

*HydroSim*

**Una Librería para Simulación, Modelación y  
Optimización en Hidrometalurgia.**

**Reporte Técnico**

**Por**

**Luis Cisternas  
Nancy Luza  
Edelmira Gálvez**



## RESUMEN

Se ha desarrollado una librería para estudiar los procesos de extracción de metales por la vía hidrometalúrgica, utilizando la herramienta ASCEND IV. Esta librería es útil para la simulación, modelación y optimización de estos procesos y fenómenos, con el fin de estudiar el comportamiento de las variables involucradas y obtener resultados aplicables en la industria.

La librería *HydroSim* incluye diferentes modelos de Lixiviación, Extracción por Solvente y Electroobtención, además de modelos para representar estados y etapas auxiliares. Estos modelos incluyen diferentes niveles de complejidad, por ejemplo se disponen varios modelos para etapas de extracción/stripping. Cada modelo se puede utilizar en forma individual o unirse para realizar estudios de circuitos hidrometalúrgicos, pudiendo evaluar la interacción de las variables en cada etapa y/o del proceso global.

Diferentes aplicaciones se han estudiado, incluyendo el equilibrio simultáneo de Cobre y Hierro en procesos de extracción de cobre, efecto del reciclo interno en mezcladores-sedimentadores (continuidad de fases), simulaciones de circuitos de extracción, efecto de tasa de riego en pilas lixiviación estáticas y dinámicas, entre otros ejemplos.

La librería no sólo se puede usar utilizando los modelos disponibles, sino por ser transparente, se puede ampliar y/o modificar, permitiendo otros estudios.

## 1. INTRODUCCIÓN

En Chile la minería es la actividad económica más importante, y más aún en el norte del país donde se presenta la mayor mineralización cuprífera del mundo, lo que ha llevado a un crecimiento económico sostenido en los últimos años, por la excelente calidad de los recursos, la magnitud de las reservas y por el aumento en el nivel de explotación. En los años noventa, las producciones de cobre crecieron aceleradamente, obteniendo producciones que superaban el doble de las extracciones, en sólo los primeros siete años de esa década (García et al, 2001). Este desarrollo se ha producido para satisfacer el incremento en la demanda mundial de cobre, en especial de Asia, de los últimos veinte años (Nishiyama, 2005) y además por el aumento de las inversiones extranjeras y las nuevas tecnologías implementadas en los procesos productivos.

La hidrometalurgia se presenta actualmente, como una de las vías más importantes en la recuperación de metales, debido a las ventajas comparativas que presenta dentro de la industria minera del cobre, oro y zinc, entre otros metales. Entre las ventajas más destacables figuran la producción limpia, debido a la ausencia de polución por gases contaminantes, tema muy relevante considerado en los procesos productivos actuales. Otro punto de interés, es la factibilidad del tratamiento de minerales de baja ley, lo cual sería inviable con otras vías de producción; además, en el aspecto químico, el proceso presenta alta selectividad y alto grado de separación en las reacciones involucradas, obteniendo un producto de alta pureza. El tema económico es, sin duda, uno de los más atractivos para la industria, debido a que la línea hidrometalúrgica completa ofrece menores costos de producción que se reflejan en el producto final (Menacho, 2005). Existe una constante en la búsqueda de nuevas tecnologías que considera (1) incrementar la productividad de las distintas partes del proceso, (2) reducir los costos de operación, (3) reducir los impactos ambientales adversos de las efluentes del proceso y (4) en caso de la necesidad de una nueva capacidad de planta, desarrollar procesos nuevos, simples, limpios y más económicos (Peters, 1992).

Este trabajo se presenta como una herramienta tecnológica que pretende contribuir al desarrollo del rubro minero focalizado en los procesos hidrometalúrgicos para la extracción de minerales de cobre. Aunque varios trabajos han sido publicados sobre modelación, simulación y optimización de estos sistemas, existe aun necesidad de contar con herramientas computacionales para comprender mejor su comportamiento y mejorar la relación eficiencia/capacidad de operación.

Específicamente, se presenta una librería, construída dentro de ASCEND, que incluye una serie de rutinas para la simulación, modelación y optimización de procesos y fenómenos en hidrometalurgia.

## 2. ANTECEDENTES

### 2.1. HIDROMETALURGIA

La hidrometalurgia o metalurgia extractiva por disolución química es uno de los procesos de recuperación de metales desde la mena, más utilizado hoy en día. La hidrometalurgia como disciplina independiente, data del tiempo de los alquimistas (Habashi, 1993). *De Re Metallica* discute conocimientos de reacciones de reemplazo como la cementación del cobre por el hierro y el uso de *aqua regia* en los años 600 a 900 D.C. Otro hito importante ocurrió por el año 1880, al descubrir que el oro y la plata pueden ser lixiviados en soluciones cianuradas (Mooiman et al, 2005). La comercialización de estos procesos revolucionaron la industria del oro, y establece el pilar fundamental de la metalurgia extractiva del oro más de un siglo después (Fleming, 1992). La lixiviación y la electrometalurgia fundaron tempranamente la hidrometalurgia. La disciplina moderna emergió con el desarrollo de la extracción por solvente (SX) y el intercambio iónico (IX) como procesos de separación de uranio en el proyecto Manhattan en 1942 (Flett, 2005). Más recientemente, los procesos de extracción biológica y el uso de altas temperaturas y presiones han sido agregados al arsenal de operaciones unitarias hidrometalúrgicas, como se ha mostrado en los recientes procesos de extracción de cobre (McElroy y Young, 1999) y níquel (Anthony y Flett, 1997) desde materiales que, anteriormente, sólo podían ser tratados por la vía pirometalúrgica (Mooiman et al, 2005). A lo largo del tiempo, los avances se han producido debido a factores como la demanda de metales o compuestos de alta pureza, la necesidad de nuevos productos con características específicas, la disminución de costos de producción y el cumplimiento de las actuales normativas vigentes, con respecto a salud, seguridad y medio ambiente.

El proceso de extracción comienza con una etapa de preparación del mineral, que generalmente consiste en la trituración, para luego someterlo a la etapa de extracción. Esta etapa corresponde a la lixiviación del mineral, luego viene la etapa de recuperación, que puede realizarse por diferentes caminos, cuya elección depende de factores como las características del mineral, concentración de la solución obtenida en la lixiviación y del producto deseado.

Después de la etapa de preparación del mineral (usualmente chancado y molienda) varias rutas de proceso son posibles. En procesos hidrometalúrgicos, generalmente la etapa de extracción consiste en la disolución de los constituyentes valiosos del mineral. Esto es conocido como lixiviación, que es una operación de transferencia de masa sólido-líquido, que puede ocurrir en condiciones ambiente o a elevadas temperaturas y/o bajo presión. Las condiciones del proceso dependen de las reacciones que se llevan a cabo. El agente lixivante debe cumplir con varias características, entre las cuales figuran la capacidad de disolución rápida, manteniéndose como un inerte con las especies químicas de la ganga, tener bajo costo y estar disponible en grandes cantidades. Existen diferentes métodos de lixiviación clasificados por: percolación (lixiviación estática) y por agitación (lixiviación dinámica). La lixiviación por percolación consiste en que el agente lixivante percola a través de la masa estática de mineral, proceso que puede realizarse de varias formas: existe la lixiviación in Situ, en Pilas y en Bateas. En la lixiviación por agitación, el mineral es reducido a tamaños finos y se agita con el disolvente en un recipiente, de ahí su nombre.

Hoy en día, la lixiviación en Pilas se presenta como la etapa de extracción más importante dentro de la hidrometalurgia del cobre, debido a las ventajas que presenta tanto en su bajo costo de producción y energético, como en la posibilidad de tratamiento de minerales pobres y al bajo grado de contaminación ambiental, es por eso que, en este trabajo, se ha optado por el estudio de este proceso.

Las soluciones obtenidas en la etapa de lixiviación son enviadas a operaciones de recuperación. Esta etapa de recuperación puede consistir de una o más operaciones, cuando más de una operación es incluida, el objetivo es purificar la solución. Esta purificación es generalmente realizada por adsorción, extracción por solventes o por intercambio iónico. La extracción por solventes es uno de los procesos más efectivos y económicos para purificar, concentrar y separar los metales valiosos que se encuentran en las soluciones enriquecidas provenientes de procesos de lixiviación, su principal aplicación se encuentra en la producción de cobre, aunque también se aplica para la obtención de uranio, vanadio, molibdeno, boro, entre otras especies. Por su amplia utilización, en especial en la industria minera del cobre, se ha desarrollado una librería de modelación y simulación de este proceso, que contribuya al desarrollo del sector minero.

La extracción por solventes (SX), o extracción líquido-líquido, es una operación unitaria para la purificación y concentración de una amplia variedad de metales. Esta consiste en el contacto de una fase orgánica, que contiene un extractante, con una fase acuosa que contiene el metal de interés. El extractante reacciona químicamente con el metal, para formar un complejo orgánico-metal, el cual es soluble en la fase orgánica. Las impurezas, por lo general, no reaccionan con el extractante y se quedan en la fase acuosa. La fase orgánica, que contiene el complejo orgánico-metal, es separada de la fase acuosa. El metal es recuperado y concentrado en otra fase acuosa por la reacción química inversa. Este metal diluido en la solución acuosa debe ser, finalmente, recuperado como producto final, para ello se somete a una etapa de purificación.

La etapa de purificación puede realizarse por distintas formas, dependiendo de las características de la solución y naturaleza química de la etapa de recuperación precedida, por ejemplo, si la recuperación se realizó mediante intercambio iónico o adsorción, obteniendo una solución concentrada en la especie de interés, se puede realizar la purificación de éste mediante cristalización, precipitación iónica o reducción con gas; en caso de que de la lixiviación se obtenga directamente una solución de alta concentración, se podría pasar directamente a la purificación utilizando las operaciones anteriores. Para soluciones de baja concentración, el proceso de extracción puede realizarse por adsorción, extracción por solventes o intercambio iónico. Si la recuperación del metal en soluciones diluidas, se realizó mediante extracción por solventes, la purificación se realizará mediante la electroobtención, o en algunos casos podría purificarse directamente desde la lixiviación, pasando a etapas de precipitación iónica o reducción electroquímica.

La electroobtención (EW), electrodeposición o precipitación por reducción electrolítica, es un proceso que consiste en la recuperación del metal desde la solución electrolito (solución acuosa proveniente de SX), por un proceso de electrólisis para depositarlo en un cátodo, obteniendo como producto el metal de interés con alto grado de pureza.

En el área de la hidrometalurgia del cobre, el proceso más utilizado comienza con la preparación del mineral, pasando posteriormente a la lixiviación, luego a la etapa de extracción por solventes, para terminar con la electroobtención y así obtener un metal puro.

Este proceso ha sido estudiado, en esta memoria, para desarrollar modelos matemáticos que permitan simular, modelar, optimizar y analizar los procesos y fenómenos involucrados en el sistema. Ya se han presentado los principios de hidrometalurgia involucrados, a continuación se señalan las características del software utilizado en la implementación de los modelos.

## 2.2. ASCEND IV (Advanced System for Computations in ENgineering Design)

ASCEND IV es tanto un entorno de modelación matemática a gran escala, orientado a objetos, como un potente lenguaje de modelamiento matemático. Aunque principalmente ha sido desarrollado por Ingenieros Químicos, se ha puesto gran cuidado en asegurar que el dominio sea independiente (ASCEND website). Es así como ASCEND puede apoyar actividades de modelación en campos desde Arquitectura hasta Zoología (computacional).

ASCEND IV es un sistema que puede realizar modelos realmente grandes, 100.000 ecuaciones, plantearlos y solucionarlos, en minutos, en el PC. También puede solucionar pequeños problemas que actualmente son solucionados usando una hoja de cálculo, pero en donde el usuario define que factores serán parámetros (datos) y que factores serán variables. El programa presenta ventajas aprovechables, pero para usar este sistema es necesario un entrenamiento especial.

Este programa utiliza programación orientada a objetos (POO), esto es que el sistema se define en términos de “clases de objetos”, objetos que son entidades que combinan *estado* (datos), *comportamiento* (procedimientos o métodos) e *identidad* (propiedad del objeto que lo diferencia de otro). Las principales características de este lenguaje de programación son: la *Abstracción*, debido a que cada objeto puede “comunicarse” con otros objetos sin revelar su funcionamiento; el *Encapsulamiento*, esto es, que se agrupan en el mismo nivel de abstracción a los elementos pertenecientes a la misma entidad; el *Principio de Ocultación* de los objetos, para proteger al acceso a sus datos internos; *Polimorfismo* se refiere a que distintos objetos presentan diferentes comportamientos y *Herencia*, con respecto a las clases de objetos, que están interrelacionadas, formando una jerarquía de clasificación; los objetos heredan las propiedades y el comportamiento de todas las clases a las que pertenecen. La programación orientada a objetos expresa un programa como un conjunto de estos objetos, que colaboran entre ellos para realizar tareas. Esto permite hacer los programas y módulos más fáciles de escribir, mantener y reutilizar.

En ASCEND, se construye un modelo formado por objetos y clases de objetos, éstos tienen asociado su propio *comportamiento*, el que se encuentra definido por métodos, que son algoritmos asociados al objeto o a la clase de objetos, cuya ejecución se desencadena tras la recepción de un “mensaje”, indicándole al objeto qué tiene que hacer. Específicamente, estos métodos establecerán los procedimientos de cálculo, determinando qué variables se calcularán y cuáles serán parámetros o datos conocidos que se ingresarán al sistema.

Además ASCEND cuenta con varios resolvedores que se pueden seleccionar y que incluyen una rutina de optimización utilizable en diferentes tipos de modelos. Si bien el programa no es amigable, una de las grandes ventajas que presenta es la transparencia, puesto que, en los modelos, es posible ver el código y modificarlo con libertad. Otra ventaja es que los modelos disponibles pasan a formar parte de la librería del programa, las que pueden reutilizarse según necesidad. Estas librerías pueden usarse para el cálculo de múltiples variables en distintos casos de estudio, los que pueden guardarse como una *macro*, que graba todos los procedimientos realizados por el programa para efectuar el cálculo específico, y que permite ser, posteriormente, reutilizado, de esta forma, se puede contar con diferentes macros o *script* con una misma librería. Las librerías desarrolladas

con este programa, a partir de los modelos implementados, permiten realizar la simulación del proceso para analizar variables de estudio, pudiendo incluso mejorar el proceso a través de la herramienta de optimización que ASCEND ofrece.

### 3. LIBRERÍA DE HIDROMETALURGIA (HYDROSIM)

#### 3.1. DESCRIPCIÓN GENERAL

Se ha desarrollado una librería para estudiar los procesos de extracción de metales por la vía hidrometalúrgica, utilizando la herramienta ASCEND IV. Esta librería es útil para la simulación, modelación y optimización de estos procesos y fenómenos, con el fin de estudiar el comportamiento de las variables involucradas y obtener resultados aplicables en la industria. La librería incluye diferentes modelos hidrometalúrgicos, además de modelos para representar estados y etapas auxiliares. Los modelos son construídos a partir de “elementos base” (ver tabla 3.1), que constituyen la estructura fundamental del modelo. Para el desarrollo de estas librerías, se han incluido y ampliado los modelos presentados por Malatesta (2004), los que, según muestra la tabla adjunta, son asignados a la versión I, luego los nuevos modelos corresponden a la versión II.

*Tabla 3.1. Modelos incorporados en la librería HydroSim.*

<b>Modelo</b>	<b>Descripción</b>	<b>Versión</b>
<b><i>Elementos Base:</i></b>		
Mixture	Mezcla de componentes líquidos.	I
Solid Mixture	Mezcla de componentes sólidos.	II
Stream	Flujo o corriente de líquidos.	I
Solid Stream	Flujo o corriente de sólidos.	II
Mixer	Mezclador de flujos de líquidos.	I
Solid Mixer	Mezclador de flujos de sólidos.	II
Splitter	Divisor de flujos de líquidos.	I
Solid Splitter	Divisor de flujos de sólidos.	II
<b><i>Modelo de Lixiviación:</i></b>		
Heap Leaching	Balance de masa en estado estacionario.	I
Heap Block	Bloque unitario de pila de lixiviación.	II
Heap Leach	Pila de lixiviación.	II
<b><i>Modelo de Extracción por Solvente (SX):</i></b>		
Mixersettler Equilibria	Mezclador-sedimentador en equilibrio.	II
Mixersettler	Mezclador-sedimentador con transferencia de masa.	I
Mixersettler Rigorous	Mezclador-sedimentador incluyendo continuidad de fases.	II
<b><i>Modelo de Electroobtención (EW):</i></b>		
EW Cell	Balance de masa en estado estacionario.	I
Cathode	Modelo Cátodo	II
Anode	Modelo Ánodo	II
Cell	Celda de electroobtención	II

En todo proceso hidrometalúrgico se trabaja con flujos de líquidos y de sólidos, éstos tienen propiedades intrínsecas, como el estar formados por una mezcla de distintos componentes, con sus respectivas masas moleculares y determinados valores de sus densidades másicas y molares. Estas propiedades se han definido y parametrizado como un “estado” (*State*) en el modelo *Mixture* y *Solid\_Mixture*. Luego esta mezcla de componentes líquidos y sólidos, es relacionada con un flujo volumétrico y un flujo molar, para crear el modelo de corriente o *Stream*, y *Solid Stream* para las corrientes de sólidos. Los flujos del proceso se pueden mezclar, a partir de un balance que determina que la suma de los flujos de entrada es igual al flujo de salida, expresado mediante el modelo *Mixer* y *Solid Mixer*, y mediante la forma inversa, dividir corrientes, utilizando el modelo *Splitter*, y para los sólidos, *Solid Splitter*. Estos elementos bases forman la columna vertebral de los modelos de Lixiviación, Extracción por Solvente y Electroobtención, desarrollados en este trabajo.

Para la etapa de lixiviación, se han construido distintos modelos a partir de los elementos bases. El primero y más simple, el modelo *Heap\_Leaching*, consiste en un sencillo balance de masa referido a las corrientes de entrada y salida. Luego se presenta un modelo más complejo constituido por bloques unitarios de lixiviación o *Heap\_Block*, que consideran todas las variables involucradas en la transferencia de masa. Estos bloques son relacionados entre sí, formando la pila de lixiviación (modelo *Heap Leach*), la que puede adoptar distintas configuraciones para la utilización de pilas estacionarias o dinámicas.

En la etapa de extracción por solventes, también se desarrollaron modelos de distinto nivel de complejidad, el primero de ellos es el *Mixersettler Equilibria*, que considera que la reacción ocurre en un mezclador-sedimentador en condiciones de equilibrio. El siguiente modelo, llamado *Mixersettler*, toma en cuenta los fenómenos asociados a la transferencia de masa, al igual que el modelo *Mixersettler Rigorous*, que además incluye la continuidad de las fases orgánico-acuoso. Una explicación más a fondo de los modelos de lixiviación y SX, se detallan en las secciones siguientes.

La electroobtención es la última etapa del proceso modelado en la librería. Al igual que para la lixiviación, se cuenta con un balance de masa en el modelo llamado *EW Cell*. Se han modelado las celdas, realizando un modelo para el cátodo (*Cathode*), incluyendo las reacciones de reducción, la ecuación de Nerst, y una expresión cinética de la transferencia de electrones. En forma análoga, se desarrolló un modelo para el ánodo (*Anode*) que, junto con el modelo anterior, constituyen el modelo de celda de electroobtención (*Cell*).

Los modelos anteriores han sido implementados en archivos de texto que ASCEND puede procesar. Los archivos de la librería con los modelos incluidos, se detallan en la tabla 3.2:

Tabla 3.2. Archivos incluidos en la librería HydroSim.

Archivo	Descripción
<b>Librerías (.a4l)</b>	
HydroAtoms	<i>Librería con definición de dimensiones de variables utilizadas.</i>
HydroBasic	<i>Librería que incluye modelos de Elementos Base.</i>
HydroLeach	<i>Librería que incluye modelos: Heap Leaching, Heap Block y Heap Leach.</i>
HydroSX.	<i>Librería que incluye modelos: Mixersetttler, Mixersetttler Equilibria y Mixersetttler Rigorous.</i>
HydroEW	<i>Librería que incluye modelos: EW Cell, Cathode, Anode y Cell.</i>
<b>Ejemplos de Aplicación (.a4c)</b>	
HS_HB	Simulación de bloque de lixiviación.
HS_HS	Simulación de pila estática de lixiviación.
HS_HD	Simulación de pila dinámica de lixiviación.
HS_SX_1	Simulación de mezclador-sedimentador en equilibrio y pseudo-equilibrio.
HS_SX_1_E	Simulación de mezclador-sedimentador. (Modelo Mixersetttler Equilibria)
HS_SX_1_R	Simulación de mezclador-sedimentador. (Modelo Mixersetttler Rigorous)
HS_SX_1_RR	Simulación de mezclador-sedimentador con recirculación interna de orgánico.
HS_SX_1_1	Simulación de circuito de SX con 1 etapa de extracción y 1 etapa de stripping. (Modelo Mixersetttler)
HS_SX_1_1_E	Simulación de circuito de SX con 1 etapa de extracción y 1 etapa de stripping. (Modelo Mixersetttler Equilibria)
HS_SX_1_1_R	Simulación de circuito de SX con 1 etapa de extracción y 1 etapa de stripping. (Modelo Mixersetttler Rigorous)
HS_SX_2_2_E	Simulación de circuito de SX con 2 etapas de extracción y 2 etapas de stripping.
HS_SX_2_2_E1	Simulación de circuito de SX con 2 etapas de extracción y 2 etapas de stripping. Incluye recirculación y bypass de orgánico.
HS_SX_2_2_E2	Simulación de circuito de SX con 2 etapas de extracción y 2 etapas de stripping. Incluye bypass de flujo acuoso.
HS_SX_Fit	Optimización de variables: determinación de las constantes de equilibrio.
HS_EW_1	Simulación de celda de EW. (Modelo Cell).
<b>Scripts para estudio de casos (.a4s)</b>	
HS_SX_1_a	Ejemplo de cálculo: isoterma de equilibrio y pseudo-equilibrio.
HS_SX_1_b	Ejemplo de cálculo: efecto de pH acuoso en isoterma de equilibrio.
HS_SX_1_c	Ejemplo de concentración de extractante en isoterma de equilibrio.

### 3.2. LIXIVIACIÓN EN PILAS

Para la modelación de los fenómenos de la lixiviación en pilas se consideraron diferentes aspectos. La lixiviación en pilas, como se explicó anteriormente, consiste en que la pila de mineral es regada con la solución lixivante que percola, a través del material, hasta la base de la pila, en donde se recoge como solución rica en el metal de interés (pls). A continuación se presenta el modelo matemático desarrollado.

#### 3.2.1. Modelo de Bloque Unitario (*Heap Block*)

Primeramente se modeló un bloque unitario de lixiviación, como se muestra en la figura 3.1, en que el líquido lixivante  $Q^{in}$ , ingresa por la parte superior del bloque y riega la masa de mineral sin lixiviar  $W^{in}$ , luego la solución cargada  $Q^{out}$  sale por la parte inferior del bloque y la masa de mineral lixiviado  $W^{out}$  es desechada.

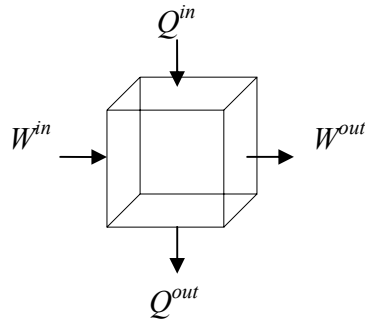


Figura 3.1: Bloque Unitario de Lixiviación.

Expresando, matemáticamente, lo anterior, se obtienen los balances totales de soluciones y de masa, considerando densidad constante:

$$Q^{in} = Q^{out} \quad [\text{vol/t}] \quad (3.1)$$

$$W^{in} = W^{out} \quad [\text{masa/t}] \quad (3.2)$$

Luego la ecuación para la transferencia de las especies de interés, desde la masa de mineral a la solución lixivante es:

$$W^{in} X_i^{in} + Q^{in} w_i^{in} = W^{out} X_i^{out} + Q^{out} w_i^{out} \quad [\text{masa/t}] \quad (3.3)$$

donde  $X_i^{in}$  es la fracción de concentración del componente  $i$  en el mineral de entrada y  $X_i^{out}$ , en el mineral de salida,  $w_i^{in}$  y  $w_i^{out}$  son las concentraciones en [g/l] de las especies  $i$  en el flujo de solución que entra y sale del bloque, respectivamente. Se considera que las

especies transferidas  $i$ , corresponden a los elementos  $Cu$  y  $Fe$ ; pero esto, es posible modificarlo fácilmente, en el modelo implementado.

El balance del ácido en el bloque, expresa que el ácido que entra al sistema, a través de la solución, es igual al ácido que sale más el consumo del mismo. Este balance se ha expresado haciendo referencia a la concentración del protón  $H^+$ , es por esta razón que el valor del consumo de ácido  $Q^H$  ha sido dividido por la masa molecular del ácido sulfúrico y se han considerado, en el balance, los 2 protones presentes en el ácido. Luego la ecuación es:

$$2 \cdot Q^{in} \cdot z^{in} \cdot MW_Z = 2 \cdot Q^{out} \cdot z^{out} \cdot MW_Z + 2 \cdot \frac{Q^H}{98} \quad [\text{masa/t}] \quad (3.4)$$

donde,  $z^{in}$  y  $z^{out}$  son las concentraciones del protón  $H^+$  en la solución de entrada y salida; y  $MW_Z$  es la masa atómica del protón, que tiene un valor de 1.

Para simular el comportamiento de la solución, con respecto a la transferencia de masa, se utilizó el modelo de núcleo sin reaccionar, propuesto por Levenspiel, para esferas de tamaño constante, en que la difusión en la capa de ceniza controla la velocidad de reacción. Este modelo considera que el reactante (agente lixivante) difunde hasta la superficie del sólido, penetrando en la partícula y difundiendo hasta la superficie de reacción, en el núcleo no reaccionado, luego los productos de la reacción difunden por la capa de ceniza hacia el exterior hasta el seno del fluido. La primera ecuación representa el tiempo de residencia  $t$  como función de la conversión  $\alpha_i$  y del tiempo característico  $\tau_i$ , de las iésimas especies.

La ecuación es:

$$t = \tau_i \left[ 1 - 3(1 - \alpha_i)^{2/3} + 2(1 - \alpha_i) \right] \quad [t] \quad (3.5)$$

El tiempo  $\tau_i$  es el tiempo necesario para la conversión completa, siendo característico para cada componente transferido, y es una función del diámetro de partícula  $D$ , la ley del mineral  $X^n$ , la concentración molar del ácido que sale  $z^{out}$  y una constante específica para cada catión  $K_i$ :

$$\tau_i = \frac{K_i \cdot X^{in} \cdot D^2}{z^{out}} \quad [t] \quad (3.6)$$

$$K_i = \frac{SD}{MW_i \cdot 48 \cdot D_{efz}} \quad [\text{hr mol/m}^3] \quad (3.7)$$

Donde,  $SD$  es la densidad del mineral,  $MW_i$  es la masa atómica de las especies transferidas y  $D_{efz}$  es la difusividad efectiva del ácido.

Las ecuaciones anteriores también han sido referidas al ácido, de forma que se tiene, además, el tiempo de residencia como función de la conversión de ácido  $\alpha_z$  y tiempo característico  $\tau_z$ .

$$t = \tau_z \left[ 1 - 3(1 - \alpha_z)^{2/3} + 2(1 - \alpha_z) \right] \quad [\text{t}] \quad (3.8)$$

El tiempo característico del ácido está definido por:

$$\tau_z = \frac{K_z \cdot D^2}{Z^{out}} \quad [\text{t}] \quad (3.9)$$

Donde  $K_z$  es una constante relacionada con el ácido,  $D$  es el diámetro de la partícula y  $Z^{out}$  es la concentración molar de salida del ácido.

El modelo también incluye una ecuación, basada en balance de masa, para la conversión de cada especie  $\alpha_i$ , relacionando los flujos de sólidos de entrada y salida,  $W^{in}$  y  $W^{out}$ , y la composición de la especie antes  $X_i^{in}$  y después de la lixiviación  $X_i^{out}$ :

$$\alpha_i = \frac{W^{in} X_i^{in} - W^{out} X_i^{out}}{W^{in} X_i^{in}} \quad [\text{fracción}] \quad (3.10)$$

Asimismo existe una ecuación para la conversión de ácido  $\alpha_z$ , expresada como la diferencia de las concentraciones de ácido que ingresa al bloque unitario,  $Z^{in}$ , y la concentración de salida  $Z^{out}$ , con respecto a la condición inicial de ácido:

$$\alpha_z = \frac{Z^{in} - Z^{out}}{Z^{in}} \quad [\text{fracción}] \quad (3.11)$$

Además se incluye la ecuación de la masa total de mineral, al considerar que corresponde a la masa alimentada por unidad de tiempo  $W^{in}$ , multiplicada por el tiempo de proceso  $t$ :

$$M^{in} = W^{in} \cdot t \quad [\text{masa}] \quad (3.12)$$

Y finalmente el consumo máximo de ácido es:

$$C_{\max} = \frac{Q^H}{W^{in} \cdot \alpha_z} \quad [\text{kg ácido/kg mineral}] \quad (3.13)$$

donde,  $Q^H$  es el consumo de ácido,  $W^{in}$  el mineral alimentado y  $\alpha_z$  la conversión del ácido (Meruane).

### 3.2.2. Modelo de Pila de Lixiviación (*Heap Leach*)

La segunda parte del modelo corresponde a la estructuración de la pila a partir de los bloques de lixiviación. Los bloques son conectados vertical y horizontalmente, unos con otros, (ver figura 3.2) para formar la pila completa.

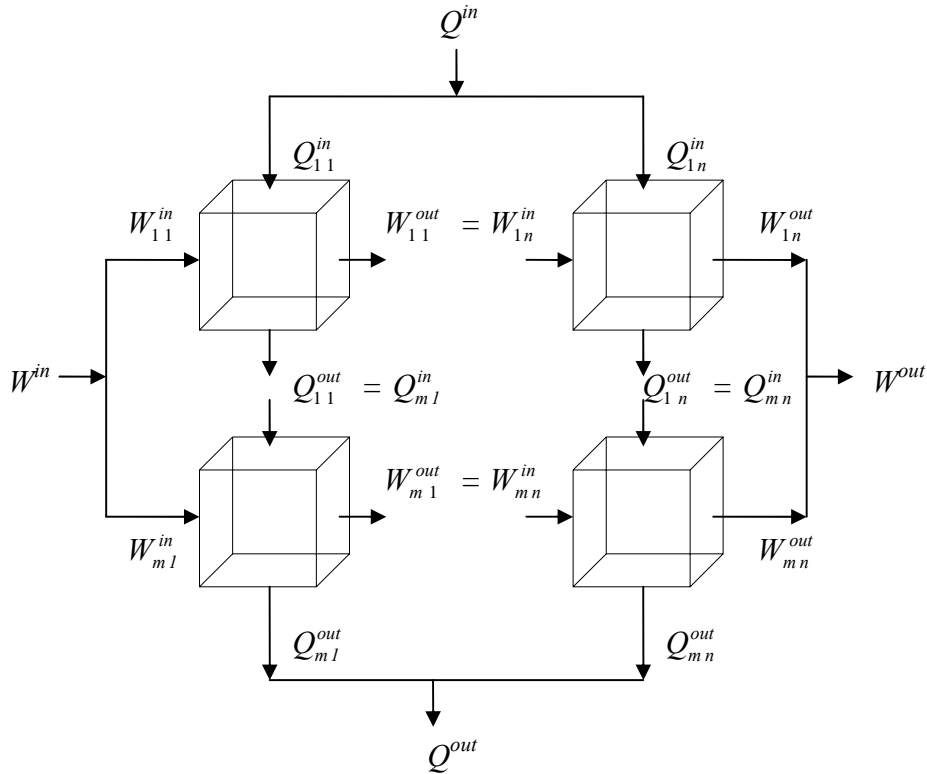


Figura 3.2 : Pila de Lixiviación, formada por Bloques Unitarios.

La disposición vertical de los bloques, esto es la ubicación de unos sobre otros, establecería la altura de la pila, la que se determinaría, entonces, según la cantidad de bloques que se apilen. La configuración horizontal de los bloques, determina si la pila es estática o dinámica. Una pila dinámica se puede formar suponiendo que, durante un intervalo de tiempo determinado, la pila es alimentada con una columna formada por  $m$  bloques de mineral y, asimismo, en cada intervalo, se descarta una columna de bloques de mineral, de igual masa, que ha cumplido con su periodo de lixiviación. De esta forma, la pila, se mantiene con un valor de masa total de mineral, constante.

Para simular una pila estática, se considera sólo una columna, horizontalmente, debido a que la pila es alimentada una sola vez, con el mineral. Con respecto a las particiones verticales, indistintamente para pilas estáticas o dinámicas, se pueden disponer los bloques que se estimen convenientes.

La numeración utilizada, para la identificación de los bloques en la pila, es del tipo matricial  $(m,n)$  con  $m$  y  $n$  números positivos, donde  $m$ : número de bloques apilados en forma vertical y  $n$ : número de bloques conectados horizontalmente. De esta forma, por ejemplo, la numeración de los bloques superiores es:  $(1,1), (1,2), \dots, (1,n-1), (1,n)$  y para los primeros bloques laterales:  $(1,1), (2,1), \dots, (m-1,1), (m,1)$  y así hasta numerar todos los bloques de la pila. Los valores de  $m$  y  $n$  son arbitrarios y se deben establecer como parámetros en el programa.

Al trabajar con la pila completa se alimenta un único flujo de solución  $Q^{in}$  y de sólidos  $W^{in}$ , los que, luego, son distribuidos para alimentar a los bloques horizontales y verticales, respectivamente. A continuación se presentan las ecuaciones de los balances totales de solución y masa a densidad constante:

$$Q^{in} = Q^{out} \quad [\text{vol/t}] \quad (3.14)$$

$$W^{in} = W^{out} \quad [\text{masa/t}] \quad (3.15)$$

La solución lixivante  $Q^{in}$  ingresa a la pila por la parte superior, luego es dividida para alimentar a cada uno de los bloques superiores, en una pila dinámica, o bien al único bloque, si la pila es estática. El flujo, por tanto, es dividido en flujos iguales, mediante el modelo de *Mezclador de flujos de líquidos*, lo que es representado con la siguiente ecuación:

$$Q^{in} = \sum_{j=1}^n Q_{1,j}^{in} \quad [\text{vol/t}] \quad (3.16)$$

donde,  $Q_{1,j}^{in}$  es el flujo de líquido que ingresa a cada uno de los  $n$  bloques superiores.

El flujo de sólidos  $W^{in}$ , alimentado a la pila es dividido en flujos iguales  $W_{i,1}^{in}$ , mediante el modelo de *Mezclador de flujos de sólidos*, para alimentar a los  $m$  bloques dispuestos verticalmente. La ecuación que lo representa es:

$$W^{in} = \sum_{i=1}^m W_{i,1}^{in} \quad [\text{masa/t}] \quad (3.17)$$

La solución que ingresó a cada bloque,  $Q_{1,j}^{in}$ , para todo  $j$  hasta  $n$ , percola por los bloques superiores hasta salir por la parte inferior del bloque. Este flujo de líquido  $Q_{1,j}^{out}$  será la alimentación del bloque siguiente  $Q_{2,j}^{in}$ , y así sucesivamente, hasta alcanzar la base de la pila. La ecuación general que representa la conexión entre los bloques apilados es:

$$Q_{i,j}^{out} = Q_{i+1,j}^{in}, \quad \forall i \in [m-1, n] \quad [\text{vol/t}] \quad (3.18)$$

Para el caso del mineral alimentado, en una pila dinámica habrá una cantidad de bloques equivalente al periodo total de lixiviación, donde en cada intervalo de tiempo también será descartado el material más antiguo. Las masas de sólidos que ingresen al sistema y hasta

que terminan su tiempo de proceso  $t$ , se lixivian, de forma que el material  $W_{i,j}^{out}$  que termina su intervalo de tiempo  $j$  de proceso, es el material que comenzará su intervalo  $j+1$  de lixiviación  $W_{i,j+1}^{in}$ . Esto corresponde a la conexión de los bloques en forma horizontal, lo que escrito en forma general es:

$$W_{i,j}^{out} = W_{i,j+1}^{in} \quad , \quad \forall j \in [m, n-1] \quad [\text{masa/t}] \quad (3.19)$$

Los líquidos finales  $Q_{m,j}^{out}$ , para todo  $j$  hasta  $n$ , son mezclados para obtener un flujo de solución cargada único  $Q^{out}$ , que pasará a la siguiente etapa del proceso. La ecuación que representa el mezclado de las soluciones, expresada en forma general es:

$$Q^{out} = \sum_{j=1}^n Q_{m,j}^{out} \quad [\text{vol/t}] \quad (3.20)$$

Los bloques de mineral que son descartados,  $W_{i,n}^{out}$  para todo  $j$  en  $m$ , al completar el proceso, son mezclados para obtener un único flujo de sólidos a la salida  $W^{out}$ . La ecuación correspondiente es:

$$W^{out} = \sum_{j=1}^m W_{m,n}^{out} \quad [\text{masa/t}] \quad (3.21)$$

El modelo también incluye la ecuación de volumen de la pila dado por la multiplicación de los factores altura  $h$  y área de la pila  $A$ , que se relacionan con la densidad del mineral  $SD$ , con el material alimentado  $W^{in}$  y con el tiempo total de lixiviación  $T$ , de la siguiente forma:

$$A \cdot h = \frac{W^{in} \cdot T}{SD} \quad [\text{vol}] \quad (3.22)$$

Se ha considerado también la relación entre el área de lixiviación de la pila  $A$ , con el flujo de solución alimentada  $Q^{in}$  y con la tasa de riego  $TR$ , a través de la ecuación:

$$TR = \frac{Q^{in}}{A} \quad [\text{vol/área/t}] \quad (3.23)$$

Finalmente se presentan ecuaciones para la conversión total de las especies de interés  $\alpha_{TOTALi}$ :

$$\alpha_{TOTALi} = \frac{W^{in} X_i^{in} - W^{out} X_i^{out}}{W^{in} X_i^{in}} \quad [\text{fracción}] \quad (3.24)$$

donde  $W^{in}$  y  $W^{out}$  son los flujos de sólidos de entrada y salida, y  $X_i^{in}$  la composición de la especie antes y,  $X_i^{out}$ , después de la lixiviación, para  $i$ : Cu, Fe.

y una ecuación para la conversión total de ácido  $\alpha_{TOTALZ}$  :

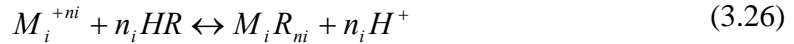
$$\alpha_{TOTALZ} = \frac{Z^{in} - Z^{out}}{Z^{in}} \quad \text{[fracción]} \quad (3.25)$$

donde  $Z^{in}$  es la concentración de ácido que ingresa a la pila y  $Z^{out}$ , la concentración que sale de la misma.

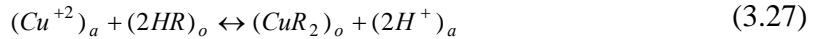
### 3.3. EXTRACCIÓN POR SOLVENTES (SX)

Se desarrollaron tres modelos para el proceso de extracción por solventes, que presentan distintos grados de dificultad. El primero de ellos es el modelo *Mixer-settler Equilibria*, que modela un mezclador-sedimentador en condiciones de equilibrio. El siguiente es el modelo *Mixer-settler*, que incluye el fenómeno de la transferencia de masa en la interfase y, por último, el modelo *Mixer-settler Rigorous* que considera el efecto de la inversión de fases y un modelo para determinar el tamaño de burbuja. Todos los modelos incluyen las ecuaciones de la reacción química involucrada en la transferencia de las especies y las ecuaciones de conservación de masa, luego cada modelo considera las ecuaciones características correspondientes.

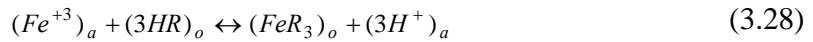
Los modelos que se describen corresponden a la operación de un mezclador-sedimentador (*Mixer-settler*), que es principalmente usado en plantas de extracción por solvente de cobre. Los modelos implementados se concentran en el mezclador, considerando que el sedimentador provee suficiente tiempo de residencia para permitir la separación completa de una fase acuosa y orgánica. También se considera, que la transferencia de iones entre la fase acuosa y orgánica, en el sedimentador, es despreciable. El modelo es básicamente el desarrollado por Aminian et al (2000). El proceso de extracción es debido a la transferencia de iones entre la fase orgánica (*o*) y la fase acuosa (*a*), descrito por la siguiente ecuación química:



donde  $M_i$  representa la *i*-ésima especie extraída,  $n_i$  la valencia iónica y  $HR$  la molécula extractante. Así por ejemplo, en la reacción de cobre se tiene:



y el ión férrico es extraído de acuerdo a:



donde, los subíndices *a* y *o* son para la fase acuosa y orgánica, respectivamente. El modelo para el proceso de extracción, debe considerar la conservación de cada especie involucrada en la reacción. Para ese propósito las especies son divididas en especies extraídas e intercambiables, el extractante ( $HR$ ) y el ión hidrógeno ( $H^+$ ). Asumiendo un volumen constante en el mezclador, la conservación del volumen para la fase acuosa y orgánica está dado por:

$$Q_a^{in} + Q_o^{in} = Q_a^{out} + Q_o^{out} \quad (3.29)$$

donde,  $Q$  es el flujo de volumétrico, dado en [vol/t], de alimentación y salida ( $Q^{in}$  y  $Q^{out}$ ) del mezclador. Ya que la transferencia de iones tiene un pequeño impacto en la densidad de fases, se puede asumir que el sistema presenta densidad constante, es decir:

$$Q_o^{in} = Q_o^{out} = Q_o \quad Q_a^{in} = Q_a^{out} = Q_a \quad (3.30)$$

El principio de conservación de la masa de la especie extraída  $i$  esta dada por:

$$Q_a^{in} x_i^{in} - Q_a^{out} x_i^{out} - A f_i = 0 \quad [\text{moles/t}] \quad (3.31)$$

$$Q_o^{in} y_i^{in} - Q_o^{out} y_i^{out} + A f_i = 0 \quad [\text{moles/t}] \quad (3.32)$$

donde,  $x_i$  es la concentración de la especie  $i$  [moles/vol] en la fase acuosa,  $A$  es la superficie interfacial,  $y_i$  es la concentración de la especie  $i$  en la fase orgánica [moles/vol],  $f_i$  es el flujo de transferencia de la especie  $i$  de la fase acuosa a la orgánica expresada en [moles /t área], y por lo tanto será positivo para las etapas de extracción y negativo para las etapas de stripping.

La ecuación de la conservación de la masa para  $H$  y  $RH$  esta dado por:

$$Q_a^{in} x_H^{in} - Q_a^{out} x_H^{out} + A \sum_{i=1}^N n_i f_i = 0 \quad [\text{moles/t}] \quad (3.33)$$

$$Q_o^{in} y_{RH}^{in} - Q_o^{out} y_{RH}^{out} - A \sum_{i=1}^N n_i f_i = 0 \quad [\text{moles/t}] \quad (3.34)$$

donde,  $n_i$  es el número de  $RH$  o  $H^+$  involucrado en la transferencia de especie.

El volumen de la fase orgánica  $V_o$  en la mezcla, asumiendo agitación perfecta en el mezclador es:

$$V_o = V_m \frac{Q_o}{Q_a + Q_o} \quad [\text{vol}] \quad (3.35)$$

donde,  $V_m$  es el volumen del mezclador,  $Q_a$  y  $Q_o$ , los flujos volumétricos para las fases acuosa y orgánica, respectivamente.

Las ecuaciones anteriores están incluídas en cada uno de los modelos.

### 3.3.1. Modelo de Mezclador-Sedimentador en Equilibrio (*Mixer-Settler Equilibria*)

Este modelo considera que, las fases acuosa y orgánica, a la salida del mezclador-sedimentador, se encuentran en equilibrio. Luego cuando las fases se ponen en contacto, las especies reaccionan de acuerdo a una ecuación de la reacción. Considerando que  $m$ ,  $n$  y  $p$  son los órdenes de reacción parcial. La velocidad de reacción en adelante, de la especie  $i$ , está dada por:

$$\varphi_i^f = k_{fi} \frac{(x_i^{out})^m (y_{RH}^{out})^n}{(x_H^{out})^p} \quad (3.36)$$

La relación entre la constante de equilibrio y las velocidades de reacción están dadas por:

$$(K_i)^z = \frac{k_{fi}}{k_{ri}} = \left[ \frac{y_i^{out} (x_H^{out})^{ni}}{x_i^{out} (y_{RH}^{out})^{ni}} \right]^z \quad (3.37)$$

Asumiendo  $z = 1$ , la velocidad de reacción química se puede representar como:

$$f_i = k_{ri} (K_i \frac{(x_i^{out})^m (y_{RH}^{out})^n}{(x_H^{out})^p} - \frac{(x_H^{out})^{ni-p} (y_i^{out})}{(y_{RH}^{out})^{ni-n} (x_i^{out})^{1-m}}) \quad (3.38)$$

Considerando la estequiometría de la reacción, la relación de la velocidad de reacción química se puede expresar como:

$$f_{RH} = -f_H = \sum_{i=1}^N n_i f_i \quad (3.39)$$

donde,  $f_i$  es la velocidad de transferencia total de la especie  $i$  desde una fase a las otra.

La superficie interfacial total,  $A$  entre la fase acuosa y orgánica esta dada por:

$$A d_b = 6 V_o \quad [\text{vol}] \quad (3.40)$$

donde,  $V_o$  es el volumen de la fase dispersa en el mezclador y  $d_b$  es diámetro medio de la gota esférica de la fase dispersa.

### 3.3.2. Modelo de Mezclador-Sedimentador (*Mixer-Settler*)

Este modelo, incluye el fenómeno de transferencia de masa en la interfase. Se ha considerado que el modelo del proceso de extracción depende de la velocidad de reacción química y de la transferencia de masa que conduce a la recuperación de las especies desde la fase acuosa a la orgánica. La figura 3.3 muestra un esquema del proceso de extracción. La especie acuosa ( $M_i$ ) difunde desde la fase acuosa a la interfase orgánica –acuosa para reaccionar con el extractante que ha difundido desde el volumen de la fase orgánica hacia la interfase. El protón hidrógeno difunde de vuelta a la fase acuosa y la especie extraída difunde desde la interfase al volumen orgánico.

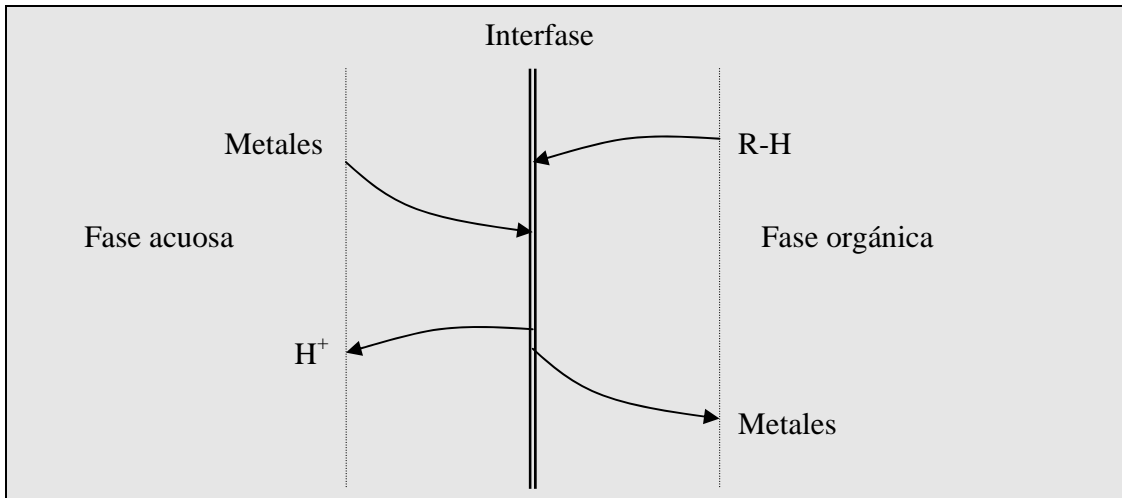


Figura 3.3. Transferencia de masa en la interfase.

Después de un período de transición inicial, la velocidad de transferencia de la especie, desde la fase acuosa, es balanceada, con la velocidad de consumo de la especie, por la reacción química. Si el proceso de difusión es lento, entonces la actividad de la especie en la interfase será cercana a las condiciones de equilibrio termodinámico de una reacción de extracción. Por el otro lado, si la reacción química es lenta, la actividad de la especie en la interfase será cercana a las condiciones de la solución. En la práctica, ambos mecanismos controlan el proceso y las actividades de las especies de interfase se encuentran entre los valores en equilibrio termodinámico y los valores en la solución de la fase acuosa y fase orgánica.

Las velocidades de transferencia de masa de la especie extraída y  $H^+$ , desde la fase acuosa a la interfase, se puede modelar usando las siguientes ecuaciones:

$$r_i^a = m_i^a (x_i^{out} - x_i^{int}) \quad [\text{moles/t /área}] \quad (3.41)$$

$$r_H^a = m_H^a (x_H^{out} - x_H^{int}) \quad [\text{moles/t /área}] \quad (3.42)$$

Mientras, las velocidades de transferencia de masa, dadas en [moles/t/área] desde la interfase a la fase orgánica, se representan por:

$$r_i^o = m_H^o (y_i^{out} - y_i^{int}) \quad (3.43)$$

$$r_{RH}^o = m_{RH}^o (y_{RH}^{out} - y_{RH}^{int}) \quad (3.44)$$

donde,  $m$  es el coeficiente de transferencia de masa y los superíndices  $a$ ,  $o$ , e  $int$  representan a la fase acuosa, la orgánica y la interfase respectivamente.

Al llegar las especies a la interfase, reaccionan según las ecuaciones de velocidad de reacción mostradas en el modelo anterior, ecuaciones (3.36) y (3.37), pero considerando las concentraciones en la interfase, en vez de las concentraciones de salida, luego de la ecuación (3.38), se obtiene:

$$\lambda_i = k_{ri} \left( K_i \frac{(x_i^{int})^m (y_{RH}^{int})^n}{(x_H^{int})^p} - \frac{(x_H^{int})^{ni-p} (y_i^{int})}{(y_{RH}^{int})^{ni-n} (x_i^{int})^{1-m}} \right) \quad (3.45)$$

En estado estacionario, la velocidad de reacción total, es igual a la velocidad de transferencia de masa por difusión y a la velocidad de reacción química, y por lo tanto:

$$r_i^a = -r_i^o = \lambda_i = f_i \quad (3.46)$$

$$f_{RH} = -f_H = \sum_{i=1}^N n_i f_i \quad (3.47)$$

donde,  $f_i$  es la velocidad de transferencia total de la especie  $i$  desde una fase a las otra. El modelo del mezclador-sedimentador corresponde a un sistema de ecuaciones no lineales que ASCEND puede resolver. El modelo descrito del *mixer-settler* es válido para el proceso de extracción como también para el stripping. En este trabajo se asume que los órdenes parciales de la reacción química son uno ( $m=n=p=1$ ) (Aminian et al, 2000) y la siguiente relación se utiliza para los coeficientes de transferencia de masa:

$$m_{Cu} = m_{RH} = 2 m_{CuR_2} = 0.1 m_H \quad (3.48)$$

Al igual que el modelo en equilibrio, también se considera la superficie interfacial total  $A$ , entre la fase acuosa y orgánica, en función del diámetro de burbuja  $d_b$  y del volumen de la fase dispersa en el mezclador  $V_o$ , con la ecuación:

$$A d_b = 6 V_o \quad [\text{vol}] \quad (3.49)$$

### 3.3.3. Modelo de Mezclador-Sedimentador Riguroso (*Mixer-Settler Rigorous*)

El modelamiento del área interfacial es un problema desafiante, debido a que, la fenomenología de la inversión de fases orgánico/acuosa, aún está pobremente comprendida. Estudios experimentales han mostrado, que en recipientes agitados, la fase dispersa está presente, aproximadamente, si la fracción es menor a 0.3, en volumen. Sin embargo, esto deja una gran fracción volumétrica, llamada la región ambivalente, y es en esta región en la que operan, generalmente, las industrias. En este trabajo, es modelada la región ambivalente, considerando una fase continua, en una cierta fracción del volumen de mezclado, con otra fase continua en la fracción remanente (ver figura 3.4). Luego el área interfacial puede ser estimada con la siguiente ecuación:

$$A = \frac{6V_o\alpha d_{ba} + 6(V_m - V_o)(1 - \alpha)d_{bo}}{d_{ba}d_{bo}} \quad [\text{área}] \quad (3.50)$$

que considera que el área disponible para el intercambio másico está formado por una fracción  $\alpha$  de continuidad acuosa y  $1 - \alpha$  de continuidad orgánica.

Luego  $A$ , se define en función de los volúmenes de la mezcla,  $V_m$ , y de la fase orgánica,  $V_o$ , además del diámetro de burbuja  $d_b$ , correspondiente a la fase, y de la fracción orgánico/acuosa  $\alpha$ . Esta área, depende de la continuidad de fase predominante, esto es, para continuidad orgánica ( $\alpha = 0$ ) la ecuación es:

$$A = \frac{6(V_m - V_o)}{d_{ba}} \quad [\text{área}] \quad (3.51)$$

y para continuidad acuosa ( $\alpha = 1$ ):

$$A = \frac{6V_o}{d_{bo}} \quad [\text{área}] \quad (3.52)$$

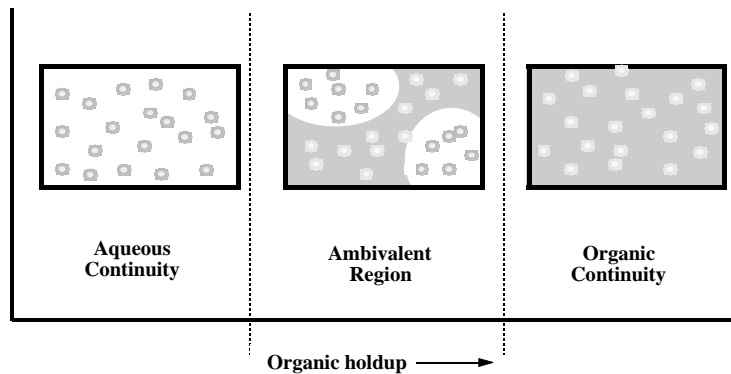


Figura 3.4. Esquema para representar continuidad de fases.

La fracción de continuidad acuosa  $\alpha$ , toma valores entre cero y uno, considerándose  $\alpha = 0$  para continuidad orgánica,  $\alpha = 1$  para continuidad acuosa y para la zona ambivalente, se utiliza una función de los volúmenes de orgánico  $V_o$  y de mezcla  $V_m$ , de manera que:

$$\alpha = 1.875 - 2.5 \frac{V_o}{V_m} \quad [\text{fracción}] \quad (3.53)$$

Para el diámetro de burbuja orgánica  $d_{bo}$  Godfrey et al (1989), propone una ecuación empírica que puede ajustarse para cada caso, la cual está dada por:

$$d_{bo} = 0.084D \left( 1 + 1.98 \left( \alpha \frac{V_o}{V_m} \right)^{0.85} \right) \left( \frac{\mu_o}{\mu_a} \right)^{0.44} W^{-0.8} \quad [\text{longitud}] \quad (3.54)$$

y para la burbuja acuosa  $d_{ba}$ :

$$d_{ba} = 0.084D \left( 1 + 1.98 \left[ (1 - \alpha) \left( 1 - \frac{V_o}{V_m} \right) \right]^{0.85} \right) \left( \frac{\mu_o}{\mu_a} \right)^{0.44} \left( W \frac{d_a}{d_o} \right)^{-0.8} \quad [\text{longitud}] \quad (3.55)$$

donde,  $D$  es el diámetro del agitador,  $\alpha$  es la fracción de continuidad acuosa,  $V_o$  es el volumen de la fase orgánica,  $V_m$ , el volumen de la mezcla,  $\mu_o$  es la viscosidad de la fase orgánica y  $\mu_a$ , de la fase acuosa. Las constantes presentes en las ecuaciones anteriores, fueron determinadas empíricamente, por ejemplo los valores  $0.084$ ,  $1.98$  y  $0.44$  dependen del tipo de agitador usado. El factor  $W$  corresponde al número de Weber, que es un parámetro adimensional que expresa la relación entre las fuerzas de inercia y las fuerzas de tensión superficial. Este número está dado por:

$$W = \frac{N_{ag}^2 D^3 \rho_{dis}}{\sigma} \quad [\text{factor}] \quad (3.56)$$

donde,  $N_{ag}$  es la velocidad de agitación,  $\rho_{dis}$  es la densidad de la fase dispersa y  $\sigma$  la tensión superficial. Para valores bajos del número de Weber, la formación de la gota será próxima a la fuente de origen, por la menor inercia que posee; cuando éste número es más grande, mayor es la fuerza de inercia y la gota se formará más alejada de la fuente de origen.

### 3.4. ELECTROOBTENCIÓN (EW)

El modelo de electroobtención considera una celda como se muestra en la figura 3.5:

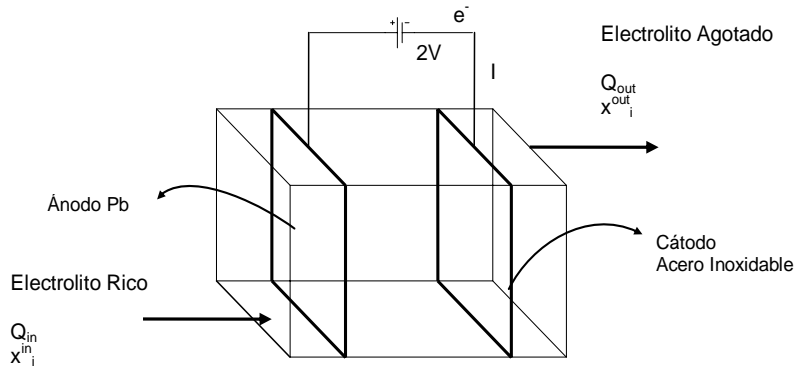


Figura 3.5. Celda de electroobtención.

Los modelos del cátodo y ánodo fueron basados en las ecuaciones de Lapicque y Storck (1985). En el cátodo se considera que ocurre la siguiente reacción:



Luego la corriente en el cátodo se define como:

$$I_C = Afr_c nF \quad [A] \quad (3.58)$$

donde  $A$  es el área del cátodo,  $fr_c$  es la velocidad de transferencia de electrones por unidad de área,  $n$  es el número de electrones transferidos por la reacción química, en este caso  $n=2$  y  $F$  es la constante de Faraday. La ecuación para el sobrevoltaje  $V$  es:

$$V = U_c - E \quad [Volt] \quad (3.59)$$

con  $U_c$  la caída de voltaje en el cátodo y  $E$  el potencial de equilibrio.

Nernst estableció una ecuación para el potencial de equilibrio en función de su valor estándar  $E^0$ , la constante universal de los gases  $R$  y la temperatura  $T$ :

$$E = E^0 - \frac{RT}{nF} \ln \frac{a_{Cu}}{a_{Cu^{+2}}} = E^0 - \frac{RT}{nF} \ln \frac{1}{y_{Cu}} \quad [Volt] \quad (3.60)$$

Con  $a_{Cu}$  y  $a_{Cu^{+2}}$  las actividades del cobre metálico y cobre en la solución. Pero como  $a_{Cu} = 1$ , la actividad  $a_{Cu^{+2}}$  se escribe en términos de la concentración de cobre  $y_{Cu}$ .

Para la velocidad de transferencia electrónica por unidad de área  $fr_c$ , se utiliza la ecuación de Butler-Volmer:

$$fr_c = k_0 y_{Cu}^{1-\alpha} (e^{\alpha k} - e^{-(1-\alpha)k}) \quad [\text{mol/t}] \quad (3.61)$$

donde

$$k = \frac{nVF}{RT} \quad (3.62)$$

además  $k_0$  es una constante y  $\alpha$  es el coeficiente de transferencia de carga. En este trabajo se asume  $\alpha = 0.62$

En el ánodo se considera que ocurre la siguiente reacción:



donde la ecuación para la corriente en el ánodo  $I_a$  es:

$$I_a = A \cdot fr_a \cdot n \cdot F \quad [\text{A}] \quad (3.64)$$

y el sobrevoltaje  $V$ :

$$V = U_a - E \quad [\text{Volt}] \quad (3.65)$$

con  $U_a$ : caída de voltaje en el ánodo.

La ecuación de Nernst para el ánodo está dada por:

$$E = E^0 + \frac{RT}{nF} \ln \frac{(H^+)^2}{0.9} \quad [\text{Volt}] \quad (3.66)$$

Para determinar la velocidad de transferencia electrónica, en el ánodo, se utiliza la ecuación de Tafel:

$$V = 0.303 + 0.12 \log(fr_a nF) \quad [\text{Volt}] \quad (3.67)$$

donde  $fr_a$  es la velocidad de transferencia de electrones en el ánodo.

Luego para modelar la celda, se considera un modelo similar al propuesto por Aminian et al (2000), como se muestra en la figura 3.6:

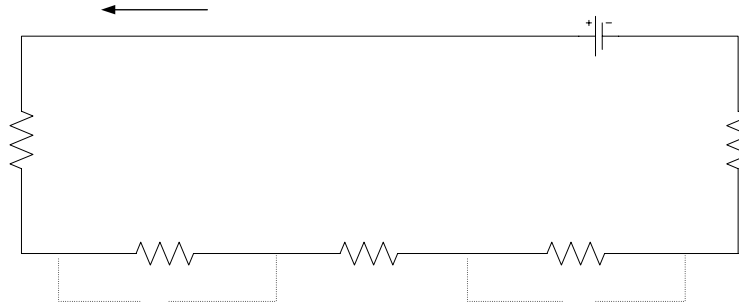


Figura 3.6. Circuito eléctrico de electroobtención de cobre.

de manera que la depositación de cobre en cátodo  $P_{Cu}$  se escribe en función de  $fr_c$  la velocidad de transferencia,  $PM_{Cu}$  el peso molecular del cobre y  $A$  el área del cátodo:

$$P_{Cu} = fr_c PM_{Cu} A \quad [\text{masa/t}] \quad (3.68)$$

y la generación de ácido en el ánodo:

$$P_Z = 2 fr_a A \quad [\text{masa/t}] R_{HC} \quad (3.69)$$

Luego realizando un balance de masa para el Cu, Fe y ácido, las ecuaciones obtenidas, respectivamente, son:

$$Q^{in} x_{Cu}^{in} - Q^{out} x_{Cu}^{out} - P_{Cu} = 0 \quad [\text{masa/t}] \quad \text{Cu}^{2+} + 2e^- = \text{Cu} \quad (3.70)$$

$$Q^{in} x_{Fe}^{in} - Q^{out} x_{Fe}^{out} = 0 \quad [\text{masa/t}] \quad (3.71)$$

$$Q^{in} x_{H^+}^{in} - Q^{out} x_{H^+}^{out} + P_Z = 0 \quad [\text{masa/t}] \quad U_C \quad (3.72)$$

Finalmente el voltaje total del proceso es:

$$U_T = I R_C + I R_A + I R_S + U_C + U_A \quad [\text{Volt}] \quad (3.73)$$

donde  $R_C$  y  $R_A$  son las resistencias del hardware del cátodo y ánodo, respectivamente;  $I$  es la corriente que es igual en el cátodo y el ánodo;  $R_S$  es la resistencia de la solución de sulfato de cobre, la cual se determina por la ecuación empírica:

$$R_S = d(0.134 + 0.00356 \cdot X_{Cu} + 0.02451 \cdot Z) \quad [\text{Ohms}] \quad (3.74)$$

con  $d$  es la distancia en [cm] entre el cátodo y el ánodo.

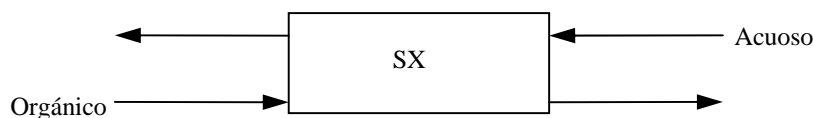
A partir de este modelo se puede construir un banco de celdas, pero tal estudio no ha sido incluido en esta tesis.

## 4. EJEMPLOS DE APLICACIÓN

HydroSim ha sido construido utilizando programación orientada a objetos, lo que permite simular distintas configuraciones de procesos utilizando una misma librería. Los modelos disponibles se pueden configurar de la forma deseada para representar diferentes estructuras o circuitos hidrometalúrgicos. Varias aplicaciones son posibles y los archivos *HS\_SX\_1\_a*, *HS\_SX\_1\_b*, *HS\_SX\_1\_c*, listados en la tabla 3.1, son ejemplos de ello.

### 4.1. EJEMPLO 1: EXTRACCIÓN POR SOLVENTE I

Por ejemplo, se realizó un estudio del efecto del pH sobre el equilibrio acuoso-orgánico de los sistemas Cu y Fe, en un mezclador sedimentador para el proceso de SX (archivo *HS\_SX\_1*). En la figura 4.1 se muestra un esquema del modelo implementado:



*Figura 4.1. Reciclo interno en etapa SX.*

Los resultados obtenidos se muestran en la figura 4.2, pudiendo observar que al aumentar el valor de pH, la relación orgánico acuoso aumenta, pero de manera significativa sólo hasta una acidez de 2.7; para valores mayores de pH, el efecto es casi nulo. Asimismo ocurre para el sistema Fe orgánico y Cu acuoso, donde para pH mayores a este valor, no se aprecia cambio significativo.

Se analizó además la variación que produce la concentración del extractante en el equilibrio acuoso orgánico de Cu, pudiendo apreciar, en la figura 4.3, que al aumentar su valor, también sufre un aumento la concentración de cobre en las corrientes acuosa y orgánica. Ocurre lo mismo para el sistema Fe orgánico y Cu acuoso, donde ambas concentraciones cambian considerablemente, en conjunto con la variación del extractante R-H.

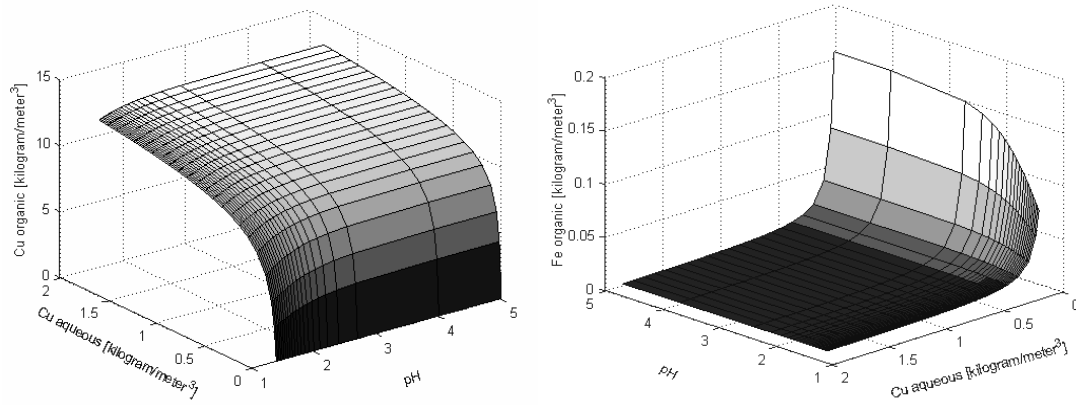


Figura 4.2. Efecto del pH sobre el equilibrio de Cu (izquierda) y Fe (derecha) en sistemas Cu/Fe

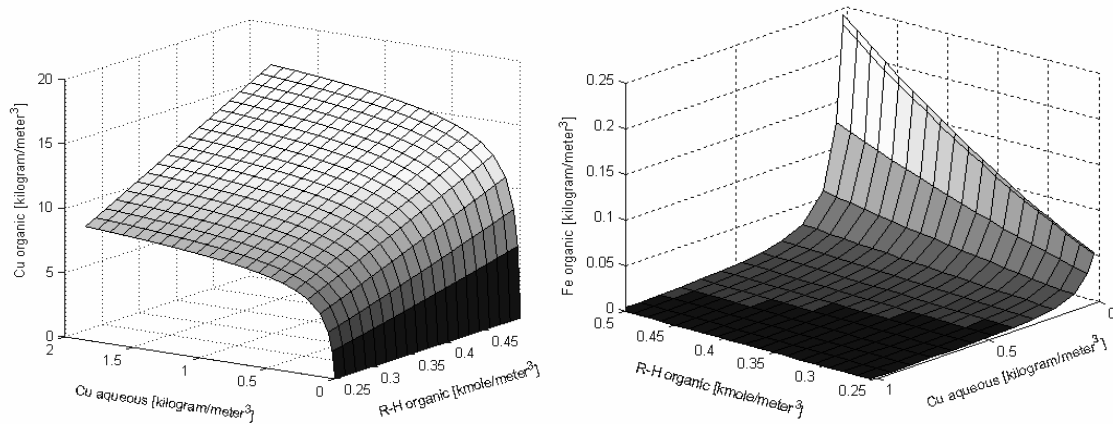


Figura 4.3. Efecto del extractante-orgánico sobre el equilibrio de Cu (izquierda) y Fe (derecha) en sistemas Cu/Fe

## 4.2. EJEMPLO 2: EXTRACCIÓN POR SOLVENTE II

Por ejemplo en la figura 4.4, las etapas de Lixiviación, SX y EW se conectaron formando un circuito simple de extracción de Cu, que puede ser usado para estudiar su comportamiento. El circuito consta de un flujo de refino (*reff*) con baja concentración de cobre que riega la etapa de lixiviación (*hp*), de esta se obtiene una solución acuosa más concentrada o *pls* (pregnant leach solution), que alimenta a la etapa de extracción en *SX*. La etapa de extracción contacta el *pls* con un flujo de orgánico descargado, al que es transferido el cobre. Luego el flujo de acuoso ya tratado o refino es recirculado a la lixiviación. El cobre transferido al orgánico es recuperado en la etapa de stripping (*st*), al contactarlo con una solución acuosa de baja concentración de cobre o electrolito agotado (*spent*). De esta reacción se obtiene el orgánico descargado y un electrolito rico (*strong*) que alimenta a la etapa de electroobtención (*ew*), obteniendo cátodos de cobre y la corriente *spent* que nuevamente recupera el cobre de la corriente orgánica cargada. Las etapas de extracción (*ex1*) y la etapa de stripping (*st*) siguen el modelo *Mixer-Settler Equilibria*, presentado anteriormente.

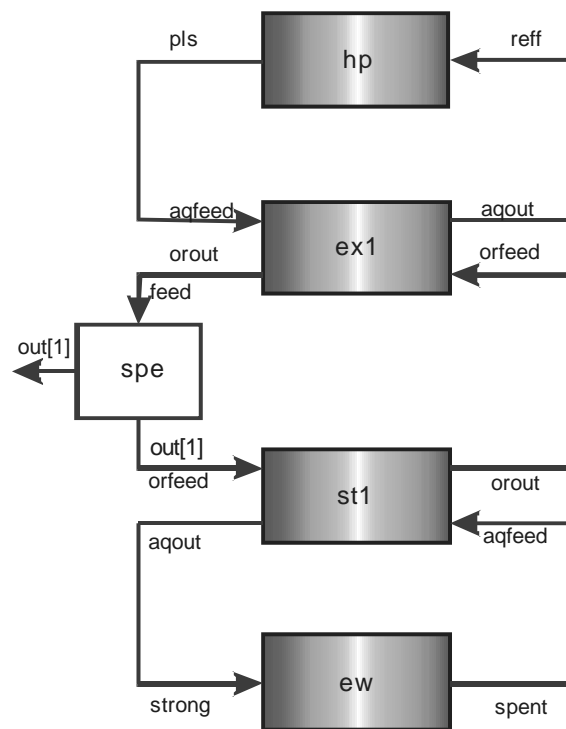


Figura 4.4. Circuito de Extracción de Cobre.

Utilizando este circuito que consta de una etapa de extracción y una de reextracción o stripping, se han realizado cálculos de las variables del sistema, como por ejemplo, la figura 4.5, compara el comportamiento de la eficiencia y de la capacidad del proceso, observando que al aumentar la capacidad, la eficiencia disminuye.

Otro ejemplo de cálculo es la relación entre los flujos de acuoso y orgánico en el proceso de extracción, pudiendo observar, en la figura 4.6, el cambio en la relación de estos flujos para distintos valores del coeficiente convectivo de transferencia de masa, el cual se relaciona con la eficiencia del proceso, según el acercamiento a las condiciones de equilibrio de fases.

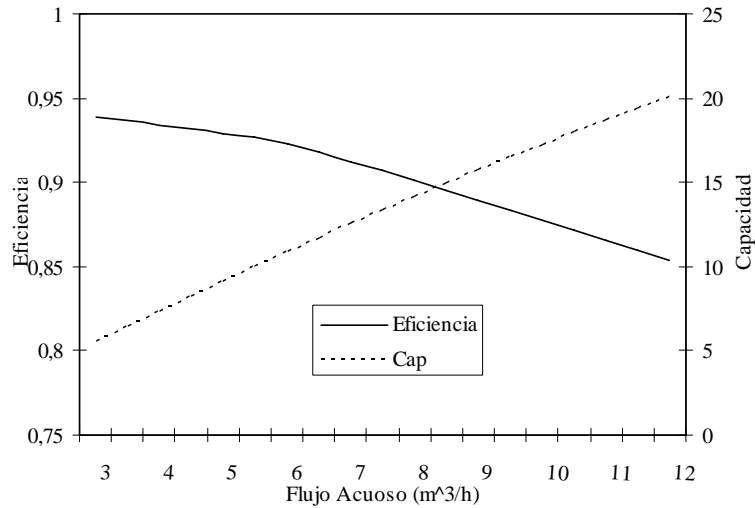


Figura 4.5. Eficiencia y Capacidad para Flujo Acuoso en SX

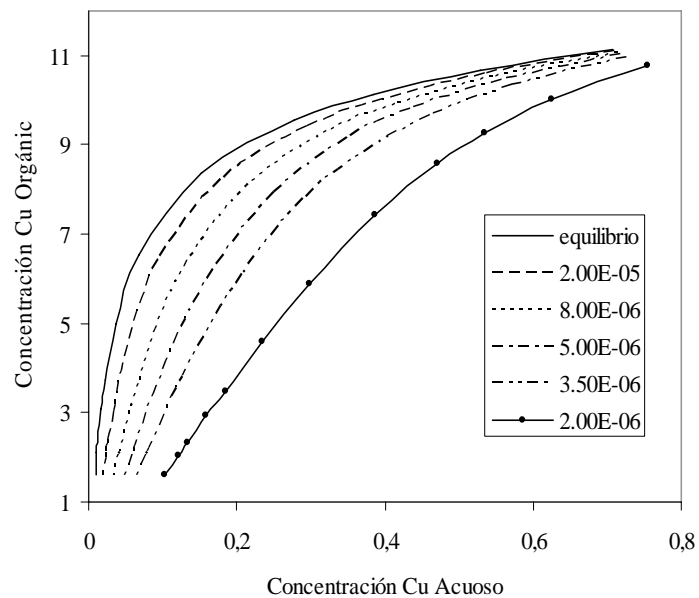


Figura 4.6. Concentración de cobre en flujos orgánico y acuoso para distintos valores del coeficiente de transferencia de masa.

### 4.3. EJEMPLO 3: EXTRACCIÓN POR SOLVENTE III

Para este caso, a partir de la librería *HydroSim*, se desarrolló una simulación de un circuito hidrometalúrgico, en el cual, la etapa de *SX* considera tres etapas de extracción (*ex1*, *ex2*, *ex3*) y una etapa de stripping (*st*) que siguen el modelo *Mixer-Settler Equilibria*.

Se realizaron cálculos con dos configuraciones para la conexión del *pls* y *refino* con las tres etapas de extracción, según un circuito serie-paralelo tradicional (*SP Tradicional*) utilizado industrialmente y un circuito serie-paralelo II (*SP II*) propuesto por Rojas et al (2005). En la figura 4.7 se muestran ambos circuitos utilizados para los cálculos. Con línea continua gruesa se muestra el circuito tradicional y con línea punteada la configuración serie-paralelo II de conexión de las tres etapas de extracción.

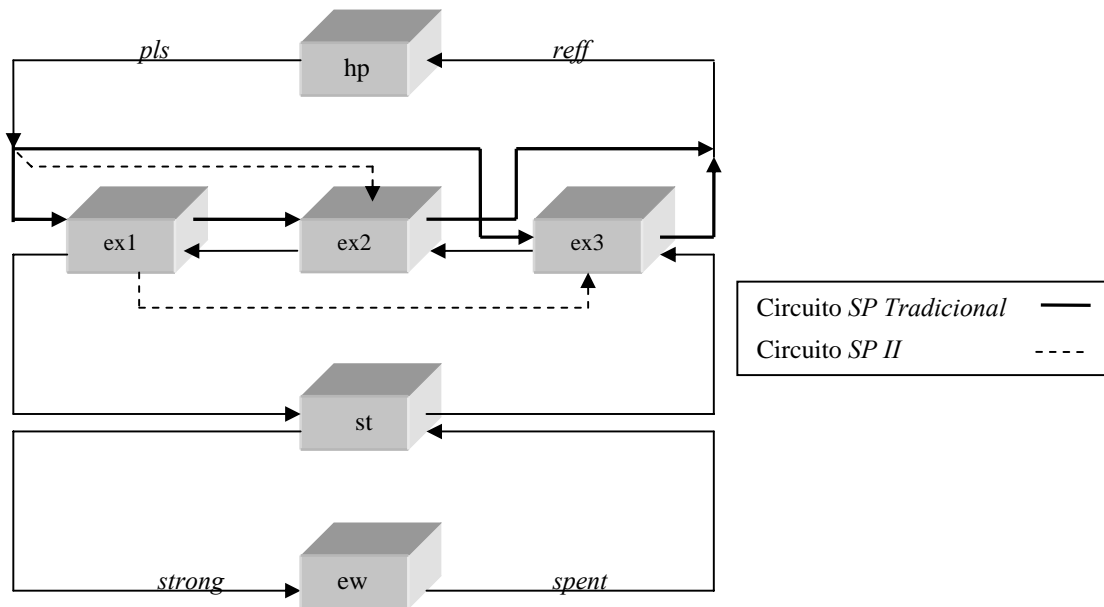


Figura 4.7. Circuitos hidrometalúrgicos con tres etapas de extracción en *SX*.

Para realizar los cálculos en ASCEND IV, con la librería *HydroSim*, es necesario fijar algunas variables y asignarles valores de entrada. Los parámetros considerados para realizar los cálculos, son datos reales de una planta piloto hidrometalúrgica con un flujo de *pls* característico, luego los datos de entrada son los siguientes:

Para los mezcladores-sedimentadores *ex1*, *ex2*, *ex3* y *st*:

Coefficiente convectivo de transferencia de masa del Cobre:	0.42 cm/s
Coefficiente convectivo de transferencia de masa del Hierro:	0.0058 cm/s
Diámetro de burbuja en la fase dispersa:	0.08 cm
Volumen de la mezcla:	2.8 m <sup>3</sup>

Para los circuitos de *SX*:

Flujo volumétrico de PLS:	9.5 m <sup>3</sup> /hr
Concentración de Cobre en PLS:	5 g/l
Concentración de Hierro en PLS:	3 g/l
Concentración de Ácido en PLS:	0.0167 mol/m <sup>3</sup>
Flujo volumétrico de Electrolito Agotado:	9.05 m <sup>3</sup> /hr
Concentración de Cobre en Electrolito Agotado:	40 g/l
Concentración de Hierro en Electrolito Agotado:	0.03 g/l
Concentración de Ácido en Electrolito Agotado:	1.6326 mole/m <sup>3</sup>
Flujo volumétrico de Orgánico Descargado:	6.5 m <sup>3</sup> /hr

Se realizó la simulación usando el resolvidor QRSIV, obteniendo los resultados mostrados en la tabla siguiente:

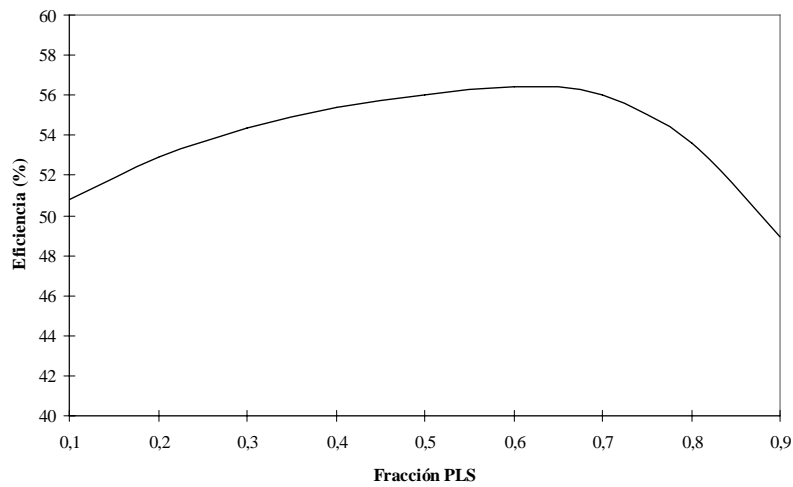
Tabla 4.1. Resultados obtenidos en la simulación de los circuitos para *SX* en serie-paralelo para *SP* tradicional y *SP II*.

	<i>S-P Tradicional</i>	<i>S-P II</i>
Cobre en refino serie (g/l)	3.45	1.38
Cobre en refino paralelo (g/l)	2.11	3.02
Cobre en refino total (g/l)	2.78	2.19
Hierro en refino serie (g/l)	3	2.99
Hierro en refino paralelo (g/l)	2.99	3
Hierro en refino total (g/l)	2.99	2.99
Recuperación Extracción (mol/h)	0.33	0.42
Concentración Extractante en orgánico (%)	28.5	36.8
Cobre en orgánico descargado (g/l)	2.69	4.69
Cobre en orgánico cargado (g/l)	5.93	8.78
Cobre en electrolito rico (g/l)	42.3	42.9
Hierro en orgánico descargado (g/l)	4.1E-09	9.9E-09
Hierro en orgánico cargado (g/l)	3.3E-05	6.65E-05
Hierro en electrolito rico (g/l)	0.03	0.03
Eficiencia (%)	44.4	56

Se puede observar, en la tabla 4.1, que la concentración de cobre y hierro en orgánico cargado es mayor en el circuito *S-P II*. Esto puede deberse al alto porcentaje de extractante en el orgánico en este último sistema (36.8%), que aunque comparativamente con los procesos habituales en la industria (14% a 20%), puede parecer que esta concentración sea demasiado alta, pero es necesario considerar, que el flujo de *pls* presenta una baja concentración de cobre (3 g/l) y alta concentración de hierro (5 g/l), luego este porcentaje de extractante, obtenido, sería requerido para lograr la selectividad de cobre entre tanta cantidad de hierro. El cobre en el refino total es mayor en el modelo *tradicional*, y la cantidad de hierro presente, es bastante similar en ambas configuraciones, asimismo la concentración de cobre en el electrolito rico, de la etapa de electroobtención, en que también se aprecian valores muy parecidos. Finalmente, se puede observar que la

recuperación de cobre es mayor en el circuito *S-P II*, con un valor de 0.42 mol/h de cobre, que en el circuito tradicional con 0.33 mol/h de cobre, entregando, de esta forma, una mayor eficiencia en el proceso, lo que podría marcar la diferencia en la selección de la mejor configuración de las etapas de extracción, para el proceso de extracción por solvente.

Además para el circuito serie-paralelo *II*, se estudió el cambio de la eficiencia al dividir la corriente *PLS* con distintas fracciones de flujo para alimentar las etapas de extracción *ex1* y *ex2*, (ver figura 4.7) obteniendo que al variar la fracción de flujo que alimenta a la etapa *ex1*, la eficiencia del proceso comienza a aumentar hasta llegar a un valor máximo de 56%, para una fracción de alimentación para *ex1* de 0.65 de *PLS*, y de 0.35 para *ex2*.



*Figura 4.8. Eficiencia versus fracción de PLS alimentado a etapa de extracción ex1 en circuito SP II.*

#### 4.4. EJEMPLO 4: OPTIMIZACIÓN PROCESO EXTRACCIÓN POR SOLVENTE

*HydroSim* cuenta con una opción de optimización disponible en ASCEND IV, con la que es posible optimizar procesos o ajustar los modelos desarrollados a los datos de planta. Por ejemplo, se ha utilizado esta herramienta, para la determinación de constantes de equilibrio basada en datos operacionales de un circuito de SX, obteniendo un valor de la constante de equilibrio para el cobre de  $K_{Cu}= 9.87$ , y para el hierro:  $K_{Fe}= 0.0003$ .

Los datos comparativos, experimentales y calculados, se muestran en la tabla 4.2, donde se puede ver que los datos son casi exactos.

*Tabla 4.2. Datos experimentales versus datos calculados en optimización de proceso.*

<b>Corriente</b>	<b>g/l</b>	<b>Valor Experimental</b>	<b>Valor Calculado</b>
Salida Acuosa	Cu	0.02	0.018
	Fe	8.40	8.41
Salida Orgánico	Cu	2.89	2.89
	Fe	0.15	0.15



#### 4.6. EJEMPLO 6: BLOQUE DE LIXIVIACIÓN

Para la simulación de pilas de lixiviación, los modelos disponibles incluyen “bloques de lixiviación”, los cuales se pueden arreglar de la forma deseada, de modo de representar diferentes tipos de operación de pilas y diferentes circuitos de lixiviación. En este ejemplo se simulará un bloque unitario de lixiviación, analizando las variables involucradas. Para ello se dieron valores de entrada que se muestran a continuación:

Flujo de solución que ingresa:	50 m <sup>3</sup> /h
Flujo de sólidos que ingresa:	30 ton/h
Ley de cobre en mineral que ingresa:	1 %
Ley de hierro en mineral que ingresa:	2 %
Concentración de ácido en solución:	0.17 mol/m <sup>3</sup>
Concentración de cobre en solución:	0.025 g/l
Concentración de hierro en solución:	0.02 g/l
Densidad del mineral:	1500 kg/m <sup>3</sup>
Diámetro de partícula:	1.2 cm
Tiempo de lixiviación:	760 h
Constante específica de cobre:	3E+07 h mol/m <sup>5</sup>
Constante específica de hierro:	3.45E+07 h mol/m <sup>5</sup>
Constante específica de ácido:	5.38E+05 h mol /m <sup>5</sup>

Se realizó la simulación usando el resolvidor QRSIV, obteniendo los siguientes resultados:

*Tabla 4.3. Resultados obtenidos en la simulación de un bloque de lixiviación.*

Cobre en solución salida (g/l)	5.62
Hierro en solución salida (g/l)	8.67
Ácido en solución de salida (mol/m <sup>3</sup> )	0.036
Cobre en mineral salida (%)	0.67
Hierro en mineral salida (%)	0.55
Conversión de ácido (%)	78.6
Conversión de cobre (%)	93.26
Conversión de hierro (%)	72.14
Consumo de ácido (kg/h)	655.2
Consumo máximo de ácido (kg ácido/kg mineral)	0.027

De los resultados obtenidos se puede verificar que existe transferencia de cobre y hierro desde el mineral hacia la solución lixivante, comparando las concentraciones de estas especies en la solución lixivante a la entrada y salida del bloque, asimismo con la ley de mineral, que disminuye desde un valor de 1% de cobre a 0.67%. También disminuye la concentración de ácido de la solución, debido al consumo que alcanza un valor de 655.2 kg por cada hora de operación. Es posible conocer además las conversiones de las especies reaccionantes: ácido, cobre y hierro, y el consumo máximo de ácido por masa de mineral.

#### 4.7. EJEMPLO 7: PILA DE LIXIVIACIÓN ESTÁTICA

Se realizó la simulación de una pila de lixiviación estática, conformada por dos bloques de lixiviación dispuestos verticalmente, uno sobre otro, para representar que la pila es alimentada con mineral sólo una vez. Se considera que cada uno de los dos bloques es alimentado con la mitad del flujo total de sólidos  $W^{in}$ . Para la solución lixivante, el flujo volumétrico total que ingresa  $Q^{in}$  es el mismo que entra al primer y segundo bloque, sin dividirse, como se muestra en la figura 4.11:

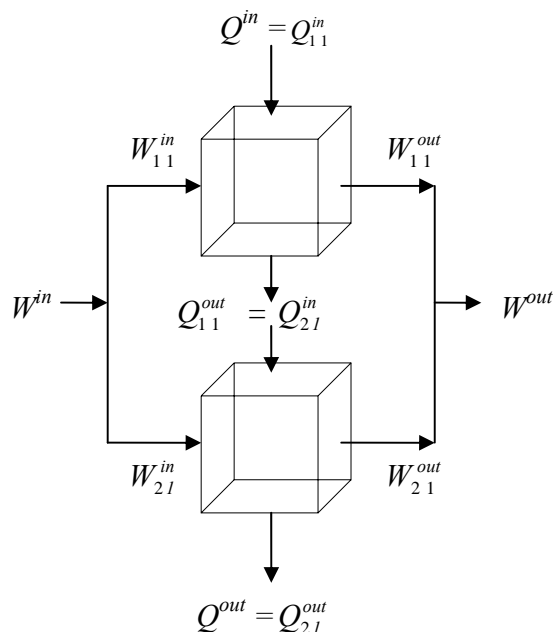


Figura 4.11. Esquema de simulación de pila de lixiviación estática.

Para la realización de esta simulación se dispuso de valores de entrada que se muestran a continuación:

Flujo de solución que ingresa:	50 m <sup>3</sup> /h
Flujo de sólidos que ingresa:	30 ton/h
Ley de cobre en mineral que ingresa:	1 %
Ley de hierro en mineral que ingresa:	2 %
Concentración de ácido en solución:	0.17 mol/m <sup>3</sup>
Concentración de cobre en solución:	0.025 g/l
Concentración de hierro en solución:	0.03 g/l
Tasa de riego:	0.3 m <sup>3</sup> / día/ m <sup>2</sup>
Altura de pila:	10 m
Constante específica de cobre:	3E+07 h mol/m <sup>5</sup>
Constante específica de hierro:	3.45E+07 h mol/m <sup>5</sup>
Constante específica de ácido:	5.38E+05 h mol /m <sup>5</sup>
Densidad del mineral de bloque (i , j) :	1500 kg/m <sup>3</sup>
Diámetro de partícula de bloque (i , j):	1.2 cm
Tiempo de lixiviación de bloque (i , j):	760 h

Se realizaron los cálculos de la simulación considerando los parámetros mostrados anteriormente, obteniendo los siguientes resultados, referidos a la pila completa y a cada bloque lixiviado:

*Tabla 4.4. Resultados obtenidos en la simulación de una pila de lixiviación estática.*

<b>Pila Estática:</b>	
Cobre en solución salida (g/l)	4.9
Hierro en solución salida (g/l)	7.5
Ácido en solución de salida (mol/m <sup>3</sup> )	0.015
Cobre en mineral salida (%)	0.17
Hierro en mineral salida (%)	0.76
Conversión total de ácido (%)	90.8
Conversión total de cobre (%)	82.5
Área de pila (m <sup>2</sup> )	4000

	<b>Bloque (1,1)</b>	<b>Bloque (2,1)</b>
Cobre en solución salida (g/l)	2.8	4.9
Hierro en solución salida (g/l)	4.4	7.5
Ácido en solución de salida (mol/m <sup>3</sup> )	0.036	0.015
Cobre en mineral salida (%)	0.067	0.28
Hierro en mineral salida (%)	0.56	0.96
Conversión de ácido (%)	78.7	57.1
Conversión de cobre (%)	93.3	71.7
Conversión de hierro (%)	72.1	51.6
Consumo de ácido (kg/h)	655.3	101.6
Consumo máximo de ácido (kg ácido/kg mineral)	0.055	0.012

De los resultados obtenidos se puede observar que el programa entrega valores totales del proceso como la conversión total de ácido y cobre, también las leyes del mineral finales, de cobre y hierro, las concentraciones de salida de la solución lixivante y área de la pila. Pero además, como la pila está formada por bloques de lixiviación, se pueden obtener resultados de cada uno de los bloques, de manera de conocer el desarrollo del proceso en forma parcial. Por ejemplo la concentración de cobre en la solución lixivante, al percolar del primer al segundo bloque, es de 2.8 g/l, mientras que a la salida del segundo bloque presenta la concentración final de flujo total que corresponde a 4.9 g/l de cobre. Con respecto al mineral lixiviado, para este caso, la simulación permite observar que la ley de cobre disminuyó de un 1% que es el valor inicial, a 0.067% en la mitad superior de la pila, correspondiente al primer bloque, mientras que la ley del mineral en la mitad inferior (segundo bloque) es de un 0.28% de cobre al terminar el proceso, estos valores entregan una ley final de mineral total en la pila de 0.17% de cobre. Asimismo, es posible conocer la conversión parcial de ácido, cobre y hierro, y el consumo de ácido a la salida de cada bloque constituyente del proceso.

#### 4.8. EJEMPLO 8: PILA DE LIXIVIACIÓN DINÁMICA

Finalmente, se realizó la simulación de una pila de lixiviación dinámica, compuesta por cuatro bloques de lixiviación conectados como muestra la figura 4.12. Nuevamente, se considera, que cada uno de los dos bloques laterales es alimentado con la mitad del flujo total de sólidos  $W^{in}$ , pero con respecto a la solución lixivianante, a diferencia del ejemplo anterior, el flujo volumétrico total que ingresa  $Q^{in}$  también se divide en dos para alimentar los dos bloques superiores de la pila.

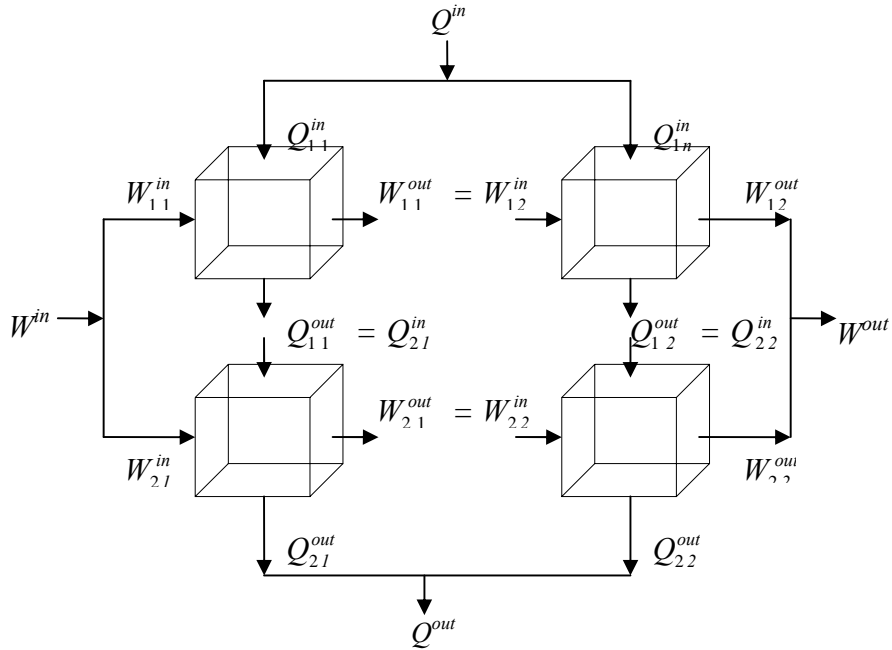


Figura 4.12. Esquema de simulación de pila de lixiviación dinámica.

Se ha estudiado el efecto de la tasa de riego sobre la altura y área de una pila dinámica de lixiviación, para lograr la misma conversión de cobre. Se puede observar, en la figura 4.13, que al aumentar la tasa de riego, el área de la pila disminuye, mientras que la altura de ésta, aumenta.

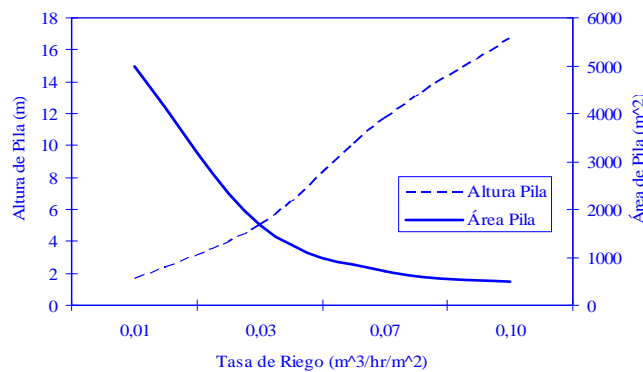


Figura 4.13. Efecto de la Tasa de Riego sobre la altura y área de una pila dinámica de lixiviación.

## 5. CONCLUSIONES Y COMENTARIOS FINALES

### 5.1 CONCLUSIONES Y COMENTARIOS

Se ha desarrollado *HydroSim*, una librería para la modelación, simulación y optimización de procesos hidrometalúrgicos en ASCEND IV.

ASCEND es un programa libre que puede descargarse de Internet para ser utilizado. El programa posee gran flexibilidad debido a que funciona a partir de la programación de modelos matemáticos implementados en las denominadas *librerías*, que pueden utilizarse de múltiples maneras dependiendo de los parámetros considerados y las variables a calcular. Además ASCEND cuenta con varios resolvers que se pueden seleccionar y que incluyen una rutina de optimización utilizable en diferentes tipos de modelos. Estas librerías pueden usarse para el cálculo de múltiples variables en distintos casos de estudio, los que pueden guardarse como una *macro*, que graba todos los procedimientos realizados por el programa para efectuar el cálculo específico, y que permite ser, posteriormente, reutilizado. Si bien el programa no es amigable y se necesita de tiempo para familiarizarse con él, una de las grandes ventajas que presenta es la transparencia, puesto que, en los modelos, es posible ver el código para modificarlo con libertad según los requerimientos del usuario.

La librería *HydroSim* se ha implementado a partir de modelos simples llamados *Elementos Base*, que aportan las herramientas elementales para desarrollar modelos con mayor complejidad. En este caso se han implementado un conjunto de modelos hidrometalúrgicos, específicamente de los procesos de lixiviación, extracción por solventes y electroobtención, que presentan distintos niveles de dificultad, para utilizar en casos específicos aplicados al diseño en ingeniería química. Los modelos pueden utilizarse independientemente, o bien, como un circuito hidrometalúrgico completo, debido a la flexibilidad que presentan y que permite utilizarlos según necesidad. La librería puede ser usada para estimar parámetros desconocidos u optimizar algunas variables usando una rutina de optimización disponible. Los modelos pueden ser modificados y adaptados según necesidad. Como limitación cabe mencionar que los modelos necesitan ser probados y calibrados lo que puede tomar tiempo, pero una vez hecho esto, la librería puede ser utilizada para simular, modelar, optimizar y diseñar, procesos hidrometalúrgicos o bien mejorar nuestro entendimiento de los fenómenos asociados.

Se realizaron siete ejemplos para mostrar el funcionamiento de la librería desarrollada. Primeramente se modeló un circuito hidrometalúrgico simple, que consta de una etapa de lixiviación, una etapa de extracción que a su vez se contacta con una etapa de recuperación o stripping y finalmente con la etapa de electroobtención. Se estudió la relación entre eficiencia y capacidad del proceso, se determinó también la concentración de cobre en las corrientes acuosa y orgánica al variar la velocidad de transferencia, y el efecto del pH y del extractante en el orgánico, en sistemas Cu-Fe. Un segundo circuito estudiado, consta de tres etapas de extracción y una etapa de stripping, empleándose para representar dos configuraciones diferentes de proceso que permitieron comparar los resultados, obteniendo una mayor eficiencia en el circuito serie-paralelo II. En el tercer ejemplo, se calcularon las constantes de equilibrio para el Cu y Fe en un proceso de SX, para determinar las

concentraciones de las dos especies en los flujos involucrados, obteniendo resultados casi exactos a los datos experimentales. También se estudió el efecto del reciclado interno de orgánico sobre la continuidad de fases en SX, graficando el hold up orgánico versus el área interfacial total, donde claramente se identifican las zonas de continuidad acuosa, orgánica y la zona ambivalente. Finalmente se simuló un bloque de lixiviación, que es la unidad fundamental para la simulación de pilas de lixiviación. Se estudió el caso de una pila estática de dos bloques apilados, pudiendo conocer las conversiones de ácido y de cobre finales, y en cada uno de los bloques, entre otras variables de proceso. También se simuló una pila de lixiviación dinámica, en que se analizaron variables como la tasa de riego, altura de la pila y área superficial.

Al estudiar distintos ejemplos, se puede vislumbrar la amplia posibilidad de opciones disponibles que presenta la librería *HydroSim*, lo que promueve la iniciativa de estudios futuros que tiendan al mejoramiento de los procesos actuales utilizados en la industria de procesos hidrometalúrgicos, o bien, dando pauta al desarrollo de estudios en otros ámbitos en ingeniería química, tanto en el área de procesos como en diseño de productos.

## 5.2. TRABAJOS FUTUROS

Como futuros trabajos, se agregará mayor complejidad a los modelos de lixiviación, extracción por solvente y electroobtención.

Se desea implementar la planificación de soluciones en el proceso de lixiviación, de manera de poder determinar y controlar las etapas en que se encuentran, a partir de la simulación del proceso. Esto se realizará definiendo un tiempo de operación de pila que considerará el tiempo de drenaje del *p/s* además del tiempo de lixiviación, ya estudiado. Además el tiempo de ciclo total tomará en cuenta el tiempo de operación de cada una de las pilas que conformen el proceso. Esto último, servirá para realizar estudios con respecto al tiempo total de ciclo de lixiviación, comparando las eficiencias de las pilas tratadas y evaluar la eficiencia y capacidad de procesos de agotamiento completo y parcial de mineral.

Con respecto a la extracción por solvente, se desarrollará una ecuación que relacione la razón acuoso orgánico, con los volúmenes de la fase orgánica y de la mezcla total, para valores variables de los límites de la región ambivalente, dentro del fenómeno de inversión de fases. Esto es, debido a que muchos autores difieren en la determinación de los límites de la zona ambivalente, lo que lleva a obtener diversos resultados, por lo que se busca implementar una única ecuación, en que se pueda evaluar la condición límite elegida.

Por último para el modelo de electroobtención, se realizarán estudios de las variables involucradas en el proceso, como se ha hecho con los modelos para lixiviación y extracción por solvente, de manera de evaluar el comportamiento de los modelos en las simulaciones y establecer mejoras que permitan la utilización de estos modelos en procesos reales. También, es necesario estudiar con mayor profundidad el modelo de electroobtención, especialmente las expresiones para la velocidad de transferencia electrónica, que presentan problemas de convergencia.

## 6. REFERENCIAS

- ASCEND website: <http://ascend.cheme.cmu.edu/>
- Aminian H., C. Bazin, D. Hodouin, C. Jacob, 2000. *Simulation of a SX-EW Pilot Plant. Hydrometallurgy, Vol. 56: 13 – 31.*
- Anthony T., D. S. Flett, 1997. *Nickel Processing Technology: A Review. Minerals Industry International Vol. 1: 26 – 42.*
- Fleming, C. A., 1992. *Hydrometallurgy of Precious Metals Recovery. Hydrometallurgy Vol. 30: 127 – 162.*
- Flett, D. S., 2005. *Solvent Extraction in Hydrometallurgy: The Role of Organophosphorus Extractants. Journal of Organometallic Chemistry Vol. 690: 2426 – 2438.*
- Garcia P., P. F. Knights, J. E. Tilton, 2001. *Labor Productivity and Comparative Advantage in Mining: The Copper Industry in Chile. Resources Policy Vol. 27: 97 – 105.*
- Godfrey J. C., F. I. Obi, R. N. Reeve, 1989. *Measuring Drop Size in Continuous Liquid-Liquid Mixers, Chem. Eng. Progress, 61 – 69.*
- Hoh Y. C., S. J. Ju, T. M. Chiu, 1989. *Effect of Internal Recycle on Mixer-Settler Performance, Hydrometallurgy, Vol. 23: 105 – 118.*
- Habashi, F., 1993. *A Textbook of Hydrometallurgy. Métallurgie Extractive, Sainte Foy, Québec. Page 689.*
- Lopicque F. y A. Storck. *Modelling of a Continuous Parallel Plate Plug Flow Electrochemical Reactor: Electrowinning of Copper. Journal of Applied Electrochemistry, Vol. 17: 925 - 935.*
- Levenspiel, O., 1987. *Ingeniería de las Reacciones Químicas.*
- Malatesta C. M., 2004. *Simulación de Procesos de Extracción por Solvente con ASCEND IV. Memoria para optar al título de Ingeniero Civil Industrial en Química, Universidad de Antofagasta.*
- McElroy, R., W. Young, 1999. *Pressure Oxidation of Complex Copper Ores. In: Jergensen II, G. V. (Ed.), Copper Leaching, Solvent Extraction and Electrowinning Technology. Society for Mining Metals and Exploration, Littleton, CO. Page 29 – 40.*

- Menacho, J., 2005. *La Hidrometalurgia y su Desarrollo*. Revista Área Minera 2, <http://www.areaminera.com/Servicios/eduexplora/5.act>.
- Meruane G. E., T. Vargas. *Criterios de Diseño del Circuito de Soluciones en la Lixiviación Bacteriana de Sulfuros de Cobre en Pilas*. Revista Electrónica Ciencia Abierta. Vol. 11.
- Mooiman, M. B., K. C. Sole, D. J. Kinneberg, 2005. *Challenging the TraditionalHydrometallurgy Currículo-An Industry Perspective*. Hydrometallurgy Vol. 79: 80 – 88.
- Nishiyama T., 2005. *The Roles of Asia and Chile in the World Copper Market*. Resources Policy, Vol. 30: 131 – 139.
- Padilla G., 2004. *Análisis de Variables de Diseño de Procesos Hidrometalúrgicos para Minerales de Cobre*. Memoria para optar al título de Ingeniero Civil Industrial en Química, Universidad de Antofagasta.
- Peters E., 1992. *Hydrometallurgical Process Innovation*. Hydrometallurgy, 29: 1-3, 431-459.
- Rojas E., G. Araya, J. Picardo, H. Hein, 2005. *Serie Paralelo Óptimo: Un Nuevo concepto de Configuración en Extracción por Solventes*. Congreso Hydrocopper 2005, Santiago, Chile. Page 449 – 458.