráfico 31. Recuperación de cobre a diferentes ciclos de riego y reposo y tamaños de pila con convección natural.

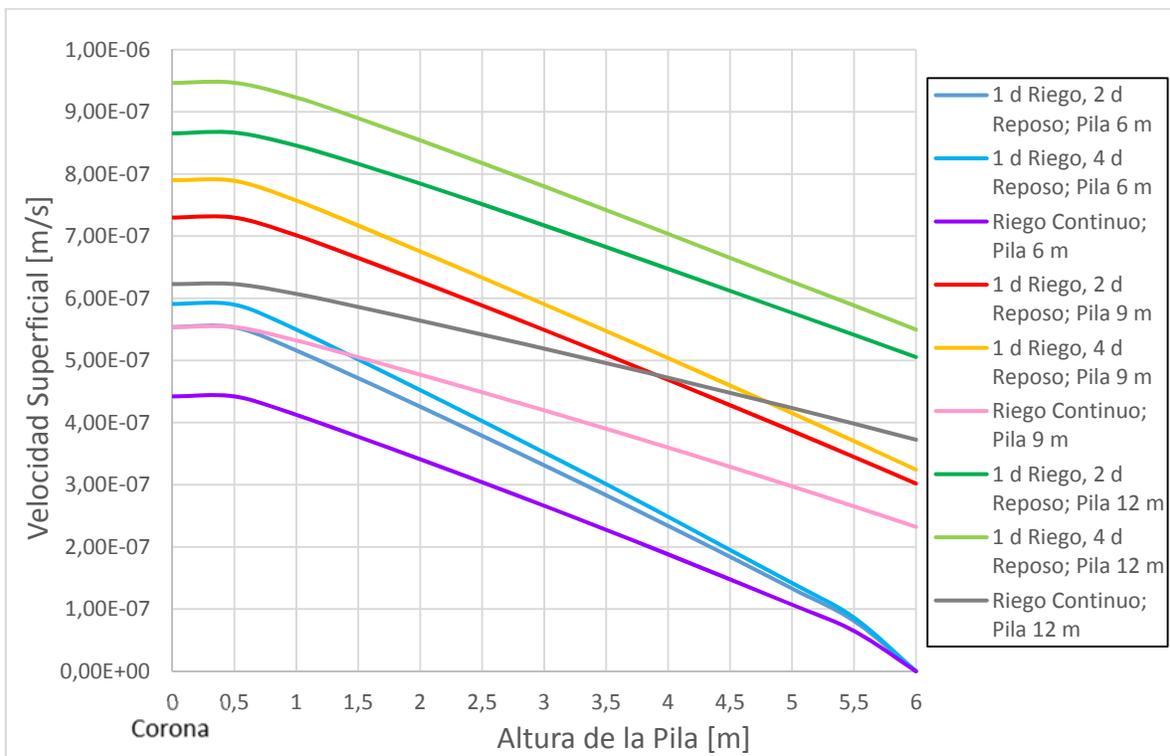


Gráfico 32. Promedio de las velocidades superficiales del flujo de aire (últimos 200 días) a diferentes ciclos de riego y reposo y tamaños de pila con convección natural.

El perfil de concentración de oxígeno en el líquido se mantiene relativamente constante para los diferentes casos de ciclo de riego y reposo y tamaños de pilas. En los primeros 0,5 m de profundidad, se aprecia una concentración levemente superior de oxígeno para los casos de riego continuo para los tres tamaños de pila.

Del Gráfico 32 se desprende que, en general, a mayor tamaño de la pila y menor tasa de riego promedio, mayor es la velocidad superficial del gas. A mayor altura de la pila, mayor es el efecto de aislante térmico del lecho. Al conservar mejor el calor generado por las reacciones del mineral, el gradiente de temperatura en el tiempo de operación es en promedio mayor para las pilas altas. Luego, las grandes diferencias de presión en las secciones superiores posibilita el desarrollo de elevadas velocidades superficiales cerca de la corona de las pilas de mayor altura. Para un menor contenido de humedad en la pila (es decir, para ciclos prolongados de reposo) la resistencia que opone el lecho no saturado al flujo de aire es menor (mayor espacio de circulación del gas entre los intersticios proporcionados por las partículas sólidas y la solución impregnada), lo que causa un mayor flujo de aireación.

Los mayores valores de coeficiente de transferencia se alcanzan con el riego continuo. Bajo este régimen de riego, el valor promedio del coeficiente se mantiene constante en todo el perfil de la pila, independiente del tamaño de ésta. Cuando existe una alteración en el flujo de líquido, el coeficiente de transferencia modifica su valor en la posición vertical. La reducción del coeficiente de transferencia está asociada a una caída del flujo de líquido que percola el lecho. La disminución más drástica del coeficiente lo experimenta la pila de 12 m. Esto indica que el control de la transferencia de oxígeno, mediante ciclos de riego y reposo, en pilas de gran altura no genera un incremento en el coeficiente global volumétrico de transferencia. Se puede establecer que el aumento del área interfacial de transferencia, al reducir el hold up de líquido, no compensa la pérdida de transporte advectivo de oxígeno provocado por la inexistencia de movimiento de la solución. Al combinar estos dos fenómenos, prevalece el último mencionado, lo que repercute en la disminución del coeficiente de transferencia. La tendencia observada del incremento del coeficiente con la profundidad, para los ciclos con reposo, puede vincularse con el aumento de la temperatura y la velocidad superficial de escurrimiento del líquido en las posiciones inferiores de la pila.

10. CONCLUSIONES

Se desarrolló el modelamiento fenomenológico de la fluidodinámica de la fase gaseosa y del balance de oxígeno en una dimensión al interior de una pila de biolixiviación. Estos modelos fueron integrados a un modelo general de biolixiviación, desarrollado por la empresa BioSigma, el cual considera la fluidodinámica de la fase líquida, reacciones entre mineral-solución de especies sulfuradas y oxidadas de cobre, crecimiento de microorganismos oxidantes de hierro y azufre, balance de calor, especiación y precipitación de especies en solución. Los modelos también pueden ser usados para simular columnas y botaderos.

Se empleó la ecuación general de conservación de masa para determinar la concentración de oxígeno en cada fase. Por la complejidad de esta ecuación, se utilizó el método operator splitting para resolverla numéricamente. El método operator splitting secciona la ecuación general de balance en las ecuaciones de advección y difusión/dispersión y las ecuaciones de transferencia y consumo de oxígeno. Estas ecuaciones se modelaron de forma individual, representando cada una los sub-procesos de transporte, consumo y aporte de oxígeno en la solución y en el aire.

Los modelos de advección y difusión/dispersión se discretizaron mediante el método numérico de volúmenes de control y se resolvieron utilizando el algoritmo de Thomas. En el modelo de advección y difusión de oxígeno en el aire se incorporó la condición de borde de transferencia de oxígeno desde la atmósfera hacia la corona de la pila, por medio del transporte convectivo generado por el viento. Para el balance de oxígeno en el líquido, se calculó la concentración de saturación de oxígeno en la solución, que limita la concentración de esta especie en función de la temperatura del lecho.

El modelo de determinación de la tasa de transferencia y consumo se resolvió a través del método de Newton-Raphson, considerando como datos de entrada los valores de las concentraciones determinados por los modelos de advección y difusión/dispersión. Este modelo actualiza la concentración, incorporando la transferencia de oxígeno entre ambas fases y el consumo de oxígeno por la actividad bacteriana. Para estimar la tasa de transferencia de oxígeno entre el líquido y el gas, se calculó el coeficiente global volumétrico de transferencia de oxígeno. El coeficiente se compone de dos parámetros, los cuales se estimaron de forma teórica, considerando relaciones geométricas y ecuaciones empíricas aportadas por la literatura. El valor del coeficiente depende de la temperatura, el hold up de líquido, la velocidad superficial de la solución y el tamaño promedio de partículas en el lecho.

El modelo de la fluidodinámica de la fase gaseosa determina los campos de velocidades y presiones del aire. La velocidad del aire es una variable que debe ser conocida para resolver la ecuación de conservación de oxígeno en el gas. Se usó la ecuación de conservación de movimiento para modelar el flujo de aire, la cual considera la resistencia que opone el medio poroso al flujo de aire (permeabilidad del lecho) y la gravedad del fluido. Se introdujo una modificación a la ecuación de conservación de movimiento para modelar el movimiento del fluido controlado por la convección natural. Esta ecuación también se discretizó por volúmenes de control, pero se resolvió numéricamente a través del algoritmo SIMPLER, en conjunto con el algoritmo de Thomas.

Los modelos descritos anteriormente se escribieron en módulos (programas externos, donde el código se escribe utilizando una estructura con características de función), los cuales son invocados por el programa principal del modelo general de biolixiviación. Adicionalmente se construyó un módulo de entorno gráfico computacional. Este último le otorga al modelo general de

biolixiviación una interfaz gráfica amigable, la cual facilita el desarrollo de las pruebas de simulación, ajuste del modelo y obtención de las variables de salida.

Por medio de simulaciones, se evaluó el impacto de la aireación natural y forzada en la recuperación de cobre, la concentración de oxígeno en solución, la temperatura y la actividad de los microorganismos biolixiviantes. También se estudió el efecto de la granulometría, la temperatura, los ciclos de riego y reposo y las dimensiones del lecho en la variación de la tasa de transferencia de oxígeno y el flujo de aire, en condiciones de convección natural, al interior de la pila.

El modelo se calibró utilizando datos experimentales de una pila operada por BioSigma. El ajuste de los parámetros teóricos permitió que el modelo obtuviera buenos resultados en las curvas de las variables de operación más relevantes, al compararlas con los datos reales (ver Gráficos 1, 2, 3, 4, 5 y 6).

De los resultados obtenidos en el caso base (condiciones de operación y datos de entrada de la pila BioSigma), las simulaciones revelaron que la tasa de riego es la variable que produce un mayor cambio en la temperatura al interior de la pila (principalmente en los primeros días de operación) y que el calor generado por las reacciones de lixiviación, fomentado por la actividad bacteriana, aporta un incremento marginal en la temperatura del sistema. Se encontró que el aumento de la población de microorganismos thiooxidantes eleva el promedio de temperatura al interior de la pila.

Según la información expuesta por los gráficos de simulación, en convección forzada, la temperatura es el factor preponderante en la baja tasa de crecimiento de los microorganismos ferrooxidantes y en la consecuente baja tasa de renovación de férrico en solución.

Los resultados sustentan la gran correlación que existe entre la concentración de bacterias ferrooxidantes adheridas y la concentración de férrico en solución. La regeneración del stock de férrico en cada sección de la pila, durante los primeros 200 días de operación, está limitado por la cinética de lixiviación de los minerales sulfurados y/o por una baja concentración de bacterias ferrooxidantes en las secciones inferiores de la pila.

Para la tasa de aireación definida en el caso base, la concentración de oxígeno no es un factor limitante en la cinética global de biolixiviación. En efecto, de acuerdo al modelo, BioSigma utiliza un flujo bastante elevado para airear la pila.

La dinámica generada por los cambios de temperatura en el exterior, respecto al interior del lecho, producen en la pila una suerte de ciclo de respiración, donde el transporte de oxígeno, dependiendo de las horas del día, puede aumentar o disminuir de forma importante, para flujos menores de inyección de aire o en convección natural. También se observó que el aporte de oxígeno realizado por la atmosfera está fuertemente influenciado por la temperatura.

Al utilizar diferentes flujos de inyección de aire en el caso base, el modelo reportó una ganancia de más de 15 puntos en la recuperación de cobre, al comparar la inyección de aire usada originalmente por BioSigma con el escenario de convección natural. El modelo también informa que al inyectar aire con una velocidad superficial sobre los $0,1 \text{ [Nm}^3/\text{m}^2/\text{h}]$ en la pila, la ganancia obtenida en la recuperación final es casi despreciable.

Al analizar el caso base de aireación, el perfil de concentración de oxígeno a lo largo de la pila se mantiene relativamente constante luego de los 150 días de operación. Con un flujo de inyección 100 veces menor respecto al caso base, se percibe un escenario de transición en la concentración de oxígeno, donde la concentración mínima (de aproximadamente 1 ppm) se alcanza entre los 0,5

y 2 metros de profundidad en la pila. Para la condición de convección natural, bajo los 2 metros de profundidad, la concentración de oxígeno en el líquido es casi cero. Las simulaciones en condiciones de convección natural y flujos muy bajos de inyección de aire, reproducen que la concentración de oxígeno en solución desciende rápidamente hasta valores inferiores a 0,5 ppm para profundidades mayores a 1 m desde la corona, sin que se pueda reponer la concentración de oxígeno en las secciones inferiores de la pila.

Para todos los escenarios de aireación, se replica en general el mismo patrón de desarrollo poblacional de los microorganismos, con las bacterias thiooxidantes desarrollándose en la parte superior del lecho, y las ferrooxidantes concentrándose en las secciones inferiores. Con la disminución del flujo de aireación se reduce notablemente la población de microorganismos. Lo anterior supone que el menor aporte de oxígeno realizado por el flujo de aire restringe el potencial de crecimiento de las bacterias. Los microorganismos thiooxidantes son los más afectados con la disminución del caudal de aire, dada las condiciones más idóneas de temperatura y disponibilidad de azufre en el lecho. Los microorganismos ferrooxidantes y thiooxidantes modifican su perfil de concentración cuando el oxígeno en el líquido está en bajas concentraciones, incrementando su población cerca de la corona.

El modelo sugiere que a mayor flujo de aireación, mayor es la temperatura al interior de la pila, lo que conduce a una mayor tasa de reacción entre el mineral y la solución. De esta manera, una buena tasa de aireación no solo incrementa la disponibilidad de oxígeno en solución, sino que además mejora el balance de calor en la pila, generando sinergias positivas en los procesos de biolixiviación que ocurren en el lecho.

El modelo señala que el cambio en la granulometría del mineral no genera una variación significativa en la concentración de oxígeno en el líquido. Por otro lado, el coeficiente de transferencia experimenta un fuerte incremento cuando se utiliza una menor granulometría. En promedio, el coeficiente de transferencia es poco sensible respecto a los diferentes tipos de convección, para las diferentes distribuciones granulométricas analizadas. La velocidad superficial promedio del flujo de aire, en convección natural, es invariante a los cambios de granulometría en la pila.

Las simulaciones efectuadas evidencian que la menor concentración de oxígeno en el líquido se obtiene con las condiciones de menor temperatura y convección natural. Sin embargo, la menor temperatura en convección forzada logra la mayor concentración promedio de oxígeno en solución. El modelo predice que, en el caso base, el coeficiente de transferencia aumenta con la temperatura y con la tasa de aireación. Luego para bajas temperaturas, por una menor tasa de transferencia, aun cuando se presenta un consumo reducido del oxígeno, la concentración de oxígeno en solución es menor en el caso de convección natural. Para la condición de convección forzada, el aumento de temperatura disminuye la concentración de saturación de oxígeno en solución y aumenta la actividad bacteriana, lo que reduce la cantidad de oxígeno en el líquido.

La velocidad superficial en convección natural aumenta con la disminución de temperatura ambiente, debido a que el gradiente de temperatura entre el interior de la pila y el exterior aumenta, aun cuando se disminuye la temperatura de la solución y del aire.

Al analizar la recuperación, para el caso base se tiene un incremento de este parámetro con el aumento de la temperatura. Para la convección natural, dado que a bajas temperaturas ambientales se favorece la ventilación al interior de la pila, la recuperación aumenta al disminuir la temperatura. El modelo infiere que en convección natural, un aumento de la temperatura global en el sistema no implica necesariamente una mayor recuperación, si no está acompañado de un incremento del flujo

de aire por convección libre. Así, con las condiciones usadas para la pila BioSigma en convección natural, la mejora en la capacidad de transporte de oxígeno desde el aire hacia el líquido es más relevante que un incremento en la cinética de las reacciones de lixiviación y las condiciones de desarrollo de los microorganismos, provocado por un alza en la temperatura.

El perfil de concentración de oxígeno en el líquido se mantiene relativamente constante para los diferentes casos de ciclo de riego y reposo y tamaños de pilas. En general, a mayor tamaño de la pila y menor tasa de riego promedio, mayor es la velocidad superficial del gas.

Cuando existe una alteración en el flujo de líquido, el coeficiente de transferencia modifica su valor en la posición vertical. En convección natural, la reducción del coeficiente de transferencia está asociada a una caída del flujo de líquido que percola el lecho. El modelo indica que al cortar el riego en pilas de gran altura, el aumento del área interfacial de transferencia, generado por la disminución de la humedad en el lecho, no compensa la pérdida de transporte advectivo de oxígeno provocado por la ausencia de movimiento de la solución, produciéndose una disminución neta del coeficiente global volumétrico de transferencia. Sin embargo, por la mayor aireación, en las pilas de mayor altura existe una mejor transferencia de oxígeno.

Las simulaciones arrojaron resultados que son coherentes con lo esperado y observado experimentalmente ante determinados cambios de variables y condiciones de operación. Lo anterior corrobora una buena reproductibilidad del modelo con la realidad.

La implementación de los modelos desarrollados repercutió en un aumento de la capacidad predictiva del modelo general de BioSigma, incrementando la utilidad de estos programas como herramienta primordial en el diseño y planificación de las operaciones de biolixiviación en minerales de cobre.

11. NOMENCLATURA

δ	Espesor de la capa de líquido que recubre las partículas en el lecho	[m]
Δt	Paso en el tiempo	[d]
Δz	Paso en el espacio (distancia entre nodos)	[m]
ε_i	Fracción volumétrica de la fase i en el lecho	[m ³ fase i / m ³ lecho]
$\varepsilon_{l,r}$	Contenido volumétrico de líquido residual	[m ³ líquido / m ³ lecho]
$\varepsilon_{l,sat}$	Contenido volumétrico de líquido en el lecho saturado de líquido	[m ³ líquido / m ³ lecho]
μ_i	Velocidad específica de crecimiento del microorganismo i	[1/d]
μ_i	Viscosidad dinámica de la fase i	[kg/(m·s)]
$\mu_{max,i}$	Velocidad específica máxima de crecimiento del microorganismo i	[1/d]
ρ_i	Densidad de la fase/especie i	[kg/m ³]
ρ_{min}	Densidad del mineral	[kg/m ³]
σ	Coefficiente estequiométrico	-
τ	Tortuosidad de los canales de aire	-
ϕ	Humedad relativa del aire	-
a	Área interfacial entre las fases líquida y gaseosa por unidad de volumen	[m ² /m ³]
A_{ef}	Área efectiva de circulación o escurrimiento del fluido	[m ²]
A_{esp}	Área específica del lecho	[m ² / m ³ lecho]
A_r	Área de riego	[m ²]
B_z	Componente de fuerza de cuerpo en la dirección vertical	[kg/(m ² ·s ²)]
d_c	Diámetro del canal de aire	[m]
d_p	Diámetro promedio de las partículas de mineral que componen el lecho	[m]
$d_{p,max}$	Diámetro promedio de partículas del intervalo granulométrico de mayor tamaño	[m]
D_e	Coefficiente de difusión efectiva	[m ² /d]
D_H	Coefficiente de dispersión hidrodinámica	[m ² /d]
E_A	Energía de activación	[J/mol]
f_a	Factor de corrección, aplicado para considerar el número efectivo de partículas que presentan un recubrimiento completo por el film líquido (representa el efecto tamaño del aglomerado)	-
$F_i(T)$	Factor de corrección de la velocidad específica máxima de crecimiento del microorganismo i en función de la temperatura	-
$[Fe^{2+}]_l$	Concentración de ferroso en la fase líquida	[kg/m ³]
g	Vector constante de aceleración gravitacional	[m/s ²]
h_{O_2}	Coefficiente de transferencia convectiva de oxígeno para un fluido turbulento, paralelo a una interfase plana	[m/d]

H_e	Constante de Henry para el oxígeno disuelto en el líquido	-
j_D	Factor adimensional de grupo de transferencia de masa	-
J_i	Flujo de difusión en la fase i	[kg/(m ² ·d)]
k	Constante cinética de reacción química	[m/d]
k_0	Constante cinética intrínseca de reacción química	[m/d]
k_{int}	Permeabilidad intrínseca del lecho	[m ²]
k_L	Coefficiente global de transferencia de oxígeno entre las fases líquida y gaseosa	[m/s]
$k_L a$	Coefficiente global volumétrico de transferencia de oxígeno entre las fases líquida y gaseosa	[1/s]
$k_{r,g}$	Permeabilidad relativa gaseosa del lecho	-
K	Permeabilidad gaseosa efectiva del lecho	[m ²]
K_{Fe}	Constante de saturación respecto a la concentración de ferroso	[kg/m ³]
$K_{O_2,i}$	Constante de saturación respecto a la concentración de oxígeno para el microorganismo i	[kg/m ³]
K_S	Constante de saturación respecto a la concentración de azufre	[kg/m ³]
L_c	Longitud de los canales de aire	[m]
L_{pila}	Largo de la corona de la pila	[m]
m	Orden de reacción	-
ms_f	Coefficiente de mantención de ferroxidantes en ferroso	[kg Fe / (cel·d)]
ms_t	Coefficiente de mantención de thiooxidantes en azufre	[kg S / (cel·d)]
M	Peso molecular	[g/mol]
N_c	Número de canales de aire por unidad de volumen de lecho	[1 / m ³ lecho]
N_p	Número de partículas de mineral por unidad de volumen de lecho	[1 / m ³ lecho]
$N_{p,max}$	Número de partículas del intervalo granulométrico de mayor tamaño en cada sección de lecho	[1 / m ³ lecho]
$[O_2]_{g,\infty}$	Concentración de oxígeno en la atmósfera (concentración invariante para una cierta distancia sobre la corona de la pila)	[kg/m ³]
$[O_2]_i$	Concentración de oxígeno en la fase i	[kg/m ³]
$[O_2]_l^{max}$	Concentración de saturación del oxígeno disuelto en agua destilada	[kg/m ³]
P	Presión total del sistema	[atm]
P_i	Presión parcial de la especie i	[atm]
$P_{H_2O}^{sat}$	Presión de saturación del vapor de agua (presión de vapor en equilibrio)	[atm]
Pe	Número de Péclet	-
Por	Porosidad del lecho seco	[m ³ vacío / m ³ lecho]
PA	Peso atómico	[g/mol]
q_i	Velocidad superficial (velocidad de Darcy) del fluido de fase i	[m/d]
Q_i	Flujo del fluido de fase i	[m ³ /d]
R	Constante de los gases ideales	[J/(K·mol)]

R_c	Radio de los canales de aire	[m]
R_h	Radio hidráulico	[m]
Re	Número de Reynolds	-
$[S^0]_s$	Concentración de azufre elemental extraído del mineral	[kg azufre / m ³ mineral]
S_{ef}	Saturación efectiva del líquido	-
Sc	Número de Schmidt	-
Sh	Número de Sherwood	-
t	Tiempo	[d]
T	Temperatura del sistema	[K]
T_{amb}	Temperatura ambiente (sobre la corona de la pila)	[K]
v_i	Velocidad intersticial del fluido de fase i	[m/d]
$\overline{v}_{g,c}$	Velocidad promedio del flujo de gas al interior de los canales de aire	[m/s]
$v_{g,\xi}$	Velocidad mínima de transición del flujo de aire	[m/s]
$\overline{v}_{g,\infty}$	Velocidad promedio del aire / viento	[m/s]
$X_{a,i}$	Concentración del microorganismo i adherido a la superficie de las partículas	[cel/m ²]
$X_{l,f}$	Concentración de ferroxidantes en la fase líquida	[cel/m ³]
Y_{Fe}	Rendimiento de ferroxidantes en ferroso	[cel / kg Fe]
Y_S	Rendimiento de thiooxidantes en azufre	[cel / kg S]
z	Posición en el eje vertical	[m]

11.1. Subíndices

Ent	Valor de la variable evaluada en la entrada del sistema
f	Microorganismos ferroxidantes
g	Fase gaseosa
l	Fase líquida
s	Fase sólida
t	Microorganismos thiooxidantes

12. BIBLIOGRAFÍA

- [1] PETERSEN, J. y DIXON, D. G. 2007. Principles, mechanisms and dynamics of chalcocite heap bioleaching. En: RAWLINGS, D. E. y JOHNSON, B. D. (Eds.). *Biomining*. Berlin, Springer-Verlag. pp. 193-218.
- [2] BRIERLEY, C. L. 1997. Mining biotechnology: Research to commercial development and beyond. En: RAWLINGS, D. E. (Eds.). *Biomining: Theory, microbes and industrial processes*. Berlin, Springer-Verlag. pp. 3-17.
- [3] OLSON, G. J., BRIERLEY, J. A. y BRIERLEY, C. L. 2003. Bioleaching review part B: Progress in bioleaching: applications of microbial processes by the minerals industries. *Appl. Microbiology Biotechnology* 63:249-257.
- [4] SCHNELL, H. A. 1997. Bioleaching of copper. En: RAWLINGS, D. E. (Eds.). *Biomining: Theory, microbes and industrial processes*. Berlin, Springer-Verlag. pp. 21-43.
- [5] RAWLINGS, D. E. 2002. Heavy metal mining using microbes. *Annual Review of Microbiology* 56:65-91.
- [6] OGBONNA, N. 2006. Mathematical modelling of agglomerate scale phenomena in heap bioleaching. Thesis presented for the degree of Masters in Applied Science. Cape Town, University of Cape Town, Department of Chemical Engineering.
- [7] CORRANS, I. J., HARRIS, B. y RALPH, B. J. 1972. Bacterial leaching: an introduction to its application and theory and a study on its mechanism of operation. *J. S. Afr. Inst. Mining Metallurgy* 72:221-230.
- [8] LEAHY, M. J., DAVIDSON, M. R. y SCHWARZ, M. P. 2005. A model for heap bioleaching of chalcocite with heat balance: Bacterial temperature dependence. *Minerals Engineering* 18:1239-1252.
- [9] DEMERGASSO, C., CASTILLO, D., GALLEGUILLOS, P., ESCUDERO, L. O. y CASAMAYOR, E. 2003. Genetic identification and temporal dynamics of microorganisms from a demonstrative dump of a marginal copper sulfide bioleaching project. En: RIVEROS, P. A., DIXON, D. G., DREISINGER, D. B. y MENACHO, J. (Eds.). *Hydrometallurgy of copper, proceedings of copper 2003*. Montreal, CIM-MetSoc. Vol. 6.
- [10] MERUANE, G. y VARGAS, T. 2003. Bacterial oxidation of ferrous iron by *Acidithiobacillus ferrooxidans* in the pH range 2.5-7.0. *Hydrometallurgy* 71:149-158.
- [11] ROHWERDER, T., GEHRKE, T., KINZLER, K. y SAND, W. 2003. Bioleaching review part A: Progress in bioleaching: fundamentals and mechanisms of bacterial metal sulphide oxidation. *Appl. Microbiology Biotechnology* 63:239-248.
- [12] OJUMU, T. V., PETERSEN, J., SEARBY, G. E. y HANSFORD, G. S. 2006. A review of rate equations proposed for microbial ferrous-iron oxidation with a view to application to heap bioleaching. *Hydrometallurgy* 83:21-28.
- [13] DIXON, D. G. y PETERSEN, J. 2003. Comprehensive modelling study of chalcocite column and heap bioleaching. En: RIVEROS, P. A., DIXON, D. G., DREISINGER, D. B. y MENACHO, J. (Eds.). *Hydrometallurgy of copper, proceedings of copper 2003*. Montreal, CIM-MetSoc. pp. 493-516.

- [14] DIXON, D. G. 2003. Heap leach modelling - the current state of the art. En: YOUNG, C. A., ALFANTAZI, A. M., ANDERSON, C. G., DREISINGER, D. B., HARRIS, B. y JAMES, A. (Eds.). Hydrometallurgy 2003, Vol. 1. Pennsylvania, TMS. pp. 289-314.
- [15] BERRY, V. y MURR, L. 1978. Direct observations of bacteria and quantitative studies of their catalytic role in the leaching of low-grade, copper-bearing waste. En: MURR, L., TORMA, A. y BRIERLEY, J. (Eds.). Metallurgical applications of bacterial leaching and related microbiological phenomena. New York, Academic Press. pp. 103-136.
- [16] PETERSEN, J. y DIXON, D. G. 2006. Modelling and optimization of heap bioleach processes. En: RAWLINGS, D. E. y JOHNSON, D. B. (Eds.). Biomining. Berlin, Springer-Verlag. pp. 153-175.
- [17] BOUFFARD, S. C. 2003. Understanding the heap biooxidation of sulfidic refractory gold ores. Thesis submitted in partial fulfilment of the requirements for the degree of Doctor of Philosophy. British Columbia, The University of British Columbia, Department of Metals and Materials Engineering.
- [18] NEUBURG, H. J., CASTILLO, J. A., HERRERA, M.N., WIERTZ, J.V., VARGAS, T. y BADILLA-OHLBAUM, R. 1991. A model for the bacterial leaching of copper sulfide ores in pilot-scale columns. *Int. J. Min. Proc.* 31:247-264.
- [19] RAULD, J., MONTEALEGRE, R., SCHMIDT, P. y DOMIC, E. 1986. T.L. leaching process: a phenomenological model for oxide copper ores treatment. En: SME-AIME annual meeting. Louisiana, New Orleans.
- [20] JO, M., BUSTOS, S., ESPEJO, R., RUIZ, O., ROJAS, J. y MONTEALEGRE, R. 1991. Bacterial thin layer leaching of copper sulphide ores. En: COPPER '91. Canada, Ottawa.
- [21] BUSTOS, S., ESPEJO, R., RUIZ, O., ROJAS, J., MONTEALEGRE, R., NEUBURG, H., ARAYA, C., YAÑEZ, H., TAPIA, R. y RAULD, J. 1993. Application of the bacterial thin layer leaching process to Quebrada Blanca ores. En: THE MINERALS, metals & materials society, 1993. Pennsylvania, Warrendale, TMS. pp. 1-14.
- [22] BUSTOS, S., ESPEJO, R., RUIZ, O., ROJAS, J., MONTEALEGRE, R., NEUBURG, H., ARAYA, C., YAÑEZ, H., REYES, R., RAULD, J., JO, M., ARRIAGADA, F. y D'AMICO, J. 1995. Copper sulphide hydrometallurgy and the thin layer bacterial leaching technology of SMP Tecnología S.A. En: COPPER '95. Chile, Santiago.
- [23] CASAS, J. M., MARTINEZ, J., MORENO, L. y VARGAS, T. 1998. Bioleaching model of a copper-sulfide ore bed in heap and dump configurations. *Metallurgical and Materials Transactions B* 29:899-909.
- [24] BOUFFARD, S. C. y DIXON, D. G. 2009. Modeling pyrite bioleaching in isothermal test columns with the HeapSim model. *Hydrometallurgy* 95:215-226.
- [25] LEAHY, M. J., SCHWARZ, M. y DAVIDSON, M. R. 2006. An air sparging CFD model for heap bioleaching of chalcocite. *Applied Mathematical Modelling* 30:1428-1444.
- [26] YIN, S., WU, A., LI, X. y WANG, Y. 2011. Mathematical model for coupled reactive flow and solute transport during heap bioleaching of copper sulfide. *J. Cent. South Univ. Technol.* 18:1434-1440.

- [27] PANTELIS, G., RITCHIE, A. I. M. y STEPANYANTS, Y. A. 2002. A conceptual model for the description of oxidation and transport processes in sulphidic waste rock dumps. *Applied Mathematical Modelling* 26:751-770.
- [28] GREEN, D. y PERRY, R. 2007. *Perry's chemical engineers' handbook*. 8^a ed. New York, McGraw Hill professional.
- [29] ROSSI, G. 1990. *Biohydrometallurgy*. Hamburg, McGraw Hill Book Company GmbH.
- [30] PATANKAR, S. 1980. *Numerical heat transfer and fluid flow*. New York, McGraw Hill Book Company. (Hemisphere series on computational methods in mechanics and thermal science).
- [31] BIRD, R. B., STEWART, W. E. y LIGHTFOOT, E. N. 1960. *Transport phenomena*. New York, John Wiley & Sons, Inc.
- [32] VERSTEEG, H. K. y MALALASEKERA, W. 1995. *An introduction to computational fluid dynamics: The finite volume method*. London, Longman Scientific & Technical.
- [33] NIGRO, N. y STORTI, M. 2011. *Métodos numéricos en fenómenos de transporte*. Santa Fe, Centro internacional de métodos computacionales en ingeniería.
- [34] GRATHWOHL, P. 1998. *Diffusion in natural porous media: Contaminant transport, sorption desorption and dissolution kinetics*. New York, Springer Science+Business Media. pp. 23-40. (The Kluwer international series).
- [35] BEAR, J. 1972. *Dynamics of fluids in porous media*. New York, American Elsevier Publishing Company, Inc. pp. 579-617.
- [36] KUO, J. 2014. *Practical design calculations for groundwater and soil remediation*. 2^a ed. Florida, CRC Press. pp. 94-95.
- [37] POUR, R. A. y KAMANBEDAST, A. A. 2011. Investigation of vertical transmission of pollution at laboratory model and it's vitalizing for determination of dispersion coefficient at homogeneous sandy soil. *World Applied Sciences Journal* 14(2):351-355.
- [38] EITEMAN, M. A. 2012. *Mass transfer coefficients lecture*, biochemical engineering lab BCHE 3180. Georgia, University of Georgia, Faculty of Engineering.
- [39] TREYBAL, R. E. 1980. *Mass-transfer operations*. 3^a ed. Singapore, McGraw Hill Book Company. (Chemical engineering series).
- [40] CUSSLER, E. L. 2009. *Diffusion: Mass transfer in fluid systems*. 3^a ed. Cambridge, Cambridge University Press. (Cambridge series in chemical engineering).
- [41] CHISTI, M. Y. 1989. *Airlift bioreactors*. London, Elsevier Applied Science.
- [42] SCILAB ENTERPRISES. 2015. Open source software for numerical computation. [en línea] <<http://www.scilab.org/>> [consulta: 10 abril 2015].
- [43] JAISWAL, D. K., KUMAR, A. y YADAV, R. R. 2011. Analytical solution to the one-dimensional advection-diffusion equation with temporally dependent coefficients. *Journal of Water Resource and Protection* 3:76-84.

- [44] AMERICAN PUBLIC HEALTH ASSOCIATION. 1965. Water pollution control federation, standard methods for the examination of water and wastewater. 12^a ed. New York, American Public Health Assoc. pp. 408-410.
- [45] LYMAN, W. J., REEHL, W. F. y ROSENBLATT, D. H. 1990. Handbook of chemical property estimation methods. Washington, American Chemical Society.
- [46] WILKE, C. R. 1950. Diffusional properties of multicomponent gases. Chemical Engineering Progress 46:95-104.
- [47] BERGMAN, T. L., LAVINE, A. S., INCROPERA, F. P. y DEWITT, D. P. 2011. Fundamentals of heat and mass transfer. 7^a ed. New York, John Wiley & Sons, Inc.
- [48] AL-KHLAIFAT, A. y ARASTOPOUR, H. 1997. Simulation of two-phase flow through low-permeability porous media. En: AEA TECHNOLOGY international users conference proceedings '97. Chicago, Illinois, AEA. pp. 31-42.
- [49] WEAST, R. C. 1986. Handbook of chemistry and physics. 67^a ed. Florida, CRC Press Inc.
- [50] SCANLON, B. R., NICOT, J. P. y MASSMANN, J. W. 2001. Soil gas movement in unsaturated systems. En: WARRICK, A. W. (Eds.). Soil physics companion. Florida, CRC Press Inc. pp. 297-341.
- [51] COREY, A. T. 1954. The interrelation between gas and oil relative permeabilities. Producer's Monthly 19(1):38-44.
- [52] VAN GENUCHTEN, M. T. 1980. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. Soil Sci. Soc. Am. J. 44:892-898.
- [53] NIKRITYUK, P. A. 2011. Computational thermo-fluid dynamics: In materials science and engineering. Weinheim, WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Boschstr.
- [54] ATKINSON, K. A. 1989. An introduction to numerical analysis. 2^a ed. New York, John Wiley & Sons, Inc.
- [55] GIERKE, J. S., HUTZLER, N. J. y CRITTENDEN, J. C. 1990. Modelling the movement of volatile organic chemicals in columns of unsaturated soil. Water Resources Research 26(7):1529-1547.
- [56] SPURK, J. y AKSEL, N. 2008. Fluid Mechanics. 2^a ed. Berlin, Springer-Verlag.
- [57] KAVIANY, M. 1995. Principles of heat transfer in porous media. 2^a ed. New York, Springer-Verlag.
- [58] SHARMA, M. y YASHONATH, S. 2007. Size dependence of solute diffusivity and Stokes-Einstein relationship: Effect of van der Waals interaction. Diffusion Fundamentals 6(35):1-2.
- [59] WILSON, E. J. y GEANKOPLIS, C. J. 1966. Liquid mass transfer at very low Reynolds numbers in packed beds. Industrial and Engineering Chemistry Fundamentals 5(1):9-14.
- [60] MILLER, G. 2003. Ore geo-technical effects on copper heap leach kinetics. En: ALTA COPPER 2003. Melbourne, Australia, ALTA Metallurgical Services.

- [61] PIRT, S. J. 1982. Maintenance energy: A general model for energy-limited and energy-sufficient growth. *Arch. Microbiol.* 133:300-302.
- [62] BIOSIGMA. 2014. Comunicación personal Dr. Roberto Collao.
- [63] FRANZMANN, P. D., HADDAD, C. M., HAWKES, R. B., ROBERTSON, W. J. y PLUMB, J. J. 2005. Effects of temperature on the rates of iron and sulfur oxidation by selected bioleaching Bacteria and Archaea: Application of the Ratkowsky equation. *Minerals Engineering* 18:1304-1314.
- [64] MAY, B. A., VANDERGHEYNST, J. S. y RUMSEY, T. 2006. The kinetics of *Lagenidium giganteum* growth in liquid and solid cultures. *Journal of Applied Microbiology* 101:807-814.
- [65] MATHEWS, J. H. y FINK, K. K. 2004. Numerical methods using Matlab. 4^a ed. New Jersey, Prentice-Hall Inc. pp. 430-436.
- [66] DIXON, D. G. 2000. Analysis of heat conservation during copper sulphide heap leaching. *Hydrometallurgy* 58:27-41.
- [67] LEAHY, M. J. y SCHWARZ, M. P. 2009. Modelling jarosite precipitation in isothermal chalcopyrite bioleaching columns. *Hydrometallurgy* 98:181-191.
- [68] VARGAS, T., DAVIS-BELMAR, C. S. y CÁRCAMO, C. 2014. Biological and chemical control in copper bioleaching processes: When inoculation would be of any benefit? *Hydrometallurgy* 150:290-298.
- [69] YAZICI, Y. 2010. Operator splitting methods for differential equations. Thesis submitted in partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science in Mathematics. Turkey, Izmir, Izmir Institute of Technology, School of Engineering and Sciences.
- [70] HOLDEN, H., KARLSEN, K. H., LIE, K. y RISEBRO, N. H. 2010. Splitting methods for partial differential equations with rough solutions: Analysis and MATLAB programs. Zürich, European Mathematical Society. (EMS series of lectures in mathematics).
- [71] ALEMANI, D. 2011. Notes on operator splitting theory. Queensland, The University of Queensland, School of Land, Crop & Food Sciences.
- [72] FLETCHER, C. A. 1991. Computational techniques for fluid dynamics 1: Fundamental and general techniques. 2^a ed. Berlin, Springer-Verlag.

ANEXOS

Anexo A. Método Operator Splitting

Los procesos físicos complejos son frecuentemente modelados por sistemas de ecuaciones diferenciales parciales lineales y no lineales. Debido a la complejidad de estas ecuaciones, en la mayoría de los casos no existe un método que pueda proveer una solución numérica con muy buena precisión, asociada a un bajo costo computacional [69]. Para poder simplificar la solución de las ecuaciones diferenciales no lineales, se introduce un procedimiento de división de operadores, el cual es usado ampliamente para resolver problemas de advección-difusión-reacción en ecuaciones de conservación de masa y en ecuaciones de Navier-Stokes.

La principal idea del método operator splitting se basa en dividir o desacoplar una ecuación compleja (modelo global) en varias ecuaciones más simples (sub-modelos), y resolver estas ecuaciones simples con métodos adaptados de discretización y de solución numérica (esquema de cálculo numérico apropiado). Se intenta obtener un conjunto de sub-ecuaciones para las cuales están disponibles algoritmos de resolución más simples y más prácticos de programar computacionalmente.

Los sub-operadores se escogen considerando los diversos procesos físicos que representa la ecuación diferencial. Para obtener una solución aproximada del problema original, se resuelve una secuencia de sub-modelos, los cuales generan un “error de división”. El orden del error de división puede ser estimado teóricamente, y éste depende del espacio temporal de integración definido.

El método numérico global se conforma cuando los esquemas de cálculo numérico de cada sub-ecuación se asocian mediante el método operator splitting, acoplando las soluciones simplificadas individuales en una sola solución final corregida.

A continuación se formula el método en una forma bastante simplificada.

Se desea resolver el siguiente tipo de problema (problema de Cauchy) [70]:

$$\frac{dw}{dt} + \Lambda(w) = 0 \quad ; \quad w(t = 0) = w_0 \quad (477)$$

Donde Λ es un operador no especificado. Asumiendo que $\Lambda = \Lambda_1 + \Lambda_2$ se puede escribir en una manera “natural” (donde Λ_1 y Λ_2 son sub-operadores que componen el operador original), el método operator splitting permite resolver de forma separada el problema de la ecuación (477), en un dominio de tiempo $t \in [0, \mathbb{T}]$, al considerar los siguientes sub-problemas [71]:

$$\frac{dw^*}{dt} + \Lambda_1(w^*) = 0 \quad ; \quad w^*(t = 0) = w_0 \quad (478)$$

$$\frac{dw^{**}}{dt} + \Lambda_2(w^{**}) = 0 \quad ; \quad w^{**}(t = 0) = w^*(t = \mathbb{T}) \quad (479)$$

La solución aproximada del problema original en el tiempo $t = \mathbb{T}$ es $w(\mathbb{T}) = w^{**}(\mathbb{T})$. Naturalmente, el problema y la condición inicial de la ecuación (477) deben cumplir un conjunto de condiciones de borde, las cuales serán consideradas adecuadamente en la primera división

(ecuación (478)). Lo anterior se debe a que el operador Λ_1 contiene derivadas espaciales de la variable.

Para los intervalos de tiempo discreto utilizados en este modelo, la magnitud del error generado al adoptar el método operator splitting es relativamente bajo.

Anexo B. Método de Newton-Raphson

El método de Newton-Raphson es un método iterativo usado para encontrar aproximaciones de las raíces de una función real. El método utiliza los primeros términos de la serie de Taylor de una función $f(x)$ en la vecindad de una raíz supuesta [72].

Al conservar solo los términos de primer orden de la serie de Taylor de la función $f(x)$ alrededor del punto $x = x_0 + \epsilon$, se tiene la siguiente aproximación:

$$f(x_0 + \epsilon) \approx f(x_0) + \left. \frac{df}{dx} \right|_{x=x_0} \epsilon \quad (480)$$

La expresión anterior puede usarse para estimar la cantidad de ajuste ϵ requerido para acercarse hacia la raíz, comenzando desde un valor inicial supuesto x_0 . Al imponer que $x_0 + \epsilon$ es la raíz de la función y redefinir $\epsilon \equiv \epsilon_0$, se tiene:

$$\epsilon_0 = -f(x_0) \left(\left. \frac{df}{dx} \right|_{x=x_0} \right)^{-1} \quad (481)$$

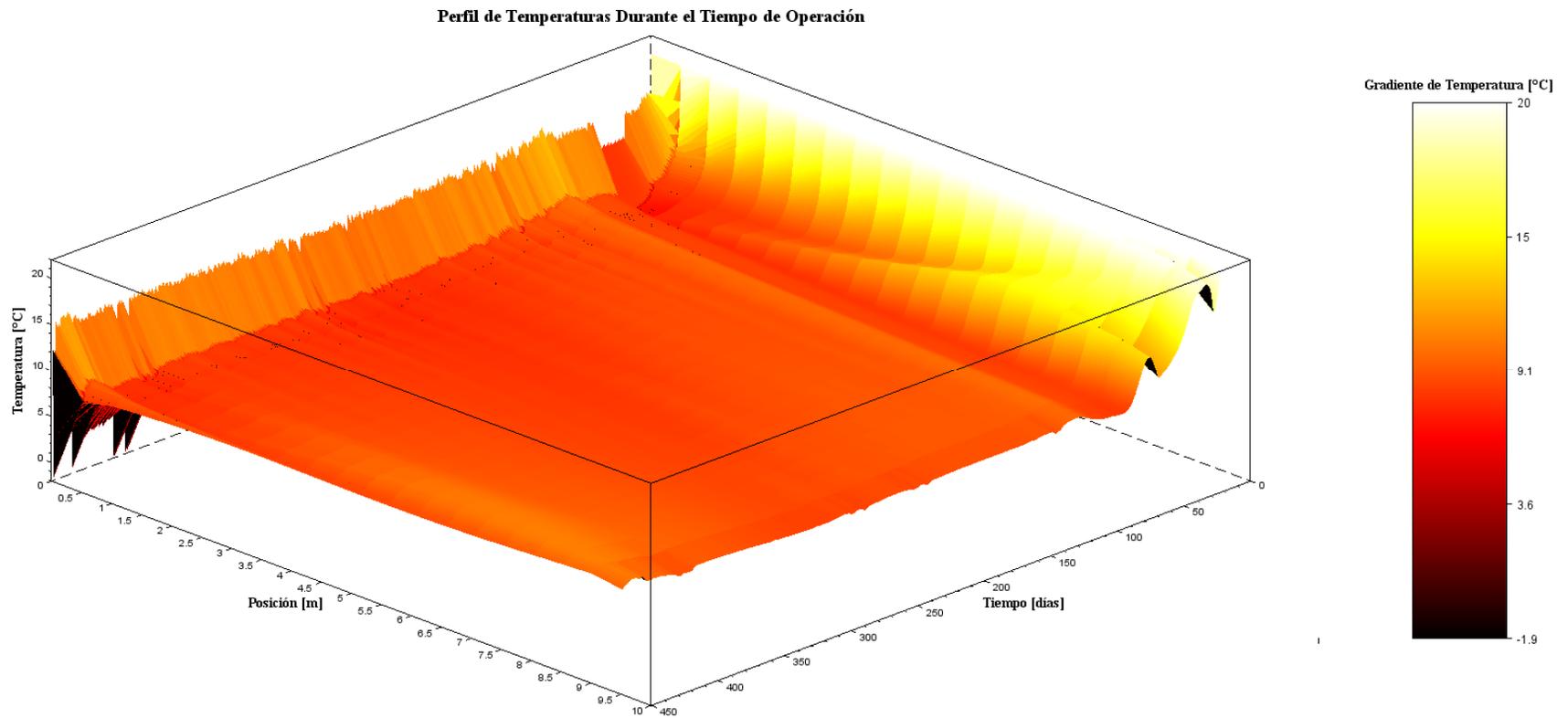
La ecuación (481) es el primer ajuste realizado para encontrar la raíz de $f(x)$. Estableciendo $x_1 = x_0 + \epsilon_0$ se puede calcular un nuevo ϵ_1 , y así sucesivamente, el proceso puede ser repetido hasta que converge a un punto fijo (la raíz). Con una buena elección inicial de la posición de la raíz, para cada número natural n , se puede aplicar iterativamente el algoritmo:

$$x_{n+1} = x_n - f(x_n) \left(\left. \frac{df}{dx} \right|_{x=x_n} \right)^{-1} \quad (482)$$

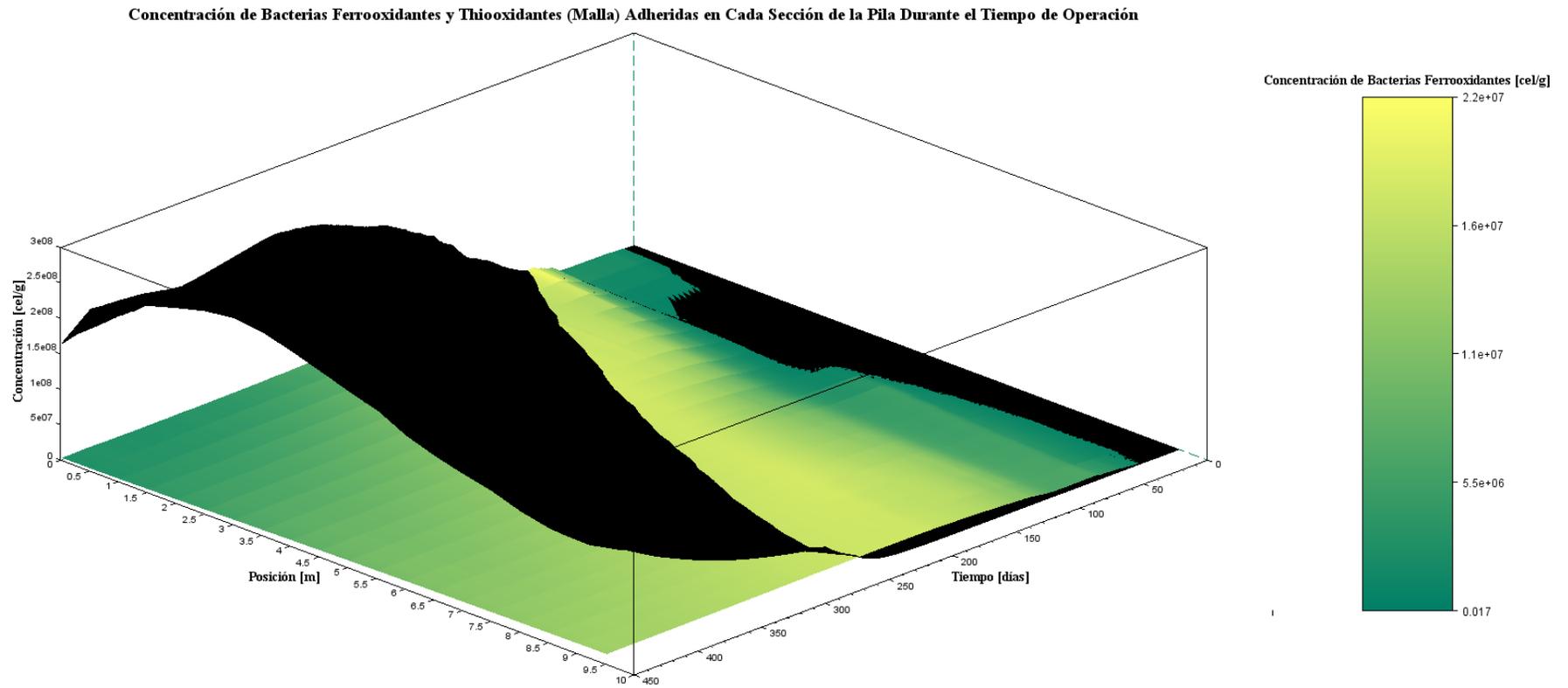
Donde x_{n+1} es el nuevo valor del cero aproximado de la función y x_n es el valor previo calculado del cero en la iteración n .

La iteración del algoritmo se detiene cuando se satisface un criterio de convergencia dado.

Anexo C. Perfil de Temperaturas Durante el Tiempo de Operación

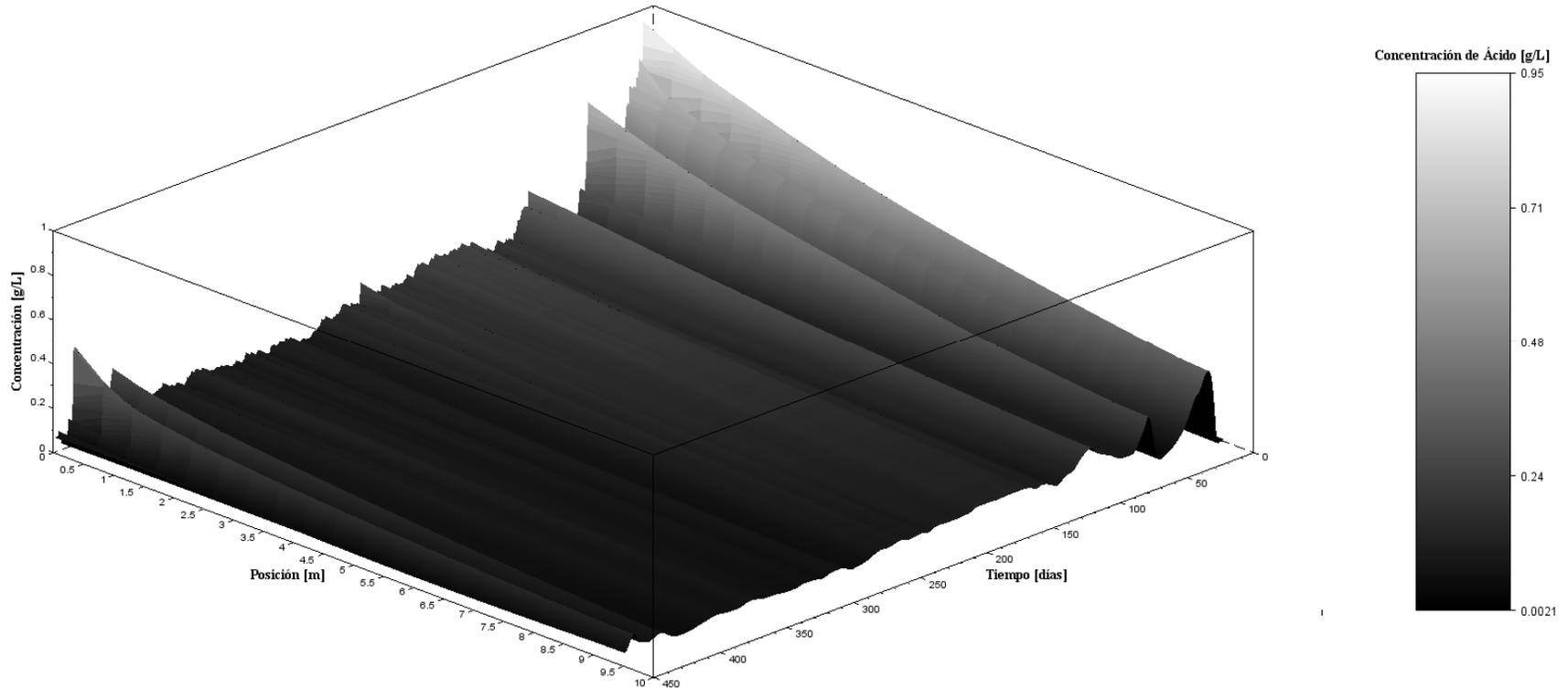


Anexo D. Concentración de Bacterias Ferroxidantes y Thiooxidantes Adheridas en Cada Sección de la Pila Durante el Tiempo de Operación

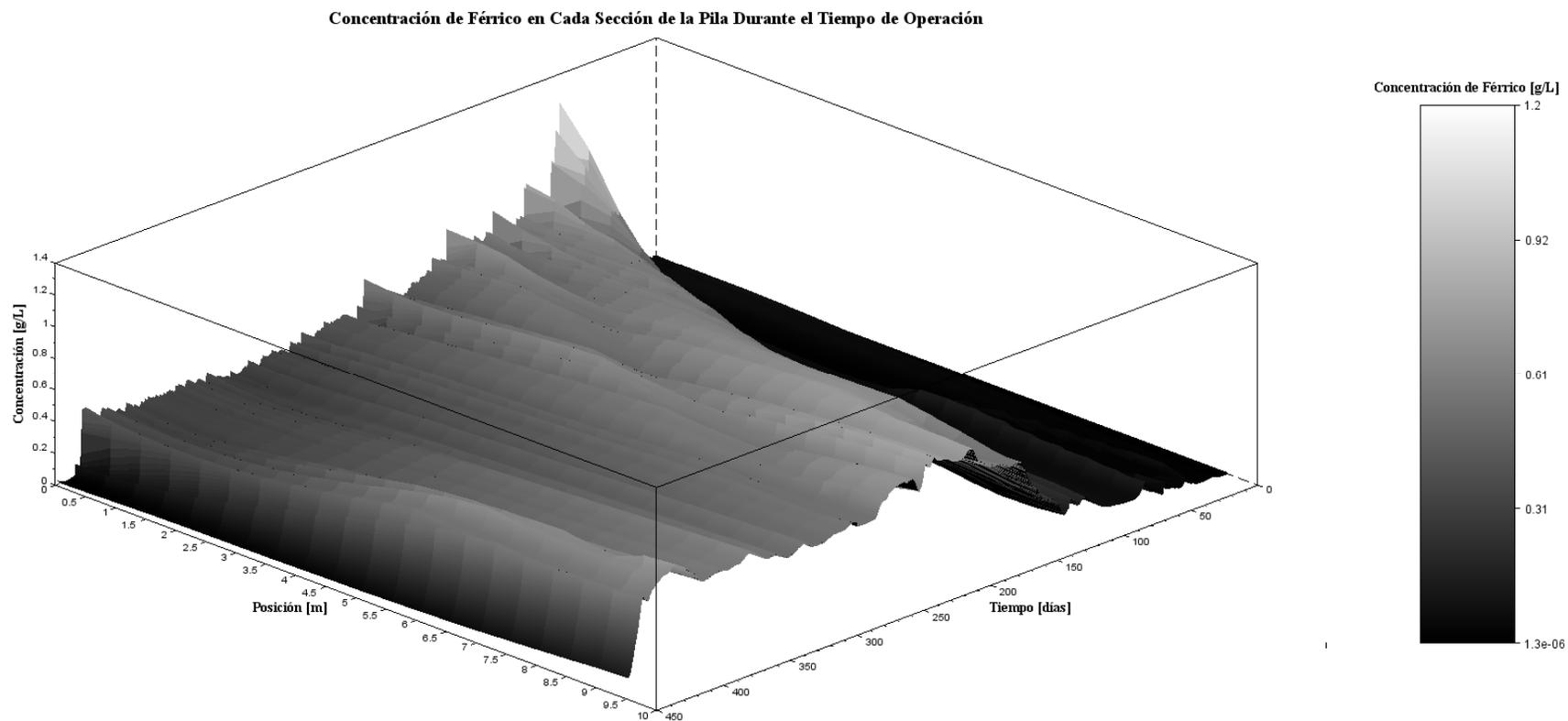


Anexo E. Concentración de Ácido en Cada Sección de la Pila Durante el Tiempo de Operación

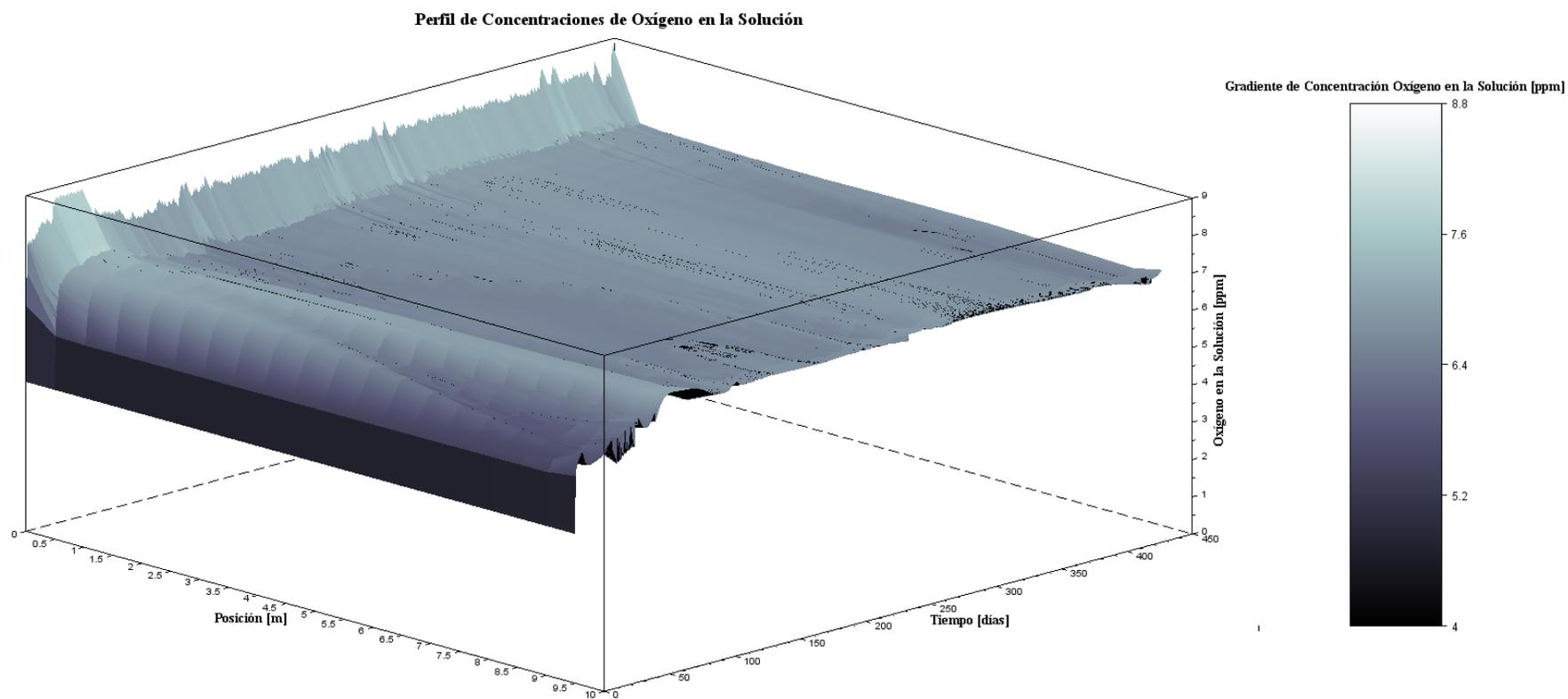
Concentración de Protones Totales (Ácido) en Cada Sección de la Pila Durante el Tiempo de Operación



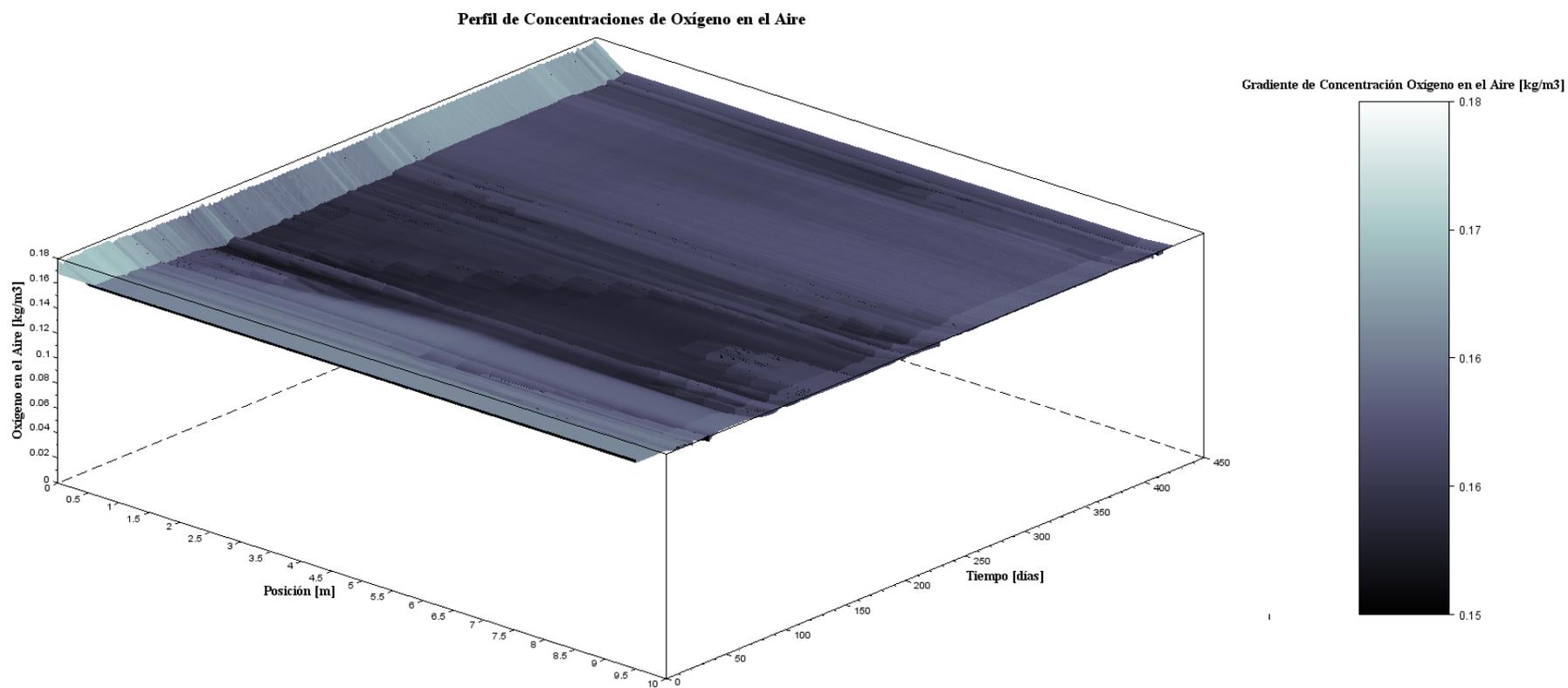
Anexo F. Concentración de Férrico en Cada Sección de la Pila Durante el Tiempo de Operación



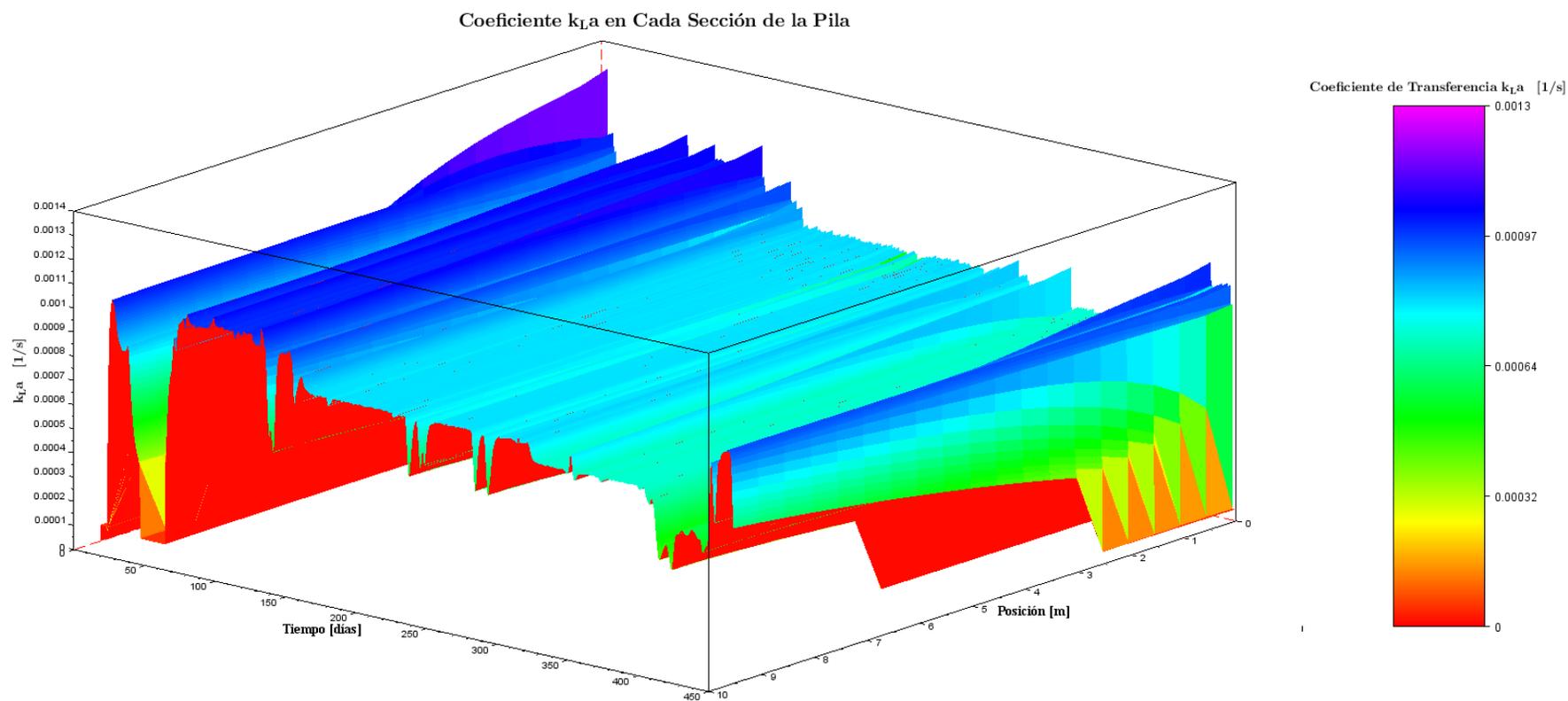
Anexo G. Perfil de Concentraciones de Oxígeno en la Solución Durante el Tiempo de Operación



Anexo H. Perfil de Concentraciones de Oxígeno en el Aire Durante el Tiempo de Operación



Anexo I. Coeficiente k_{LA} en Cada Sección de la Pila Durante el Tiempo de Operación



Anexo J. Velocidad Superficial del Flujo de Aire en Cada Sección de la Pila Durante el Tiempo de Operación

