



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

EMISIONES DE CO₂ ASOCIADAS A LOS PROCESOS DE FABRICACIÓN Y USO DE BUSES CON MOTOR DIÉSEL Y ELÉCTRICOS DEL SISTEMA DE TRANSPORTE PÚBLICO DE LA CIUDAD DE SANTIAGO DE CHILE

MEMORIA PARA OPTAR AL TÍTULO DE INGENIERO CIVIL QUÍMICO

FRANCO SEBASTIÁN LIZAMA VALENZUELA

PROFESORA GUÍA:
MELANIE COLET LAGRILLE

MIEMBROS DE LA COMISIÓN:
GUILLERMO VALENZUELA VENEGAS
TOMÁS VARGAS VALERO

SANTIAGO DE CHILE
2021

RESUMEN DE LA MEMORIA PARA OPTAR AL
TÍTULO DE INGENIERO CIVIL QUÍMICO
POR: FRANCO SEBASTIÁN LIZAMA VALENZUELA
FECHA: NOVIEMBRE 2021
PROF. GUÍA: MELANIE COLET LAGRILLE

EMISIONES DE CO₂ ASOCIADAS A LOS PROCESOS DE FABRICACIÓN Y USO DE BUSES CON MOTOR DIÉSEL Y ELÉCTRICOS DEL SISTEMA DE TRANSPORTE PÚBLICO DE LA CIUDAD DE SANTIAGO DE CHILE

En la última década se ha impulsado el uso de vehículos eléctricos en reemplazo de los vehículos con motores de combustión interna como alternativa para combatir el cambio climático, ya que no generan emisiones directas durante su uso. Sin embargo, no se ha profundizado en el impacto ambiental de la fabricación de este tipo de vehículos, considerando que sus materias primas provienen de industrias contaminantes y con un alto consumo energético.

El presente trabajo tiene por objetivo ampliar esta visión, calculando y comparando las emisiones de CO_{2,eq} para la fabricación y uso de un bus diésel y uno eléctrico. Para esto, se toman como caso de estudio un bus del recorrido 506 del sistema de transporte público de la ciudad de Santiago de Chile.

Se consideraron las partes con mayor impacto ambiental en su fabricación, que son el chasis, la carrocería, el motor y las baterías de ion litio, y se resolvieron los balances de masa y energía para los procesos productivos del acero, el aluminio y el cobre por ser las principales materias primas que componen estas partes.

Se encontró que para la fabricación de un bus eléctrico y de un bus diésel se emiten 42,1 y 31,7 t de CO_{2,eq}, respectivamente. Además, cada bus diésel emite 1,12 kg de CO_{2,eq} por km recorrido. Como resultado secundario, se encontró que para fabricar un bus eléctrico se consume 35 veces más agua que para fabricar uno diésel.

Se concluye que los buses eléctricos son más contaminantes que los buses diésel en su fabricación, pero no en su operación. Es importante mejorar los procesos para disminuir sus emisiones y lograr que la electromovilidad sea una medida efectiva contra el cambio climático. Se propone profundizar el estudio incluyendo la energía requerida para obtener la electricidad y el diésel necesarios en el uso de cada bus.

Dedicatoria

*A mi eterno perro Gary, por
su infinito amor y compañía.*

Tabla de contenido

Capítulo 1. Introducción.....	1
1.1 Motivación.....	1
1.2 Antecedentes	2
1.2.1 Transporte público en Santiago de Chile.....	3
1.2.2 Baterías de ion litio	5
1.3 Objetivos y Alcances del Estudio	8
Capítulo 2. Revisión Bibliográfica	11
2.1 Acero y hierro fundido.....	11
2.1.1 Fusión en alto horno	13
2.1.2 Acería de oxígeno básico (BOF).....	15
2.2 Aluminio	16
2.2.1 Proceso Bayer	18
2.2.2 Proceso Hall-Hérault.....	19
2.3 Cobre	20
2.3.1 Proceso pirometalúrgico del cobre	22
2.3.2 Proceso hidrometalúrgico del cobre	23
Capítulo 3. Metodología.....	25
3.1 Cálculo del Caso Base.....	25
3.1.1 Buses diésel	25
3.1.2 Buses eléctricos.....	26
3.2 Balances de masa y energía.....	28
3.3 Procesos productivos.....	30
3.3.1 Producción de acero.....	30
3.3.2 Proceso del Aluminio	33

3.3.3	Proceso del Cobre	36
3.4	Servicios	40
Capítulo 4.	Resultados y Discusión	42
4.1	Producción de acero y hierro fundido.....	42
4.1.1	Pre calentamiento de aire.....	42
4.1.2	Fusión en alto horno	43
4.1.3	Reducción con oxígeno básico.....	48
4.2	Producción de aluminio.....	51
4.2.1	Chancado	51
4.2.2	Molienda	52
4.2.3	Digestión.....	53
4.2.4	Sedimentación.....	54
4.2.5	Filtrado.....	55
4.2.6	Precipitación	56
4.2.7	Calcinación	57
4.2.8	Electrólisis de alúmina	58
4.3	Producción de cobre	60
4.3.1	Chancado	61
4.3.2	Molienda	61
4.3.3	Flotación	62
4.3.4	Espesado.....	63
4.3.5	Filtrado.....	64
4.3.6	Secado	65
4.3.7	Fusión.....	66
4.3.8	Conversión	68

4.3.9	Pirorrefinación.....	70
4.3.10	Moldeo.....	71
4.3.11	Electrorefinación.....	72
4.4	Fabricación de buses diésel y eléctricos.....	74
4.5	Uso de buses diésel y eléctricos.....	75
Capítulo 5.	Discusión General.....	77
5.1	Balances de masa.....	77
5.2	Balances de energía.....	79
Capítulo 6.	Conclusiones.....	80
Capítulo 7.	Recomendaciones y Trabajo Futuro.....	82
Capítulo 8.	Bibliografía.....	84
Anexo A.	Recorrido 506.....	95
Anexo B.	Caso base para LiPF_6 , LiFePO_4 y grafito.....	96

Índice de figuras

Figura 1: Número de vehículos eléctricos vendidos a nivel mundial entre 2010 y 2019. Adaptada de [6].	2
Figura 2: Bus con motor diésel de la Red Metropolitana de Movilidad.	3
Figura 3: Bus eléctrico de la Red Metropolitana de Movilidad.	4
Figura 4: Evolución de tecnologías de control de emisiones de los buses RED en el período 2006-2019. Adaptada de [16].	5
Figura 5: Esquema de una batería de ion litio y sus procesos de carga y descarga. Adaptada de [22].	7
Figura 6: Composición másica de una batería de ion litio-hierro-fosfato (LFP).	8
Figura 7: Diagrama de bloques general de la producción de acero a partir de hematita.	13
Figura 8: Esquema del alto horno y sus principales secciones.	13
Figura 9: Esquema del reactor de la etapa de acería de oxígeno básico.	16
Figura 10: Distribución geográfica de las reservas de bauxita [34].	17
Figura 11: Diagrama de bloques general de la producción de aluminio.	18
Figura 12: Diagrama de bloques del proceso Bayer.	18
Figura 13: Cuba de electrólisis de alúmina.	20
Figura 14: Distribución geográfica de las reservas de mineral de cobre [40].	21
Figura 15: Diagrama de bloques del proceso pirometalúrgico del cobre.	22
Figura 16: Diagrama de bloques del proceso hidrometalúrgico del cobre.	24
Figura 17: Diagrama de flujo del proceso productivo del acero.	30
Figura 18: Diagrama de flujo del proceso productivo del aluminio.	33
Figura 19: Diagrama de flujo del proceso pirometalúrgico del cobre.	38
Figura 20: Trazado y distancia total del recorrido 506. Imagen elaborada a partir de Google Maps.	95

Índice de tablas

Tabla 1: Evolución de la norma europea para vehículos pesados [13].	4
Tabla 2: Densidad energética y voltaje para diferentes baterías de ion litio [19] [20].	6
Tabla 3: Composición elemental del acero AISI 1020 [29].	12
Tabla 4: Propiedades del aluminio [33].	17
Tabla 5: Propiedades del cobre [39].	21
Tabla 6: Caso base para buses diésel.	25
Tabla 7: Masa de cada componente de las baterías por bus.	26
Tabla 8: Información comercial de los buses D9W y K9 de BYD.	27
Tabla 9: Caso base para buses eléctricos.	27
Tabla 10: Composición del mineral de hierro [50].	31
Tabla 11: Descripción de flujos del proceso productivo del acero.	32
Tabla 12: Composición del mineral de aluminio [35].	34
Tabla 13: Composición química del lodo rojo [53].	34
Tabla 14: Descripción de flujos del proceso productivo del aluminio.	35
Tabla 15: Composición del mineral de cobre [56].	36
Tabla 16: Descripción de flujos del proceso productivo del cobre.	39
Tabla 17: Requerimiento de servicio de cada etapa.	40
Tabla 18: Balance de masa para precalentamiento de aire.	42
Tabla 19: Balance de masa para alto horno.	47
Tabla 20: Balance de masa para reducción con oxígeno básico.	49
Tabla 21: Balance de masa para el chancado de mineral de aluminio.	51
Tabla 22: Balance de masa para la molienda de mineral de aluminio.	53
Tabla 23: Balance de masa para la digestión de bauxita.	54
Tabla 24: Balance de masa para la sedimentación.	55
Tabla 25: Balance de masa para filtrado en proceso del aluminio.	55
Tabla 26: Flujo y composición másica del lodo rojo.	56
Tabla 27: Balance de masa para la precipitación de $\text{Al}(\text{OH})_3$.	57
Tabla 28: Balance de masa para la calcinación de alúmina.	57

Tabla 29: Balance de masa para la electrólisis de aluminio.....	59
Tabla 30: Balance de masa para chancado de mineral de cobre.....	61
Tabla 31: Balance de masa para molienda de mineral de cobre.....	62
Tabla 32: Balance de masa para flotación.	63
Tabla 33: Balance de masa para espesado.	64
Tabla 34: Balance de masa para filtrado en proceso del cobre.....	65
Tabla 35: Balance de masa para el secado de concentrado de cobre.....	65
Tabla 36: Balance de masa para la fusión de cobre.	67
Tabla 37: Balance de masa para la conversión de cobre.....	69
Tabla 38: Balance de masa para la pirorrefinación de cobre.	71
Tabla 39: Balance de masa para el moldeo de ánodos de cobre.....	72
Tabla 40: Balance de masa para la electrorefinación de cobre.....	73
Tabla 41: Emisiones de CO ₂ por fabricación para cada tipo de bus.	74
Tabla 42: Balance de masa global para el proceso productivo de acero.	77
Tabla 43: Balance de masa global para el proceso productivo de aluminio.....	78
Tabla 44: Balance de masa global para el proceso productivo de cobre.	78
Tabla 45: Densidad de los solventes del electrolito.....	96
Tabla 46: Masa de LiPF ₆ , LiFePO ₄ y grafito en un bus eléctrico.....	97

Capítulo 1. Introducción

1.1 Motivación

Durante la última década se ha impulsado a nivel mundial el desarrollo de vehículos eléctricos (VEs) en reemplazo de los vehículos con motor a gasolina o diésel, ya que los VEs generan cero emisiones de gases de efecto invernadero durante su operación [1]. Este impulso se ve motivado por los “Objetivos de Desarrollo Sostenible” de las Naciones Unidas, que proponen el uso de energías limpias para enfrentar el cambio climático y sus efectos [2][3].

Los vehículos eléctricos comenzaron a comercializarse desde el 2010, teniendo un fuerte crecimiento en las ventas durante los últimos años. En efecto, entre los años 2014 y 2019 las ventas a nivel mundial crecieron en promedio anual un 60% según la Agencia Internacional de la Energía (IEA, por su sigla en inglés) [4]. En la Figura 1 se muestra el número de VEs vendidos a nivel mundial entre los años 2010 y 2019, donde se observa que China corresponde al principal consumidor de este tipo de vehículos, con un 47% del total mundial para el año 2019, mientras que Europa y Estados Unidos presentan crecimientos similares en los últimos años [4]. Los países incluidos en la categoría “Otros” son: Australia, Brasil, Canadá, Chile, India, Japón, Corea del Sur, Malasia, México, Nueva Zelanda, Sudáfrica y Tailandia.

Chile es un país que ha desarrollado interés en los vehículos eléctricos. Según la “Estrategia Nacional de Electromovilidad” del año 2017, trabajo en conjunto del Ministerio de Energía, Ministerio del Medio Ambiente y Ministerio de Transportes y Telecomunicaciones del gobierno de Chile, el gobierno se propuso lograr que el 100% del transporte público urbano sea eléctrico al 2050 [5].

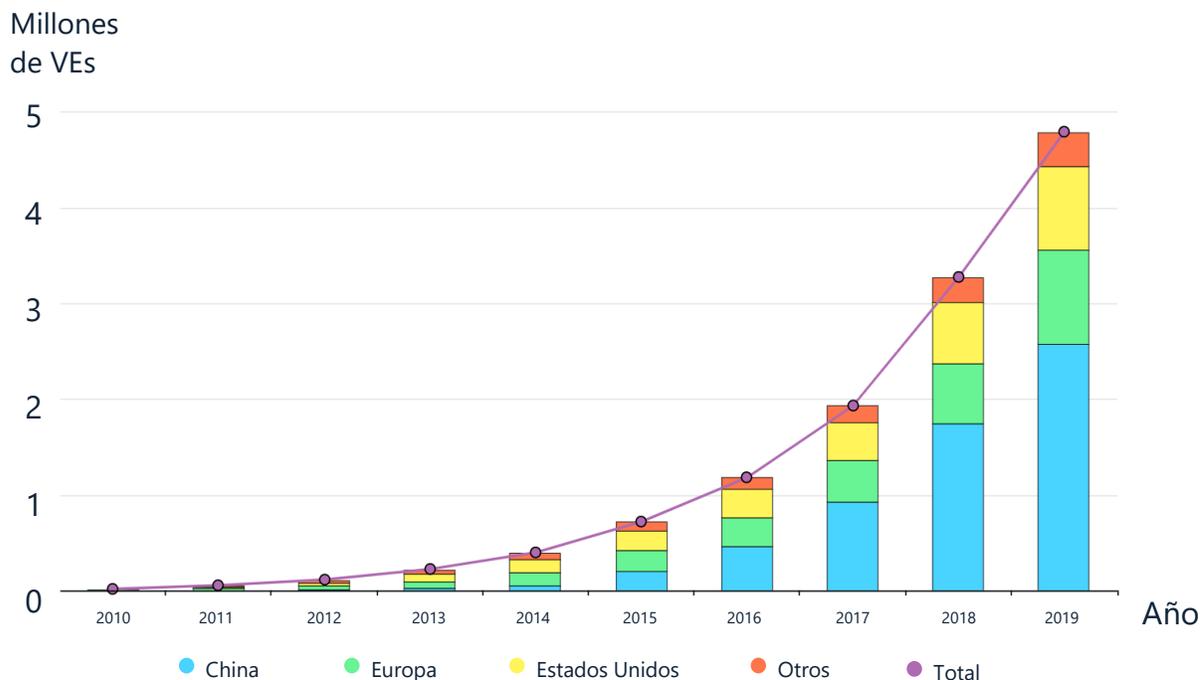


Figura 1: Número de vehículos eléctricos vendidos a nivel mundial entre 2010 y 2019. Adaptada de [6].

Como se puede notar, el mercado de la electromovilidad proyecta un gran desarrollo y crecimiento. Sin embargo, poco se ha discutido con respecto a las emisiones de gases de efecto invernadero y el consumo de agua asociadas a la fabricación de estos vehículos, considerando que las materias primas requeridas provienen en su mayoría de industrias con alto consumo energético e hídrico, y altas emisiones de gases contaminantes, como ocurre en las industrias del aluminio, el cobre y el acero [7]. Al ser un mercado en constante aumento, se considera relevante profundizar en este punto, por lo que el presente trabajo de título busca realizar un análisis más cercano a la realidad del impacto de la electromovilidad en la emisión de gases de efecto invernadero y el consumo de agua y, en consecuencia, en el cambio climático.

1.2 Antecedentes

A continuación, se presentan los antecedentes del presente trabajo, comenzando con una contextualización del transporte público en Santiago de Chile y la normativa

que lo rige. Luego se describen de manera detallada las baterías de ion litio usadas en los buses eléctricos.

1.2.1 Transporte público en Santiago de Chile

La Red Metropolitana de Movilidad (o RED), llamada Transantiago de 2006 a 2019 [8], es el sistema de transporte público de la ciudad de Santiago de Chile, que incluye el servicio de buses, metro y tren suburbano. Actualmente, el servicio de buses tiene una flota de 7.279 vehículos a cargo de 6 empresas de transporte y cuenta con 382 recorridos diferentes para cubrir la zona urbana de Santiago, con una demanda de pasajeros estimada de 5,8 millones de usuarios [9].

Los primeros buses del Transantiago correspondían a buses con motores diésel de combustión interna. En la Figura 2 se observa un bus del recorrido 506, el cual posee un chasis y motor Mercedes Benz. Otras marcas mayormente utilizadas son Volvo y Scania.



Figura 2: Bus con motor diésel de la Red Metropolitana de Movilidad.

A partir de noviembre del año 2017, Transantiago puso en funcionamiento los primeros buses eléctricos [10], cuyo número ha aumentado progresivamente desde entonces. Para agosto del 2020, habían 676 buses eléctricos en servicio, correspondiente al 9,3% de la flota total [11]. En la Figura 3, se presenta un bus eléctrico de la marca BYD, con baterías de ion de litio [12].



Figura 3: Bus eléctrico de la Red Metropolitana de Movilidad.

La normativa de emisiones contaminantes que rige para los buses diésel del sistema de transporte público es la norma europea (Euro), que establece los valores límite de las emisiones de monóxido de carbono (CO), hidrocarburos (HC), óxidos de nitrógeno (NO_x) y material particulado (MP) de estos vehículos, en función de la potencia del motor. La evolución de la normativa se presenta en la Tabla 1.

Tabla 1: Evolución de la norma europea para vehículos pesados [13].

Norma	CO / g kWh ⁻¹	HC / g kWh ⁻¹	NO _x / g kWh ⁻¹	MP / g kWh ⁻¹
Euro I	4,9	1,23	9,0	0,40
Euro II	4,0	1,10	7,0	0,15
Euro III	2,1	0,66	5,0	0,10
Euro IV	1,5	0,46	3,5	0,02
Euro V	1,5	0,46	2,0	0,02
Euro VI	1,0	0,36	1,2	0,01

El estándar del sistema de transporte público exige que todos los buses nuevos que ingresen desde 2017 tengan tecnologías suficientes para cumplir con la norma Euro VI [14]. Sin embargo, el Decreto 130 de la legislación de Chile establece que todos los buses en circulación deben cumplir con la norma Euro III [15].

En la Figura 4 se presenta la evolución de las tecnologías de emisión que tenían los buses del transporte público desde el 2006 al 2019. En ella se puede notar que los buses Euro I y II lograron ser reemplazados por completo en los años 2010 y 2014, respectivamente. Además, para disminuir el material particulado emitido por los

buses Euro III, muchos de ellos fueron reacondicionados agregándoles un filtro antipartículas (FAP), lo cual ocurre de manera significativa desde el año 2010. Por último, se observa que desde el año 2016 se mantienen constantes los buses Euro III con filtro y Euro V, y se reemplazan los Euro III sin filtro por buses Euro VI y buses eléctricos con baterías (BEB) [16].

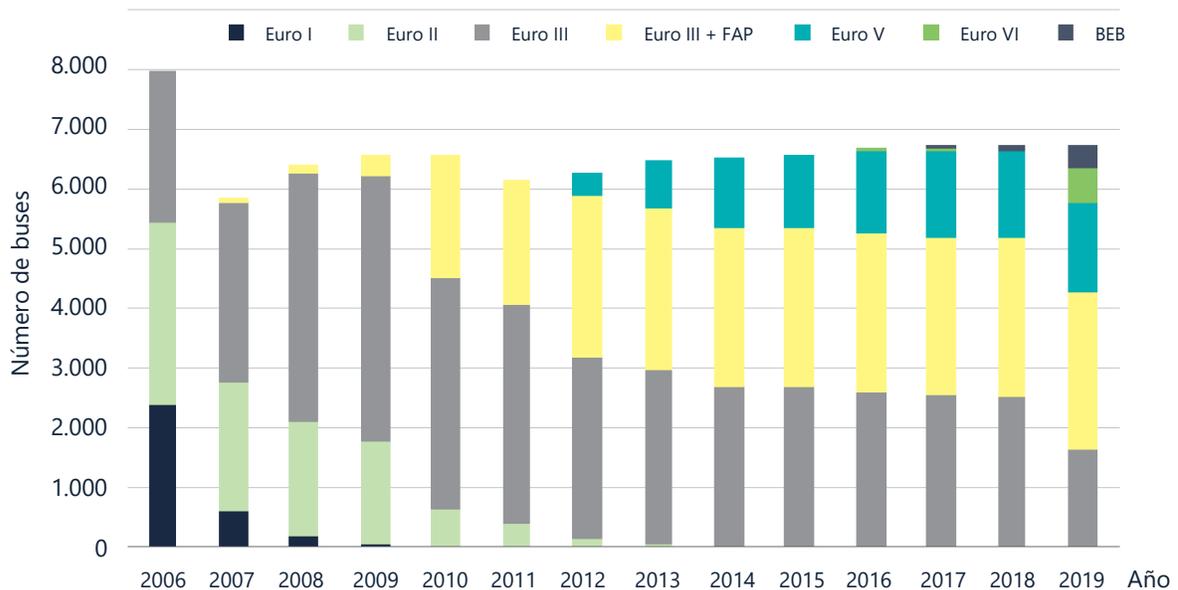


Figura 4: Evolución de tecnologías de control de emisiones de los buses RED en el período 2006-2019. Adaptada de [16].

1.2.2 Baterías de ion litio

Las baterías son sistemas en los que ocurre una reacción electroquímica, que debido a su reversibilidad permite almacenar y suministrar energía en los procesos de carga y descarga, respectivamente [17]. En particular, las baterías de ion litio aprovechan las propiedades de este metal para generar energía de manera más eficiente. Por ejemplo, su bajo peso molecular permite crear baterías más livianas, y, al ser uno de los metales con menor radio iónico, se facilita la difusión del ion Li^+ a través del electrolito [18].

Las principales partes de las baterías de ion litio son [19]:

- **Cátodo:** consiste en un colector de corriente de aluminio al cual se le agrega un compuesto de intercalación en base a litio y un óxido o fosfato de otro metal. Los iones de litio se transportan desde el cátodo al ánodo durante la carga de la batería, mientras que en la descarga los iones de litio regresan al cátodo.

Se pueden generar diferentes tipos de baterías de ion litio según el compuesto de intercalación que se le agregue al cátodo, como, por ejemplo:

- Baterías LCO: cátodo de aluminio cubierto con óxido de cobalto-litio (LiCoO_2).
- Baterías LMO: cátodo de aluminio cubierto con óxido de manganeso-litio (LiMn_2O_4).
- Baterías LFP: cátodo de aluminio cubierto con fosfato de hierro-litio (LiFePO_4).

Cada una de estas baterías presenta distintas características, como diferentes densidades energéticas o voltajes, tal como lo muestra la Tabla 2.

Tabla 2: Densidad energética y voltaje para diferentes baterías de ion litio [19] [20].

Baterías	Densidad energética / Wh kg ⁻¹	Voltaje / V
LCO	150-200	3,65
LMO	260-300	3,80
LFP	90-160	3,20

- **Ánodo:** corresponde a un colector de corriente de cobre recubierto con grafito, cuya organización en capas permite la intercalación de los iones Li^+ y almacenarlos al cargar la batería.
- **Electrolito:** es una sal de litio, generalmente hexafluorofosfato de litio (LiPF_6), disuelta en un solvente orgánico, que puede contener dimetil carbonato ($\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_3$), etil-metil carbonato ($\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_3$), carbonato de etileno ($\text{C}_3\text{H}_4\text{O}_3$) y carbonato de propileno ($\text{C}_4\text{H}_6\text{O}_3$) en diferentes proporciones. La sal disuelta aporta iones litio y aumenta la conductividad en el medio, lo cual favorece la difusión de litio dentro de la batería.

- **Separador:** compuesto por un film polimérico de poliolefinas, cuya función es separar ambos electrodos y permitir sólo el transporte de iones de litio.

Los buses del transporte público de Santiago usan baterías del tipo LFP [12]. Si bien estas poseen una menor densidad energética y voltaje de celda entre las tres (ver Tabla 2), las baterías LFP ofrecen una alternativa más segura debido a que las interacciones hierro-fósforo-oxígeno son más estables que las de cobalto-oxígeno o manganeso-oxígeno frente a un aumento en la temperatura, dándole mayor resistencia ante un sobrecalentamiento [21].

En la Figura 5 se muestra el esquema de una batería tipo LFP, donde se observan las principales secciones, así como el flujo de electrones e iones de litio en los procesos de carga y descarga.

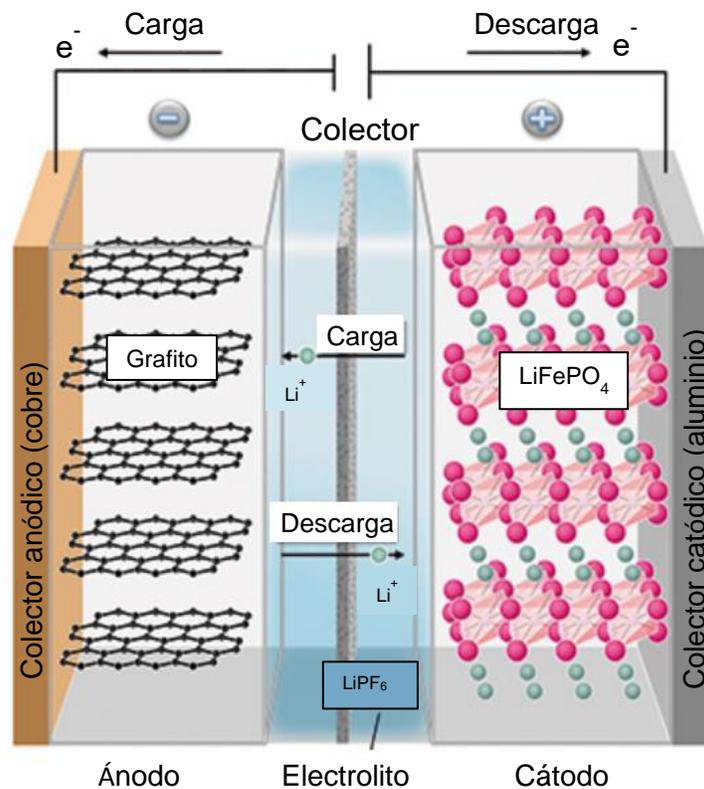


Figura 5: Esquema de una batería de ion litio y sus procesos de carga y descarga. Adaptada de [22].

La composición másica de una LFP se muestra en el gráfico de la Figura 6 [23]. En este se observa que la sección de mayor peso es el cátodo (colector y LiFePO_4),

con un 31%, seguido de la carcasa con un 27% y el ánodo con un 23% (colector y grafito).

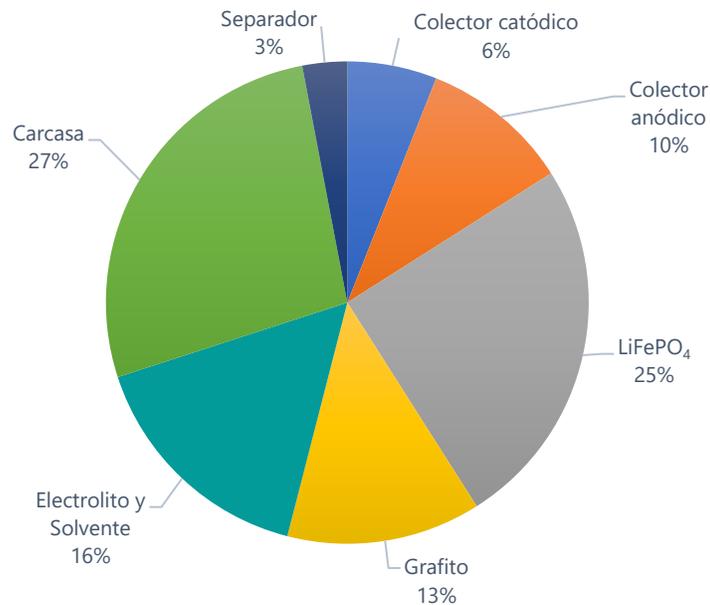


Figura 6: Composición másica de una batería de ion litio-hierro-fosfato (LFP).

1.3 Objetivos y Alcances del Estudio

El objetivo general del estudio es determinar los niveles de emisiones de gases de efecto invernadero, y secundariamente el consumo de agua, asociados a la fabricación y uso de buses con motor diésel y eléctricos del sistema de transporte público de la ciudad de Santiago de Chile.

Para realizar la comparación asociada a la fabricación de los buses de motores diésel y eléctricos, se considera la producción de las materias primas asociadas a las partes principales de cada tipo de bus [24]. Para esto, se proponen los siguientes límites de batería:

- Un bus diésel, considerando el chasis, la carrocería y el motor.
- Un bus eléctrico, considerando el chasis, la carrocería y las baterías de ion de litio.

Para los buses diésel se considera que el chasis y la carrocería están hechos de acero y que el motor tiene acero, hierro fundido y aluminio [25]. En el caso de los

buses eléctricos se considera el acero para el chasis y la carrocería, aluminio para la carcasa y el colector de corriente catódico de las baterías, y cobre para el colector de corriente anódico.

El estudio se limita a considerar sólo la producción de acero, aluminio y cobre, por ser procesos de metalurgia extractiva que tienen un alto impacto ambiental en comparación con la producción de los otros materiales asociados a la fabricación de buses [24]. Esto implica que la producción de grafito, litio-hierro-fosfato y hexafluorofosfato de litio quedan fuera de los alcances de este estudio.

Además, para analizar los procesos productivos de cada materia prima se consideran niveles de producción de plantas reales para resolver los balances de masa y energía. De esta manera, se calculan las emisiones de $\text{CO}_{2,\text{eq}}$ y el consumo de agua involucradas en producir una tonelada del respectivo material.

Por otro lado, las emisiones asociadas al uso de buses diésel se estiman en base a factores de emisión relacionados con el consumo del combustible. En contraste, los buses eléctricos no generan emisiones en su uso.

Por último, para comparar el impacto asociado al uso de estos buses se toma como referencia el recorrido 506 de la Red Metropolitana de Movilidad, ya que la empresa a cargo de este trayecto (Metbus) cuenta con ambos tipos de bus en su flota (diésel y eléctricos). Además, este recorrido es uno de los más extensos del sistema RED y con mayor demanda de pasajeros. En el Anexo A se profundiza sobre la información y el trazado del recorrido 506.

En vista del objetivo general y los alcances del estudio, los objetivos específicos de este son:

- Plantear los diagramas de flujo de los procesos productivos del aluminio, el cobre y el acero, en base a una revisión bibliográfica, y resolver los balances de masa y energía asociados.
- Estimar las emisiones de $\text{CO}_{2,\text{eq}}$, y secundariamente el consumo de agua, asociados a la fabricación y uso de los modelos de buses en estudio, y comparar los resultados encontrados para buses diésel y eléctricos.

- Estimar y comparar las emisiones asociadas al uso de buses diésel y eléctricos, en base a referencias bibliográficas.

Capítulo 2. Revisión Bibliográfica

En este capítulo se describen los procesos productivos de las principales materias primas involucradas en la fabricación de buses diésel y eléctricos (ver Capítulo 1).

2.1 Acero y hierro fundido

El hierro fundido y el acero son aleaciones de hierro y carbono, que se distinguen principalmente por el contenido de carbono que hay en cada uno de ellos. El primero tiene de 2 a 4% de carbono, mientras que el acero tiene una composición de este compuesto menor al 2% [26].

Entre las propiedades comunes del acero y el hierro fundido se encuentra la dureza, ductilidad, soldabilidad, maleabilidad y maquinabilidad [27]. Sin embargo, la diferencia de carbono entre ambos materiales provoca variaciones en algunas propiedades. Por ejemplo, el hierro fundido es más frágil y con una menor temperatura de fusión (1.165°C), mientras que el acero tiene mayor resistencia a la corrosión y punto de fusión (1.425-1.540°C) [28].

En el caso del acero, el hierro se puede alea con otros elementos para otorgar nuevas propiedades a los diferentes tipos de acero. Entre los principales elementos aleantes (además del carbono) que se pueden encontrar en los aceros están [27]:

- **Manganeso:** aporta a la desoxidación del acero, previene la formación de sulfuros de hierro y aumenta el endurecimiento del acero. Generalmente, en el acero la composición de manganeso es al menos 0,3%.
- **Cromo:** sus principales funciones en la aleación son aumentar el endurecimiento y la resistencia a la corrosión. Este compuesto es de mayor relevancia en los aceros inoxidables, donde la composición de cromo está entre 10,5% y 12%[27].
- **Níquel:** sirve para aumentar la dureza y ductilidad del acero.

Además, el acero presenta compuestos en menor composición que se consideran impurezas no deseadas que no se logran eliminar en el proceso productivo y que afectan sus propiedades, los cuales son [27]:

- Azufre: desde composiciones mayores a 0,05% aumenta la fragilidad del acero y disminuye la soldabilidad. Sin embargo, también sirve para mejorar la maquinabilidad, por lo que existen casos donde se agrega a la aleación dependiendo de qué propiedad se quiera potenciar.
- Fósforo: normalmente está en composiciones menores a 0,04% de los aceros. En los aceros de mayor dureza, tiende a aumentar la fragilidad, sin embargo, se puede agregar de manera opcional para aumentar la maquinabilidad y resistencia a la corrosión.

En particular, el material utilizado para los buses del transporte público es el acero AISI 1020, cuya composición se muestra en la Tabla 3.

Tabla 3: Composición elemental del acero AISI 1020 [29].

Material	Composición másica / %
Hierro	99,08 – 99,53
Carbono	0,17 – 0,23
Manganeso	0,30 – 0,60
Azufre	≤ 0,05
Fósforo	≤ 0,04

Tanto el hierro como el acero se obtienen a partir de mineral de hierro, donde la principal mena es la hematita (Fe_2O_3). A modo general, la hematita es fundida en un alto horno para formar el arrabio como producto líquido. Posteriormente, se disminuye la concentración de carbono del arrabio en una etapa de reducción con oxígeno para obtener el acero. En la Figura 7 se muestra un esquema con las principales etapas para la producción de acero, las cuales se detallan en las siguientes subsecciones.



Figura 7: Diagrama de bloques general de la producción de acero a partir de hematita.

Por otro lado, para la producción de hierro fundido se utiliza arrabio sólido almacenado, el cual es fundido y moldeado para sus diferentes aplicaciones [30].

2.1.1 Fusión en alto horno

El proceso productivo del acero comienza con la fundición en el alto horno. En este equipo, las materias primas son hematita como mineral de hierro, coque como combustible y caliza (CaCO_3) para la eliminación de impurezas. Todas estas materias primas se alimentan por la parte superior del alto horno, mientras que el aire precalentado a 1.000°C ingresa desde la parte inferior [31]. En la Figura 8 se muestra el esquema general del alto horno con sus principales secciones, las cuales se describen detalladamente a continuación.

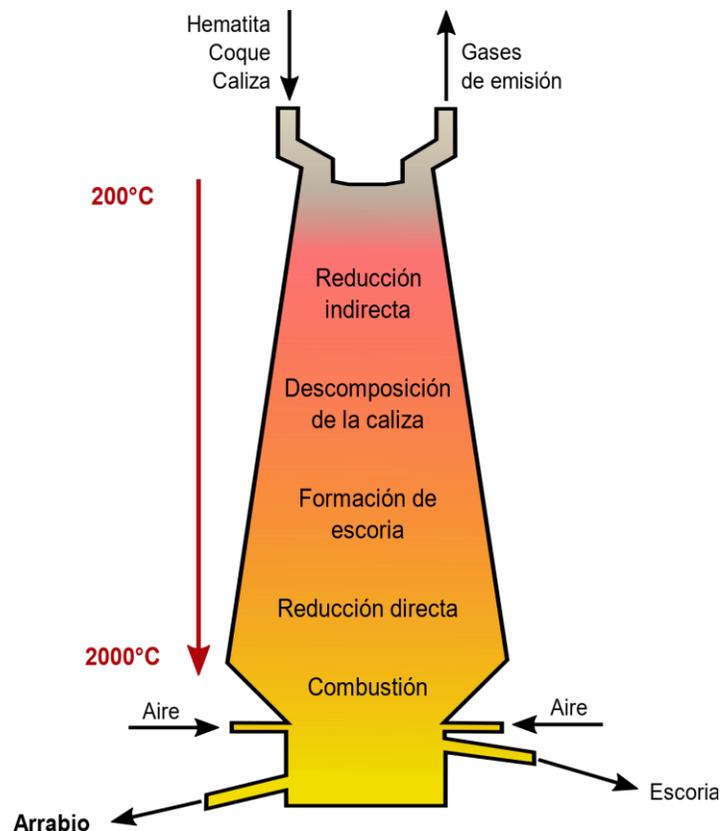
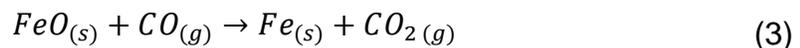
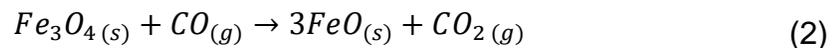
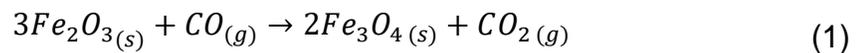


Figura 8: Esquema del alto horno y sus principales secciones.

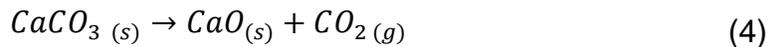
Este equipo tiene una altura promedio de 30 metros, y a medida que descienden las materias primas se genera un gradiente de temperatura que va desde los 200 a los 2.000°C debido al calor generado por las reacciones involucradas.

El funcionamiento del alto horno puede dividirse en 5 zonas según la temperatura a la que se encuentre. De menor a mayor temperatura (o bien, de mayor a menor altura del horno), las zonas son:

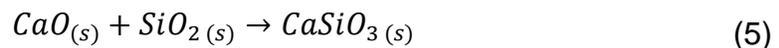
1. **Reducción indirecta:** ocurre entre los 400 y 800°C y corresponde a la reacción entre el mineral de hierro y el monóxido de carbono generado en la zona de combustión. Las reacciones involucradas son:



2. **Descomposición de la caliza:** en esta sección la temperatura es de 900°C y ocurre la descomposición térmica de la cal según la reacción:

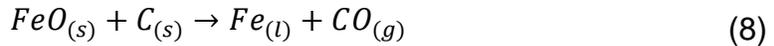
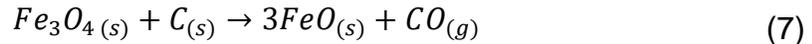
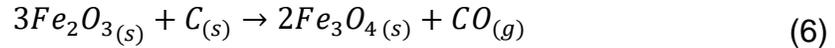


3. **Formación de escoria:** el óxido de calcio generado en la etapa anterior reacciona con el óxido de silicio presente en el mineral de hierro como impureza (arena), formando silicato de calcio como la principal escoria del alto horno. Esto da lugar a la reacción (5), la cual ocurre a 1.200°C.



Dependiendo de la composición del mineral, también pueden reaccionar compuestos como fósforo, óxidos de magnesio, azufre, entre otras.

4. **Reducción directa:** corresponde a la interacción entre el mineral de hierro y el coque, esto ocurre entre 1.400 y 1.600°C. Las reacciones involucradas son:



Cabe mencionar que a 1.540°C se alcanza el punto de fusión del hierro, por lo que se obtiene el producto líquido a partir de este punto.

Dado que el monóxido de carbono tiene mayor capacidad reductora que el coque, sólo un tercio del mineral reacciona en la sección de reducción directa, el resto del mineral lo hace en la zona de reducción indirecta [31].

5. **Combustión:** ocurre en la zona de mayor temperatura y corresponde a la reacción del coque con oxígeno para formar dióxido de carbono (2.000°C), el cual, a su vez, reacciona con más coque para generar monóxido de carbono (1.700°C), estas reacciones son, respectivamente:



En todas las secciones, los compuestos sólidos y líquidos descienden a través del horno, mientras que los gases ascienden hasta ser liberados en la sección superior.

Finalmente, el arrabio se separa de la escoria por densidad, permitiendo la extracción de este hacia la siguiente etapa.

2.1.2 Acería de oxígeno básico (BOF)

La obtención de acero se realiza en un convertidor autógeno, donde se agrega el arrabio proveniente del alto horno y se inyecta oxígeno de manera controlada para reaccionar con el carbono y obtener una composición menor al 2%. En la Figura 9 se muestra el esquema del reactor de esta etapa.

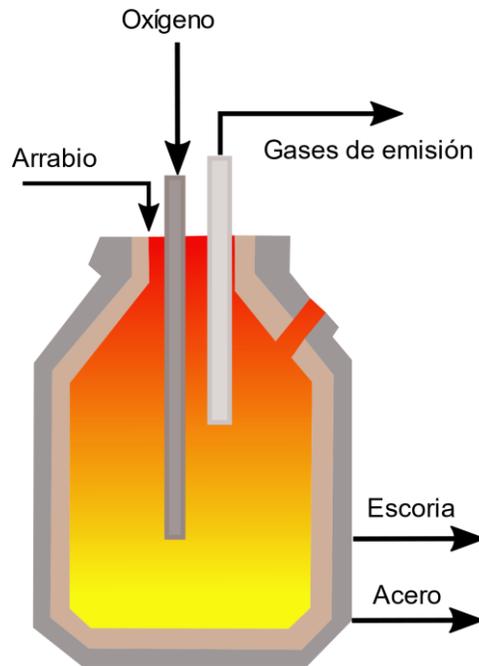


Figura 9: Esquema del reactor de la etapa de acería de oxígeno básico.

Las reacciones (11), (12) y (13) ocurren en la etapa de acería de oxígeno básico.



De la parte inferior de este equipo se extrae el acero al carbono fundido, el cual continúa su tratamiento en procesos de aleación con otros metales y moldeo, según el producto que se desee obtener.

2.2 Aluminio

El aluminio es un elemento metálico de número atómico 13, y es el metal más abundante de la corteza terrestre [32]. Se caracteriza por ser un metal liviano y de baja densidad, buen conductor térmico y eléctrico, blando y maleable. Las propiedades del aluminio se presentan en la Tabla 4.

Tabla 4: Propiedades del aluminio [33].

Propiedad	Valor	Unidades
Densidad	2,69	g cm^{-3}
Punto de fusión	933	K
Coefficiente de conductividad eléctrica	$3,78 \cdot 10^7$	S m^{-1}
Coefficiente de conductividad térmica a 25°C	327	$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$
Calor específico	897	$\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$

El aluminio se obtiene a partir de la bauxita, mineral cuya distribución geográfica se muestra en la Figura 10. En ella, se observa que Guinea, Australia, Vietnam, Brasil y Jamaica concentran el 72% del total de las reservas.

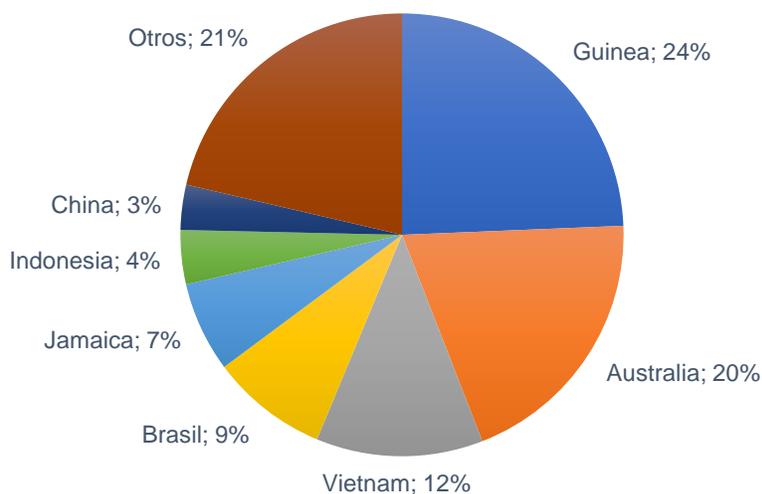


Figura 10: Distribución geográfica de las reservas de bauxita [34].

La bauxita se puede presentar en tres formas minerales principales: gibbsita, boehmita y diáspora. Sin embargo, en los 5 países con mayores reservas la composición de la roca es principalmente gibbsita ($\text{Al}(\text{OH})_3$) [35], por lo que se estudiará el proceso productivo considerando las condiciones de operación con las que se trata esta forma mineral.

A nivel general, el aluminio se obtiene tras dos procesos principales: la producción de alúmina (Al_2O_3) a partir de bauxita en el proceso Bayer y la obtención de aluminio

metálico a partir de alúmina en el proceso Hall-Hérout, tal como se muestra en la Figura 11. A continuación, se describe cada uno de ellos.



Figura 11: Diagrama de bloques general de la producción de aluminio.

2.2.1 Proceso Bayer

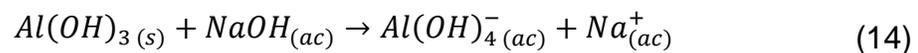
En la Figura 12 se muestra el diagrama de bloques del proceso Bayer.



Figura 12: Diagrama de bloques del proceso Bayer.

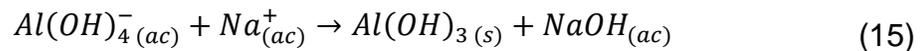
Este proceso comienza con el chancado de la bauxita en una trituradora de martillo hasta alcanzar un tamaño menor a 2 cm. Luego, se le agrega una solución de soda cáustica con concentración 3 M a 140°C y se realiza la molienda en un molino de bolas, para disminuir el tamaño del mineral a 0,15 cm [36].

La pulpa (mineral más solución) se bombea hacia la etapa de digestión, donde se disuelve la mayor parte del aluminio formando el ion $Al(OH)_4^-$. La reacción involucrada corresponde a la ecuación (14), que recibe el nombre de formación de licor [36].

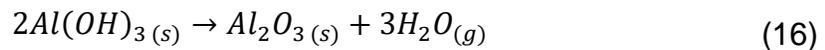


A continuación, se eliminan los sólidos restantes del mineral en una etapa de clarificación, que comienza con la separación de residuos sólidos por sedimentación, y luego se concentra el licor eliminando impurezas en una etapa de filtrado. Los sólidos obtenidos de las etapas de sedimentación y filtración son el principal residuo de este proceso, que reciben el nombre de lodo rojo debido a su alto contenido de hematita [37].

Una vez que se tiene el licor limpio, se precipita el hidróxido de aluminio mediante la disminución de la temperatura de la solución, debido a la sobresaturación de esta. Para esto, se agregan pequeños cristales de $Al(OH)_3$ (semillas) al equipo, que propician la cristalización [37]. De esta manera, se van formando cristales de diferentes tamaños, los cuales se clasifican reutilizando los de menor tamaño como semillas y pasando los de mayor tamaño a la siguiente etapa. La reacción de cristalización se muestra en la reacción (15), donde cabe mencionar que el hidróxido de sodio generado se puede recuperar y utilizar nuevamente en la digestión.

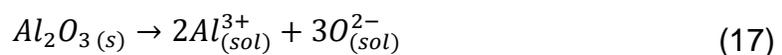


La última etapa del proceso Bayer es la calcinación, donde se agrega aire caliente en un reactor de lecho fluidizado para calentar los cristales hasta $1.100^\circ C$, temperatura a la cual ocurre la descomposición térmica del hidróxido de aluminio según la reacción (16). De esta manera, se obtiene la alúmina en polvo que se trata en el siguiente proceso [36].



2.2.2 Proceso Hall-Hérout

El proceso Hall-Hérout permite obtener el aluminio metálico a partir de la electrólisis de alúmina. Para esto, en una cuba electrolítica se disuelve alúmina agregando criolita (Na_3AlFe_6) como solvente, ya que este ayuda a disminuir el punto de fusión de la alúmina de $2.000-2.500^\circ C$ a $900-1.000^\circ C$. De esta manera, se forman los iones de aluminio y oxígeno según la reacción (17) [38].



La cuba se encuentra recubierta por carbón, el cual actúa como cátodo, mientras que el ánodo corresponde a barras de grafito que se ingresan por la parte superior de la cuba, tal como se muestra en la Figura 13.

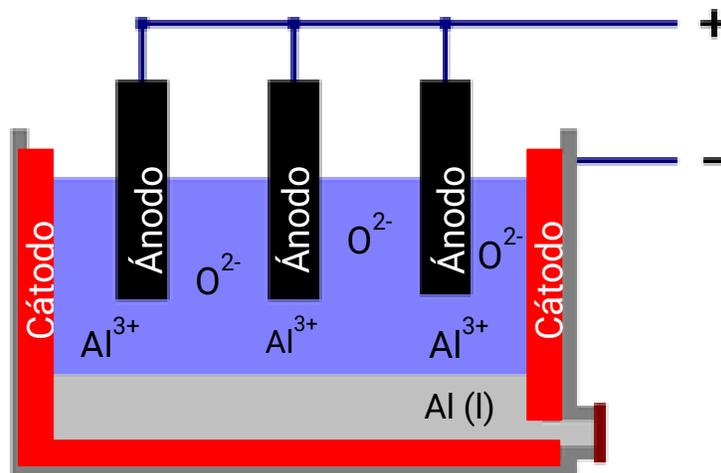
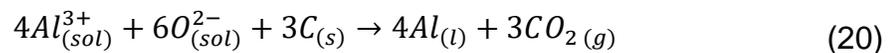
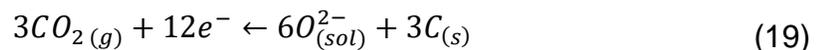


Figura 13: Cuba de electrólisis de alúmina.

Al aplicar corriente a la celda, se reduce el ion aluminio a aluminio metálico líquido en el cátodo y se concentra en la parte inferior de la cuba, mientras que el oxígeno reacciona en el ánodo, consumiendo el grafito y formando dióxido de carbono. Las ecuaciones (18), (19) y (20) muestran las reacciones catódica, anódica y global, respectivamente [32].



Finalmente, el aluminio fundido se extrae y moldea, para formar las láminas de aluminio que se utilizan en la producción de baterías de litio y el motor de los buses diésel.

2.3 Cobre

El cobre es un metal de transición con número atómico 29. Entre sus principales características destaca su conductividad eléctrica y térmica, además de la resistencia a la corrosión. Las propiedades fisicoquímicas de este metal se presentan en la Tabla 5.

Tabla 5: Propiedades del cobre [39].

Propiedad	Valor	Unidades
Densidad	8,96	g cm^{-3}
Punto de fusión	1.356	K
Coefficiente de conductividad eléctrica	$5,87 \cdot 10^7$	S m^{-1}
Coefficiente de conductividad térmica a 25°C	386	$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$
Calor específico	387	$\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$

La distribución geográfica de las reservas de mineral de cobre se muestra en la Figura 14, donde se observa que Sudamérica posee el 39% de las reservas a nivel mundial, concentradas entre Chile y Perú.

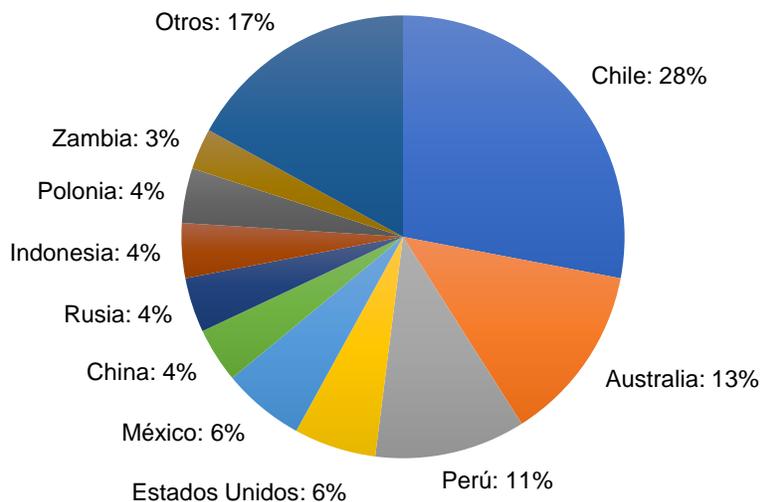


Figura 14: Distribución geográfica de las reservas de mineral de cobre [40].

El cobre metálico es obtenido a partir de fuentes minerales, las cuales pueden ser sulfuros u óxidos de cobre. El 80% del mineral de cobre a nivel mundial corresponde a sulfuros, principalmente calcopirita (CuFeS_2) y calcosina (Cu_2S), mientras que el 20% restante son óxidos de cobre, tales como azurita ($\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$) y cuprita (Cu_2O) [41].

Según la naturaleza de cada mineral, existen dos vías principales para producir cobre: pirometalurgia e hidrometalurgia [41], las cuales se describen a continuación.

2.3.1 Proceso pirometalúrgico del cobre

La pirometalurgia consiste en obtener cobre metálico a partir de minerales sulfurados según las etapas mostradas en la Figura 15.

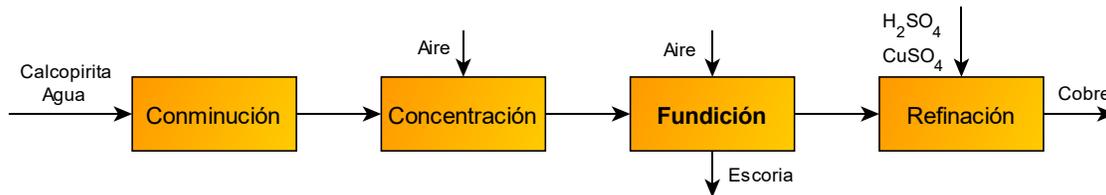


Figura 15: Diagrama de bloques del proceso pirometalúrgico del cobre.

Para describir las etapas principales de la pirometalurgia del cobre, se toma como materia prima la calcopirita (CuFeS_2) con una ley del 1%, ya que actualmente esta es la principal mena y ley del cobre [36].

- **Conminución:** corresponde a la disminución de tamaño de partícula del mineral de 25 mm a 5 mm en una etapa de chancado, y luego un proceso de molienda para disminuirlo hasta 0,01 mm [42]. De esta manera se genera un material fino que facilita la recuperación en la siguiente etapa. Para la molienda se prepara una pulpa con 70% mineral y 30% agua (relación en masa) [41].
- **Concentración:** esta etapa comienza ingresando la pulpa a celdas de flotación, donde se separa la ganga (relave) del compuesto de interés usando aire y reactivos que permitan separarlos de manera selectiva. Así, se logra separar la calcopirita hasta tener un concentrado de aproximadamente 30% cobre [41]. Posterior a eso, se procede a disminuir la humedad del concentrado en etapas de espesamiento, filtrado y secado, respectivamente. El producto de esta etapa es el concentrado seco de cobre.
- **Fundición:** esta parte del proceso se divide en tres etapas principales:
 - **Fusión:** el objetivo de esta etapa es fundir el concentrado. Para esto se oxida el azufre y el hierro de la calcopirita agregando aire enriquecido de oxígeno a un convertidor. El calor generado por las reacciones de oxidación permite que este equipo opere de manera

autógena, elevando la temperatura de 30°C a 1.250°C [41]. Los principales productos de esta etapa son la mata de cobre (45-75% cobre) y la escoria, que contiene principalmente óxidos de hierro.

- Conversión: Esto se hace en un convertidor, agregando aire a la mata de cobre para eliminar el hierro y azufre restantes, a una temperatura de 1.200°C. Esta etapa también es un proceso autógeno debido al aprovechamiento de los calores de reacción. Como productos de esta etapa se tiene cobre blíster con un 99% de pureza y la escoria [41].
- Pirorrefinación: por último, se elimina el azufre restante y el oxígeno que pueda estar disuelto en el cobre fundido inyectando gas natural a un horno anódico. El producto de esta etapa se moldea y solidifica, obteniendo los ánodos de cobre con una pureza del 99,5% [41].

Además de los productos mencionados en cada parte, en las tres etapas de la fundición se presentan grandes emisiones de dióxido de azufre (SO₂) debido a la naturaleza sulfurada del concentrado.

- **Refinación:** corresponde a la última etapa del proceso, donde se hace un proceso de electrorefinación en una celda electrolítica. En esta, se aplica corriente para disolver el ánodo en el electrolito, que es una solución de ácido sulfúrico (H₂SO₄) y sulfato de cobre (CuSO₄), de manera que los iones de cobre disueltos se reducen en el cátodo, depositándose en un electrodo de acero inoxidable y formando los cátodos de cobre con una pureza del 99,99%. Algunas impurezas no se depositan y precipitan formando el barro anódico, que contiene oro y plata, mientras que otras permanecen disueltas y son retiradas del electrolito, como el arsénico o el bismuto.

2.3.2 Proceso hidrometalúrgico del cobre

Los minerales de óxidos de cobre son tratados mediante la hidrometalurgia, cuyas principales etapas se muestran en la Figura 16 y se describen a continuación [43].

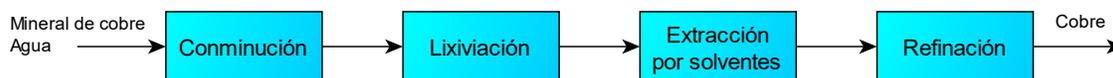
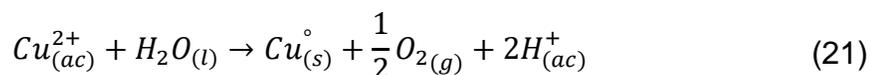


Figura 16: Diagrama de bloques del proceso hidrometalúrgico del cobre.

- **Cominución:** al igual que en la pirometalurgia, se reduce el tamaño del mineral en un chancador giratorio para aumentar la exposición del cobre.
- **Lixiviación:** el objetivo de esta etapa es disolver el cobre del mineral. Para esto, se rocía ácido sulfúrico en solución sobre pilas de mineral. El cobre se lixivía, percola a través del sólido y es recolectado en piscinas de lixiviado, obteniendo una solución impura con una concentración de 1 a 6 gramos de cobre por litro e impurezas como hierro y manganeso disuelto [41].
- **Extracción por solventes:** en este proceso se purifica el lixiviado separando el cobre de las impurezas. Primero, se extrae el cobre del lixiviado con un extractante orgánico selectivo para este metal, mientras que las impurezas se mantienen en la fase acuosa. Luego, ambas fases se separan por gravedad y la fase orgánica se pone en contacto con una solución acuosa de ácido sulfúrico y sulfato de cobre, donde ocurre una re-extracción (*stripping*) del cobre, pasando de la fase orgánica a la acuosa. De esta manera, se obtiene como producto una solución rica en cobre con una concentración de 45 gramos por litro, la cual sirve de electrolito en la siguiente etapa [41].
- **Recuperación:** la etapa final es la electroobtención del cobre. En este proceso se tiene una celda con cátodos de acero inoxidable, ánodos de plomo o acero inoxidable y la solución rica en cobre como electrolito. A esta celda se le aplica una corriente continua que permite que los iones de cobre se reduzcan y formen el cátodo de cobre con 99,99% de pureza. Por otro lado, en el ánodo se descompone el agua liberando oxígeno y protones, de manera que la reacción global para la electroobtención es:



Capítulo 3. Metodología

En este capítulo se presentan los detalles de la determinación del caso base asociado a los requerimientos de acero, hierro fundido, aluminio y cobre para la fabricación de un bus diésel y de un bus eléctrico. Posteriormente, se presentan los supuestos utilizados para resolver los balances de masa y energía asociados a cada proceso simulado. Luego, se presentan los diagramas de flujo de cada proceso productivo, junto a la descripción de las materias primas y productos. Finalmente, se describe la metodología utilizada para el cálculo de emisiones de CO_{2,eq} asociadas al uso de servicios.

3.1 Cálculo del Caso Base

3.1.1 Buses diésel

Para los buses diésel, el principal modelo de chasis para los buses del recorrido 506 es el O 500 U de Mercedes Benz, el cual está hecho de acero y tiene una masa total de 5.956 kg [44]. Además, el peso bruto vehicular de este bus es 18.500 kg [44], donde se puede estimar que la carrocería incluye 4.193 kg de acero¹.

El motor del bus es el modelo OM 926 LA de Mercedes Benz, el cual tiene una masa total de 565 kg [45]. La distribución másica de los materiales del motor es 47,4% hierro fundido, 36,3% acero, 10,8% aluminio y 5,5% otros materiales, como plásticos o caucho [25][46]. Según lo mencionado, se calcula el caso base para los buses diésel mostrado en la Tabla 6.

Tabla 6: Caso base para buses diésel.

Material	Sección	Masa / kg
Acero	Chasis, carrocería y motor	10.354,2
Aluminio	Motor	60,9
Hierro fundido	Motor	268,0

¹ Para esto se toma como referencia que 1/3 del peso bruto vehicular corresponde a la carrocería, a la que se le resta el peso de los asientos, ventanas y estructura exterior del bus para obtener la masa de acero.

3.1.2 Buses eléctricos

En el caso de los buses eléctricos, el modelo que se utiliza para el recorrido 506 es el K9 de BYD, cuyo chasis está hecho de acero y utiliza baterías de litio-hierro-fosfato (LFP) [12].

En relación con las baterías, cada bus posee un total de 288 unidades, con una capacidad de energía total de 276 kWh [12]. Además, se conoce por información comercial otorgada de manera confidencial, que las baterías tienen una densidad energética promedio de 0,1475 kWh kg⁻¹. Así, la masa total de baterías por bus es:

$$m_{LFP} = \frac{276 \text{ kWh}}{0,1475 \text{ kWh kg}^{-1}} = 1.871,2 \text{ kg} \quad (22)$$

Además, se tiene la composición másica de cada batería presentada en la sección 1.2.2. Con esto se puede calcular la masa de cada uno de sus componentes a través de una ponderación directa entre composición y masa total, lo que se muestra en la Tabla 7.

Tabla 7: Masa de cada componente de las baterías por bus.

Material	Sección	Composición / %	Masa por bus / kg
Aluminio	Cátodo	6	112,3
	Carcasa	27	505,2
Cobre	Ánodo	10	187,1
LiPF₆ + Solvente	Electrolito	16	299,4
LiFePO₄	Material activo	25	467,8
	cátodo		
Grafito	Material activo	13	243,3
	ánodo		
Poliolefinas	Separador	3	56,1
Total		100	1.871,2

Por otro lado, para estimar la masa del chasis se tomó como referencia el modelo D9W de BYD, ya que en ese caso se conoce la masa de este (con baterías) y sus

dimensiones, mientras que en el caso del modelo K9 no se tiene información sobre la masa del chasis. Las dimensiones de cada bus se muestran en la Tabla 8 [47] [48].

Tabla 8: Información comercial de los buses D9W y K9 de BYD.

Modelo	Largo / m	Ancho / m	Alto / m	Volumen / m ³	Masa chasis y baterías / kg
K9	12,54	2,55	3,41	109,07	-
D9W	12,27	2,32	3,07	87,36	8.260

Para tener la masa de las baterías del bus D9W se tomó como supuesto que ambos buses tienen el mismo tipo de baterías, es decir, con la misma densidad energética. Además, se conoce que la capacidad de energía del bus D9W es 324 kWh [47]. Luego, la masa del chasis D9W es:

$$m_{Chasis\ D9W} = 8.260\ kg - \frac{324\ kWh}{0,1475\ kWh\ kg^{-1}} = 6.063,4\ kg \quad (23)$$

Finalmente, se llegó a la masa del chasis del bus K9 usando el valor calculado en (23) y la relación entre los volúmenes:

$$m_{Chasis\ K9} = 6.063,4\ kg \cdot \frac{109,07\ m^3}{87,36\ m^3} = 7.570,8\ kg \quad (24)$$

Por último, para la carrocería se utilizó que la relación entre la masa de la carrocería y las baterías es de 2,12, obtenida en base a información técnica de un bus eléctrico de referencia [49]. De esta manera, se encontró que la masa para la carrocería es de 3.968,2 kg. La Tabla 9 muestra el caso base para un bus eléctrico, con la masa correspondiente a los materiales considerados.

Tabla 9: Caso base para buses eléctricos.

Material	Sección	Masa / kg
Acero	Chasis y carrocería	11.538,0
Aluminio	Cátodo y carcasa de baterías	617,5
Cobre	Ánodo	187,1

La masa correspondiente a los materiales que no fueron considerados en el presente trabajo (LiPF₆, LiFePO₄ y grafito) se detallan en el Anexo B.

3.2 Balances de masa y energía

La ecuación (25) muestra la expresión general para resolver los balances de masa.

$$\text{acumulación} = \text{entradas} - \text{salidas} + \text{generación} - \text{consumo} \quad (25)$$

Se considera que todas las etapas operan en estado estacionario, es decir, no existe acumulación en el sistema. Además, se considera que en las etapas donde no existan reacciones químicas los términos de generación y consumo serán nulos.

Por otro lado, la expresión general del balance de energía (E) es:

$$\frac{dE}{dt} = E_{\text{entrada}} - E_{\text{salida}} + E_{\text{generada}} - E_{\text{consumida}} \quad (26)$$

En esta ecuación, los términos de entrada (E_{entrada}) y salida (E_{salida}) consideran la energía interna, potencial y cinética de los flujos másicos respectivos, mientras que los términos de generación (E_{generada}) y consumo ($E_{\text{consumida}}$) de energía se deben al trabajo (W) o al calor (Q).

Se considera que en los sistemas estudiados las variaciones de energía potencial y cinética son despreciables, por lo que la energía de entrada y salida se rige sólo por la energía interna (U). Adicionalmente, la energía interna se relaciona con la entalpía según la ecuación (27), que corresponde a la definición de entalpía.

$$H = U + P \cdot v \quad (27)$$

donde:

- H : entalpía, en $J \text{ kg}^{-1}$.
- U : energía interna, en $J \text{ kg}^{-1}$.
- P : presión, en Pa .
- v : volumen específico, en $m^3 \text{ kg}^{-1}$

Si se considera la variación de entalpía según la ecuación (27) en términos diferenciales, se llega a:

$$dH = dU + P \cdot dv + v \cdot dP \quad (28)$$

Se toma como supuesto que los sistemas están a presión constante y que los cambios en el volumen son despreciables frente a la energía interna. Con esto en consideración, la ecuación (28) se puede integrar y llegar a:

$$H \approx U \quad (29)$$

Por otro lado, la entalpía de una especie i en una corriente se puede calcular como:

$$H_i = \Delta H_{f_i}^o + \int_{T_{ref}}^T C_{P_i} dT \quad (30)$$

donde:

- H_i : entalpía de la especie i , en $J \text{ kg}^{-1}$.
- $\Delta H_{f_i}^o$: entalpía de formación estándar a 25°C y 1 atm , en $J \text{ kg}^{-1}$.
- C_{P_i} : calor específico de la especie i , en $J (\text{kg K})^{-1}$.
- T_{ref} : temperatura de referencia, en K .
- T : temperatura, en K .

Los valores de entalpía de formación estándar y calor específico se obtuvieron a partir de la base de datos del Instituto Nacional de Estándares y Tecnología (NIST, por su sigla en inglés).

Por último, se considera que los procesos operan en estado estacionario, por lo que la variación de energía en el tiempo es nula. En base a todo lo mencionado, se simplifica la ecuación (26), llegando a la ecuación (31).

$$0 = F_e \cdot H_e - F_s \cdot H_s + Q - W \quad (31)$$

donde:

- F_e : flujo másico de entrada, en kg s^{-1} .
- H_e : entalpía del flujo de entrada, en $J \text{ kg}^{-1}$.

- F_s : flujo másico de salida, en $kg\ s^{-1}$.
- H_s : entalpía del flujo de salida, en $J\ kg^{-1}$.
- Q : calor neto, en W .
- W : trabajo neto, en W .

Cabe destacar que para los balances de masa y energía se considera que las entradas al proceso están a $25^\circ C$ y 1 atm. Además, en los procesos que se usa aire se considera una composición molar de 21% oxígeno y 79% nitrógeno.

3.3 Procesos productivos

3.3.1 Producción de acero

Para la producción del acero y el hierro fundido se plantea el diagrama de flujo mostrado en la Figura 17, donde se observa que la fusión en el alto horno fue dividida en 7 subsecciones según su temperatura de operación.

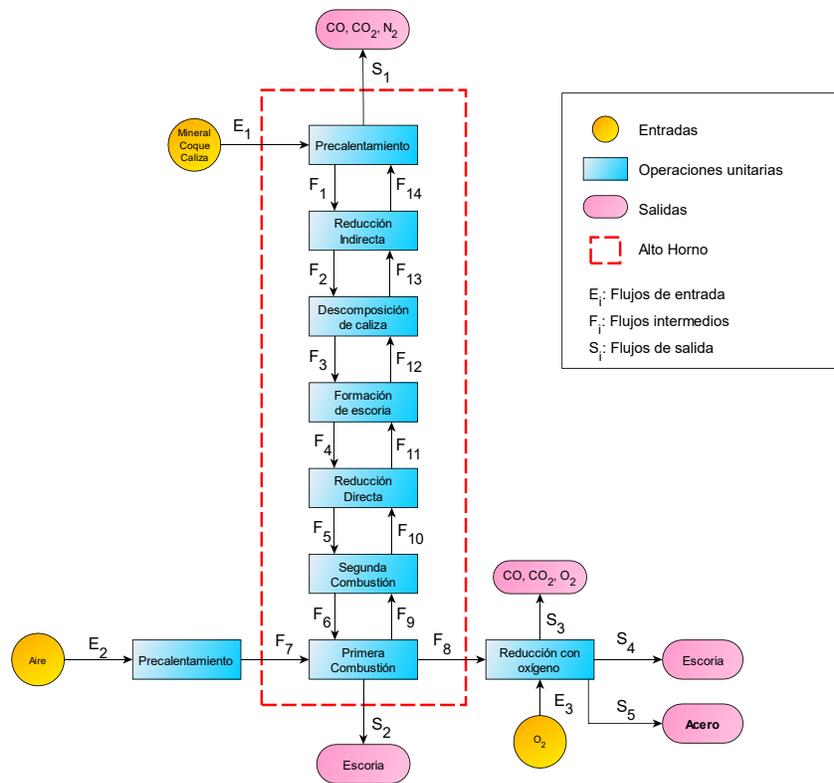


Figura 17: Diagrama de flujo del proceso productivo del acero.

Las materias primas para la producción de acero son:

- Mineral de hierro: corresponde principalmente a hematita, sin embargo, este se encuentra en rocas que también poseen otros componentes, como óxido de silicio, alúmina, azufre, entre otros. Para resolver los balances de masa y energía se considera una composición del mineral de hierro de referencia, la cual se muestra en la Tabla 10.

Tabla 10: Composición del mineral de hierro [50].

Especie	Fórmula química	Composición másica / %
Hematita	Fe ₂ O ₃	95,769
Óxido de silicio	SiO ₂	2,358
Alúmina	Al ₂ O ₃	1,396
Óxido de hierro	FeO	0,455
Óxido de fósforo	P ₂ O ₅	0,021
Azufre	S	0,001

- Coque: está compuesto principalmente por carbono y se utiliza como combustible del alto horno. Se alimentan 500 kg de coque por tonelada de mineral de hierro [31].
- Caliza: es principalmente carbonato de calcio (CaCO₃), el cual se agrega en el alto horno para reducir la concentración de impurezas, alimentándolo a una razón de 40 kg de caliza por tonelada de mineral de hierro [51].

Además del acero, las principales salidas del proceso son:

- Arrabio: es el producto líquido que contiene el hierro fundido, con una composición entre 2% y 4% de carbono. El arrabio puede usarse para la producción de hierro fundido, o continuar en el proceso para disminuir su concentración de carbono y formar el acero.
- Escoria: es el producto que contiene las impurezas descartadas del proceso productivo, tanto en el alto horno como en la acería de oxígeno básico.
- Gases de emisión: son las emisiones gaseosas generadas en el alto horno y en el reactor de reducción con oxígeno, principalmente CO, CO₂, N₂ y O₂.

La Tabla 11 muestra la descripción de los flujos presentados en la Figura 17, incluyendo las especies presentes en cada uno de ellos.

Tabla 11: Descripción de flujos del proceso productivo del acero.

Flujo	Descripción	Especies
E ₁	Entrada de materias primas	Fe ₂ O ₃ , SiO ₂ , Al ₂ O ₃ , FeO, P ₂ O ₅ , S, coque, CaCO ₃
E ₂	Entrada de aire para la combustión	O ₂ , N ₂
E ₃	Oxígeno para acería de oxígeno básico	O ₂
F ₁	Materia prima precalentada	Fe ₂ O ₃ , SiO ₂ , Al ₂ O ₃ , FeO, P ₂ O ₅ , S, coque, CaCO ₃
F ₂	Sólidos tras reducción indirecta	Fe ₂ O ₃ , SiO ₂ , Al ₂ O ₃ , P ₂ O ₅ , S, Fe, coque, CaCO ₃
F ₃	Sólidos tras descomposición de caliza	Fe ₂ O ₃ , SiO ₂ , Al ₂ O ₃ , P ₂ O ₅ , S, Fe, coque, CaO
F ₄	Sólidos en formación de escoria	Fe ₂ O ₃ , Al ₂ O ₃ , P ₂ O ₅ , S, Fe, coque, CaO, CaSiO ₃
F ₅	Salida sólida/líquida en reducción directa	Al ₂ O ₃ , P, S, Fe, coque, CaO, CaSiO ₃
F ₆	Salida sólida/líquida tras segunda combustión	Al ₂ O ₃ , P, S, Fe, coque, CaO, CaSiO ₃
F ₇	Aire precalentado	O ₂ , N ₂
F ₈	Arrabio	Fe, C, P, S
F ₉	Gases tras primera combustión	O ₂ , N ₂ , CO ₂
F ₁₀	Gases tras segunda combustión	O ₂ , N ₂ , CO
F ₁₁	Salida gaseosa de reducción directa	O ₂ , N ₂ , CO
F ₁₂	Gases tras formación de escoria	O ₂ , N ₂ , CO
F ₁₃	Gases tras descomposición de caliza	O ₂ , N ₂ , CO, CO ₂
F ₁₄	Salida gaseosa de reducción indirecta	O ₂ , N ₂ , CO, CO ₂
S ₁	Emisión de gases del alto horno	CO, CO ₂ , N ₂
S ₂	Escoria del alto horno	CaSiO ₃ , CaO, Al ₂ O ₃
S ₃	Emisión de gases del horno de oxígeno básico	CO, CO ₂ , O ₂
S ₄	Escoria de horno de oxígeno básico	CaO, P ₄ O ₁₀
S ₅	Acero	Fe, C, P, S

Además, se toma como referencia la producción de una planta real de la empresa ArcelorMittal en España, la cual genera 5 millones de toneladas de acero al año a partir de un mineral de hematita [52].

3.3.2 Proceso del Aluminio

Para la producción de aluminio se plantea el diagrama de flujo mostrado en la Figura 18, donde se separa la producción entre el proceso Bayer y el proceso Hall-Hérout.

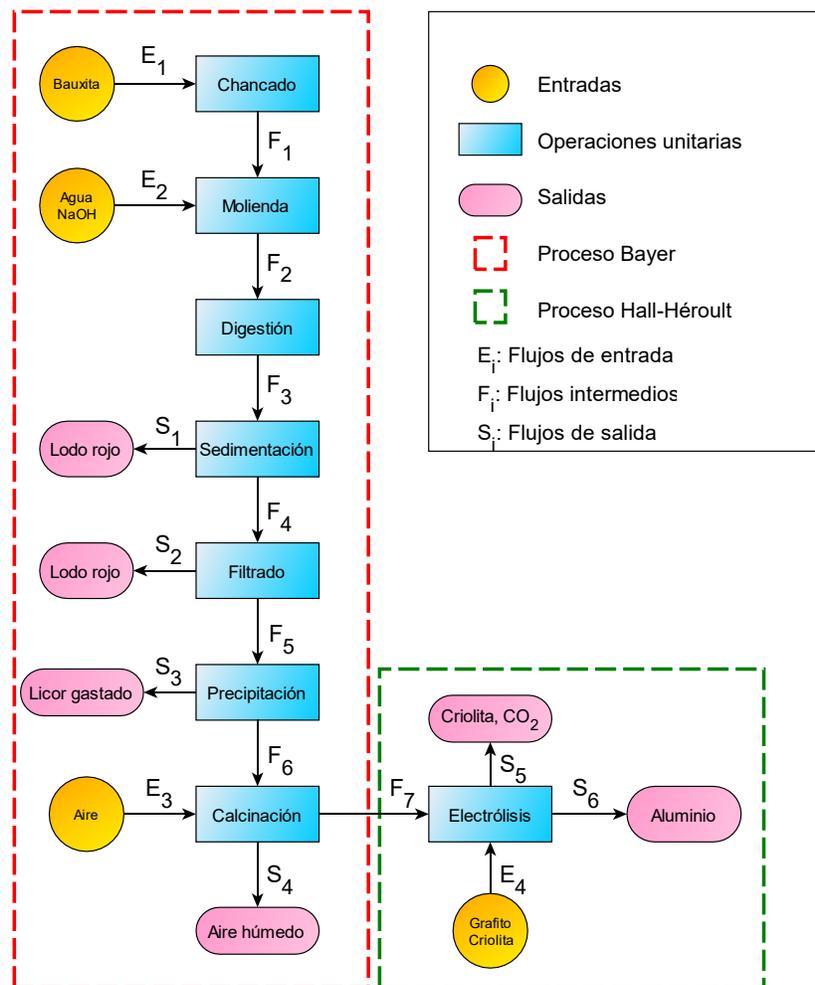


Figura 18: Diagrama de flujo del proceso productivo del aluminio.

Las materias primas para la producción de aluminio son:

- Mineral de aluminio: se considera la gibbsita como fuente mineral, por lo explicado en el Capítulo 2. Los principales componentes de este mineral son

hidróxido de aluminio, óxido de hierro y óxido de silicio, cuya composición se muestra en la Tabla 12.

Tabla 12: Composición del mineral de aluminio [35].

Especie	Fórmula química	Composición másica / %
Hidróxido de aluminio	Al(OH) ₃	70
Óxido de hierro	Fe ₂ O ₃	20
Óxido de silicio	SiO ₂	10

- Hidróxido de sodio: se utiliza una solución acuosa de NaOH con concentración 3 M, ya que a esta concentración se realiza la disolución para gibbsita [37].
- Grafito: corresponde al ánodo de la cuba electrolítica utilizada en el proceso Hall-Hérout. Este se consume a medida que ocurre la reacción anódica.
- Criolita: es agregada a la cuba electrolítica para disminuir la temperatura de fusión del aluminio, tal como se explicó en el Capítulo 2.

Además del aluminio obtenido como producto principal, las otras salidas del proceso son:

- Emisiones gaseosas de CO₂: es la principal emisión en la producción de aluminio, formado en la reacción anódica del proceso Hall-Hérout.
- Lodo rojo: es el mayor residuo del proceso Bayer y corresponde a los sólidos separados tras las etapas de sedimentación y filtración. En su composición permanecen los minerales y especies no disueltas en la etapa de digestión. Los principales componentes y la composición promedio del lodo rojo se muestran en la Tabla 13.

Tabla 13: Composición química del lodo rojo [53].

Especie	Fórmula química	Composición másica / %
Óxido de hierro	Fe ₂ O ₃	20 – 45
Hidróxido de aluminio	Al(OH) ₃	5 – 22
Óxido de silicio	SiO ₂	5 – 30
Óxido de titanio	TiO ₂	4 – 20
Óxido de calcio	CaO	0 – 14

La Tabla 14 muestra la descripción de los flujos presentados en la Figura 18, incluyendo las especies presentes en cada flujo.

Tabla 14: Descripción de flujos del proceso productivo del aluminio.

Flujo	Descripción	Especies
E ₁	Entrada de mineral de aluminio	Al(OH) ₃ , Fe ₂ O ₃ , SiO ₂
E ₂	Solución de NaOH	H ₂ O, NaOH
E ₃	Aire	N ₂ , O ₂
E ₄	Criolita y ánodos de grafito	Na ₃ AlF ₆ , C
F ₁	Mineral chancado	Al(OH) ₃ , Fe ₂ O ₃ , SiO ₂
F ₂	Mineral molido	H ₂ O, Al(OH) ₃ , Fe ₂ O ₃ , SiO ₂ , Na ⁺ , OH ⁻
F ₃	Producto de digestión	H ₂ O, Al(OH) ₃ , Al(OH) ₄ ⁻ , Fe ₂ O ₃ , SiO ₂ , Na ⁺ , OH ⁻
F ₄	Líquido sedimentado	H ₂ O, Al(OH) ₄ ⁻ , Al(OH) ₃ , Na ⁺ , Fe ₂ O ₃ , SiO ₂ , OH ⁻
F ₅	Líquido filtrado	H ₂ O, Al(OH) ₄ ⁻ , Na ⁺ , OH ⁻
F ₆	Precipitado de alúmina (hidratado)	Al(OH) ₃
F ₇	Alúmina	Al ₂ O ₃
S ₁	Lodo rojo (sedimentación)	H ₂ O, Al(OH) ₃ , Fe ₂ O ₃ , Al(OH) ₄ ⁻ , SiO ₂ , Na ⁺ , OH ⁻
S ₂	Lodo rojo (filtrado)	Al(OH) ₃ , Fe ₂ O ₃ , SiO ₂ , H ₂ O, Al(OH) ₄ ⁻ , Na ⁺ , OH ⁻
S ₃	Licor gastado	H ₂ O, Na ⁺ , OH ⁻ , Al(OH) ₄ ⁻
S ₄	Aire húmedo	O ₂ , N ₂ , H ₂ O
S ₅	Criolita y emisiones de electrólisis	Na ₃ AlF ₆ , CO ₂
S ₆	Aluminio	Al

Para obtener los resultados se toma como referencia la producción de 4,7 millones de toneladas anuales de alúmina a partir de bauxita, correspondiente a la refinería de la empresa Alcoa en Pinjarra, Australia, que es la planta de mayor producción a nivel mundial [54].

3.3.3 Proceso del Cobre

En esta sección se presenta la metodología para obtener los resultados de las emisiones asociadas a la producción del cobre. Es importante mencionar que se analiza únicamente la vía pirometalúrgica, ya que la principal mena de cobre es la calcopirita, la que se procesa de esta manera por ser un mineral sulfurado [36].

Además, se descarta la vía hidrometalúrgica porque la cinética asociada a la lixiviación de los compuestos sulfurados es muy lenta, siendo un proceso poco efectivo para el mineral estudiado [55]. En la Figura 19 se presenta el diagrama de flujo para el proceso pirometalúrgico, donde las principales entradas son:

- Mineral de cobre: se considera que la calcopirita es la principal mena de cobre, y se estima que tiene una ley del 1% [36]. El resto de los componentes del mineral y sus composiciones se muestran en la Tabla 15.

Tabla 15: Composición del mineral de cobre [56].

Especie	Fórmula química	Composición másica / %
Calcopirita	CuFeS_2	4,38
Óxido de silicio	SiO_2	60,47
Óxido de aluminio	Al_2O_3	26,90
Óxido de hierro (II)	FeO	3,48
Óxido de calcio	CaO	4,69
Azufre	S	0,08

- Agua: se utiliza en la pulpa que ingresa a la etapa de molienda y en el electrolito de la celda de electrorefinación. Este último está compuesto por una solución acuosa de ácido sulfúrico (H_2SO_4) y sulfato de cobre (CuSO_4) con concentraciones de 170 g L^{-1} y 100 g L^{-1} , respectivamente [57].
- Aire: es usado para concentrar la calcopirita en la etapa de flotación y para generar la combustión en las etapas de fundición.

Por otro lado, además del cobre que se obtiene como producto deseado, las principales salidas del proceso son:

- Relaves: se obtiene en la salida de la etapa de flotación, y corresponde a la mezcla de minerales no deseados (ganga) con agua.
- Escoria: son las impurezas separadas del cobre en las etapas de fundición. Los principales compuestos que forman parte de la escoria son óxidos de silicio (SiO_2), aluminio (Al_2O_3) y hierro (FeO , Fe_3O_4), entre otras especies.
- Emisiones gaseosas: mayormente en las etapas de fundición, donde el azufre del mineral reacciona con el aire para formar dióxido de azufre (SO_2).

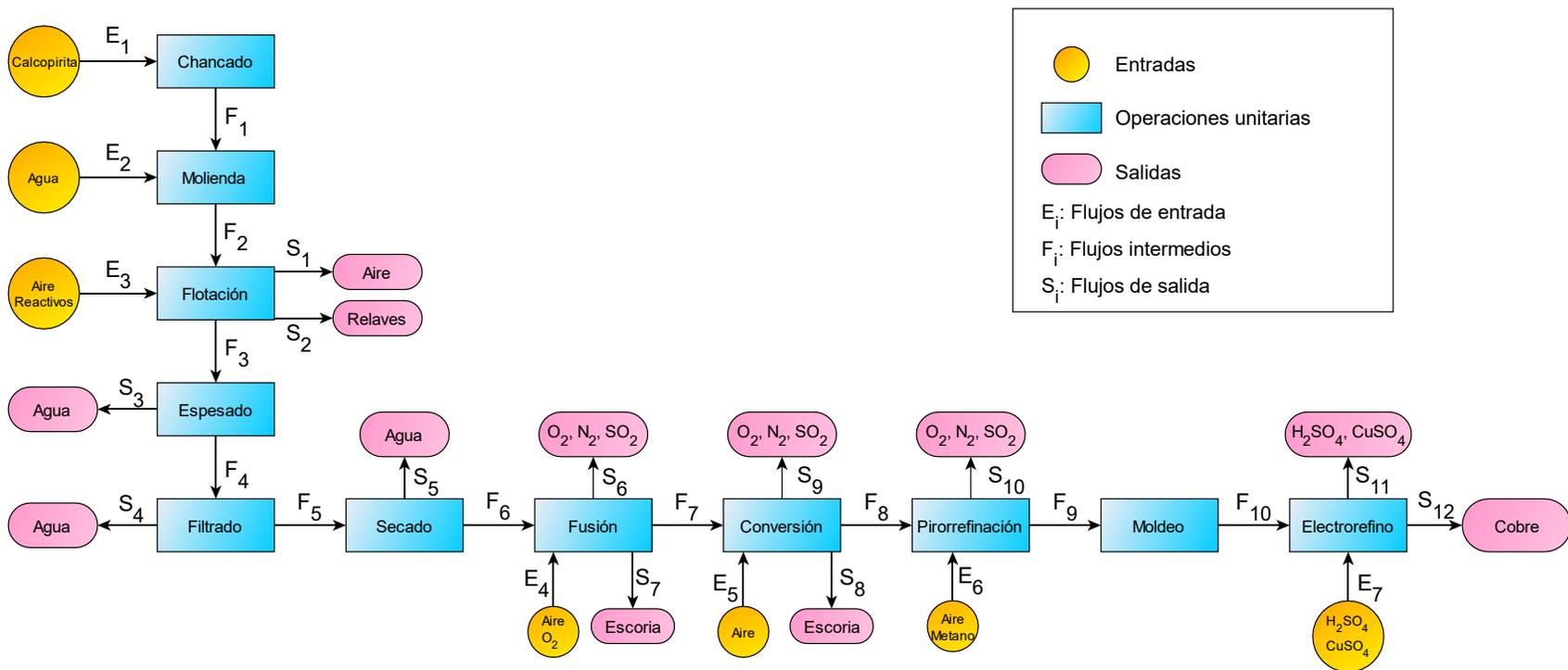


Figura 19: Diagrama de flujo del proceso pirometalúrgico del cobre.

La Tabla 16 muestra las descripciones y especies en los flujos de la Figura 19.

Tabla 16: Descripción de flujos del proceso productivo del cobre.

Flujo	Descripción	Especies
E ₁	Entrada de mineral de cobre	CuFeS ₂ , FeO, SiO ₂ , Al ₂ O ₃ , CaO, S
E ₂	Agua para molienda	H ₂ O
E ₃	Aire y reactivos para flotación	O ₂ , N ₂ , Ca(OH) ₂ , NaCN, C ₆ H ₁₄ O, C ₃ H ₅ OS ₂ K
E ₄	Aire enriquecido de oxígeno	O ₂ , N ₂
E ₅	Aire para convertidor Peirce-Smith	O ₂ , N ₂
E ₆	Aire y metano para horno anódico	O ₂ , N ₂ , CH ₄
E ₇	Electrolito de electrorefino	H ₂ O, H ₂ SO ₄ , CuSO ₄
F ₁	Mineral chancado	CuFeS ₂ , FeO, SiO ₂ , Al ₂ O ₃ , CaO, S
F ₂	Mineral molido	H ₂ O, CuFeS ₂ , FeO, SiO ₂ , Al ₂ O ₃ , CaO, S
F ₃	Concentrado de cobre	H ₂ O, CuFeS ₂ , FeO, SiO ₂ , Al ₂ O ₃ , CaO, S
F ₄	Concentrado de cobre espesado	H ₂ O, CuFeS ₂ , FeO, SiO ₂ , Al ₂ O ₃ , CaO, S
F ₅	Concentrado de cobre filtrado	H ₂ O, CuFeS ₂ , FeO, SiO ₂ , Al ₂ O ₃ , CaO, S
F ₆	Concentrado de cobre seco	CuFeS ₂ , FeO, SiO ₂ , Al ₂ O ₃ , CaO, S
F ₇	Mata de cobre	Cu ₂ S, FeS, SiO ₂ , S
F ₈	Cobre blíster	Cu, S
F ₉	Cobre anódico	Cu, S
F ₁₀	Ánodos de cobre moldeados	Cu, S
S ₁	Salida de aire de flotación	O ₂ , N ₂
S ₂	Relaves	H ₂ O, CuFeS ₂ , FeO, SiO ₂ , Al ₂ O ₃ , CaO, S
S ₃	Salida de agua de espesado	H ₂ O, CuFeS ₂ , FeO, SiO ₂ , Al ₂ O ₃ , CaO, S
S ₄	Agua retirada en filtrado	H ₂ O, CuFeS ₂ , FeO, SiO ₂ , Al ₂ O ₃ , CaO, S
S ₅	Agua retirada en secado	H ₂ O
S ₆	Gases emitidos en la fusión	O ₂ , N ₂ , SO ₂
S ₇	Escoria de la fusión	Cu ₂ S, FeO, Fe ₃ O ₄ , Fe ₂ SiO ₄ , SiO ₂ , Al ₂ O ₃ , CaO
S ₈	Escoria de la conversión	FeO, Fe ₃ O ₄ , Fe ₂ SiO ₄ , SiO ₂ , Cu
S ₉	Gases emitidos en la conversión	O ₂ , N ₂ , SO ₂
S ₁₀	Gases emitidos en la pirorrefinación	O ₂ , N ₂ , SO ₂
S ₁₁	Salida de electrolito	H ₂ O, H ₂ SO ₄ , CuSO ₄
S ₁₂	Cátodo de cobre	Cu

Para resolver los balances de masa y energía se toma como referencia la planta de Codelco “El Teniente”, ubicada en Rancagua, Chile, que usa la vía pirometalúrgica y produce 465 mil toneladas de cobre al año a partir de calcopirita [43][58].

3.4 Servicios

Para calcular las emisiones asociadas al uso de servicios se considera que se requiere electricidad, gas natural, vapor de agua, y aire. Los factores de emisión de CO_{2,eq} de la generación de electricidad y de la combustión de gas natural se estiman a partir de la base de datos de la Agencia de Protección de Medioambiente (EPA, por su sigla en inglés) de Estados Unidos, documento E9-5711 [59]. Las etapas que requieren cada uno de estos servicios se resumen en la Tabla 17.

Tabla 17: Requerimiento de servicio de cada etapa.

Servicio	Proceso productivo	Etapas
Electricidad	Acero	Acería de oxígeno básico
		Chancado
	Aluminio	Molienda
		Calcinación
		Electrolisis de aluminio
	Cobre	Chancado
		Molienda
		Secado
		Electrorefinación
	Gas Natural	Acero
Aluminio		Digestión
Cobre		Pirorrefinación
Vapor	Cobre	Calentamiento de electrolito
Aire	Acero	Alto horno
		Acería de oxígeno básico
	Aluminio	Calcinación
	Cobre	Flotación
		Fusión
		Conversión

Para estimar el impacto ambiental asociado al uso de servicios se considera que la electricidad tiene un factor de emisión de $9,94 \times 10^{-5}$ kg de $\text{CO}_{2,\text{eq}}$ kJ^{-1} [59]. Además, el gas natural tiene un poder calorífico de 1.600 kJ kg^{-1} y un factor de emisión de $5,59 \times 10^{-5}$ kg de $\text{CO}_{2,\text{eq}}$ kJ^{-1} [59].

Por otro lado, el vapor de agua y el aire no tienen emisiones de $\text{CO}_{2,\text{eq}}$ asociadas, sin embargo, son necesarios para resolver los balances de masa y energía de cada proceso productivo. Para estos servicios se consideran los siguientes supuestos:

- El vapor de agua que se utiliza para calentar ingresa a 125°C .
- El aire, que se utiliza para enfriar, ingresa a 25°C y 1 atm. Tiene un poder calorífico de -5 kJ kg^{-1} .

Capítulo 4. Resultados y Discusión

En esta sección se presentan los resultados de balances de masa, balances de energía, y consumos de servicios en los procesos productivos del acero, el aluminio y el cobre. Cabe mencionar que los resultados son presentados utilizando la nomenclatura de flujos del Capítulo 3.

4.1 Producción de acero y hierro fundido

4.1.1 Precalentamiento de aire

El objetivo de esta etapa es precalentar el aire que ingresa al alto horno desde una temperatura de 25 hasta 1.000°C, que es la temperatura necesaria para la correcta operación de este equipo [60]. El balance de masa global para la etapa de precalentamiento de aire queda determinado por la expresión (32).

$$0 = E_2 - F_7 \quad (32)$$

Se establece que la cantidad de aire a utilizar es 2,5 veces la masa de mineral de hierro para asegurar que todo el coque utilizado como combustible reaccione [51].

Tabla 18: Balance de masa para precalentamiento de aire.

Especie	$E_2 / t h^{-1}$	$F_7 / t h^{-1}$
O ₂	490,09	490,09
N ₂	1.614,05	1.614,05
Total	2.104,14	2.104,14

El requerimiento de calor para que el aire alcance la temperatura deseada viene dado por el balance de energía:

$$Q = F_7 \cdot H_7 - E_2 \cdot H_2 \quad (33)$$

donde H_i es la entalpía asociada al flujo másico F_i . De esta manera se obtiene que el flujo de calor requerido es 627 MW. Luego, las emisiones de CO_{2,eq} asociadas al requerimiento de gas natural (\dot{m}_{gas}) como servicio para calentar el aire son:

$$m_{gas} = 627.000 \text{ kJ s}^{-1} \cdot 5,59 \cdot 10^{-5} \text{ kg CO}_{2,eq} \text{ kJ}^{-1} = 35,05 \text{ kg CO}_{2,eq} \text{ s}^{-1} \quad (34)$$

Se considera que este resultado está sobreestimado, ya que las plantas siderúrgicas aprovechan el calor de los gases emitidos para precalentar el aire en equipos llamados estufas de alto horno, o *cowpers*, con el fin de disminuir el consumo de gas natural y enfriar los gases de emisión [61]. Para tener un resultado más cercano a la realidad habría que considerar la transferencia de calor entre el aire y la salida gaseosa del alto horno.

4.1.2 Fusión en alto horno

Tal como se mencionó en el Capítulo 2, la fusión en el alto horno fue dividida en secciones, las cuales se pueden ver en la Figura 17, y para cada una de ellas se presentan los balances de masa y energía. Cabe mencionar que las entradas se consideran conocidas y contemplan la alimentación de mineral de hierro, coque y caliza por la parte superior del horno, y de aire desde la parte inferior.

Para cada sección se plantean los balances respectivos, pero es importante mencionar que los resultados globales corresponden a la solución del sistema de ecuaciones formado por todas las etapas del alto horno.

La primera etapa de manera descendiente en el alto horno es el precalentamiento de la materia prima, donde la carga de mineral, coque y caliza se pone en contacto con los gases de emisión para aumentar su temperatura de 25 a 400°C [62]. Considerando los flujos mostrados en la Figura 17 y la Tabla 11, el balance de masa queda determinado por la ecuación (35).

$$0 = E_1 + F_{14} - F_1 - S_1 \quad (35)$$

Además, se considera que no hay reacciones involucradas, por lo que se pueden establecer las relaciones (36) y (37), que implican que los sólidos descienden y los gases suben a través del horno, respectivamente.

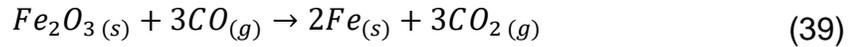
$$E_1 = F_1 \quad (36)$$

$$F_{14} = S_1 \quad (37)$$

La siguiente etapa corresponde a la reducción indirecta, que ocurre a 600°C [62]. El balance de masa global de esta etapa queda dado por la ecuación (38).

$$0 = F_1 + F_{13} - F_2 - F_{14} \quad (38)$$

En esta sección se reduce el mineral de hierro con monóxido de carbono, y a su vez, parte del monóxido reacciona con el oxígeno proveniente desde las secciones inferiores del alto horno para formar dióxido de carbono. Luego, las reacciones involucradas son:



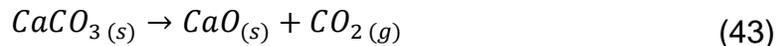
De la revisión bibliográfica, se tiene que la conversión del óxido de hierro por reducción indirecta ($\chi_{Fe_2O_3}^{RI}$) es 66,7% [31]. Además, la composición del gas de salida no tiene oxígeno [63], lo que significa que es completamente consumido en la reacción (40). Teniendo esto en consideración, se pueden establecer las relaciones (41) y (42), donde $f_i^{F_j}$ representa la fracción másica de la especie i en el flujo F_j .

$$\chi_{Fe_2O_3}^{RI} = \frac{f_{Fe_2O_3}^{F_1} \cdot F_1 - f_{Fe_2O_3}^{F_2} \cdot F_2}{f_{Fe_2O_3}^{F_1} \cdot F_1} = 0,667 \quad (41)$$

$$\chi_{O_2} = 1 \quad (42)$$

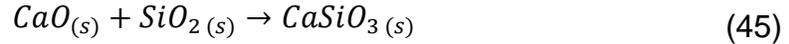
La siguiente etapa es la descomposición térmica de la caliza en cal (CaO) y dióxido de carbono, la cual ocurre a 900°C según la reacción (43). A esta temperatura, todo el CaCO₃ se descompone, por lo que se considera que la conversión de la reacción es 100%.

El balance de masa general de esta sección queda dado por la ecuación (44).



$$0 = F_2 + F_{12} - F_3 - F_{13} \quad (44)$$

Luego, en la sección a 1.200°C la cal reacciona con el óxido de silicio acorde a la reacción (45) para que ocurra la formación de escoria, que es principalmente silicato de calcio (CaSiO_3) [64].



En rigor, esta reacción ocurre a partir de los 1.200°C y sigue ocurriendo a medida que aumenta la temperatura hasta lograr la conversión completa de SiO_2 . Sin embargo, para simplificar el proceso se toma como supuesto que toda la conversión ocurre en esta sección.

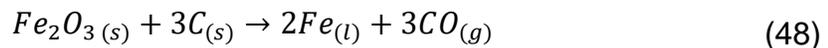
El balance de masa de la etapa de formación de escoria queda descrito por la ecuación (46).

$$0 = F_3 + F_{11} - F_4 - F_{12} \quad (46)$$

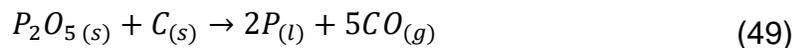
Posterior a la formación de escoria, viene la etapa de reducción directa con coque y la fusión del hierro, la cual ocurre a 1.540°C, cuyo balance de masa global se muestra en la ecuación (47).

$$0 = F_4 + F_{10} - F_5 - F_{11} \quad (47)$$

La reacción (48) representa la reducción del mineral. En esta etapa se consume todo el mineral de hierro que no reaccionó en la reducción indirecta, por lo que la conversión de Fe_2O_3 sería completa.



Adicionalmente, en esta sección ocurre la reacción de P_2O_5 con coque, donde se forma el fósforo que otorga las propiedades al acero. Esta reacción se muestra en (49) y se considera conversión completa de P_2O_5 .



Las últimas dos secciones corresponden a las dos etapas de la combustión del coque. La primera ocurre a 2.000°C en la sección inferior del alto horno, donde el coque reacciona con el oxígeno para formar CO₂. Luego, la segunda zona de combustión ocurre a medida que el CO₂ asciende por el horno, por lo que ocurre a una menor temperatura (1.700°C) y el coque reacciona formando CO [30]. Los balances de masa para la primera y segunda combustión se muestran en las ecuaciones (50) y (51).

$$0 = F_6 + F_7 - F_8 - F_9 - S_2 \quad (50)$$

$$0 = F_5 + F_9 - F_6 - F_{10} \quad (51)$$

La conversión global de coque se fijó en 90%, de esta manera el arrabio tendría la composición másica de carbono en el rango acorde a este producto.

Finalmente, se resuelve el sistema de las ecuaciones formado por los balances de masa y energía de cada sección. Así, se logra determinar que el requerimiento de potencia del alto horno para la producción propuesta es de 19,6 GW. Del mismo modo, se encuentran los flujos de salida del alto horno, correspondientes a los gases de emisión (S_1), la escoria (S_2) y el arrabio (F_8). El resultado del balance de masa se presenta en la Tabla 19.

Sobre los resultados de la Tabla 19 es importante discutir las composiciones del gas de salida y el arrabio. Con respecto al primero, las composiciones másicas de nitrógeno, dióxido y monóxido de carbono son 58,8%, 23,3% y 17,9%, respectivamente. Según referencias bibliográficas, una composición estándar para este gas es 50,4% N₂, 30,5% CO₂ y 18,9% CO [63], por lo que se considera que los resultados obtenidos son consecuentes con un caso real y están en el mismo rango. La diferencia existente se puede atribuir a que para simplificar los balances de energía se consideró que el mineral estaba seco, sin embargo, siempre existe humedad remanente en el mineral. En consecuencia, el agua puede reaccionar con coque generando CO e hidrógeno gaseoso (H₂), lo que altera las composiciones de la salida.

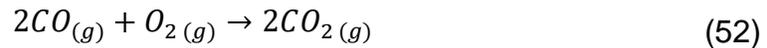
Tabla 19: Balance de masa para alto horno.

Especie	E₁ / t h⁻¹	E₂ / t h⁻¹	S₁ / t h⁻¹	S₂ / t h⁻¹	F₈ / t h⁻¹
Fe₂O₃	806,05	0	0	0	0
SiO₂	19,85	0	0	0	0
Al₂O₃	11,75	0	0	11,75	0
FeO	3,83	0	0	0	0
P₂O₅	0,17	0	0	0	0
S	0,01	0	0	0	0,01
C	420,83	0	0	0	40,07
CaCO₃	33,67	0	0	0	0
Fe	0	0	0	0	566,75
P	0	0	0	0	0,08
CaO	0	0	0	0,34	0
CaSiO₃	0	0	0	38,37	0
O₂	0	490,09	0	0	0
N₂	0	1.614,05	1.614,05	0	0
CO	0	0	491,51	0	0
CO₂	0	0	637,37	0	0
Total	1.296,16	2.104,14	2.742,93	50,46	606,91

Por otro lado, en la composición másica de arrabio predomina el hierro con un 93,3% y el carbono con 6,6%. Estos resultados son similares a los esperados, pues por referencias se conoce que el arrabio tiene en promedio 94,4% de hierro y 4,5% de carbono [65]. Si bien esta diferencia de carbono podría cambiar considerablemente las propiedades del producto, se considera que el valor está en el orden de magnitud acorde a lo esperado. Se podría alcanzar un resultado con mayor precisión si se hubieran considerado otros componentes del arrabio, como el manganeso, el magnesio o el silicio, sin embargo, estos no se consideraron para simplificar el estudio.

En este punto se pueden calcular las emisiones asociadas a la producción de una tonelada de hierro fundido, pues la producción de este material utiliza arrabio sólido

como materia prima, tal como se mencionó en la sección 2.1. Sin embargo, para estimar sus emisiones hay que considerar que todo el CO emitido por el alto horno debe ser convertido en CO₂ antes de ser liberado a la atmosfera. Esto se hace fuera del equipo y la reacción involucrada es la ecuación (52).



Mediante estequiometría se puede calcular la masa de dióxido de carbono generada al alcanzar la conversión completa de CO, esto es:

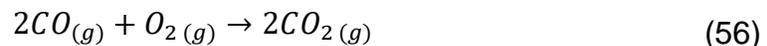
$$m_{CO_2}^{S_1} = \frac{m_{CO}^{S_1}}{PM_{CO}} \cdot PM_{CO_2} \quad (53)$$

donde $m_i^{S_1}$ es el flujo másico de la especie i en la salida gaseosa del alto horno y PM_i es el peso molecular de la especie i . Al resolver se obtiene una masa de CO₂ igual a 772,27 t h⁻¹, que al sumarle las emisiones directas de CO₂ del alto horno se llega a que la emisión total es de 1.409,64 t h⁻¹. Finalmente, las emisiones de CO₂ asociadas a la producción de una tonelada de hierro fundido (E_{HF}) incluyen el precalentamiento del aire y el alto horno, esto es:

$$E_{HF} = \frac{(126,18 + 1.409,64) t CO_2 h^{-1}}{606,91 t_{HF} h^{-1}} = 2,5 t CO_{2,eq} t_{HF}^{-1} \quad (54)$$

4.1.3 Reducción con oxígeno básico

La última etapa del proceso es la reducción con oxígeno básico. En ella, se ingresa el arrabio obtenido en el alto horno y se reduce el contenido de carbono para formar el acero como producto final. Esta reducción se logra alimentando oxígeno en alta concentración, de tal manera que logre reaccionar acorde a las reacciones (55) y (56).



Adicionalmente, se carga óxido de calcio para favorecer la formación de escoria en la acería de oxígeno básico. Una de las reacciones que se considera es la oxidación de fósforo hacia P_4O_{10} para controlar la composición de este compuesto en el acero. La reacción respectiva se muestra en la ecuación (57) y se considera una conversión del 90% para asegurar que la composición másica de fósforo sea menor o igual a 0,04%, tal como se presentó en la Tabla 3.



Además, el balance de masa global para esta etapa queda determinado en la ecuación (58), que considera en las entradas el arrabio (F_8) y los requerimientos del equipo (E_3), mientras que en la salida están los gases de emisión (S_3), la escoria de la etapa (S_4) y el acero (S_5).

$$0 = F_8 + E_3 - S_3 - S_4 - S_5 \quad (58)$$

Tras resolver, se llega a los resultados mostrados en la Tabla 20.

Tabla 20: Balance de masa para reducción con oxígeno básico.

Espece	$F_8 / t h^{-1}$	$E_3 / t h^{-1}$	$S_3 / t h^{-1}$	$S_4 / t h^{-1}$	$S_5 / t h^{-1}$
Fe	566,75	0	0	0	566,75
C	40,07	0	0	0	4,01
P	0,08	0	0	0	0,01
S	0,01	0	0	0	0,01
CaO	0	21,38	0	21,38	0
P₄O₁₀	0	0	0	0,16	0
O₂	0	65,06	7,33	0	0
N₂	0	3,56	3,56	0	0
CO	0	0	67,27	0	0
CO₂	0	0	26,43	0	0
Total	606,91	90,00	104,59	21,54	570,78

De la Tabla 20 se observa que la composición de hierro en el acero final es de 99,3%. Además, la conversión de carbono en esta etapa es 89,9%, con lo que la

composición másica de este elemento en el acero final es de 0,7%. Este valor se considera adecuado, considerando que el acero debe tener una composición de carbono menor al 1%. Por último, también se cumple que las composiciones de fósforo y azufre son menores a 0,04% y 0,05%, respectivamente.

Sobre el balance de energía, es importante mencionar que este equipo opera de manera autógena, es decir, aprovecha el calor generado en las reacciones para mantener su operación y no requiere de fuentes externas. Luego, para resolver el balance de energía se impone que el requerimiento energético externo sea nulo y se encuentra la temperatura de operación del equipo. Bajo estas condiciones, la temperatura calculada es 1.961°C, cuyo valor es superior al real, que es de 1.600°C [66]. Esto se debe a que al calcularlo se consideró una entrada continua de oxígeno, sin embargo, en la realidad se utilizan sistemas de control que ante aumentos de temperatura disminuyen el flujo de oxígeno para evitar sobrecalentamiento, de manera que se podría obtener el resultado adecuado si se estudia la alimentación de oxígeno como un flujo intermitente o semicontinuo. Por otro lado, cabe mencionar que se alcanza la temperatura necesaria de manera autógena, sin embargo, se debería retirar un flujo de calor de 98 MW para que el equipo opere en la temperatura adecuada.

En relación con las emisiones de CO₂ en esta etapa, se procede de manera análoga al caso del alto horno, es decir, también se contemplan las emisiones directas generadas por las reacciones (55) y (56) y la oxidación del monóxido de carbono a CO₂ para cuantificar las emisiones totales. Utilizando nuevamente la relación (53) se tiene que las emisiones de CO₂ asociadas a la acería de oxígeno básico son 132,13 t h⁻¹.

Finalmente, para calcular las emisiones asociadas a la producción de una tonelada de acero (E_{acero}) se deben considerar las emisiones del precalentamiento de aire, alto horno y reducción con oxígeno básico, lo cual se muestra en la ecuación (59).

$$E_{acero} = \frac{(126,18 + 1.409,64 + 132,13) t CO_2 h^{-1}}{570,78 t_{acero} h^{-1}} = 2,9 t CO_{2,eq} t_{acero}^{-1} \quad (59)$$

De esta manera, se obtiene que las emisiones en la producción de una tonelada de hierro fundido y acero son 2,5 y 2,9 t CO_{2,eq}, respectivamente. Al comparar estos valores con los reportados se encuentra un resultado sobreestimado, pues en promedio se emiten 1,9 toneladas de CO₂ por tonelada de acero producida [67]. La diferencia en estos resultados se debe a que actualmente se utilizan tecnologías que disminuyen el impacto ambiental y que no fueron consideradas, como aprovechar el calor de los gases de emisiones para calentar el aire inicial, la recirculación de monóxido de carbono dentro de las secciones del alto horno para aprovechar su capacidad como agente reductor, entre otras.

4.2 Producción de aluminio

4.2.1 Chancado

La primera etapa del proceso corresponde al chancado del mineral, al cual se le disminuye el tamaño de 200 a 20 mm [32]. El balance de masa para esta etapa queda determinado por la ecuación (60), mientras que el resultado del balance de masa se muestra en la Tabla 21.

$$0 = E_1 - F_1 \quad (60)$$

Tabla 21: Balance de masa para el chancado de mineral de aluminio.

Espece	$E_1 / t h^{-1}$	$F_1 / t h^{-1}$
Al(OH)₃	1.295,00	1.295,00
Fe₂O₃	370,00	370,00
SiO₂	185,00	185,00
Total	1.850,00	1.850,00

El flujo de entrada de mineral se fijó teniendo en consideración que para formar una tonelada de alúmina se requieren entre 1,9 y 3,6 toneladas de bauxita [68]. Además, se usa la relación de la Tabla 12 para determinar la masa de cada componente.

Por otro lado, la energía requerida para disminuir el tamaño del mineral (E) y el tamaño de las partículas se pueden relacionar según la ecuación de Bond, que

corresponde a una relación empírica utilizada en procesos de conminución [69], la cual se presenta en la ecuación (61).

$$E = 10 \cdot E_i \cdot \left(\frac{1}{\sqrt{d_f}} - \frac{1}{\sqrt{d_i}} \right) \quad (61)$$

En la ecuación (61) se tiene que:

- E_i : índice de trabajo de Bond, en kWh t⁻¹. Este parámetro es constante y depende de las propiedades del material procesado. Para el caso de la bauxita se tiene un valor de 10,8 kWh t⁻¹ [70].
- d_i : diámetro de entrada de las partículas, en mm.
- d_f : diámetro de salida, en mm.

Una vez que se obtiene la energía necesaria (en kWh t⁻¹), se multiplica por el flujo de mineral para encontrar la potencia total requerida, donde se obtiene un valor de 1,7 MW. Como el equipo funciona con electricidad, se utiliza el factor de emisión asociado a la generación de electricidad y se encuentra que se emiten 0,59 t CO_{2,eq} h⁻¹.

4.2.2 Molienda

La siguiente etapa corresponde a la molienda, en la cual se forma una pulpa entre el mineral chancado y una solución acuosa de hidróxido de sodio para lograr disminuir el tamaño de 20 a 1,5 mm en un molino de bolas [32].

El flujo de agua se determinó considerando que una planta real requiere 5 litros de agua por kg de alúmina formada [71]. Conociendo además la relación másica entre bauxita y alúmina descrita en la sección 4.2.1, se puede suponer que el flujo másico de agua es aproximadamente 1,5 veces el de mineral.

La concentración de NaOH depende de la naturaleza del mineral. En este caso, como se trabaja con bauxita en base a gibbsita, la concentración adecuada es 105 g L⁻¹, es decir, 2,63 M de NaOH [32].

La expresión para el balance de masa de esta etapa se muestra en la ecuación (62), cuyo resultado se muestra en la Tabla 22. Cabe mencionar que en esta etapa tampoco hay reacciones involucradas.

$$0 = E_2 + F_1 - F_2 \quad (62)$$

Tabla 22: Balance de masa para la molienda de mineral de aluminio.

Especie	$E_2 / t h^{-1}$	$F_1 / t h^{-1}$	$F_2 / t h^{-1}$
Al(OH)₃	0	1.295,00	1.295,00
Fe₂O₃	0	370,00	370,00
SiO₂	0	185,00	185,00
H₂O	2.775,00	0	2.775,00
Na⁺	1.402,17	0	1.402,17
OH⁻	1.307,35	0	1.307,35
Total	5.214,52	1.850,00	7.064,52

Por otro lado, el balance de energía también se resuelve utilizando la ecuación de Bond, donde se obtiene que el requerimiento energético es de 0,51 MW, que al utilizar electricidad como servicio generaría 0,18 t CO_{2,eq} h⁻¹.

4.2.3 Digestión

A continuación, se realiza la digestión de bauxita, cuyo objetivo es disolver el hidróxido de aluminio en la solución de NaOH. De esta manera se obtiene una solución concentrada en aluminio como ion Al(OH)₄⁻ según la reacción (14). Este proceso se realiza en un reactor a 140°C porque a esa temperatura se favorece la velocidad de reacción sin que existan otras reacciones involucradas [32].

La expresión que describe el balance de masa para la digestión de bauxita se muestra en la ecuación (63), y su respectivo resultado se presenta en la Tabla 23.

$$0 = F_2 - F_3 \quad (63)$$

Para resolver el balance de masa se considera que la conversión de gibbsita es de 95,5%, ya que ese es el valor que se alcanza a nivel industrial [72].

Tabla 23: Balance de masa para la digestión de bauxita.

Espece	$F_2 / t h^{-1}$	$F_3 / t h^{-1}$
$Al(OH)_3$	1.295,00	58,27
Fe_2O_3	370,00	370,00
SiO_2	185,00	185,00
H_2O	2.775,00	2.775,00
Na^+	1.402,17	1.402,17
OH^-	1.307,35	767,70
$Al(OH)_4^-$	0	1.506,38
Total	7.064,52	7.064,52

Por otro lado, el balance de energía contempla el calor necesario para aumentar la temperatura de la pulpa de 25°C a 140°C y para mantener constante la temperatura en el reactor. Esto da como resultado un requerimiento de 6,28 GW, que equivalen a 1.253 t CO_{2,eq} h⁻¹.

Sobre el resultado del balance de energía, es importante considerar las condiciones con las que se trabaja, pues el mineral en base a gibbsita tiene mayor concentración de aluminio que el mineral en base a boehmita o diáspora, por lo que si se trabajara con otros minerales el requerimiento energético e hídrico sería mucho mayor para producir una misma cantidad de aluminio. Además, estos otros minerales presentan cinéticas diferentes y requieren mayores temperaturas de operación. Por ejemplo, para una misma concentración de NaOH, las digestiones de boehmita y diáspora deben realizarse a 237 y 262°C, respectivamente [32], lo que aumentaría considerablemente el consumo energético.

4.2.4 Sedimentación

En las siguientes etapas, sedimentación y filtración, se deben separar los residuos sólidos de la solución (licor). Primero se realiza la sedimentación, donde la separación se hace por gravedad. El balance de masa queda descrito por:

$$0 = F_3 - F_4 - S_1 \quad (64)$$

En la sedimentación no ocurren reacciones químicas y se logra retirar el 85% de los sólidos [32], de manera que se llega al resultado de la Tabla 24.

Tabla 24: Balance de masa para la sedimentación.

Especie	$F_3 / t h^{-1}$	$F_4 / t h^{-1}$	$S_1 / t h^{-1}$
$Al(OH)_3$	58,27	8,74	49,53
Fe_2O_3	370,00	55,50	314,50
SiO_2	185,00	27,75	157,25
H_2O	2.775,00	2.529,15	245,85
Na^+	1.402,17	1.277,94	124,23
OH^-	767,70	699,68	68,02
$Al(OH)_4^-$	1.506,38	1.372,92	133,46
Total	7.064,52	5.971,68	1.092,84

Por último, no se considera el balance de energía debido a que no existen reacciones, cambios de temperatura ni requerimiento de servicios en esta etapa.

4.2.5 Filtrado

A continuación, en la etapa de filtrado se retiran los sólidos restantes, de manera de obtener el licor necesario para la siguiente etapa. El balance de masa del filtrado queda descrito por la ecuación (65) y el resultado se muestra en la Tabla 25.

$$0 = F_4 - F_5 - S_2 \quad (65)$$

Tabla 25: Balance de masa para filtrado en proceso del aluminio.

Especie	$F_4 / t h^{-1}$	$F_5 / t h^{-1}$	$S_2 / t h^{-1}$
$Al(OH)_3$	8,74	0	8,74
Fe_2O_3	55,50	0	55,50
SiO_2	27,75	0	27,75
H_2O	2.529,15	2.525,19	3,96
Na^+	1.277,94	1.275,94	2,00
OH^-	699,68	698,58	1,10
$Al(OH)_4^-$	1.372,92	1.370,77	2,15
Total	5.971,68	5.870,48	101,20

Es importante mencionar que el lodo rojo corresponde al conjunto de las salidas sólidas de la sedimentación y la filtración (S_1 y S_2), es decir, 1.194 t h^{-1} . En la Tabla 26 se muestra el total obtenido para el agua y las especies sólidas que componen el lodo rojo.

Tabla 26: Flujo y composición másica del lodo rojo.

Especie	Lodo rojo / t h^{-1}	Composición másica / %
Al(OH)_3	58,27	6,75
Fe_2O_3	370,00	42,87
SiO_2	185,00	21,43
H_2O	249,81	28,95
Total	863,08	100

De la Tabla 26 se observa que las composiciones másicas de todas las especies sólidas están dentro de los rangos esperados para la composición del lodo rojo (ver Tabla 13), por lo que se considera que el resultado obtenido es consecuente con una planta real.

Por último, al igual que la etapa anterior, la filtración no tiene reacciones químicas, variaciones de temperatura ni requerimiento de servicios, por lo que el balance de energía no otorga un resultado de interés para el estudio.

4.2.6 Precipitación

El objetivo de esta etapa es precipitar el hidróxido de aluminio como cristales por sobresaturación del licor al disminuir la temperatura hasta 60°C , acorde a la reacción (15). El balance de masa global de esta etapa queda determinado por la ecuación (66), donde F_6 corresponde a la masa de cristales separados de la solución (licor gastado), S_3 .

$$0 = F_5 - F_6 - S_3 \quad (66)$$

De esta manera, se llega a los flujos másicos presentados en la Tabla 27.

Tabla 27: Balance de masa para la precipitación de $Al(OH)_3$.

Especie	$F_5 / t h^{-1}$	$F_6 / t h^{-1}$	$S_3 / t h^{-1}$
$Al(OH)_3$	0	1.069,12	0
Fe_2O_3	0	0	0
SiO_2	0	0	0
H_2O	2.525,19	0	2.525,19
Na^+	1.275,94	0	1.275,94
OH^-	698,58	0	931,69
$Al(OH)_4^-$	1.370,77	0	68,54
Total	5.870,48	1.069,12	4.801,36

Por otro lado, tras resolver el balance de energía se encuentra un requerimiento de 5,41 GW. Esta etapa no tiene emisiones directas y el enfriamiento se hace mediante agua, lo que sólo influye en el consumo hídrico.

4.2.7 Calcinación

La siguiente etapa, y última en el proceso Bayer, corresponde a la calcinación, donde el hidróxido de aluminio ingresa en un lecho fluidizado en el cual circula aire para retirar el agua y formar la alúmina, según la reacción (16). El balance de masa general para esta etapa queda determinado por la ecuación (67). El resultado del balance de masa se muestra en la Tabla 28, donde el flujo F_7 corresponde al caso base propuesto.

$$0 = E_3 + F_6 - F_7 - S_4 \quad (67)$$

Tabla 28: Balance de masa para la calcinación de alúmina.

Especie	$E_3 / t h^{-1}$	$F_6 / t h^{-1}$	$F_7 / t h^{-1}$	$S_4 / t h^{-1}$
$Al(OH)_3$	0	1.069,12	0	251,24
Al_2O_3	0	0	534,54	0
H_2O	0	0	0	283,34
Aire	1.000,00	0	0	1.000,00
Total	1.000,00	1.069,12	534,54	1.534,58

El balance de energía contempla los requerimientos tanto como para llevar el equipo a la temperatura de operación, es decir, hasta 1.100°C [37], como también para aumentar la presión del aire utilizado de 1 a 7,5 atm, que es la presión de operación en los compresores de las plantas de Alcoa [73].

El requerimiento energético del compresor se obtiene con la expresión de compresión isentrópica (W), mostrada en la ecuación (68) [74].

$$W = \frac{P_1 \cdot V_1}{\left(\frac{k-1}{k}\right)} \cdot \left[\left(\frac{P_2}{P_1}\right)^{(k-1)/k} - 1 \right] \quad (68)$$

donde:

- P_1 : presión de entrada, en Pa.
- P_2 : presión de salida, en Pa.
- V_1 : volumen del gas, en m³.
- k : coeficiente de dilatación adiabática, correspondiente al cociente entre la capacidad calorífica a presión constante (C_p) y la capacidad calorífica a volumen constante (C_v). Para este caso tiene un valor aproximado de 1,4.

Finalmente, se encuentra que el requerimiento del compresor es de 89,95 MW. Como se utiliza electricidad para que funcione, las emisiones correspondientes son 31,2 t CO_{2,eq} h⁻¹. Además, el consumo energético utilizado para la calefacción del lecho fluidizado es de 892 MW, lo que equivale a 310 t CO_{2,eq} h⁻¹ por uso de electricidad como servicio.

4.2.8 Electrólisis de alúmina

La última etapa de la producción de aluminio es el proceso Hall-Hérout, donde ocurre la electrólisis de alúmina en una cuba electrolítica. Tal como se mencionó en la sección 2.2.2, primero se disuelve la alúmina, formando iones Al³⁺ y O²⁻. En la cuba se aplica una corriente continua de 130 kA y un potencial de 5 V por celda [75] para reducir el Al³⁺ a aluminio líquido en el cátodo según la semirreacción (18). Por

otro lado, el ánodo corresponde a grafito que es consumido junto a los iones O^{2-} para formar CO_2 .

El balance de masa global queda determinado por la ecuación (69). Para resolverlo, se consideró que se alcanza la conversión completa de alúmina, ya que al aplicar una corriente continua todo el aluminio se reducirá. De esta manera, se llega a los resultados mostrados en la Tabla 29. Cabe mencionar que el flujo S_6 corresponde a la producción total de aluminio.

$$0 = E_4 + F_7 - S_5 - S_6 \quad (69)$$

Tabla 29: Balance de masa para la electrólisis de aluminio.

Especie	$E_4 / t h^{-1}$	$F_7 / t h^{-1}$	$S_5 / t h^{-1}$	$S_6 / t h^{-1}$
Al	0	0	0	282,91
Al₂O₃	0	534,54	0	0
C	138,75	0	44,30	0
CO₂	0	0	346,08	0
Total	138,75	534,54	390,38	282,91

Por otro lado, para resolver el balance de energía se utiliza la ecuación de electrólisis de Faraday, presentada en la ecuación (70).

$$m_i = \frac{I \cdot \eta \cdot t \cdot PM_i}{z \cdot F} \quad (70)$$

donde:

- m_i : masa del metal i depositada en el electrodo, en g.
- I : corriente aplicada, en A.
- η : eficiencia de corriente. Para cubas electrolíticas de aluminio en general la eficiencia de corriente es de 85% [76].
- t : tiempo de operación, en s.
- PM_i : masa molar del metal i , en $g \text{ mol}^{-1}$.
- z : número de electrones transferidos en la deposición.
- F : constante de Faraday, cuyo valor es $96.485 \text{ C mol}^{-1}$.

Utilizando la ecuación (70) se puede calcular el tiempo necesario para depositar 1 tonelada de aluminio, cuyo valor es 26,97 horas.

Además, la potencia de la cuba electrolítica (P) se puede calcular como:

$$P = V \cdot I = 5 V \cdot 130 kA = 650 kW \quad (71)$$

Es decir, se requieren 17.530 kWh por tonelada de aluminio generado. Luego, se requieren 4,96 GW para alcanzar la producción completa.

Como esta etapa requiere electricidad como servicio, las emisiones asociadas son 1.720 t CO_{2,eq} h⁻¹. Adicionalmente, las emisiones directas de CO₂ corresponden a la reacción de electrólisis, mostradas en el flujo S₅. Luego, las emisiones totales de esta etapa son 2.066 t CO_{2,eq} h⁻¹.

Del resultado anterior, se puede calcular que las emisiones asociadas al proceso Hall-Héroult son 7,3 toneladas de CO_{2,eq} por tonelada de aluminio producida. Este valor se puede considerar adecuado, pues de referencias bibliográficas se ha reportado que este valor está entre 5,6 y 7,8 toneladas de CO_{2,eq} [77].

Finalmente, considerando el proceso completo se tiene que la producción de una tonelada de aluminio tiene asociado un consumo hídrico de 9,8 toneladas de agua y emisiones de 12,9 toneladas de CO_{2,eq}. Se considera que este último valor también es consecuente con lo esperado, pues para el año 2019 el promedio global de emisiones para la producción de una tonelada de aluminio fueron 11,5 toneladas de CO_{2,eq} [78].

4.3 Producción de cobre

A continuación, se presentan los resultados para el proceso productivo del cobre. Para esto se considera que el tamaño de partícula del mineral inicial es de 25 mm [43] y la composición másica es la mostrada en la Tabla 15.

4.3.1 Chancado

La primera etapa del proceso es el chancado del mineral, donde se disminuye el tamaño de la roca desde un diámetro de entrada de 25 a 5 mm en un chancador de mandíbula. Utilizando la nomenclatura de flujos presentada en la Tabla 16, el balance de masa de esta etapa queda determinado por la ecuación (72).

$$0 = E_1 - F_1 \quad (72)$$

Además, no existen reacciones químicas involucradas, solo cambios físicos, de modo que el resultado del balance de masa se muestra en la Tabla 30.

Tabla 30: Balance de masa para chancado de mineral de cobre.

Especie	$E_1 / t h^{-1}$	$F_1 / t h^{-1}$
CuFeS₂	131,44	131,44
SiO₂	1.812,92	1.812,92
Al₂O₃	806,75	806,75
FeO	104,24	104,24
CaO	140,50	140,50
S	2,26	2,26
Total	2.998,11	2.998,11

Por otro lado, la energía requerida para disminuir el tamaño del mineral se calcula de la misma manera que para el aluminio, es decir, utilizando la ecuación (61). Esta vez, el índice de trabajo de Bond para el mineral de cobre es 18,5 kWh t⁻¹, mientras que los diámetros de entrada y salida son 25 y 5 mm, respectivamente [42]. Con esto se puede determinar que el requerimiento energético para el mineral procesado es de 3,49 MW, mientras que las emisiones asociadas a los servicios son 2,16 t CO_{2,eq} h⁻¹, debido al consumo de electricidad.

4.3.2 Molienda

Al igual que en la molienda de mineral de aluminio, en esta etapa se forma la pulpa de mineral de cobre con agua para disminuir el tamaño de las rocas de 5 a 0,01

mm. Para la molienda, el balance de masa queda descrito por la ecuación (73), cuyo resultado se presenta en la Tabla 31.

$$0 = E_2 + F_1 - F_2 \quad (73)$$

Tabla 31: Balance de masa para molienda de mineral de cobre.

Especie	E₂ / t h⁻¹	F₁ / t h⁻¹	F₂ / t h⁻¹
H₂O	1.284,91	0	1.284,91
CuFeS₂	0	131,44	131,44
SiO₂	0	1.812,92	1.812,92
Al₂O₃	0	806,75	806,75
FeO	0	104,24	104,24
CaO	0	140,50	140,50
S	0	2,26	2,26
Total	1.284,91	2.998,11	4.283,02

El balance de energía se resuelve de la misma manera que la etapa anterior, donde se encuentra que el requerimiento energético y las emisiones asociadas al uso de electricidad son 1,2 MW y 0,74 t CO_{2,eq} h⁻¹, respectivamente.

4.3.3 Flotación

En la etapa de flotación se concentra la calcopirita, separándola del resto de los minerales. Para esto, se ingresa aire a una razón de 56 L s⁻¹, o bien, 246,96 kg h⁻¹ por celda [79]. Además, para obtener el requerimiento total de aire se considera que la planta El Teniente posee 28 celdas de flotación [80].

El balance de masa para esta etapa queda expresado por la ecuación (74), mientras que el resultado se muestra en la Tabla 32.

$$0 = E_3 + F_2 - F_3 - S_1 - S_2 \quad (74)$$

Tabla 32: Balance de masa para flotación.

Especie	$E_3 / t h^{-1}$	$F_2 / t h^{-1}$	$F_3 / t h^{-1}$	$S_1 / t h^{-1}$	$S_2 / t h^{-1}$
H₂O	0	1.284,91	963,68	0	321,23
CuFeS₂	0	131,44	130,13	0	1,31
SiO₂	0	1.812,92	27,19	0	1.785,73
Al₂O₃	0	806,75	16,13	0	790,62
FeO	0	104,24	10,42	0	93,82
CaO	0	140,50	2,43	0	138,07
S	0	2,26	0,24	0	2,02
O₂	1,61	0	0	1,61	0
N₂	5,30	0	0	5,30	0
Total	6,91	4.283,02	1.150,22	6,91	3.132,80

Sobre el resultado del balance de masa es importante mencionar que la separación no es totalmente eficiente, dado que el 1% de la calcopirita queda en el relave (S_2) [41]. Además, se considera que el producto de la flotación contiene 75% de masa en agua [41] y la composición de los otros sólidos del relave se fijan según referencias bibliográficas [81].

Para resolver el balance de energía se utilizó la ecuación (68), que corresponde al uso del compresor de aire para alcanzar la presión de operación, que es de 4 atm [82]. Luego, el requerimiento energético es de 0,35 MW, lo que tiene asociado una emisión de 0,22 t CO_{2,eq} h⁻¹ debido al uso de electricidad como servicio. Sobre este resultado es importante mencionar que, según las características del mineral utilizado se podrían necesitar etapas adicionales de flotación para concentrar otros metales (como molibdeno), donde la flotación requiere de reactivos diferentes, por lo que el flujo de aire y las respectivas emisiones de una planta real pueden ser superiores a las calculadas.

4.3.4 Espesado

En esta etapa se busca separar el concentrado de cobre del líquido mediante gravedad. Al finalizar esta etapa, se retira agua y el concentrado de cobre (F_4)

alcanza una humedad del 30% [41]. La ecuación (75) muestra la expresión del balance de masa para el espesado, y los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 33.

$$0 = F_3 - F_4 - S_3 \quad (75)$$

Tabla 33: Balance de masa para espesado.

Especie	F₃ / t h⁻¹	F₄ / t h⁻¹	S₃ / t h⁻¹
H₂O	963,68	82,27	881,41
CuFeS₂	130,13	127,53	2,60
SiO₂	27,19	26,65	0,54
Al₂O₃	16,13	15,81	0,32
FeO	10,42	10,22	0,20
CaO	2,43	2,38	0,05
S	0,242	0,237	0,005
Total	1.150,22	265,09	885,13

En relación con el balance de energía, cabe mencionar que esta etapa no tiene reacciones químicas ni variaciones de temperatura involucradas, por lo que el resultado del balance no es relevante para el estudio.

4.3.5 Filtrado

En esta etapa se continúan separando los sólidos del agua mediante el filtrado. En esta etapa el concentrado alcanza una humedad del 7% en masa [83]. El balance de masa para el filtrado se muestra en la ecuación (76) y se llega a los resultados mostrados en la Tabla 34.

$$0 = F_4 - F_5 - S_4 \quad (76)$$

Sobre el balance de energía, al igual que la etapa anterior, la filtración no tiene reacciones químicas, variaciones de temperatura ni requerimiento de servicios, por lo que el balance energía no otorga un resultado de interés para el estudio.

Tabla 34: Balance de masa para filtrado en proceso del cobre.

Especie	F ₄ / t h ⁻¹	F ₅ / t h ⁻¹	S ₄ / t h ⁻¹
H ₂ O	82,27	13,45	68,82
CuFeS ₂	127,53	117,32	10,21
SiO ₂	26,65	24,52	2,13
Al ₂ O ₃	15,81	14,55	1,26
FeO	10,22	9,39	0,83
CaO	2,38	2,19	0,19
S	0,237	0,218	0,019
Total	265,09	181,64	83,45

4.3.6 Secado

En esta etapa se retira la humedad del concentrado de cobre hasta un 0,02-0,1% en masa en un secador de lecho fluidizado [83]. El balance de masa de esta etapa se expresa según la ecuación (77) y los resultados se presentan en la Tabla 35.

$$0 = F_5 - F_6 - S_5 \quad (77)$$

Tabla 35: Balance de masa para el secado de concentrado de cobre.

Especie	F ₅ / t h ⁻¹	F ₆ / t h ⁻¹	S ₅ / t h ⁻¹
H ₂ O	13,45	0	13,45
CuFeS ₂	117,32	117,32	0
SiO ₂	24,52	24,52	0
Al ₂ O ₃	14,55	14,55	0
FeO	9,39	9,39	0
CaO	2,19	2,19	0
S	0,218	0,218	0
Total	181,64	168,19	13,45

Para simplificar el efecto del agua en las etapas de fundición, se toma como supuesto que el concentrado sale completamente seco de esta etapa. Además, tampoco existen reacciones involucradas.

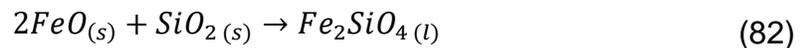
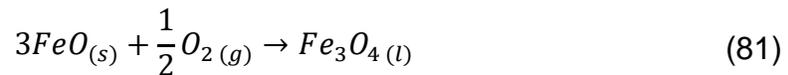
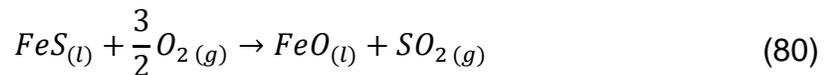
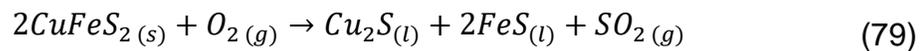
El balance de energía considera que el concentrado entra a 25°C y se eleva su temperatura hasta 150°C para evaporar el agua, por lo que también se considera el cambio de fase dentro de esta operación. Tras resolver se encuentra un requerimiento de 13,73 MW que utiliza electricidad como servicio, por lo que se le asocia una emisión de 8,5 t CO_{2,eq} h⁻¹.

4.3.7 Fusión

El objetivo de esta etapa es fundir el concentrado de cobre y obtener como producto la mata de cobre. Esto se hace en un convertidor Teniente, en el cual se ingresa concentrado de cobre, aire enriquecido de oxígeno (40% en volumen) y dióxido de silicio como fundente. El balance de masa global para esta etapa se describe por la ecuación (78).

$$0 = E_4 + F_6 - F_7 - S_6 - S_7 \quad (78)$$

Las reacciones involucradas en la fusión incluyen la reducción de la calcopirita, en la ecuación (79), y la formación de escoria en las ecuaciones (80), (81) y (82).



Para resolver el balance de masa se consideró la conversión completa de la calcopirita y que en el gas de salida (S₆) la composición del dióxido de azufre es del 20% en volumen. La conversión de las otras reacciones se fijó de manera que se cumplieran que el contenido de Cu₂S en la mata (F₇) estuviera entre 56% y 94% [41] en masa y que en la escoria el 50% corresponde a óxidos de hierro y el 15-25% es magnetita (Fe₃O₄). De esta manera se llega a los resultados de la Tabla 36 [84].

Tabla 36: Balance de masa para la fusión de cobre.

Especie	E₄ / t h⁻¹	F₆ / t h⁻¹	F₇ / t h⁻¹	S₆ / t h⁻¹	S₇ / t h⁻¹
H₂O	0	0	0	0	0
CuFeS₂	0	117,32	0	0	0
SiO₂	0	24,52	3,86	0	15,44
Al₂O₃	0	14,55	0	0	14,55
FeO	0	9,39	0	0	12,46
CaO	0	2,19	0	0	2,19
S	0	0,22	0,22	0	0
Cu₂S	0	0	48,33	0	0
FeS	0	0	16,86	0	0
Fe₂SiO₄	0	0	0	0	17,68
Fe₃O₄	0	0	0	0	17,85
O₂	32,95	0	0	0,01	0
N₂	92,05	0	0	92,05	0
SO₂	0	0	0	49,14	0
Total	125,00	168,19	69,27	141,20	82,72

Se observa de la Tabla 36 que el aproximadamente el 70% de la mata de cobre corresponde a Cu₂S, por lo que se considera que está dentro del rango esperado. Además, se cumple la composición esperada para el dióxido de azufre en el gas de salida y para los óxidos de hierro en la escoria.

En esta etapa se tienen emisiones gaseosas de SO₂, por lo que para evaluar su impacto ambiental se considera un factor de conversión de 0,44 kg de CO_{2,eq} por kg de SO₂ [85]. De esta manera se emitirían 21,6 t CO_{2,eq} h⁻¹. Este valor es una aproximación y podría ser poco representativo de la realidad, pues las fundiciones de cobre incluyen plantas secundarias donde tratan el dióxido de azufre en torres de absorción para transformarlo en ácido sulfúrico y venderlo como subproducto o utilizarlo en otras etapas. En ese caso, habría que considerar el requerimiento energético y consumo hídrico para estimar de mejor manera el impacto ambiental.

Por otro lado, es importante mencionar que los convertidores Teniente son autógenos en el estado estacionario, pues las oxidaciones de cobre y hierro son reacciones exotérmicas y permiten que el equipo opere sin necesidad de una fuente externa de energía. Luego, al plantear el balance de energía se impone que el requerimiento de calor sea nulo y se calcula la temperatura de salida considerando todas las reacciones involucradas.

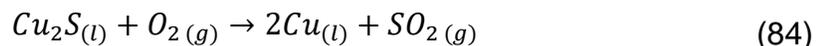
Finalmente, al resolver el balance de energía se encuentra que la temperatura de operación del equipo es de 1.164°C, valor que se considera cercano al esperado, pues este equipo opera en un rango de 1.200-1.250°C [41]. Esta diferencia se puede atribuir a que en una planta real se recircula parte de la escoria para aprovechar su calor y disminuir el requerimiento de aire, ya que el nitrógeno es inerte y tiende a disminuir la temperatura dentro del convertidor. Otro motivo para esta diferencia podría ser que hayan otros compuestos que se oxiden y que no fueron considerados en este estudio, como el magnesio [41].

4.3.8 Conversión

En esta etapa ocurre la conversión de la mata de cobre hacia cobre blíster, el cual tiene un contenido de cobre superior al 98% [43]. Esto se realiza en un convertidor Peirce-Smith, el cual es un equipo autógeno. El balance de masa para la conversión se describe por la ecuación (83).

$$0 = E_5 + F_7 - F_8 - S_8 - S_9 \quad (83)$$

Esta etapa se divide en reacciones para formar el cobre blíster y para formar la escoria. La generación de cobre viene dada por las reacción (84), mientras que para la escoria se repiten las reacciones (80), (81) y (82) del convertidor Teniente.



Debido a las condiciones de alta temperatura a las que se encuentra el convertidor, la conversión de Cu₂S se considera completa. Tras resolver el balance de masa se llega a los resultados mostrados en la Tabla 37.

Tabla 37: Balance de masa para la conversión de cobre.

Especie	E ₅ / t h ⁻¹	F ₇ / t h ⁻¹	F ₈ / t h ⁻¹	S ₈ / t h ⁻¹	S ₉ / t h ⁻¹
Cu	0	0	38,20	0,39	0
SiO₂	0	3,86	0	0,98	0
FeO	0	0	0	3,44	0
S	0	0,22	0,22	0	0
Cu₂S	0	48,33	0	0	0
FeS	0	16,86	0	0	0
Fe₂SiO₄	0	0	0	9,77	0
Fe₃O₄	0	0	0	3,70	0
O₂	44,54	0	0	0	25,36
N₂	95,46	0	0	0	95,46
SO₂	0	0	0	0	31,74
Total	140,00	69,27	38,42	18,28	152,56

De la Tabla 37 se observa que el cobre blíster (F₈) tiene una composición de 99,4% de cobre, lo que está dentro del rango esperado. El resto del flujo corresponde a azufre que aún no se elimina en el proceso.

Por otro lado, también existen emisiones de dióxido de azufre en el flujo S₉, por lo que usando el mismo factor de emisión de la fusión se calcula que estas emisiones equivalen a 13,96 t CO_{2,eq} h⁻¹.

Por otro lado, como el convertidor Peirce-Smith también es un equipo autógeno, el planteamiento del balance de energía es análogo a la etapa de fusión. Al resolver el balance de energía se encuentra que la temperatura de operación es de 1.135°C. En este caso se tiene que la temperatura real de operación está entre 1.250 y 1.300°C [41]. Esta diferencia puede deberse a que esta etapa funciona sólo con aire (no es enriquecido con oxígeno como la fusión), por lo que tiene mayor composición de nitrógeno, lo cual disminuye más la temperatura en relación con la etapa anterior. Para controlar esto en una etapa real, lo que se hace es recircular parte de la escoria para aprovechar su calor y aumentar la temperatura dentro del convertidor

4.3.9 Pirorrefinación

El objetivo de esta etapa es purificar el cobre blíster hasta un 99,99% en un horno anódico a 1.200°C. La operación de este equipo se divide en dos partes: primero se alimenta aire para formar dióxido de azufre acorde a la reacción (85):



De esta manera se logra disminuir la concentración de azufre disuelto en el cobre blíster. Luego de esta parte, aproximadamente el 0,5% del oxígeno gaseoso se disuelve en el cobre como oxígeno atómico [86], el cual debe ser retirado para evitar que afecte las propiedades del cobre.

La segunda parte es un proceso desoxidante de cobre, en el cual se inyecta metano. Primero ocurre la reacción de formación de humo con el metano, mostrado en la reacción (86) [87]:



Luego, ocurren las reacciones de reducción (87) y (88), donde se logra retirar todo el oxígeno disuelto [87].



Además, la ecuación (89) muestra el balance de masa global para la etapa de pirorrefinación, y los resultados se muestran en la Tabla 38.

$$0 = E_6 + F_8 - F_9 - S_{10} \quad (89)$$

Tabla 38: Balance de masa para la pirorrefinación de cobre.

Especie	$E_6 / t h^{-1}$	$F_8 / t h^{-1}$	$F_9 / t h^{-1}$	$S_{10} / t h^{-1}$
Cu	0	38,20	38,20	0
H₂O	0	0	0	0,22
S	0	0,22	$4,36 \cdot 10^{-5}$	0
O₂	23,29	0	0	22,68
N₂	76,71	0	0	76,71
CH₄	0,1	0	0	0
CO₂	0	0	0	0,27
SO₂	0	0	0	0,44
Total	100,10	38,42	38,20	100,32

El principal producto de esta etapa es el cobre anódico (F_9), donde se observa que el azufre se ha retirado hasta un valor mínimo y la concentración de cobre es del 99,99%, lo que es consecuente con lo esperado.

El flujo S_{10} corresponde a la salida gaseosa, donde el principal impacto se debe al CO_2 y al SO_2 . Considerando el factor de emisión para el SO_2 y el flujo de dióxido de carbono, las emisiones totales de esta etapa son $0,46 t CO_{2,eq} h^{-1}$.

Por otro lado, al resolver el balance de energía se encuentra un requerimiento de 38,35 MW.

4.3.10 Moldeo

Una vez que se tiene el cobre anódico se procede a la etapa de moldeo, en la cual se forman los ánodos de cobre (F_{10}). Esta etapa sólo considera la solidificación del material fundido, de manera que el balance de masa queda descrito por la ecuación (90), mientras que los resultados se presentan en la Tabla 39.

$$0 = F_9 - F_{10} \quad (90)$$

Tabla 39: Balance de masa para el moldeo de ánodos de cobre.

Especie	$F_9 / t h^{-1}$	$F_{10} / t h^{-1}$
Cu	38,20	38,20
S	$4,36 \cdot 10^{-5}$	$4,36 \cdot 10^{-5}$
Total	38,20	38,20

El balance de energía de esta etapa considera la energía necesaria para disminuir la temperatura del ánodo de los 1.200 a 170°C, ya que a esta temperatura se considera que el ánodo está firme para poder moverlo [88]. Para esto se utiliza agua de enfriamiento como servicio, donde se calcula un requerimiento energético de 4,8 MW y un flujo de agua de 59,7 t h⁻¹. Finalmente, el ánodo alcanza la temperatura ambiente en contacto con aire del ambiente.

4.3.11 Electrorefinación

La electrorefinación es la última etapa del proceso, en la que se aplica una corriente continua para disolver el cobre del ánodo y reducirlo en cátodos acero, y así formar los cátodos de cobre de alta pureza. Para esto, se utilizan celdas de electrolisis donde el electrolito es una solución acuosa con 170 g L⁻¹ de ácido sulfúrico (H₂SO₄) y 100 g L⁻¹ de sulfato de cobre (CuSO₄) [89].

Las semirreacciones anódica y catódica son, respectivamente:



En procesos reales se alcanza una pureza del 99,99% [41], sin embargo, para simplificar los balances se consideró que el producto final tiene una pureza del 100%. El balance de masa que describe esta etapa se muestra en la ecuación (93) y los resultados en la Tabla 40, donde se consideró conversión completa.

$$0 = E_7 + F_{10} - S_{11} - S_{12} \quad (93)$$

Tabla 40: Balance de masa para la electrorefinación de cobre.

Especie	E₇ / t h⁻¹	F₁₀ / t h⁻¹	S₁₁ / t h⁻¹	S₁₂ / t h⁻¹
Cu	0	38,20	0	38,20
S	0	4,36 · 10 ⁻⁵	4,36 · 10 ⁻⁵	0
H₂O	1.816,66	0	1.816,66	0
H₂SO₄	411,26	0	411,26	0
CuSO₄	241,92	0	241,92	0
Total	2.469,84	38,20	2.469,84	38,20

Por otro lado, el balance de energía se divide en dos partes. La primera es la energía necesaria para llevar el electrolito a la temperatura de operación, que es 65°C [41], utilizando vapor de agua como servicio. Así, se encuentra un requerimiento de 92 MW y emisiones asociadas de 21,8 t CO_{2,eq} h⁻¹.

Además, se debe considerar el consumo asociado a la electricidad usada en la electrolisis. Esto se resuelve de la misma manera que para la electrolisis de aluminio, es decir, con la ecuación de Faraday. En este caso, se tienen la siguiente información:

- La densidad de corriente es 320 A m⁻² y cada cátodo tiene un área de 1 m² [90].
- La electrorefinación se hace en la división Ventanas de Codelco, donde la planta cuenta con 6 circuitos de electrorefinación dividido en 8 en grupos. Cada grupo tiene 42 celdas electrolíticas, y cada celda electrolítica tiene 39 cátodos, es decir, un total de 78.624 cátodos. Luego, la corriente total será 25.160 kA [91].
- La eficiencia de corriente del proceso (η) es del 95% [41].
- El potencial de la celda es 0,28 V [41].

Con estos datos se calcula un requerimiento energético de 236,4 kWh por tonelada de cobre generado.

Luego, la producción completa considera 9 MW que requieren electricidad como servicio, lo cual tiene asociadas 5,6 t CO_{2,eq} h⁻¹. De esta manera, las emisiones totales para la electrorefinación son 27,4 t CO_{2,eq} h⁻¹.

Finalmente, considerando el uso de servicios y emisiones directas de todas las etapas del proceso se calcula una emisión total de 1,96 toneladas de CO_{2,eq} por tonelada de cobre producido, valor que se considera dentro del rango de emisiones esperadas, pues de referencias bibliográficas se encontró que las emisiones para una planta pirometalúrgica de cobre están entre 1,5 y 4 toneladas de CO_{2,eq} por tonelada producida [92]. Además, el consumo hídrico es de 81,2 toneladas de agua por tonelada de cobre producida.

4.4 Fabricación de buses diésel y eléctricos

Para comparar el consumo hídrico y las emisiones asociadas a la fabricación de cada tipo de bus se consideran los factores de emisión para la producción de una tonelada de cada materia prima y el caso base, lo que se resume en la Tabla 41.

Tabla 41: Emisiones de CO₂ por fabricación para cada tipo de bus.

Tipo de bus	Consumo hídrico / t por bus	Emisiones por materia prima / t CO _{2,eq} por bus	Emisiones totales / t CO _{2,eq} por bus
Bus diésel	0,6	Acero: 30,23	31,70
		Aluminio: 0,79	
		Hierro fundido: 0,68	
Bus eléctrico	21,2	Acero: 33,69	42,05
		Aluminio: 7,99	
		Cobre: 0,37	

De la Tabla 41 se calcula que las emisiones asociadas a la fabricación de un bus eléctrico es un 32,6% mayor a las de un bus diésel. En efecto, se esperaba que las emisiones del bus eléctrico fueran mayores, sin embargo, existen diferencias en las magnitudes, pues en referencias bibliográficas se reporta que los buses eléctricos emiten 47 toneladas más de CO₂ en su fabricación en comparación con los buses

diésel [93]. De esto se puede desprender que los resultados finales están subestimados, debido principalmente a que no se consideraron las emisiones respectivas a los componentes internos de las baterías, que son grafito, litio-hierro-fosfato y LiPF_6 .

También se observa que las emisiones de CO_2 correspondientes a la fabricación del chasis y la carrocería, es decir, del acero, equivalen al 80,1% del total para los buses eléctricos y 95,4% para los buses diésel. Este resultado se considera correcto ya que se sabe que esas secciones del bus son las principales contribuyentes de emisiones de dióxido de carbono [24], y además se ha reportado de estudios similares que para buses eléctricos corresponde al 61% del total y para los buses diésel un 90% [93]. Esta diferencia es consecuente con la sobreestimación de las emisiones calculadas para la fabricación del acero mencionada en la sección 4.1.3.

Por otro lado, el consumo de agua fresca asociado a fabricar un bus eléctrico es 35 veces mayor al de fabricar un bus diésel. Sin embargo, se considera que estos resultados están subestimados ya que en el proceso del acero no se considera el agua consumida en el tratamiento previo del mineral de hierro, es decir, la extracción minera, la molienda y la limpieza antes de ingresar al alto horno.

4.5 Uso de buses diésel y eléctricos

Con respecto a las emisiones asociadas al uso de cada bus, se toma como referencia el recorrido 506 de la Red Metropolitana de Movilidad, por los motivos señalados en la sección 1.3.

En el caso de los buses eléctricos, es conocido que las emisiones directas en su uso son nulas. Por otro lado, para estimar las emisiones de los buses diésel se considera un factor de emisión de 2,69 kg de $\text{CO}_{2,\text{eq}}$ por litro de diésel consumido, valor establecido por la Agencia de Protección Ambiental de Estados Unidos para este tipo de vehículos [94].

Además, el Directorio de Transporte Público Metropolitano de Santiago de Chile (DTPM) reporta para cada bus diésel un rendimiento promedio de 2,4 km por litro

de combustible [95]. Sabiendo que la distancia total del trayecto 506 es de 72,6 km (ver Anexo A), el consumo de diésel equivale a 30,24 litros. Luego, considerando el factor de emisión se estima que cada bus diésel emite 1,12 kg de CO_{2,eq} por kilómetro recorrido, que para un viaje completo del recorrido estudiado serían 81,35 kg de CO_{2,eq}.

Cabe mencionar que en 2017 la Red Metropolitana de Movilidad fijó la vida útil de los buses en 10 años [96], y si se toma como supuesto que cada bus realiza el mismo recorrido completo 3 veces al día, cada bus recorrería 794.970 km en su vida útil, lo que tendría asociado 890 toneladas de CO_{2,eq} en emisiones directas. Eso quiere decir que, tras 39,7 días de operación un bus diésel iguala las emisiones de un bus eléctrico considerando la fabricación y el uso.

Capítulo 5. Discusión General

En este capítulo se presentan discusiones asociadas a los resultados globales de balances de masa y energía para cada uno de los procesos estudiados.

5.1 Balances de masa

En la Tabla 42 se resumen los flujos máxicos de las entradas y salidas globales para el proceso productivo del acero.

Tabla 42: Balance de masa global para el proceso productivo de acero.

Entradas	Flujo máxico / t h⁻¹	Salidas	Flujo máxico / t h⁻¹
E₁	1.296,15	S₁	2.742,79
E₂	2104,14	S₂	50,46
E₃	90,00	S₃	104,59
-	-	S₄	21,54
-	-	S₅	570,77
Total	3.490,29		3.490,15

De la tabla se puede calcular que la diferencia entre las entradas y las salidas es de 0,14 t h⁻¹, es decir, el resultado del balance de masa tiene un error asociado del 0,004%. Este error se considera bajo y se atribuye a errores de aproximación del software utilizado para resolver las ecuaciones y a la recursividad involucrada al resolver las etapas del alto horno que trabajaban con flujos a contracorriente.

Del mismo modo, se presenta el resultado del balance de masa global para el proceso productivo de aluminio en la Tabla 43. En este caso se observa que la diferencia entre las entradas y las salidas es de 0,002 t h⁻¹, es decir, el resultado del balance de masa tiene un error asociado del 2,4 x 10⁻⁵ %. Luego, se considera que los resultados son adecuados y las diferencias se atribuyen nuevamente a errores de redondeo.

Tabla 43: Balance de masa global para el proceso productivo de aluminio.

Entradas	Flujo másico / t h⁻¹	Salidas	Flujo másico / t h⁻¹
E₁	1.850,00	S₁	1.092,84
E₂	5.214,52	S₂	101,19
E₃	1.000,00	S₃	4.801,37
E₄	138,75	S₄	1.534,58
-	-	S₅	390,38
-	-	S₆	282,91
Total	8.203,27		8.203,27

Por último, en la Tabla 44 se muestran los resultados para el balance de masa global para el proceso de producción de cobre.

Tabla 44: Balance de masa global para el proceso productivo de cobre.

Entradas	Flujo másico / t h⁻¹	Salidas	Flujo másico / t h⁻¹
E₁	2.998,12	S₁	4.497,18
E₂	1.284,91	S₂	3.132,80
E₃	4.497,18	S₃	885,14
E₄	125,00	S₄	83,44
E₅	140,00	S₅	13,46
E₆	100,10	S₆	141,20
E₇	2.469,84	S₇	82,72
-	-	S₈	18,28
-	-	S₉	152,56
-	-	S₁₀	100,32
-	-	S₁₁	2.469,84
-	-	S₁₂	38,20
Total	11.615,15		11.615,15

De la tabla anterior, se desprende que la diferencia entre las entradas y las salidas es de $0,002 \text{ t h}^{-1}$, lo que implica un error asociado de $1,9 \times 10^{-5} \%$, siendo este el menor error.

5.2 Balances de energía

De los resultados de balances de energía para el proceso del acero se desprende que la etapa con mayores emisiones es la fusión en el alto horno, que concentra un 84,5% de las emisiones totales de $\text{CO}_{2,\text{eq}}$. Este resultado es consecuente con lo esperado y está en el mismo rango que una planta real, ya que, por ejemplo, la empresa siderúrgica EVRAZ reportó que el 88% de sus emisiones de $\text{CO}_{2,\text{eq}}$ provenían de este equipo [97].

Además, es importante mencionar que se supuso que todo el monóxido de carbono generado en el proceso del acero se oxidaría a CO_2 . Sin embargo, se estudia el impacto del CO calculando cual es el porcentaje del total que se debe a emisiones de este gas y se encuentra que corresponde al 52,6% del total, lo cual se considera un efecto considerable en las emisiones totales.

Con relación al proceso del aluminio, la electrólisis de alúmina en el proceso Hall-Hérault es la etapa con mayores emisiones, siendo un 56,4% del total. Este valor se considera dentro de lo esperado, pues esta es la única etapa del proceso que tiene emisiones directas de CO_2 , y cada mol de alúmina procesado genera 1,5 moles de dióxido de carbono.

Por último, para la producción de cobre se tiene que el 36,5% de las emisiones se deben a la etapa de electrorefinación, principalmente por el alto requerimiento de electricidad para disolver los ánodos y formar los cátodos, además de la energía necesaria para calentar el electrolito hasta 65°C . Además, el 48% de las emisiones corresponde a dióxido de azufre en las diferentes etapas de la fundición de concentrado de cobre.

Capítulo 6. Conclusiones

En el presente trabajo se comparó el impacto ambiental asociado a la fabricación y uso de los buses diésel y eléctricos para el transporte público de la ciudad de Santiago de Chile. Para esto, se resolvieron los balances de masa y energía para los procesos productivos de las principales materias primas involucradas: acero, aluminio y cobre, con el fin de estimar las emisiones de $\text{CO}_{2,\text{eq}}$ y el consumo hídrico para cada tipo de bus. Por otro lado, la comparación en el uso de estos buses se hizo mediante factores de emisión reportados en bibliografía y considerando como referencia el recorrido 506 de la Red Metropolitana de Movilidad.

Se estimó la masa de acero, aluminio y cobre para la fabricación de cada tipo de bus. Para los buses diésel se tomó el modelo O 500 U de Mercedes Benz y se calculó una masa total de 6.490 kg, donde el 95% corresponde a acero, 4% a hierro fundido y el resto a aluminio. Para los buses eléctricos la referencia fue el modelo K9 de BYD, con una masa total de 8.375 kg, con un 90% de acero, 7% aluminio y 3% cobre.

Para el proceso del acero se tomó una producción referencial de 571 t h^{-1} y se encontró que las emisiones para producir una tonelada de hierro fundido y acero son 2,5 y 2,9 $\text{t CO}_{2,\text{eq}}$, respectivamente. La etapa con mayor volumen de emisiones de este proceso es la fusión en el alto horno, con un 84,5% de las emisiones totales.

En relación con el aluminio, se consideró una producción de referencia de 283 t h^{-1} y se encontró que la producción de una tonelada de este metal tiene asociada la emisión de 12,9 toneladas de $\text{CO}_{2,\text{eq}}$, donde la etapa con mayor impacto se debe al proceso Hall-Hérault, con un 56,4% del total.

La producción de cobre se estudió tomando como referencia una producción de $38,2 \text{ t h}^{-1}$ y se encontró un factor de emisión de 2,0 toneladas de $\text{CO}_{2,\text{eq}}$ por tonelada de cobre producida. En este caso, el 48% de las emisiones totales se debe a las emisiones directas de las etapas de fundición, mientras que el 36,5% se debe a las emisiones asociadas a la etapa de electrorefinación.

Al comparar la fabricación de un bus diésel y un bus eléctrico, se encontró que la producción del primero consume 0,6 toneladas de agua y emite 31,7 toneladas de CO_{2,eq}, mientras que el bus eléctrico tiene un consumo hídrico de 21,2 toneladas y emisiones asociadas de 42,1 toneladas de CO_{2,eq}. Las emisiones de dióxido de carbono están en el mismo rango de resultados reportados por bibliografía. Sin embargo, el consumo hídrico se considera subestimado, pues el 97% de la masa de un bus diésel corresponde a acero, y para este material no se consideró el consumo de agua asociado a las etapas previas al alto horno.

Los resultados de todos los balances de masa globales presentan un error relativo menor al 0,004%, lo cual se considera despreciable.

Se compararon las emisiones durante el uso de cada tipo de bus, donde se encontró que cada bus diésel emite 1,12 kg CO_{2,eq} por kilómetro, que equivalen a 81,35 kg de CO_{2,eq} por el recorrido 506 completo, mientras que los buses eléctricos no tienen emisiones asociadas en su uso.

Se concluye que la fabricación de un bus eléctrico tiene mayor impacto ambiental que uno diésel. Sin embargo, el uso de combustibles fósiles causa que los buses diésel emitan 890 t CO_{2,eq} durante su vida útil, generando un mayor daño al medioambiente en comparación a los buses eléctricos.

Finalmente, es importante optimizar los procesos productivos para disminuir sus emisiones y utilizar energías renovables para la generación de energía, a modo de asegurar que la electromovilidad sea una medida efectiva para enfrentar el cambio climático y sus consecuencias.

Capítulo 7. Recomendaciones y Trabajo Futuro

Se propone profundizar el presente estudio agregando etapas que no fueron consideradas por estar fuera del límite de batería, de manera de tener un resultado mucho más preciso y acorde a la realidad. A continuación, se presentan algunos ejemplos para cada proceso.

Para el proceso de acero se podrían incluir etapas previas a la fusión en el alto horno, que involucran tratamientos adicionales como la sinterización del mineral de hierro. También, se podrían considerar las etapas posteriores a la formación de acero, que incluyen la generación de aleaciones y etapas de moldeo, donde estas últimas requieren esfuerzos mecánicos que consumen electricidad.

Con relación a la producción de aluminio, se puede considerar el tratamiento del lodo rojo, ya que tiene un pH alto debido a su contenido de NaOH, lo que puede afectar el medioambiente. En una planta real, los lodos son lavados y el hidróxido de sodio recuperado se reingresa al proceso, lo que tendría un efecto considerable en el consumo hídrico.

En el proceso productivo del cobre se podría considerar el tratamiento de gases, ya que las plantas productivas de cobre tienen plantas secundarias donde tratan el dióxido de azufre emanado en las fundiciones y lo absorben en agua para formar ácido sulfúrico, para así evitar las emisiones de SO₂. Además, se podrían incluir recirculaciones de materia, como en el caso de la escoria de las etapas de fusión y conversión, donde se aprovecha su calor para mantener los equipos operando de manera autógena.

Por otro lado, también se puede ampliar el estudio al considerar los procesos productivos del resto de las materias primas asociadas a la producción de las baterías, que son el grafito para el soporte anódico, el litio-hierro-fosfato para el material activo del cátodo y el hexafluorofosfato de litio para el electrolito. Las masas

de cada compuesto asociadas a la fabricación de un bus eléctrico ya fueron calculadas en el Anexo B.

Adicionalmente, se puede estudiar el impacto ambiental asociado al transporte de las materias, pues se tomaron como referencia plantas productivas de España, Australia y Chile. Sin embargo, el mayor productor de baterías de ion litio y vehículos eléctricos es China, por lo cual hay un efecto considerable asociado al traslado de materias primas desde los países que las producen.

Finalmente, se propone estudiar el efecto de utilizar energía proveniente de fuentes renovables no convencionales, como la energía solar o eólica, pues el uso de servicios considera factores de emisión que corresponden a una matriz energética con uso de combustibles fósiles.

Capítulo 8. Bibliografía

- [1] OFFICE OF ENERGY EFFICIENCY & RENEWABLE ENERGY. Reducing Pollution with Electric Vehicles. U.S. Department of Energy. 2020. [en línea] <<https://www.energy.gov/eere/electricvehicles/reducing-pollution-electric-vehicles>> [Fecha de consulta: mar. 10, 2021].
- [2] UNITED NATIONS. Affordable and clean energy: why it matters. 2020. [En línea]. Disponible en: https://www.un.org/sustainabledevelopment/wp-content/uploads/2016/08/7_Why-It-Matters-2020.pdf.
- [3] UNITED NATIONS. Climate action: why it matters. vol. 46, n° 02. pp. 46-0890-46-0890. 2019. [En línea]. Disponible en: https://www.un.org/sustainabledevelopment/wp-content/uploads/2019/07/13_Why-It-Matters-2020.pdf.
- [4] INTERNATIONAL ENERGY AGENCY. Global EV Outlook 2020. 2020. doi: 10.1787/d394399e-en.
- [5] MINISTERIO DE ENERGÍA, MINISTERIO DE TRANSPORTES Y TELECOMUNICACIONES, Y MINISTERIO DEL MEDIO AMBIENTE. Estrategia Nacional de Electromovilidad. p. 56. 2017. [En línea]. Disponible en: http://www.minenergia.cl/archivos_bajar/2018/electromovilidad/estrategia_electromovilidad-27dic.pdf.
- [6] INTERNATIONAL ENERGY AGENCY. Global Electric Car Stock, 2010-2019. 2020. [en línea] <<https://www.iea.org/data-and-statistics/charts/global-electric-car-stock-2010-2019>> [Fecha de consulta: mar. 10, 2021].
- [7] T. R. HAWKINS, B. SINGH, G. MAJEAU-BETTEZ, Y A. H. STRØMMAN. Comparative Environmental Life Cycle Assessment of Conventional and Electric Vehicles. J. Ind. Ecol. vol. 17, n° 1. pp. 53-64. 2013. doi: 10.1111/j.1530-9290.2012.00532.x.

- [8] LA TERCERA. Gobierno rebautizará el Transantiago con nuevo nombre: se llamará Red. 2019. [en línea] <<https://www.latercera.com/nacional/noticia/gobierno-rebautizara-transantiago-nuevo-nombre-se-llamara-red/565733/>> [Fecha de consulta: mar. 12, 2021].
- [9] DIRECTORIO DE TRANSPORTE PÚBLICO METROPOLITANO. Informe de Gestión 2019, 2019.
- [10] RED METROPOLITANA DE MOVILIDAD. Comienza histórica operación de los primeros buses eléctricos de Transantiago, 2017. [en línea] <<https://www.red.cl/noticias/comienza-historica-operacion-de-los-primeros-buses-electricos-de-transantiago>> [Fecha de consulta: mar. 12, 2021].
- [11] RED METROPOLITANA DE MOVILIDAD. Con la incorporación de 115 nuevos buses eléctricos, más de la mitad de la flota del eje alameda cuenta con estándar red, 2020. [en línea] <<https://www.red.cl/noticias/con-la-incorporacion-de-115-nuevos-buses-electricos-mas-de-la-mitad-de-la-flota-del-eje-alameda-cuenta-con-estandar-red>> [Fecha de consulta: mar. 12, 2021].
- [12] T. (BYD) BERRÍOS. Flota de buses eléctricos BYD Chile Transporte público en Santiago, 2020.
- [13] DIESELNET: ENGINE & EMISSION TECHNOLOGY. Emission Standards. Heavy-Duty Truck and Bus Engines. [en línea] <<https://dieselnet.com/standards/eu/hd.php>> [Fecha de consulta: abr. 08, 2021].
- [14] DIRECTORIO DE TRANSPORTE PÚBLICO METROPOLITANO. Estándar de buses del Sistema de Transporte Público de Santiago. 2017.
- [15] CHILE. Ministerio de Transportes y Telecomunicaciones; Subsecretaría de Transportes. Decreto 130, nº 2001. 2017, pp. 1–12.
- [16] S. GALARZA. From pilots to scale. Lessons from electric bus deployments in Santiago de Chile. 2020. [En línea]. Disponible en: <https://iea.blob.core.windows.net/assets/db408b53-276c-47d6-8b05-52e53b1208e1/e-bus-case-study-Santiago-From-pilots-to-scale-Zebra-paper.pdf>.

- [17] J. WARNER. Basic Terminology. Handb. Lithium-Ion Batter. Pack Des. pp. 23–33. 2015. doi: 10.1016/b978-0-12-801456-1.00003-8.
- [18] J. WARNER. Lithium-Ion and Other Cell Chemistries. Handb. Lithium-Ion Batter. Pack Des. n° Cid. pp. 65–89. 2015. doi: 10.1016/b978-0-12-801456-1.00007-5.
- [19] A. VÄYRYNEN Y J. SALMINEN. Lithium ion battery production. J. Chem. Thermodyn. vol. 46. pp. 80–85. 2012. doi: 10.1016/j.jct.2011.09.005.
- [20] FLUX POWER. What is the Energy Density of a Lithium-Ion Battery? [en línea] <<https://www.fluxpower.com/blog/what-is-the-energy-density-of-a-lithium-ion-battery>> [Fecha de consulta: mar. 08, 2021].
- [21] W. HUANG, X. FENG, X. HAN, W. ZHANG, Y F. JIANG. Questions and Answers Relating to Lithium-Ion Battery Safety Issues. Cell Reports Phys. Sci. vol. 2, n° 1. p. 100285. 2021. doi: 10.1016/j.xcrp.2020.100285.
- [22] C. SCHULTZ, S. VEDDER, M. WINTER, Y S. NOWAK. Investigation of the decomposition of organic solvent-based lithium ion battery electrolytes with liquid chromatography-mass spectrometry. Spectrosc. Eur. vol. 28, n° 5. pp. 21–24. 2016.
- [23] A. W. GOLUBKOV ET AL. Thermal-runaway experiments on consumer Li-ion batteries with metal-oxide and olivin-type cathodes. RSC Adv. vol. 4, n° 7. pp. 3633–3642. 2014. doi: 10.1039/c3ra45748f.
- [24] A. NORDELÖF, M. ROMARE, Y J. TIVANDER. Life cycle assessment of city buses powered by electricity, hydrogenated vegetable oil or diesel. Transp. Res. Part D Transp. Environ. vol. 75, n° September. pp. 211–222. 2019. doi: 10.1016/j.trd.2019.08.019.
- [25] D. BÖCKIN Y A. M. TILLMAN. Environmental assessment of additive manufacturing in the automotive industry. J. Clean. Prod. vol. 226. pp. 977–987. 2019. doi: 10.1016/j.jclepro.2019.04.086.

- [26] RELIANCE FOUNDRY. Cast Iron vs Cast Steel. [en línea] <<https://www.reliance-foundry.com/blog/cast-iron-vs-cast-steel>> [Fecha de consulta: abr. 29, 2021].
- [27] D. GANDY. Carbon Steel Handbook. Carbon N. Y. vol. 3, nº 3. p. 172. 2007.
- [28] ALL METALS & FORGE GROUP. Melting point of metals & alloys. [en línea] <<https://steelforge.com/literature/metal-melting-ranges/>> [Fecha de consulta: abr. 30, 2021].
- [29] AZO MATERIALS. AISI 1020 Low Carbon/Low Tensile Steel, 2014. [en línea] <<http://www.azom.com/article.aspx?ArticleID=3352>> [Fecha de consulta: nov. 13, 2019].
- [30] TEC-SCIENCE. Blast Furnace Process, 2018. [en línea] <<https://www.tec-science.com/material-science/steel-making/blast-furnace-process/>> [Fecha de consulta: dic. 20, 2020].
- [31] Y. YANG, K. RAIPALA, Y L. HOLAPPA. Ironmaking, vol. 3. Elsevier Ltd., 2014.
- [32] F. HABASHI. Handbook of Extractive Metallurgy, vol. II. Quebec, Canadá, 1997.
- [33] J. HATCH. Aluminum Properties and Physical Metallurgy, vol. 205, nº 4407. 1984.
- [34] U.S. GEOLOGICAL SURVEY. Bauxite and alumina. 2020.
- [35] S. H. PATTERSON. Bauxite Reserves and Potential Aluminum Resources of the World. Geol. Surv. Bull. p. 176. 1967.
- [36] J. SANCHO, L. VERDEJA, Y A. BALLESTER. Metalurgia extractiva, Vol II: Procesos de obtención. España, 2000.
- [37] A. RUYS. Refining of alumina: The Bayer process. Alumina Ceram. pp. 49–70. 2019. doi: 10.1016/b978-0-08-102442-3.00003-8.

- [38] K. GRJOTHEIM, C. KROHN, M. MALINOVSKY, Y J. THONSTAD. Aluminium Electrolysis. Fundamentals of the Hall-Heroult Process, 2nd ed. Alemania: Aluminium-Verlag, 1982.
- [39] J. R. DAVIS. ASM Speciality Handbook, Copper and Copper Alloys. 2001.
- [40] GEOSCIENCE AUSTRALIA. Copper. [en línea] <<https://www.ga.gov.au/education/classroom-resources/minerals-energy/australian-mineral-facts/copper>> [Fecha de consulta: abr. 14, 2021].
- [41] M. SCHLESINGER, M. KING, K. SOLE, Y W. DAVENPORT. Extractive Metallurgy of Copper, 5th ed., vol. 53. Reino Unido: Elsevier, 2011.
- [42] S. ROJAS MORENO. Optimización Planta De Chancado Secundario/Terciario En División El Teniente. p. 140. 2015.
- [43] PORTAL MINERO S.A. Guía de Ingeniería en Operaciones Mineras. 2006.
- [44] M. BENZ. O500 u - 1826-59, vol. 30. pp. 8–9, 2018.
- [45] T. HARR, K. G. ROLKER, H. BERGMANN, Y C. ARGACHOY. The new Mercedes-Benz medium duty engines OM 924 la and OM 926 la of the 900 engine series for trucks and buses. SAE Tech. Pap. 1999. doi: 10.4271/1999-01-3086.
- [46] D. TODD Y S. ERIKSSON. Engines. Glob. Commer. Aviat. Ind. pp. 107–137. 2015. doi: 10.2514/5.9781600862083.0267.0280.
- [47] BYD. Chassi de Ônibus D9W. 2018.
- [48] BYD AUTO. Especificaciones Técnicas BYD K9G. 2017.
- [49] Z. YANG, B. DENG, M. DENG, Y G. SUN. A study on finite element analysis of electric bus frame for lightweight design. MATEC Web Conf. vol. 175. pp. 1–4. 2018. doi: 10.1051/matecconf/201817503049.
- [50] A. J. B. MUWANGUZI, A. ALEVANAU, Y J. K. BYARUHANGA. Application of Different Models for the Prediction of the Kinetics of Direct Reduction of Natural Iron Ores. Geomaterials. vol. 07, nº 04. pp. 117–131. 2017. doi: 10.4236/gm.2017.74009.

- [51] E. MELENDEZ. Procesos Siderúrgicos. Mexico.
- [52] ARCELORMITTAL. ArcelorMittal Asturias (Gijón). [en línea] <<https://spain.arcelormittal.com/what-we-do/lce/gijon.aspx>> [Fecha de consulta: mar. 21, 2021].
- [53] INTERNATIONAL ALUMINIUM INSTITUTE. Bauxite residue management: Best Practice. pp. 63–66. 2015. doi: 10.1007/978-3-319-48179-1_11.
- [54] PINJARRA ALUMINA REFINERY. Fact sheet, Australia, 2019.
- [55] COCHILCO. Sulfuros primarios: desafíos y oportunidades. Regist. Prop. Intelect. N° 2833439. vol. DEPP 17/20. pp. 1–40. 2017. [En línea]. Disponible en: [https://www.cochilco.cl/Listado Temtico/sulfuros primarios_desafios y oportunidades.pdf](https://www.cochilco.cl/Listado_Temtico/sulfuros_primarios_desafios_y_oportunidades.pdf).
- [56] U.S. FEDERAL HIGHWAY ADMINISTRATION. Mineral processing wastes. 2016. [en línea] <<https://www.fhwa.dot.gov/publications/research/infrastructure/structures/97148/mwst1.cfm>>.
- [57] R. ROBERTSON. Electrorefining of Copper. Wire. 1991. [En línea]. Disponible en: <http://www.sno.phy.queensu.ca/sno/str/SNO-STR-91-071.pdf>.
- [58] CODELCO. Entrega De Resultados 2018. pp. 1–21. 2019.
- [59] ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY. Federal Register Part II. 2009.
- [60] A. GHOSH Y A. CHATTERJEE. Ironmaking and Steelmaking Theory and Practice, vol. 20. 2008.
- [61] SISTEMA ESPAÑOL DE INVENTARIO DE EMISIONES. Cowpers de hornos altos. 2007.
- [62] JOINT SOCIETY ON IRON AND STEEL BASIC RESEARCH. Blast Furnace Phenomena and Modelling, 1st ed. Elsevier Applied Science, 1987.

- [63] P. GRAMMELIS, N. MARGARITIS, Y E. KARAMPINIS. Solid fuel types for energy generation: Coal and fossil carbon-derivative solid fuels. Elsevier Ltd, 2016.
- [64] CENTRO DE ESTUDIOS Y EXPERIMENTACIÓN DE OBRAS PÚBLICAS. Escorias De Horno Alto Escoria Granulada Escoria Cristalizada. España. nº 2. pp. 1–20. 2011. [En línea]. Disponible en: <http://www.cedex.es/NR/rdonlyres/BFF81F23-BDB7-4B5B-85A5-A7ABD2974A42/119856/ESCORIASDEHORNOALTO.pdf>.
- [65] I. CAMERON, M. SUKHRAM, K. LEFEBVRE, Y W. DAVENPORT. Blast furnace ironmaking: Analysis, control, and optimization. 2019.
- [66] NIPPON STEEL ENGINEERING. Basic Oxygen Furnace (BOF). [en línea] <https://www.eng.nipponsteel.com/english/whatwedo/steelplants/steelmaking/basic_oxigen_furnace/> [Fecha de consulta: ago. 10, 2021].
- [67] W. S. ASSOCIATION. Steel's contribution to a low carbon future worldsteel. World Steel Assoc. Position Pap. <http://www.worldsteel.org/publications/position-papers/Steel-s-contribution-to-a-low-carbon-future.html>/[accessed 21 February 2012]. 2012.
- [68] A. R. HIND, S. K. BHARGAVA, Y S. C. GROCOTT. The surface chemistry of Bayer process solids: A review. Colloids Surfaces A Physicochem. Eng. Asp. vol. 146, nº 1–3. pp. 359–374. 1999. doi: 10.1016/S0927-7757(98)00798-5.
- [69] T. TANAKA. Comminution laws: Several Probabilities. Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev. vol. 5, nº 4. pp. 353–358. 1966. doi: 10.1021/i260020a001.
- [70] G. S. ABDEL HAFFEZ. Correlation Between Bond Work Index and Mechanical Properties of Some Saudi Ores. JES. J. Eng. Sci. vol. 40, nº 1. pp. 271–280. 2012. doi: 10.21608/jesaun.2012.112727.
- [71] H. CONKLIN. Water Requirements of the Aluminum Industry. Geol. Surv. Water-Supply Pap. 1330-C. pp. 103–134. 1956.

- [72] J. A. M. PEREIRA, M. SCHWAAB, E. DELL'ORO, J. C. PINTO, J. L. F. MONTEIRO, Y C. A. HENRIQUES. The kinetics of gibbsite dissolution in NaOH. *Hydrometallurgy*. vol. 96, n° 1–2. pp. 6–13. 2009. doi: 10.1016/j.hydromet.2008.07.009.
- [73] S. W. SUCECH, C. MISRA, Y A. LABORATORIES. Alcoa pressure calcination process for alumina. *Light Met.* pp. 669–676. 1986.
- [74] Y. A. CENGEL. *Thermodynamics: an engineering approach*. 7th ed., vol. 2. 2008.
- [75] G. E. TOTTEN Y D. S. MACKENZIE. *Handbook of Aluminum*. 2003.
- [76] J. LOPEZ. *Proceso electrolítico de obtención del aluminio*.
- [77] M. KOCH Y J. HARNISCH. CO₂ emissions related to the electricity consumption in the European primary aluminium production. A comparison of electricity supply approaches. *Int. J. Life Cycle Assess.* vol. 7, n° 5. pp. 283–289. 2002. doi: 10.1007/BF02978889.
- [78] ALUMINIUM INSIDER. Leaders Emerge In The Aluminium Industry's Race To Zero Carbon, 2019. [en línea] <<https://aluminiuminsider.com/leaders-emerge-in-the-aluminium-industrys-race-to-zero-carbon/>> [Fecha de consulta: sep. 28, 2021].
- [79] F. BARONA. Influencia de la distribución de tamaño de burbujas en la recuperación de la flotacion para minerles de cobre. Universidad de Chile. p. 219. 2007.
- [80] J. YIANATOS, L. BERGH, K. TELLO, F. DÍAZ, Y A. VILLANUEVA. Froth mean residence time measurement in industrial flotation cells. *Miner. Eng.* vol. 21, n° 12–14. pp. 982–988. 2008. doi: 10.1016/j.mineng.2008.05.004.
- [81] V. BAZÁN, P. SARQUIS, E. BRANDALEZE, Y I. OROZCO. Characterization of the argentine copper concentrates to evaluate the possibility of a pirometallurg y industry installation. *Ingeniare*. vol. 18, n° 3. pp. 343–349. 2010. doi: 10.4067/s0718-33052010000300008.

- [82] J. PUMA. Fabricación de celdas de flotación tipo Wemco para la minera Antapaccay en la empresa IMCO Servicios SAC., 2014.
- [83] M. DURÁN Y J. SILVA. Simulación de proceso de secado de concentrado de cobre. Codelco División EL TENIENTE. 2013.
- [84] C. HUNT. Modelamiento del enfriamiento controlado de escorias de fusión de cobre. pp. 47–49. 2017.
- [85] CITY OF WINNIPEG. Emission factors in kg CO₂-equivalent per unit, WSTP South End Plant Process Selection Report, 2011. [en línea] <https://www.winnipeg.ca/finance/findata/matmgt/documents/2012/682-2012/682-2012_Appendix_H-WSTP_South_End_Plant_Process_Selection_Report/Appendix_7.pdf> [Fecha de consulta: ago. 27, 2021].
- [86] C. CONTRERAS. Elaboración de balance de masa y energía del sistema de manejo de gases para la construcción de un modelo predictivo que permita mejorar la captura de azufre y arsénico en la planta de Fundición Caletones, Codelco División El Teniente, Universidad Técnica Federico Santa María, 2018.
- [87] L. VOISIN. Fundamentos de pirometalurgia. Módulo 7: Refino a Fuego. pp. 1–31.
- [88] A. ESTEFANI. Estudio termomecánico del proceso de fabricación y funcionamiento de un molde para ánodos. Universidad de Sevilla. 2006.
- [89] P. LAROUCHE. Minor Elements in Copper Smelting and Electrorefinig, n^o November. 2001.
- [90] S. CERÓN. Desarrollo de modelo de costos de operación de la línea de procesamiento Fundición y Refinería del Cobre para evaluación económica, Universidad de Chile. 2019.
- [91] E. CORTÉS. Modificación de variables relevantes para disminuir el consumo y optimizar la eficiencia energética en refinería electrolítica división ventanas codelco - Chile. 2014.

- [92] A. E. NILSSON ET AL. A review of the carbon footprint of Cu and Zn production from primary and secondary sources. *Minerals*. vol. 7, n° 9. pp. 1–12. 2017. doi: 10.3390/min7090168.
- [93] K. W. LIE, T. A. SYNNEVÅG, J. J. LAMB, Y K. M. LIEN. The carbon footprint of electrified city buses: A case study in Trondheim, Norway. *Energies*. vol. 14, n° 3. pp. 1–21. 2021. doi: 10.3390/en14030770.
- [94] US EPA CENTER FOR CORPORATE CLIMATE LEADERSHIP. Emission Factors for Greenhouse Gas Inventories. vol. 2, n° April. pp. 1–5. 2021. [En línea]. Disponible en: papers2://publication/uuid/FDF7F83F-129C-44B6-AD7E-9620A9C9ED08.
- [95] DIRECTORIO DE TRANSPORTE PÚBLICO METROPOLITANO (DTPM). Proyecto de Mejoramiento Tecnológico en Buses del Sistema de Transporte Público de Santiago. 2014. [En línea]. Disponible en: [http://www.dtpm.gob.cl/descargas/estudios/lanzamiento/Memoria MT_TS.pdf](http://www.dtpm.gob.cl/descargas/estudios/lanzamiento/Memoria_MT_TS.pdf).
- [96] MANUEL VALENCIA. Nuevo Transantiago fija vida útil de buses en 10 años, pese a deterioro de flota actual, que ya tiene esa antigüedad. 2017. *El Mercurio*. Santiago, Chile. ene. 22.
- [97] EVRAZ. EVRAZ Canadian Steel: Low Carbon Footprint. n° November. 2016. [En línea]. Disponible en: http://d3n8a8pro7vhmx.cloudfront.net/erinweir/mailings/195/attachments/original/Cleaner_Steel_November_2016.pdf.
- [98] A. CRUZ. Recorrido 506 Santiago - Administracionytransportes.cl. 2020. [en línea] <<http://administracionytransportes.cl/2020/04/24/recorrido-506-santiago/>> [Fecha de consulta: feb. 09, 2021].
- [99] A. CRUZ. El top de recorridos con más demanda de transantiago. 2018. [en línea] <<http://administracionytransportes.cl/2018/05/02/top-recorridos-con-mas-demanda-de-transantiago/>> [Fecha de consulta: abr. 09, 2021].

[100] ROYAL SOCIETY OF CHEMISTRY. ChemSpider: Dimethyl carbonate, 2015. [en línea] <<http://www.chemspider.com/Chemical-Structure.13837280.html>> [Fecha de consulta: abr. 09, 2020].

[101] ROYAL SOCIETY OF CHEMISTRY. ChemSpider: Ethyl methyl carbonate, 2015. [en línea] <<http://www.chemspider.com/Chemical-Structure.13837280.html>> [Fecha de consulta: abr. 09, 2020].

[102] ROYAL SOCIETY OF CHEMISTRY. ChemSpider: Ethylene carbonate, 2015. [en línea] <<http://www.chemspider.com/Chemical-Structure.13837280.html>> [Fecha de consulta: abr. 09, 2020].

[103] ROYAL SOCIETY OF CHEMISTRY. ChemSpider: Propylene carbonate, 2015. [en línea] <<http://www.chemspider.com/Chemical-Structure.13837280.html>> [Fecha de consulta: abr. 09, 2020].

[104] S. PHADKE Y M. ANOUTI. Effect of lithium salt concentration on the capacity retention of Lithium rich NMC cathodes. *Electrochim. Acta.* vol. 223. pp. 31–38. 2017. doi: 10.1016/j.electacta.2016.12.010.

Anexo A. Recorrido 506

El recorrido 506 es uno de los principales de la Red Metropolitana de Movilidad, ya que atraviesa completamente la ciudad de Santiago de oriente a poniente, uniendo las comunas de Maipú, Estación Central, Santiago, Ñuñoa y Peñalolén. En su trayecto de ida y vuelta, presentado en la Figura 20, recorre una distancia total de 72,6 km [98].

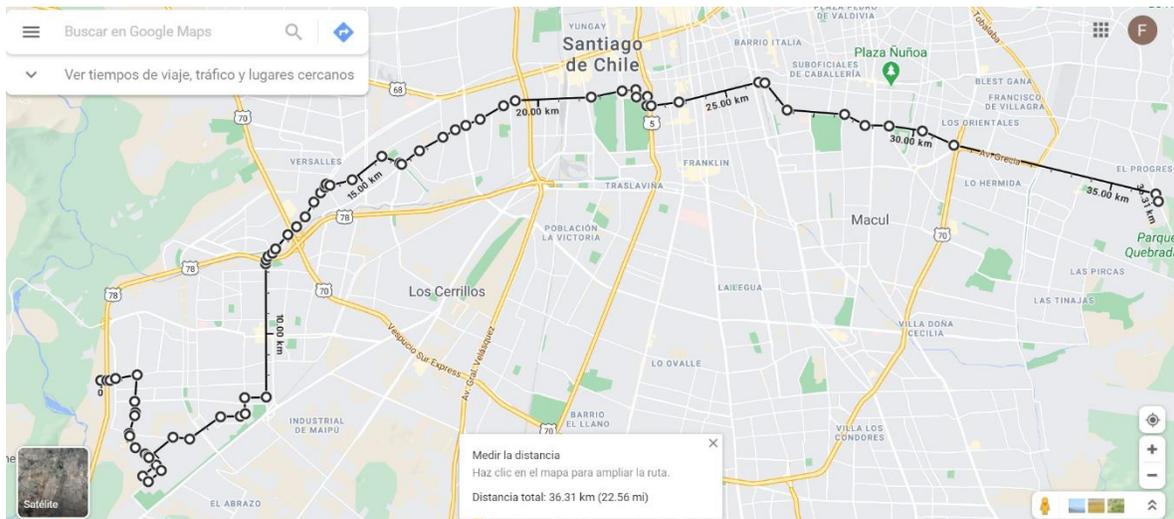


Figura 20: Trazado y distancia total del recorrido 506. Imagen elaborada a partir de Google Maps.

Además, este recorrido cuenta con el cuarto lugar en mayor demanda de pasajeros del transporte público, con un total de 10,9 millones de validaciones² en el año 2016 [99].

Por último, es importante mencionar que la empresa a cargo de este recorrido cuenta con buses de motor diésel y buses eléctricos para realizar este viaje.

En base a lo mencionado, se considera adecuado tomar como referencia el recorrido 506 para realizar el estudio comparativo de impacto ambiental de ambos tipos de buses.

² Se entiende por una validación como cada vez que un pasajero realiza el pago de su pasaje.

Anexo B. Caso base para LiPF_6 , LiFePO_4 y grafito

Además de los componentes presentados en la sección 3.1, hay tres materiales de los buses eléctricos que no fueron considerados en el presente trabajo: hexafluorofosfato de litio (LiPF_6), fosfato de hierro-litio (LiFePO_4) y grafito. En este anexo se calcula la masa de estos componentes para un bus eléctrico.

El hexafluorofosfato de litio está presente en el electrolito de las baterías, donde el solvente utilizado es una mezcla de dimetil carbonato, etil-metil carbonato, carbonato de etileno y carbonato de propileno en una relación másica 4:2:3:1, respectivamente [23]. Las densidades de estos solventes se presentan en la Tabla 45.

Tabla 45: Densidad de los solventes del electrolito.

Compuesto	Densidad / kg m^{-3}	Referencia
Dimetil carbonato	1.070	[100]
Etil-metil carbonato	1.000	[101]
Carbonato de etileno	1.320	[102]
Carbonato de propileno	1.204	[103]

Se requiere conocer la masa de LiPF_6 en las baterías. Para obtenerla, primero se estima la densidad del solvente (ρ_{solv}) ponderando la composición másica y la densidad de cada compuesto, es decir:

$$\rho_{\text{solv}} = \left(\frac{4 \cdot 1.070 + 2 \cdot 1.000 + 3 \cdot 1.320 + 1 \cdot 1.204}{10} \right) \text{kg m}^{-3} = 1.144,4 \text{kg m}^{-3} \quad (94)$$

A continuación, usando la masa de electrolito (sal y solvente) mostrada en la Tabla 7, se puede calcular el volumen del electrolito (V_{elec}), tomando como supuesto que la adición de sal no genera variaciones significativas de volumen. Esto es:

$$V_{elec} = \frac{299,4 \text{ kg}}{1.144,4 \text{ kg m}^{-3}} = 0,2616 \text{ m}^3 \quad (95)$$

Luego, sabiendo que la sal tiene una concentración molar de 1 kmol m^{-3} (1 M) [104], se calcula la masa de LiPF_6 tal como se muestra a continuación:

$$m_{\text{LiPF}_6} = 0,2616 \text{ m}^3 \cdot 1 \text{ kmol m}^{-3} \cdot 151,9 \text{ kg kmol}^{-1} = 39,7 \text{ kg} \quad (96)$$

Por último, las masas de LiFePO_4 y grafito se obtienen ponderando la relación másica de la Tabla 7, es decir, un 25% y un 13% de la masa total del bus, respectivamente. De esta manera se llega a los resultados mostrados en la Tabla 46.

Tabla 46: Masa de LiPF_6 , LiFePO_4 y grafito en un bus eléctrico.

Material	Sección	Masa / kg
LiPF_6	Electrolito	39,7
LiFePO_4	Cátodo	467,8
Grafito	Ánodo	243,3