



UNIVERSIDAD DE SONORA
DIVISIÓN DE INGENIERÍA
POSGRADO EN CIENCIAS DE LA INGENIERÍA

**Modelo Cinético y de Fragmentación de la Oxidación de
Partículas de Mata de Cobre en Condiciones
de Conversión Instantánea**

TESIS

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:

MAESTRO EN CIENCIAS DE LA INGENIERIA

PRESENTA:

Víctor Roberto Parra Sánchez

HERMOSILLO, SONORA

Septiembre 2009

Universidad de Sonora

Repositorio Institucional UNISON



"El saber de mis hijos
hará mi grandeza"



Excepto si se señala otra cosa, la licencia del ítem se describe como openAccess

UNIVERSIDAD DE SONORA


APROBACION DEL JURADO

de la tesis presentada por:

Víctor Roberto Parra Sánchez

Esta tesis ha sido revisada por cada uno de los miembros del Jurado y por mayoría de votos la han encontrado satisfactoria.

02/09/09
Fecha



Dr. Manuel Pérez Tello
Presidente

02/09/09
Fecha



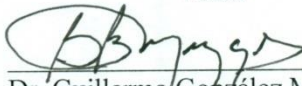
Dr. Víctor Manuel Sánchez Corrales
Secretario

02/09/09
Fecha



Dr. Abraham Rogelio Martín García
Vocal

02/09/09
Fecha



Dr. Guillermo González Muzquiz
Síndal Externo

UNIVERSIDAD DE SONORA
AUTORIZACION DEL EXAMEN DE GRADO

Septiembre 02 de 2009.

Por la presente se hace constar que el estudiante Víctor Roberto Parra Sánchez ha cumplido satisfactoriamente con los requisitos académicos correspondientes para la realización del Examen de Grado del programa de Maestría en Ciencias de la Ingeniería.



Dr. Víctor Manuel Sánchez Corrales
COORDINADOR
MAESTRIA EN CIENCIAS DE LA INGENIERIA

RESUMEN

En el presente trabajo se desarrolla un modelo matemático para predecir simultáneamente la distribución de tamaños y composición química de partículas de matas sólidas de cobre durante su oxidación en un horno de conversión instantáneo a nivel laboratorio. El modelo incluye la expansión, fragmentación, así como los cambios en la composición química a lo largo de la trayectoria de las partículas individuales al pasar por la cámara de reacción hasta llegar al fondo del reactor. El modelo supone partículas esféricas, velocidad constante de las partículas durante el vuelo, temperatura constante y que la composición de la partícula madre se conserva al momento de su fragmentación para producir las partículas hijas.

Para su resolución, el modelo requiere la especificación de cinco parámetros: rapidez de expansión de las partículas, fracción de las partículas más finas en la alimentación que logran fragmentarse, fracción de las partículas más grandes en la alimentación que logran fragmentarse, parámetro que indica la distribución de tamaños producidos por la fragmentación y factor de diámetro crítico.

El modelo fue codificado en lenguaje Fortran 90 y se utilizó el método de optimización Simplex autoajutable para encontrar los valores óptimos de los parámetros que mejor representaran a los datos experimentales. Las predicciones del modelo concordaron razonablemente con los datos experimentales obtenidos en un horno a nivel laboratorio en términos de las distribuciones de tamaños en el receptáculo y la cantidad de azufre remanente de la población de partículas a lo largo del reactor.

Los resultados indican que el tiempo de residencia de las partículas es un factor importante en la generación de polvos y que el tamaño de alimentación de las partículas tiene un efecto significativo sobre su composición y rapidez de reacción. Se predice con aceptable exactitud la generación de polvos durante el proceso, calculando con un 5.6% de error la fracción de polvos en la distribución de tamaños en el receptáculo con respecto a la experimental. Dependiendo de las condiciones de operación, se encontró que las partículas de polvo se consumen o se generan en el horno, variando su magnitud entre -7% (consumo) hasta 23% (generación) de la masa de la alimentación.

Se definen los coeficientes de distribución y contribución acumulativos los cuales sirven para analizar los fenómenos de fragmentación y su relación con la generación de partículas finas en el horno. Lo anterior es importante para realizar posteriores estudios con el fin de la optimización del proceso.

Los resultados del presente trabajo indican el uso potencial del modelo matemático para entender los mecanismos de fragmentación y de oxidación de partículas sulfurosas a altas temperaturas.

ABSTRACT

A mathematical model aimed at predicting the size distribution and chemical composition of copper matte particles during their oxidation in a laboratory flash converting furnace is presented. The model includes the expansion, fragmentation, and heterogeneous chemical reactions along the trajectories of individual particles as they travel through the reaction chamber prior to reaching the receptacle. The model assumes isothermal, spherical particles traveling at constant velocity throughout the reaction chamber. The composition of the daughter particles is assumed to be the same as that of the mother particle upon fragmentation.

The model requires the specification of five parameters, all of which with physical significance: the particle expansion rate, the fraction of the finest and coarsest particles in the feed that undergo fragmentation, a parameter that indicates the size distribution of the daughter particles, and a critical diameter factor. The model was written as a Fortran 90 code and was coupled to a self-adjustable Simplex optimization algorithm to compute the parameter values that best fit the experimental data. The model predictions were compared with experimental data collected in a large laboratory furnace. Overall, good agreement between the model predictions and the experimental data was obtained in terms of the size distributions of the population of particles in the receptacle, and the sulfur left in the particles.

The results indicate that particle residence time is an important factor in the generation of dust in the reactor. Particle mean size in the feed also plays a significant role on particle reactivity and particle composition upon reaching the receptacle. The amount of dust in the receptacle samples was predicted to be within 5.6 % error with respect to the experimental data. Depending on the operating conditions, dust particles were found to be either consumed or generated in the furnace, varying in the range of -7% (consumption) up to 23% (generation) of the feed material.

Two new concepts are introduced, namely, the accumulated contribution coefficient and the accumulated distribution coefficients. They are used to analyze the fragmentation

phenomena as well as to find relationships between particle size fractions in the feed and those in the oxidized products. They are also used to find dust generation trends upon particle oxidation. The present work shows the potential use of the mathematical model to help understand the mechanisms governing the fragmentation and oxidation of copper matte particles at high temperatures.

CONTENIDO

RESUMEN.....	iv
--------------	----

ABSTRACT.....	v
LISTA DE FIGURAS.....	xi
LISTA DE TABLAS.....	xxii
NOMENCLATURA.....	xxiii
1. INTRODUCCIÓN Y OBJETIVOS.....	1
2. REVISIÓN BIBLIOGRÁFICA.....	6
3. METODOLOGÍA.....	12
3.1 Formulación del Modelo Cinético.....	12
3.2 Formulación del Modelo de Fragmentación.....	23
3.2.1 Especificación de los Parámetros del Modelo.....	30
3.2.2 Definición del Coeficiente de Contribución.....	35
3.2.3 Definición del Coeficiente de Distribución.....	37
3.3 Cálculo de la Composición Química de la Población de Partículas.....	38
3.3.1 Funciones de Densidad por Especie.....	42
3.4 Acoplamiento y Verificación del Modelo Matemático.....	43
4. RESULTADOS Y DISCUSIÓN.....	47
4.1 Cinética de Partículas Individuales	47
4.1.1 Evolución de la Masa de la Partícula.....	49
4.1.2 Porosidad de la Capa de Óxidos.....	49
4.1.3 Grado de Conversión.....	52

4.1.4	Azufre Remanente en la Partícula.....	54
4.1.5	Coeficiente de Transferencia de Masa.....	56
4.2	Validación del Modelo Matemático.....	58
4.2.1	Distribución de Tamaños en el Receptáculo.....	58
4.2.2	Cantidad de Polvo en el Receptáculo.....	64
4.2.3	Azufre Remanente en las Partículas.....	66
4.3	Análisis del Proceso de Conversión Instantánea.....	72
4.3.1	Evolución de la Distribución de Tamaños en la Cámara de Reacción	72
4.3.2	Correlación de los Parámetros del Modelo con las Condiciones Experimentales	78
4.3.3	Generación de Polvos.....	89
4.3.4	Coeficiente de Contribución Acumulativo.....	92
4.3.5	Coeficiente de Distribución Acumulativo.....	98
4.3.6	Funciones de Densidad por Elemento.....	104
4.3.7	Composición Química por Fracción de Tamaño en el Receptáculo.....	110
5.	CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES.....	115
5.1	Conclusiones.....	115
5.2	Recomendaciones.....	117

APÉNDICE A: Desarrollo del Modelo Cinético.....	118
APÉNDICE B: Resultados del Modelo Cinético de Partículas individuales....	124
APÉNDICE C: Resultados del Modelo de Fragmentación.....	128
APÉNDICE D: Programa de Cómputo.....	170
BIBLIOGRAFÍA.....	171

LISTA DE FIGURAS

Figura

1.1	Proceso de Conversión Instantánea de Matas Sólidas de Cobre.....	3
2.1	Modelo Cualitativo de la Fragmentación de Partículas Sulfurosas a Altas Temperaturas. Adaptado de Kim y Themelis (1986) y Jokilaakso et al. (1995).	8
2.2	Convertidor Instantáneo de la Universidad de Utah.....	10
3.1	Estrategia General del trabajo.....	13
3.2	Modelo Propuesto para la Oxidación de Partículas de Mata de Cobre en Condiciones de Conversión Instantánea.....	15
3.3	Modelo de Núcleo Decreciente para la Oxidación de Partículas de Mata de Cobre en Condiciones de Conversión Instantánea.....	16
3.4	Diagrama Esquemático del Modelo de Fragmentación.....	24
3.5	Representación Gráfica de las Ecuaciones 3.52 y 3.53 para a) $p>0$ y b) $p<0$...	33
3.6	Estrategia General de Cálculo del Trabajo.....	44
4.1	Evolución de la Masa de la Partícula en Función del Tamaño Inicial.....	50
4.2	Evolución de la Porosidad de la Capa de Óxidos en Función del Tamaño Inicial.....	51
4.3	Evolución del Grado de Conversión de la Partícula en Función del Radio Inicial.....	53
4.4	Evolución del Azufre Remanente en Función del Tamaño Inicial	55
4.5	Evolución del Coeficiente de Transferencia de Masa en Función del Tamaño Inicial.....	57
4.6	Funciones de Densidad Experimental y Calculada para el Experimento No.7. Condiciones Experimentales: 37-74 μ m, Relación Oxígeno-Mata 0.25kg O ₂ /kg mata, 100% O ₂ en Gas de Proceso $r^2 = 0.962$	60

4.7	Funciones de Densidad Experimental y Calculada para el Experimento No.15. Condiciones Experimentales: 105-149 μm , Relación Oxígeno-Mata 0.25kg O_2/kg mata, 100% O_2 en Gas de Proceso $r^2 = 0.947$	62
4.8	Funciones de Densidad Experimental y Calculada para el Experimento No.17. Condiciones Experimentales: <149 μm , Relación Oxígeno-Mata 0.25kg O_2/kg mata, 70% O_2 en Gas de Proceso $r^2 = 0.986$	63
4.9	Comparación Entre las Fracciones de Polvo en el Receptáculo Calculadas y Experimentales.....	67
4.10	Evolución de la Fracción de Azufre Remanente en la Población de Partículas a lo Largo del Reactor para el Experimento No.7. Condiciones Experimentales: 37-74 μm , Relación Oxígeno-Mata 0.25kg O_2/kg mata, 100% O_2 en Gas de Proceso.....	68
4.11	Evolución de la Fracción de Azufre Remanente en la Población de Partículas a lo Largo del Reactor para el Experimento No.15. Condiciones Experimentales: 105-149 μm , Relación Oxígeno-Mata 0.25kg O_2/kg mata, 100% O_2 en Gas de Proceso.....	70
4.12	Evolución de la Fracción de Azufre Remanente en la Población de Partículas a lo Largo del Reactor para el Experimento No.17. Condiciones Experimentales: <149 μm , Relación Oxígeno-Mata 0.25kg O_2/kg mata, 70% O_2 en Gas de Proceso.....	71
4.13	Evolución de la Función de Densidad a través del Recorrido por la Cámara de Reacción, Experimento No.7. Condiciones Experimentales: 37-74 μm , Relación Oxígeno-Mata 0.25kg O_2/kg mata, 100% O_2 en Gas de Proceso.....	73
4.14	Evolución de la Función de Densidad a través del Recorrido por la Cámara de Reacción, Experimento No.15. Condiciones Experimentales: 105-149	

	μm , Relación Oxígeno-Mata 0.25kg O ₂ /kg mata, 100% O ₂ en Gas de Proceso.....	75
4.15	Evolución de la Función de Densidad a través del Recorrido por la Cámara de Reacción, Experimento No.17. Condiciones Experimentales: <149 μm , Relación Oxígeno-Mata 0.25kg O ₂ /kg mata, 70% O ₂ en Gas de Proceso.....	77
4.16	Efecto de las Variables de Operación Sobre la Rapidez de Expansión, g.....	79
4.17	Efecto de las Variables de Operación Sobre el Parámetro de Distribución, γ	82
4.18	Efecto de las Variables de Operación Sobre el Parámetro f_{2f}	84
4.19	Efecto de las Variables de Operación Sobre el Parámetro f_{nf}	86
4.20	Efecto de las Variables de Operación Sobre el Factor de Diámetro Crítico, f_c	88
4.21	Efecto de las Variables de Operación Sobre la Generación de Polvos.....	90
4.22	Coeficientes de Contribución Acumulativos para el Experimento No.7. Condiciones Experimentales: 37-74 μm , Relación Oxígeno-Mata 0.25 kg O ₂ /kg Mata, 100% de O ₂ en Gas de Proceso.....	93
4.23	Coeficientes de Contribución Acumulativos para el Experimento No.15 Condiciones Experimentales: 105-149 μm , Relación Oxígeno-Mata 0.25 kg O ₂ /kg Mata, 100% de O ₂ en Gas de Proceso.....	96
4.24	Coeficientes de Contribución Acumulativos para el Experimento No.17 Condiciones Experimentales: <149 μm , Relación Oxígeno-Mata 0.25 kg O ₂ /kg Mata, 70% de O ₂ en Gas de Proceso.....	97

4.25	Coeficientes de Distribución para el Experimento No. 7 Condiciones Experimentales: 37-74 μm , Relación Oxígeno-Mata 0.25 kg O_2/kg Mata, 100% de O_2 en Gas de Proceso.....	99
4.26	Coeficientes de Distribución para el Experimento No. 15 Condiciones Experimentales: 105-149 μm , Relación Oxígeno-Mata 0.25 kg O_2/kg Mata, 100% de O_2 en Gas de Proceso.....	102
4.27	Coeficientes de Distribución Acumulativos para el Experimento No. 17 Condiciones Experimentales: <149 μm , Relación Oxígeno-Mata 0.25 kg O_2/kg Mata, 70% de O_2 en Gas de Proceso.....	103
4.28	Funciones de Densidad para las Especies en el Receptáculo para el Experimento No.7. Condiciones Experimentales: 37-74 μm , Relación Oxígeno-Mata 0.25kg O_2/kg mata, 100% O_2 en Gas de Proceso.....	105
4.29	Funciones de Densidad para las Especies en el Receptáculo para el Experimento No.15. Condiciones Experimentales: 105-149 μm , Relación Oxígeno-Mata 0.25kg O_2/kg mata, 100% O_2 en Gas de Proceso.....	107
4.30	Funciones de Densidad para las Especies en el Receptáculo para el Experimento No.17. Condiciones Experimentales: <149 μm , Relación Oxígeno-Mata 0.25kg O_2/kg mata, 70% O_2 en Gas de Proceso.....	109
4.31	Composición por Tamaño de Partículas en el Receptáculo en Fracción Masa por Especie para el Experimento No.7. Condiciones Experimentales: 37- 74 μm , Relación Oxígeno-Mata 0.25kg O_2/kg mata, 100% O_2 en Gas de Proceso.....	111
4.32	Composición de las Partículas en el Receptáculo en Fracción Masa por Especie para el Experimento No.15. Condiciones Experimentales: 105- 149 μm , Relación Oxígeno-Mata 0.25kg O_2/kg mata, 100% O_2 en Gas de	

	Proceso.....	112
4.33	Composición de las Partículas en el Receptáculo en Fracción Masa por Especie para el Experimento No.17. Condiciones Experimentales: <149µm, Relación Oxígeno-Mata 0.25kg O ₂ /kg mata, 70% O ₂ en Gas de Proceso.....	114
B.1	Evolución del Radio del Núcleo en Función del Tamaño Inicial.....	124
B.2	Evolución del Radio de la Partícula en Función del Tamaño Inicial.....	125
B.3	Evolución de la Fracción Peso de Azufre en Función del Tamaño Inicial.....	126
B.4	Evolución de la Fracción Peso de Oxígeno en Función del Tamaño Inicial.....	127
C.1	Funciones de Densidad Experimental y Calculada para el experimento No.1. Condiciones Experimentales: <37µm, Relación Oxígeno-Mata 0.25kg O ₂ /kg mata, 70% O ₂ en Gas de Proceso $r^2 = 0.980$	128
C.2	Funciones de Densidad Experimental y Calculada para el Experimento No.2. Condiciones Experimentales: <37µm, Relación Oxígeno-Mata 0.33kg O ₂ /kg mata, 70% O ₂ en Gas de Proceso $r^2 = 0.991$	129
C.3	Funciones de Densidad Experimental y Calculada para el Experimento No.3. Condiciones Experimentales: <37µm, Relación Oxígeno-Mata 0.25kg O ₂ /kg mata, 100% O ₂ en Gas de Proceso $r^2 = 0.960$	130
C.4	Funciones de Densidad Experimental y Calculada para el Experimento No.4. Condiciones Experimentales: <37µm, Relación Oxígeno-Mata 0.33kg O ₂ /kg mata, 100% O ₂ en Gas de Proceso $r^2 = 0.976$	131
C.5	Funciones de Densidad Experimental y Calculada para el Experimento No.5. Condiciones Experimentales: 37-74µm, Relación Oxígeno-Mata 0.25kg	

	O ₂ /kg mata, 70% O ₂ en Gas de Proceso $r^2 = 0.979$	132
C.6	Funciones de Densidad Experimental y Calculada para el Experimento No.6. Condiciones Experimentales: 37-74μm, Relación Oxígeno-Mata 0.33kg O ₂ /kg mata, 70% O ₂ en Gas de Proceso $r^2 = 0.922$	133
C.7	Funciones de Densidad Experimental y Calculada para el Experimento No.7. Condiciones Experimentales: 37-74μm, Relación Oxígeno-Mata 0.25kg O ₂ /kg mata, 100% O ₂ en Gas de Proceso $r^2 = 0.962$	134
C.8	Funciones de Densidad Experimental y Calculada para el Experimento No.8. Condiciones Experimentales: 37-74μm, Relación Oxígeno-Mata 0.33kg O ₂ /kg mata, 100% O ₂ en Gas de Proceso $r^2 = 0.955$	135
C.9	Funciones de Densidad Experimental y Calculada para el Experimento No.9. Condiciones Experimentales: 74-105μm, Relación Oxígeno-Mata 0.25kg O ₂ /kg mata, 70% O ₂ en Gas de Proceso $r^2 = 0.939$	136
C.10	Funciones de Densidad Experimental y Calculada para el Experimento No.10. Condiciones Experimentales: 74-105μm, Relación Oxígeno-Mata 0.33kg O ₂ /kg mata, 70% O ₂ en Gas de Proceso $r^2 = 0.921$	137
C.11	Funciones de Densidad Experimental y Calculada para el Experimento No.11. Condiciones Experimentales: 74-105μm, Relación Oxígeno-Mata 0.25kg O ₂ /kg mata, 100% O ₂ en Gas de Proceso $r^2 = 0.928$	138
C.12	Funciones de Densidad Experimental y Calculada para el Experimento No.12. Condiciones Experimentales: 74-105μm, Relación Oxígeno-Mata 0.33kg O ₂ /kg mata, 100% O ₂ en Gas de Proceso $r^2 = 0.931$	139
C.13	Funciones de Densidad Experimental y Calculada para el Experimento No.13. Condiciones Experimentales: 105-149 μm, Relación Oxígeno-Mata 0.25kg O ₂ /kg mata, 70% O ₂ en Gas de Proceso $r^2 = 0.906$	140

C.14	Funciones de Densidad Experimental y Calculada para el Experimento No.14. Condiciones Experimentales: 105-149 μm , Relación Oxígeno-Mata 0.33kg O ₂ /kg mata, 70% O ₂ en Gas de Proceso $r^2 = 0.945$	141
C.15	Funciones de Densidad Experimental y Calculada para el Experimento No.15. Condiciones Experimentales: 105-149 μm , Relación Oxígeno-Mata 0.25kg O ₂ /kg mata, 100% O ₂ en Gas de Proceso $r^2 = 0.947$	142
C.16	Funciones de Densidad Experimental y Calculada para el Experimento No.16. Condiciones Experimentales: 105-149 μm , Relación Oxígeno-Mata 0.33kg O ₂ /kg mata, 100% O ₂ en Gas de Proceso $r^2 = 0.906$	143
C.17	Funciones de Densidad Experimental y Calculada para el Experimento No.17. Condiciones Experimentales: <149 μm , Relación Oxígeno-Mata 0.25kg O ₂ /kg mata, 70% O ₂ en Gas de Proceso $r^2 = 0.986$	144
C.18	Funciones de Densidad Experimental y Calculada para el Experimento No.18. Condiciones Experimentales: <149 μm , Relación Oxígeno-Mata 0.33kg O ₂ /kg mata, 70% O ₂ en Gas de Proceso $r^2 = 0.954$	145
C.19	Funciones de Densidad Experimental y Calculada para el Experimento No.19. Condiciones Experimentales: <149 μm , Relación Oxígeno-Mata 0.25kg O ₂ /kg mata, 100% O ₂ en Gas de Proceso $r^2 = 0.928$	146
C.20	Funciones de Densidad Experimental y Calculada para el Experimento No.20. Condiciones Experimentales: <149 μm , Relación Oxígeno-Mata 0.33kg O ₂ /kg mata, 100% O ₂ en Gas de Proceso $r^2 = 0.939$	147
C.21	Porcentaje de Error en la Predicción de Generación de Polvos por Número de Experimento.....	149
C.22	Evolución de la Fracción de Azufre Remanente en la Población de Partículas a lo Largo del Reactor para el Experimento No.1. Condiciones Experimentales: <37 μm , Relación Oxígeno-Mata 0.25kg O ₂ /kg mata,70%	

	O ₂ en Gas de Proceso.....	150
C.23	Evolución de la Fracción de Azufre Remanente en la Población de Partículas a lo Largo del Reactor para el Experimento No.2. Condiciones Experimentales: <37µm, Relación Oxígeno-Mata 0.33kg O ₂ /kg mata, 70% O ₂ en Gas de Proceso.....	151
C.24	Evolución de la Fracción de Azufre Remanente en la Población de Partículas a lo Largo del Reactor para el Experimento No.3. Condiciones Experimentales: <37µm, Relación Oxígeno-Mata 0.25kg O ₂ /kg mata, 100% O ₂ en Gas de Proceso.....	152
C.25	Evolución de la Fracción de Azufre Remanente en la Población de Partículas a lo Largo del Reactor para el Experimento No.4. Condiciones Experimentales: <37µm, Relación Oxígeno-Mata 0.33kg O ₂ /kg mata, 100% O ₂ en Gas de Proceso.....	153
C.26	Evolución de la Fracción de Azufre Remanente en la Población de Partículas a lo Largo del Reactor para el Experimento No.5. Condiciones Experimentales: 37-74µm, Relación Oxígeno-Mata 0.25kg O ₂ /kg mata, 70% O ₂ en Gas de Proceso.....	154
C.27	Evolución de la Fracción de Azufre Remanente en la Población de Partículas a lo Largo del Reactor para el Experimento No.6. Condiciones Experimentales: 37-74µm, Relación Oxígeno-Mata 0.33kg O ₂ /kg mata, 70% O ₂ en Gas de Proceso.....	155
C.28	Evolución de la Fracción de Azufre Remanente en la Población de Partículas a lo Largo del Reactor para el Experimento No.7. Condiciones Experimentales: 37-74µm, Relación Oxígeno-Mata 0.25kg O ₂ /kg mata,100% O ₂ en Gas de Proceso.....	156

C.29	Evolución de la Fracción de Azufre Remanente en la Población de Partículas a lo Largo del Reactor para el Experimento No.8. Condiciones Experimentales: 37-74 μ m, Relación Oxígeno-Mata 0.33kg O ₂ /kg mata,100% O ₂ en Gas de Proceso.....	157
C.30	Evolución de la Fracción de Azufre Remanente en la Población de Partículas a lo Largo del Reactor para el Experimento No.9. Condiciones Experimentales: 74-105 μ m, Relación Oxígeno-Mata 0.25kg O ₂ /kg mata,70% O ₂ en Gas de Proceso.....	158
C.31	Evolución de la Fracción de Azufre Remanente en la Población de Partículas a lo Largo del Reactor para el Experimento No.10. Condiciones Experimentales: 74-105 μ m, Relación Oxígeno-Mata 0.33kg O ₂ /kg mata,70% O ₂ en Gas de Proceso.....	159
C.32	Evolución de la Fracción de Azufre Remanente en la Población de Partículas a lo Largo del Reactor para el Experimento No.11. Condiciones Experimentales: 74-105 μ m, Relación Oxígeno-Mata 0.25kg O ₂ /kg mata,100% O ₂ en Gas de Proceso.....	160
C.33	Evolución de la Fracción de Azufre Remanente en la Población de Partículas a lo Largo del Reactor para el Experimento No.12. Condiciones Experimentales: 74-105 μ m, Relación Oxígeno-Mata 0.33kg O ₂ /kg mata,100% O ₂ en Gas de Proceso.....	161
C.34	Evolución de la Fracción de Azufre Remanente en la Población de Partículas a lo Largo del Reactor para el Experimento No.13. Condiciones Experimentales: 105-149 μ m, Relación Oxígeno-Mata 0.25kg O ₂ /kg mata,70% O ₂ en Gas de Proceso.....	162
C.35	Evolución de la Fracción de Azufre Remanente en la Población de Partículas a lo Largo del Reactor para el Experimento No.14. Condiciones	

	Experimentales: 105-149 μ m, Relación Oxígeno-Mata 0.33kg O ₂ /kg mata,70% O ₂ en Gas de Proceso.....	163
C.36	Evolución de la Fracción de Azufre Remanente en la Población de Partículas a lo Largo del Reactor para el Experimento No.15. Condiciones Experimentales: 105-149 μ m, Relación Oxígeno-Mata 0.25kg O ₂ /kg mata,100% O ₂ en Gas de Proceso.....	164
C.37	Evolución de la Fracción de Azufre Remanente en la Población de Partículas a lo Largo del Reactor para el Experimento No.16. Condiciones Experimentales: 105-149 μ m, Relación Oxígeno-Mata 0.33kg O ₂ /kg mata,100% O ₂ en Gas de Proceso.....	165
C.38	Evolución de la Fracción de Azufre Remanente en la Población de Partículas a lo Largo del Reactor para el Experimento No.17. Condiciones Experimentales: <149 μ m, Relación Oxígeno-Mata 0.25kg O ₂ /kg mata,70% O ₂ en Gas de Proceso.....	166
C.39	Evolución de la Fracción de Azufre Remanente en la Población de Partículas a lo Largo del Reactor para el Experimento No.18. Condiciones Experimentales: <149 μ m, Relación Oxígeno-Mata 0.33kg O ₂ /kg mata,70% O ₂ en Gas de Proceso.....	167
C.40	Evolución de la Fracción de Azufre Remanente en la Población de Partículas a lo Largo del Reactor para el Experimento No.19. Condiciones Experimentales: <149 μ m, Relación Oxígeno-Mata 0.25kg O ₂ /kg mata, 100% O ₂ en Gas de Proceso.....	168
C.41	Evolución de la Fracción de Azufre Remanente en la Población de Partículas a lo Largo del Reactor para el Experimento No.20. Condiciones Experimentales: <149 μ m, Relación Oxígeno-Mata 0.33kg O ₂ /kg mata, 100% O ₂ en Gas de Proceso.....	169

LISTA DE TABLAS

Tabla

2.1	Publicaciones relevantes sobre la oxidación de partículas de mata de cobre (1986-2008).....	7
4.1	Propiedades de la mata y del sistema requeridas por el modelo cinético.....	48
4.2	Condiciones Experimentales y Resultados del Modelo Matemático.....	59
4.3	Comparación del Presente Modelo de Fragmentación con el Reportado por Perez-Tello et al. (2008).....	65
C.1	Porcentaje de Generación de Polvos y Porcentaje de Error Cometido en su Predicción para todas las Condiciones Experimentales.....	148

NOMENCLATURA PARA EL MODELO CINETICO

Símbolo	Unidades	Definición
<i>A</i>		Nomenclatura utilizada por simplicidad para representar al oxígeno
<i>B</i>		Nomenclatura utilizada por simplicidad para representar a la mata de cobre
<i>b</i>	1	Coefficiente estequiométrico en la reacción química para la mata de cobre = $\frac{1}{\left[\frac{3}{2}+y\left(x+\frac{2}{3}\right)\right]}$
<i>C</i>		Nomenclatura utilizada por simplicidad para representar a los óxidos
<i>c</i>	1	Coefficiente estequiométrico en la reacción química para la capa de óxidos = $\frac{1}{\left[\frac{3}{2}+y\left(x+\frac{2}{3}\right)\right]}$
<i>C_A</i>	kg/mol	Concentración de oxígeno gaseoso
<i>C_{Ab}</i>	kg/mol	Concentración de oxígeno gaseoso en el seno del fluido
<i>C_{Ac}</i>	kg/mol	Concentración de oxígeno gaseoso en la superficie del núcleo sin reaccionar
<i>C_{As}</i>	kg/mol	Concentración de oxígeno gaseoso en la capa de óxidos
<i>D</i>		Nomenclatura utilizada por simplicidad para representar al SO ₂
<i>d</i>	1	Coefficiente estequiométrico en la reacción química para el SO ₂ = $\frac{xy+1}{\left[\frac{3}{2}+y\left(x+\frac{2}{3}\right)\right]}$
<i>D_{AB}</i>	m ² /s	Difusividad molecular del oxígeno en el nitrógeno
<i>D_{Aef}</i>	m ² /s	Difusividad efectiva del oxígeno en la costra de óxidos
<i>h</i>	µm/s	Rapidez de crecimiento del radio de la partícula
<i>k_m</i>	m/s	Coefficiente de transferencia de masa externo
<i>M</i>	kg/mol	Peso Molecular
<i>n</i>	mol	Número de moles
<i>N_A _{r_c}</i>	kgmol/m ² s	Flux de oxígeno en la superficie del núcleo
<i>N_A _{r_p}</i>	kgmol/m ² s	Flux de oxígeno en la superficie de la partícula

P	atm	Presión absoluta
$R_A _{r_c}$	kgmol/s	Rapidez de consumo de oxígeno en la superficie del núcleo
Re_p	1	Número de Reynolds de la partícula = $Re_p = \frac{2r_p \langle U_g \rangle \rho}{\mu}$
r_c	m	Radio del núcleo
r_i	m	Radio inicial de la partícula
r_p	m	Radio de la partícula
Sc	1	Número de Schmit = $\frac{\mu}{\rho D_{AB}}$
Sh	1	Número de Sherwood = $2 + 0.6Re_p^{1/2} Sc^{1/3}$
t	s	Tiempo
T	K	Temperatura absoluta
$\langle U_g \rangle$	m/s	Velocidad promedio del gas
V	m ³	Volumen
X		Grado de conversión de la partícula = $1 - \left(\frac{r_c}{r_i}\right)^3$
x	μm	Diámetro de la partícula
y	1	Coefficiente estequiométrico del sulfuro de hierro en la mata de cobre

Símbolos Griegos

Δt	s	Tiempo que tarda una partícula en llegar de una posición en el reactor a otra. Paso de integración
ε	1	Porosidad de la partícula
μ	Kg/ms	Viscosidad del gas de proceso
ρ	Kg/m ³	Densidad másica aparente
$\hat{\rho}$	mol/m ³	Densidad molar de las especies
σ_{AB}	Å	Diámetro de colisión. Parámetro utilizado en la ecuación de Chapman-Enskog para determinar la Difusividad molecular

τ	1	Tortuosidad
Ω	1	Integral de colisión. Parámetro utilizado en la ecuación de Chapman-Enskog para determinar la Difusividad molecular

Subíndices

<i>A</i>	Referente al oxígeno gaseoso
<i>b</i>	Referente al seno del fluido en el sistema
<i>B</i>	Nitrógeno
<i>c</i>	Referente al núcleo de la partícula (mata de cobre)
<i>eq</i>	Referente al equilibrio
<i>g</i>	Fase gaseosa
<i>i</i>	Referente a las condiciones iniciales
<i>p</i>	Referente a la partícula
<i>s</i>	Fase sólida
<i>x</i>	Átomos de azufre dentro del sulfuro de hierro en la mata de cobre

Superíndices

0	Referente al tiempo inicial
m	Referente al tiempo anterior
m+1	Referente al tiempo actual

NOMENCLATURA PARA EL MODELO DE FRAGMENTACIÓN

Símbolo	Unidades	Definición
C_3	1	Factor de forma de las partículas
$F_{20,a}$	1	Fracción peso de polvos en la población de partículas en la alimentación
$F_{20,r}$	1	Fracción peso de polvos en la población de partículas en el receptáculo
f_{2f}	1	Fracción de las partículas más pequeñas que logran fragmentarse
f_{2f}^*	1	Parámetro ajustable para determinar la pendiente de la recta que resulta al graficar f_{if} contra x_{i0} . Proyección del parámetro f_{2f} y carece de significado físico.
f_{nf}^*	1	Parámetro ajustable para determinar la pendiente de la recta que resulta al graficar f_{if} contra x_{i0} . Proyección del parámetro f_{nf} y carece de significado físico.
f_3	μm^{-1}	Función de densidad másica calculada
f_3^s	μm^{-1}	Función de densidad másica para la especie s
f_i	1	Fracción de partículas que se fragmentan de tamaño x_{i0} en cualquier punto de la cámara de reacción
f_{ic}	1	Factor de diámetro crítico del tamaño inicial x_{i0}
f_{if}	1	Fracción de partículas que logran fragmentarse del tamaño inicial x_{i0} al llegar al receptáculo
f_{nf}	1	Fracción de las partículas más grandes que logran fragmentarse
$\overline{g_3}$	μm^{-1}	Promedio de la función de densidad másica experimental
g	$\mu\text{m/s}$	Rapidez de expansión constante del diámetro de las partículas en la cámara de reacción
g_3	μm^{-1}	Función de densidad másica experimental
k	1	Constante de proporcionalidad para los cocientes de

		fragmentación
L	M	Longitud del reactor
m_a	kg	Masa total de partículas en la alimentación
$m_{i\delta k}^s$	kg	Masa de la especie s en las partículas hijas de tamaño x_k que se produjeron por la fragmentación de partículas de tamaño x_δ que provienen de partículas x_{i0} de la alimentación.
m_k^s	kg	Masa de la especie s en todas las partículas de tamaño x_k
m_{lk}^s	kg	Masa de la especie s en las partículas hijas de tamaño x_k que se produjeron por la expansión de todas las partículas de tamaño inicial x_l
$m_{\delta k}^s$	kg	Masa de la especie s en las partículas hijas de tamaño x_k que se produjeron por la fragmentación de todas las partículas que llegaron al tamaño x_δ
m_{i0}	kg	Masa de partículas de tamaño x_{i0} en la alimentación
$m_{i\delta}$	kg	Masa de partículas de tamaño x_{i0} en la alimentación que llegaron a un tamaño x_δ al momento de su fragmentación
$m_{i\delta k}$	kg	Masa de partículas de tamaño x_k que llegaron al receptáculo que provienen de la fragmentación de partículas de tamaño x_δ que fueron alimentadas con un tamaño inicial x_{i0}
m_k	kg	Masa total de partículas hijas de tamaño x_k
m_{lk}	kg	Masa de partículas hijas de tamaño x_k que resultaron de la expansión de partículas con un tamaño inicial x_l
m^s	kg	Masa de la especie s en la partícula en las partículas
$m_{\delta k}$	kg	Masa de partículas hijas de tamaño x_k que resultaron de la fragmentación de partículas madre con un tamaño x_δ
m_r	kg	Masa total en el receptáculo
$n_{i\delta}^0$	1	Número total de partículas hijas que produce una sola

		partícula madre de tamaño x_δ
$n_{i\delta k}$	1	Número total de partículas hijas producidas de tamaño x_k por todas las partículas que alcanzaron un tamaño x_δ al fragmentarse
$n_{i\delta k}^0$	1	Número total de partículas hijas de tamaño x_k que produce una sola partícula madre de tamaño x_δ
n	1	Total de tamaños utilizados para representar la distribución de partículas y para la discretización de tamaños
n_i	1	Número total de partículas de tamaño x_{i0} en la alimentación
$n_{i\delta}$	1	Número de partículas con tamaño x_{i0} en la alimentación y llegan al tamaño x_δ al momento de fragmentarse
$n_{i\delta k}$	1	Número de partículas con tamaño x_k en el receptáculo, que provienen de partículas con tamaño x_{i0} en la alimentación, llegando tamaño x_δ en el momento de la fragmentación
p	μm^{-1}	Pendiente de la recta resultante de graficar f_{if} contra x_{i0}
r^2	1	Parámetro de correlación
t	s	Tiempo
t_{ic}	s	Tiempo en el que una partícula de tamaño x_{i0} en llegar a su tamaño crítico antes de fragmentarse
v	m/s	Velocidad de desplazamiento de las partículas
W	kg	Masa total de partículas en la alimentación
x_{20}	μm	Diámetro de la partícula más pequeña en la alimentación que se supone que puede fragmentarse
x_{i0}	μm	Diámetro de la partícula en la alimentación
x_{ic}	μm	Diámetro crítico que alcanza una partícula de tamaño x_{ic} antes de fragmentarse
x_k	μm	Diámetro de las partículas hijas producidas

x_{n0}	μm	Diámetro de la partícula más grande en la alimentación que se supone no se expande
$x_{\beta 0}$	μm	Diámetro de la partícula a partir de la cual f_{2f} es diferente de cero cuando la pendiente de la gráfica f_{if} contra x_{i0} es positiva y es diferente de uno cuando la pendiente es negativa
x_{δ}	μm	Diámetro de la partícula en el momento de la fragmentación.
$x_{\eta 0}$	μm	Diámetro de la partícula a partir de la cual f_{2f} es diferente de uno cuando la pendiente de la gráfica f_{if} contra x_{i0} es positiva y es diferente de cero cuando la pendiente es negativa

Símbolos Griegos

β_{ik}	1	Coefficiente de distribución de la masa de las partículas con tamaño x_{i0} en la alimentación a las partículas con tamaño x_k en el receptáculo
B_{ik}	1	Coefficiente de distribución acumulativo de la masa de las partículas con tamaño x_{i0} alimentadas en las partículas con tamaño x_k en el receptáculo.
Δx_{i0}	μm	Incremento en la discretización de tamaños
γ	1	Parámetro de distribución
$\lambda_{i\delta k}$	1	Fracción de partículas de tamaño x_k que provienen de la fragmentación de partículas de tamaño x_{δ} y entraron a la cámara de reacción con un tamaño x_{i0} .
σ_{ik}	1	Coefficiente de contribución de las partículas con tamaño x_{i0} en la alimentación en la masa de las partículas de tamaño x_k en el receptáculo.
ρ_i	kg/m^3	Densidad aparente de la partícula en la alimentación

$\rho_{i\delta}$	kg/m ³	Densidad aparente de la partícula de tamaño x_δ en el momento de su fragmentación y proviene de una partícula de tamaño x_{i0} en la alimentación
τ	s	Tiempo de residencia de las partículas en el reactor
ϕ_{ik}	1	Coefficiente de contribución acumulativo de las partículas con tamaño x_{i0} en la alimentación en la masa de las partículas de tamaño x_k en el receptáculo
ω^s	1	Fracción peso de la especie s por fracción de tamaño
$\omega_{i\delta}^s$	1	Fracción peso de la especie s en las partículas de tamaño x_δ que provienen de una partícula de tamaño x_{i0} en la alimentación
$\omega_{i\delta k}^s$	1	Fracción peso de la especie s en las partículas hijas de tamaño x_k que provienen de la fragmentación de una partícula x_δ que entraron a la cámara de reacción con un tamaño x_{i0}
Ω^s	1	Fracción peso de la especie s en la población de partículas

Subíndices

0	Referido a condiciones de las partículas alimentadas
1	Fracción de tamaño más pequeña de partícula en la población de partículas
2	Segunda fracción de tamaño más pequeña en la población de partículas
3	Referido a factor geométrico
a	Referido a la alimentación
c	Referido a condiciones críticas de la partícula
f	Fragmentación
i	i -ésima Fracción de tamaño presente en la alimentación
k	k -ésima fracción de tamaño producido

l	Referencia al tamaño inicial de partículas que no sufren fragmentación sólo expansión
n	Fracción de tamaño más grande en la población de partículas
r	Referente al receptáculo
δ	δ -ésima fracción de tamaño al momento de la fragmentación
Superíndices	
*	Referencia a valores de los parámetros ajustables para la determinación de la pendiente de la recta resultante de graficar f_{if} contra x_{i0}
0	Referencia a una partícula individual
$a, b, c, a_1, b_1, c_1, a_2, b_2, c_2$	Parámetros reportados por los autores a las diferentes condiciones experimentales probadas en el horno a nivel laboratorio
s	Referencia a las especies químicas de la partícula

CAPÍTULO 1

INTRODUCCIÓN Y OBJETIVOS

El presente trabajo se ubica en el contexto de la producción pirometalúrgica de cobre a nivel industrial (Biswas et al. 1993). Dicho proceso se inicia con la exploración geológica para identificar su presencia y determinar su porcentaje o ley de este mineral además de su forma de explotarlo. El tamaño del material es reducido por medio de la trituración y molienda hasta obtener un tamaño máximo de 180 μm , con el cual se forma una pulpa con agua y reactivos específicos que se lleva a la flotación. En las celdas de flotación, se genera espuma cuyas burbujas arrastran el cobre y otros minerales sulfurados contenidos en la pulpa. Luego de varios ciclos, se recolecta y se seca esta espuma para obtener el concentrado de cobre que continúa su purificación.

Para separar el cobre de otros minerales e impurezas, el concentrado seco se trata a grandes temperaturas en hornos especiales. A este proceso se le conoce como fundición. El producto principal de este proceso se le denomina mata de cobre, la cual está compuesta principalmente de sulfuros de cobre y hierro en estado fundido. La mata es a su vez procesada a altas temperaturas en presencia de oxígeno para obtener cobre blíster con una pureza de 98%, y una escoria donde se concentra la mayor parte del hierro. El cobre blíster es entonces enviado a la etapa de refinación electrolítica, en la cual se obtiene cobre con una pureza superior al 99%.

El presente trabajo se relaciona directamente con el proceso de conversión instantánea de matas sólidas de cobre. Dicho proceso es una alternativa novedosa a la conversión tradicional de mata de cobre, la cual utiliza convertidores Peirce-Smith y mata en estado fundido. El nuevo proceso utiliza mata de cobre en estado sólido y un reactor similar al de fusión instantánea de concentrados. Las ventajas de esta nueva tecnología en relación a la

tecnología tradicional están reportadas ampliamente en la literatura (Asteljoki et al. 1985, Asteljoki et al. 1986, George et al 1995).

El proceso de conversión instantánea se muestra esquemáticamente en la Figura 1.1. Durante el proceso, partículas finamente divididas de mata de cobre son oxidadas a altas temperaturas en presencia de una corriente de aire enriquecida con oxígeno. Los productos del proceso incluyen cobre blister y escoria en forma fundida, así como los gases de combustión, cuyo contenido es principalmente SO_2 , N_2 y O_2 .

Durante el proceso de conversión instantánea, las partículas presentan cambios en su composición química así como en su tamaño y forma. Los cambios de tamaño incluyen la expansión y posterior fragmentación de las partículas al oxidarse en forma violenta.

La fragmentación de las partículas está relacionada con la producción de partículas finas o polvo. Estos polvos generan múltiples problemas operacionales, tales como: obstrucción de las líneas de distribución, problemas en los sistemas de transporte, corrosión, y descenso en la producción de vapor en la caldera posterior al horno. A pesar de que una parte de los polvos son recirculados al reactor, la generación de dichos polvos es indeseable por los problemas operacionales citados, así como por tener implicaciones ambientales significativas. Por lo tanto, es de interés estudiar y comprender los mecanismos que controlan la fragmentación de las partículas con miras a la futura optimización del proceso.

El esclarecimiento de tales mecanismos es un tema aún en discusión en la literatura. Varios autores (Kim and Themelis, 1986; Jokilaakso et al., 1991; Jorgensen, 1980; Suominen et al., 1991, 1994) han propuesto mecanismos cualitativos para explicar los fenómenos de cambio de tamaño observados en diversas partículas sulfurosas, durante su vuelo en la cámara de reacción durante la fusión y conversión instantánea.

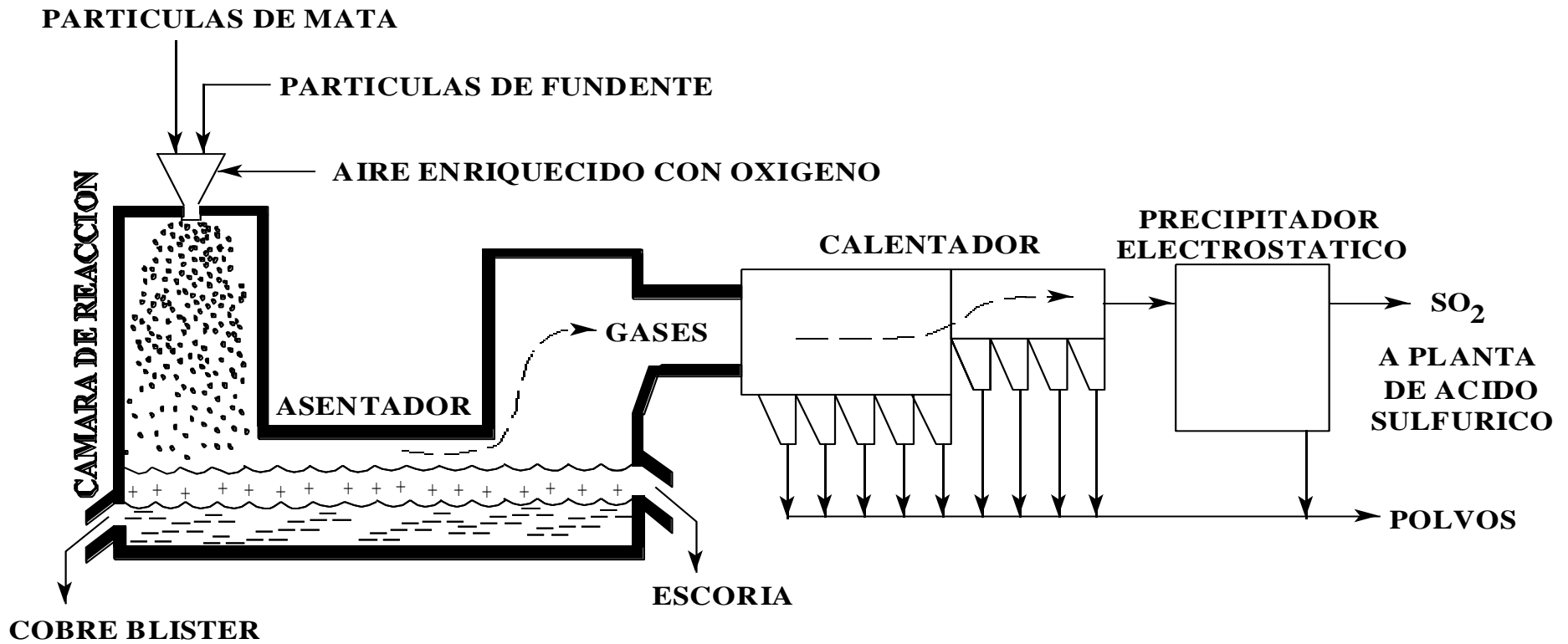


Figura 1.1. Proceso de Conversión Instantánea de Matas Sólidas de Cobre (George, 2002)

Sin embargo, es hasta fecha reciente que el primer modelo fundamental de tipo cuantitativo ha sido publicado (Perez-Tello et al., 2008). Aunque este modelo representó razonablemente los cambios en la distribución de tamaño de partícula con un tamaño inicial de 10 a 150 μm en un horno a nivel laboratorio, en él no se incluyeron las reacciones químicas heterogéneas entre las partículas y el gas.

El presente estudio pretende continuar con esta línea de investigación, mediante el desarrollo de un modelo matemático predictivo que por primera vez considere tanto los aspectos cinéticos como de fragmentación de las partículas sulfurosas. Hasta donde es del conocimiento del autor, no existen antecedentes de trabajos realizados sobre este tema en la literatura.

Objetivo General

El objetivo general de este trabajo es desarrollar un modelo matemático basado lo más posible en principios fundamentales, que represente razonablemente los cambios en tamaño y composición química de las partículas de mata de cobre durante su vuelo en la cámara de reacción de un horno de conversión instantánea a nivel laboratorio.

Objetivos Particulares

- a) Desarrollar un modelo cinético fundamental de las reacciones de oxidación de las partículas de mata en un horno de conversión instantánea.
- b) Acoplar el modelo cinético al modelo de fragmentación existente para predecir composición y tamaño de las partículas a lo largo del reactor.
- c) Verificar el modelo matemático mediante comparación con datos experimentales reportados en la literatura.
- d) Establecer la funcionalidad de los parámetros del modelo matemático con las condiciones de operación en el horno de conversión instantáneo.

e) En base a las predicciones del modelo, analizar el efecto de las condiciones de operación sobre la generación de polvo en el horno a nivel laboratorio y generar criterios de operación al respecto.

CAPÍTULO 2

REVISIÓN BIBLIOGRÁFICA

Existe una vasta literatura sobre la oxidación de partículas de sulfuros metálicos en general, particularmente en condiciones de fusión instantánea. Debido a que el proceso de conversión instantánea es de reciente creación (George, 2002; George et al., 1995) el número de publicaciones sobre este último proceso son escasas. En la Tabla 2.1 se resumen las referencias de mayor relevancia al presente trabajo. La mayoría de ellas se han enfocado a dilucidar los mecanismos de reacción de las partículas, sin embargo es notoria la escasez de trabajos relacionados con la fragmentación. Esto es probablemente debido a la dificultad para realizar estudios experimentales minuciosos a las condiciones en que se lleva a cabo el proceso, lo cual involucra temperaturas del orden de 1200 °C y régimen turbulento.

Kim y Themelis (1986) reportaron el primer modelo cualitativo sobre la oxidación de minerales sulfurados. Los autores sugirieron la existencia de dos mecanismos responsables para la fragmentación: la explosión de las partículas debido a la presión interna generada por la formación de gases al interior de la partícula y la formación de cenósferas.

Jiao et al. (1987) reportaron el primer modelo cinético de oxidación de partículas de mata de cobre, basado en el modelo de núcleo decreciente. Sin embargo, los autores no presentaron verificación con datos experimentales. Suominen et al. (1991) realizaron un estudio experimental con varios tipos de matas de cobre y presentaron sus características globales. Los autores encontraron que a mayor contenido de Cu en las partículas éstas presentaban mayor fragmentación.

Jokilaakso et al. (1994) realizaron un estudio experimental en un horno laminar a nivel laboratorio con partículas de calcopirita. A partir de sus observaciones, los autores propusieron un modelo de fragmentación que se presenta en la Figura 2.1 el cual está

Tabla 2.1 Publicaciones relevantes sobre la oxidación de partículas de mata de cobre (1986-2008)

Características del Estudio	Materia Prima	Contribución principal / Observaciones	Referencias
Experimentación en planta piloto	Calcopirita	Primer modelo cualitativo de fragmentación. Sugiere la existencia de dos mecanismos de fragmentación.	(Kim and Themelis, 1986)
Simulación computacional de un horno industrial	Mata de cobre	Desarrollo del primer modelo cinético de oxidación. No presenta verificación con datos experimentales	(Jiao et al., 1987)
Experimentación en horno de flujo laminar	Tres grados de mata de cobre	Las matas con mayor contenido de cobre sufren mayor fragmentación en condiciones altamente oxidantes	(Suominen et al., 1991, 1994)
Experimentación en horno de flujo laminar.	Concentrados de Cobre con Sb	Modificación del modelo de Kim y Themelis. Se sugiere la formación de burbujas intrapartícula	(Jokilaakso et al., 1994)
Experimentación en planta piloto	Concentrado de Cu ₂ Sa	Desarrollo de un modelo matemático de fragmentación. Pérdidas de cobre debido a fragmentación de partículas. Grado de fragmentación dependiente del tamaño inicial de alimentación.	(Shook et al., 1995)
Experimentación en horno de conversión instantánea nivel laboratorio.	Partículas de mata de cobre.	Extensa revisión de literatura sobre fragmentación de partículas a altas temperaturas.	(Riihilahti, 1997)
Experimentación de calorimetría diferencial de barrido y termogravimetría	Partículas de mata sólida de 58% y 72% Cu	Se estudió la cinética de oxidación. y se propuso un mecanismo de reacción para la oxidación de las partículas.	(Perez-Tello et al., 1999)
Experimentación en horno de conversión instantánea a nivel laboratorio.	Partículas de mata sólida de 58% y 72% Cu	Se analizaron la composición química, distribución de tamaño, morfología y mineralogía de las partículas a lo largo de su trayectoria en el horno	(Perez-Tello et al., 2001a)
Horno de conversión instantánea con flujo laminar a nivel laboratorio.	Partículas de Matas sólidas de 58% y 72% en peso de cobre.	Se propone un modelo matemático tridimensional para representar el proceso de conversión instantánea. El modelo se valida con datos experimentales..	(Perez-Tello et al., 2001b)
Correlación matemática de los datos experimentales en horno a nivel laboratorio	Partículas de mata de cobre.	Se desarrollaron correlaciones matemáticas para representar las distribuciones de tamaño de las partículas antes y después de la oxidación en un horno a nivel laboratorio.	(Perez-Tello et al., 2002)
Modelación matemática de los cambios de tamaño en el horno a nivel laboratorio	Partículas de mata de cobre.	Primer modelo matemático predictivo de la expansión y fragmentación de partículas sulfurosas en condiciones de conversión instantánea.	(Perez-Tello et al., 2008)

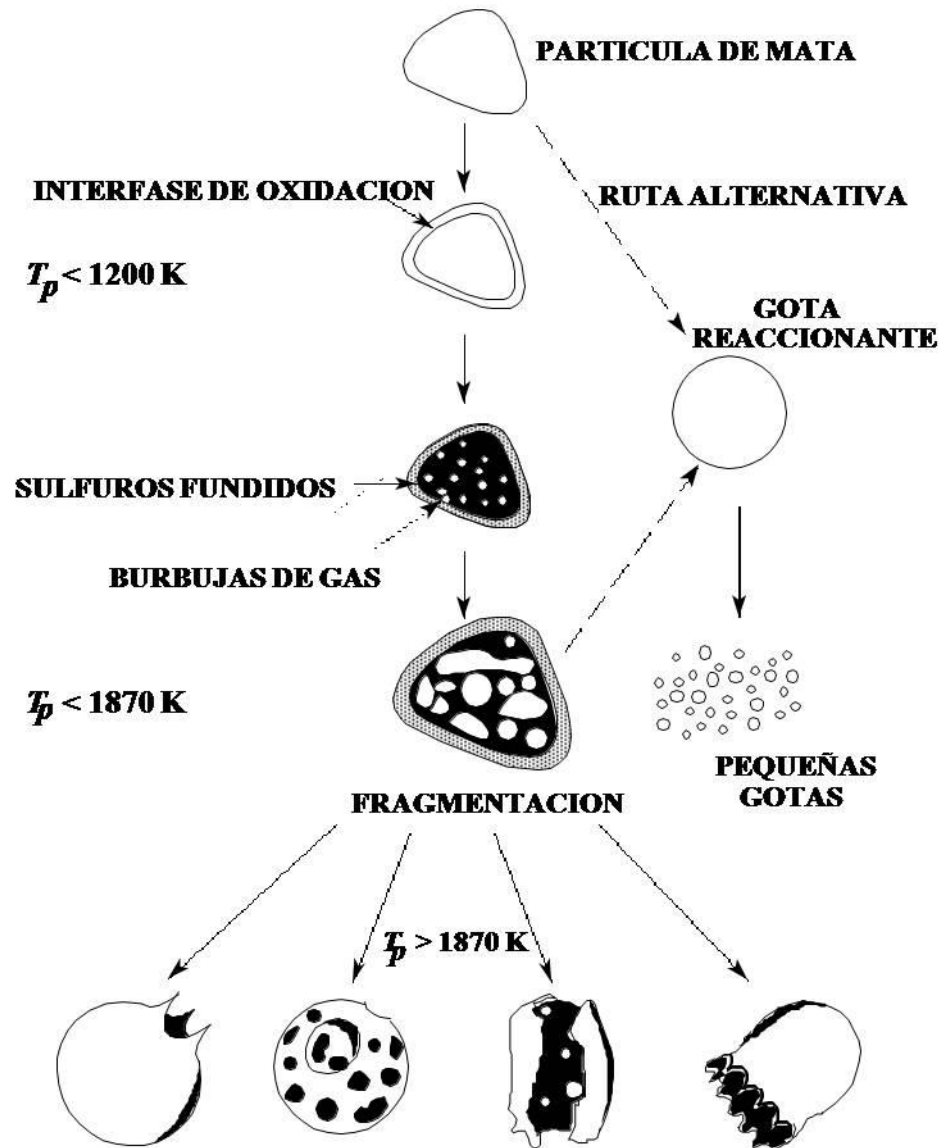


Figura 2.1 Modelo Cualitativo de la Fragmentación de Partículas Sulfurosas a Altas Temperaturas. Adaptado de Kim y Themelis (1986) y Jokilaakso et al. (1995).

basado en el originalmente propuesto por Kim & Themelis (1986). Hasta la fecha, el modelo de la Figura 2.1 es el más ampliamente aceptado para representar la trayectoria de reacción de partículas sulfurosas individuales en la cámara de reacción de los hornos de fusión y conversión instantánea.

A finales de los años noventa se realizó un extenso estudio experimental sobre la oxidación de partículas de matas de cobre en el horno a nivel laboratorio de la Universidad de Utah. Por ser relevante para el presente trabajo, se describe a continuación. La Figura 2.2 muestra el sistema experimental. Dos matas de Cu con contenidos de 58% y 72%, respectivamente, y diferentes tamaño de partícula en la alimentación (Riihilahti et al., 1997; Riihilahti et al., 1998; Perez-Tello et al., 2001a) fueron oxidadas en un horno de conversión instantáneo. Las partículas reaccionantes fueron muestreadas a lo largo de la línea de centro de la cámara de reacción, así como en el fondo del reactor (receptáculo). Las partículas fueron analizadas en cuanto a su distribución de tamaño, composición química, morfología y mineralogía.

En base a los anteriores resultados, Pérez-Tello et al. (2001b) desarrollaron un modelo matemático de los fenómenos relevantes presentes en el horno de conversión instantáneo. El modelo incluye el transporte de momentum, calor y masa, transporte de calor por radiación, así como las reacciones de oxidación heterogéneas de las partículas en condiciones turbulentas. El modelo presentó una concordancia razonable con los datos experimentales en términos de la composición química de las partículas, sin embargo no se incluyó la fragmentación, la cual fue considerable en los experimentos.

En un estudio posterior, Perez-Tello et al. (2002) desarrollaron correlaciones matemáticas para representar las distribuciones de tamaño de las partículas antes y después de la oxidación en el horno a nivel laboratorio. A pesar de que la concordancia de las correlaciones con los datos experimentales fue satisfactoria, es claro que dichas correlaciones no pueden utilizarse para explicar los fenómenos de fragmentación.

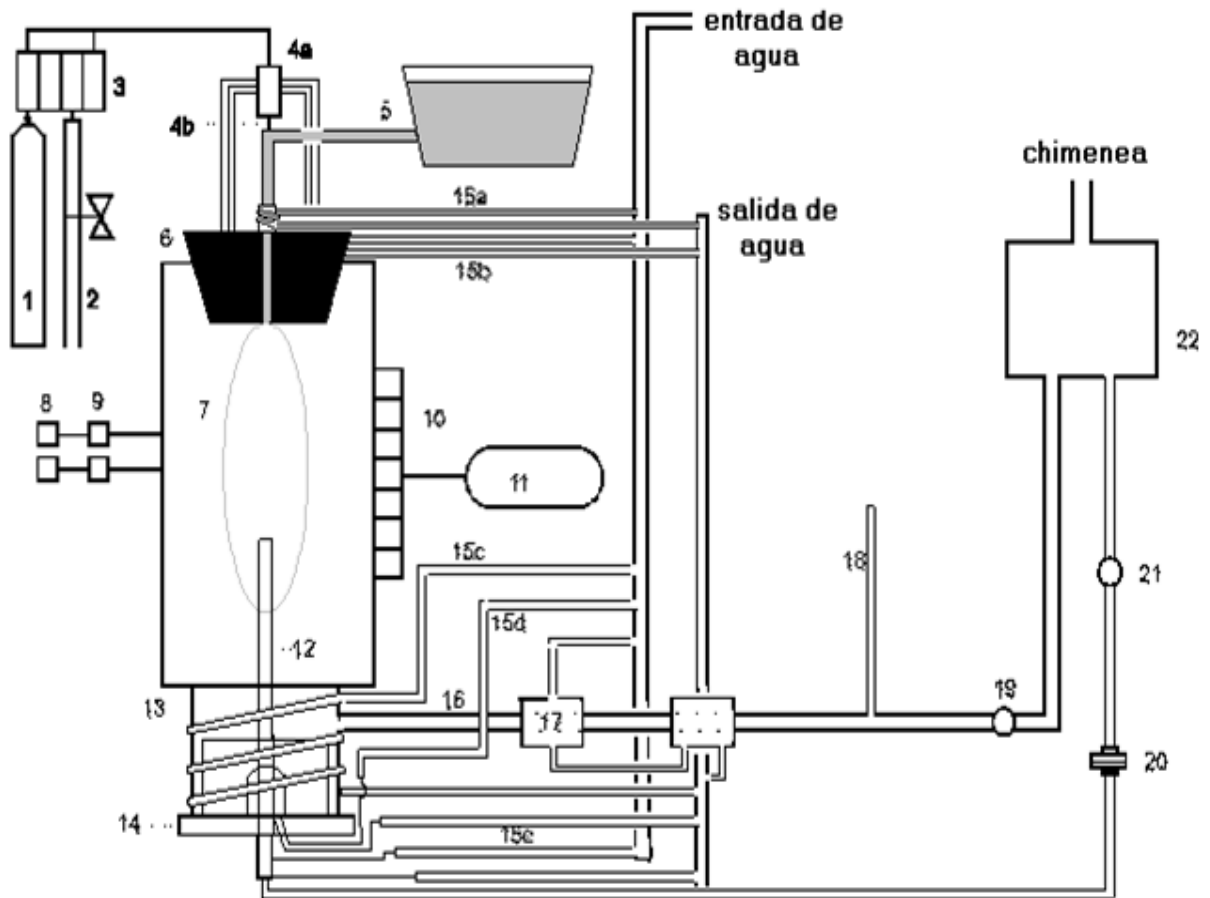


Figura 2.2 Convertidor Instantáneo de la Universidad de Utah

(1) Tanque de oxígeno, (2) Aire Comprimido, (3) Medidores de flujo de gas, (4a) Distribuidor de gas, (4b) Gas de proceso, (5) Tornillo alimentador, (6) quemador, (7) Cámara de reacción, (8) Interruptores, (9) Controladores de temperatura, (10) Termopares, (11) Computadora, (12) Sonda de muestreo, (13) Sección de enfriamiento de gas y de la partícula, (14) Receptáculo, (15a)-(15e) Agua de enfriamiento, (16) Línea de gas de salida, (17) Intercambiador de calor, (18) Manómetro, (19) Válvula de gas, (20) Filtro para muestreo de partículas, (21) Bomba de vacío, (22) Absorbedor.

Recientemente, Pérez-Tello et al. (2008) reportaron el primer modelo matemático predictivo para la expansión y fragmentación de las partículas de mata de cobre. El modelo supone que la composición y masa de las partículas permanece constante hasta antes de la fragmentación. Las predicciones de este modelo presentaron una buena concordancia con los datos experimentales. No obstante, la generación de partículas finas (polvos) se predijo con menor precisión. Los autores atribuyeron esta discrepancia al posible efecto de las reacciones químicas, ya que se sabe que los polvos están constituidos principalmente por óxidos de cobre (Suominen et al., 1994; Perez-Tello et al., 2001a).

La revisión de literatura indica que los mecanismos de fragmentación de partículas sulfurosas son aún inciertos, y que es necesario avanzar en su comprensión cuantitativa. El presente trabajo pretende contribuir en esta dirección mediante el desarrollo de un modelo matemático que incluya tanto los aspectos cinéticos como los cambios de tamaño durante el vuelo de las partículas en la cámara de reacción.

CAPÍTULO 3

METODOLOGÍA

La Figura 3.1 muestra la estrategia general de este trabajo. En base a las hipótesis del modelo cinético y de fragmentación, se desarrollaron las ecuaciones correspondientes separadamente y éstas se codificaron en lenguaje computacional Fortran 90. Una vez verificada la programación de ambos códigos de manera individual, se procedió a su acoplamiento, integrándose así el modelo computacional completo.

El modelo fue entonces verificado comparando sus predicciones con los datos experimentales a nivel laboratorio (Perez-Tello et al., 2001a) en términos de distribución de tamaño de partícula y composición química. Cuando la comparación no fue satisfactoria, se debió replantear las suposiciones del modelo y reasignar valores numéricos a los parámetros del mismo. Este proceso se realizó cuantas veces fue necesario hasta obtener una concordancia razonable de las predicciones del modelo con los datos experimentales.

A partir de este punto, se procedió a la interpretación de los resultados del modelo computacional con el fin de obtener información acerca del comportamiento de las partículas en el horno de conversión instantánea. A continuación se detallan las etapas de la metodología de la Figura 3.1.

3.1 Formulación del Modelo Cinético

El objetivo de esta sección es desarrollar un modelo cinético fundamental capaz de describir con razonable grado de exactitud los cambios en la composición química de partículas individuales de mata de cobre desde su entrada al reactor de conversión instantánea y hasta antes de su fragmentación.

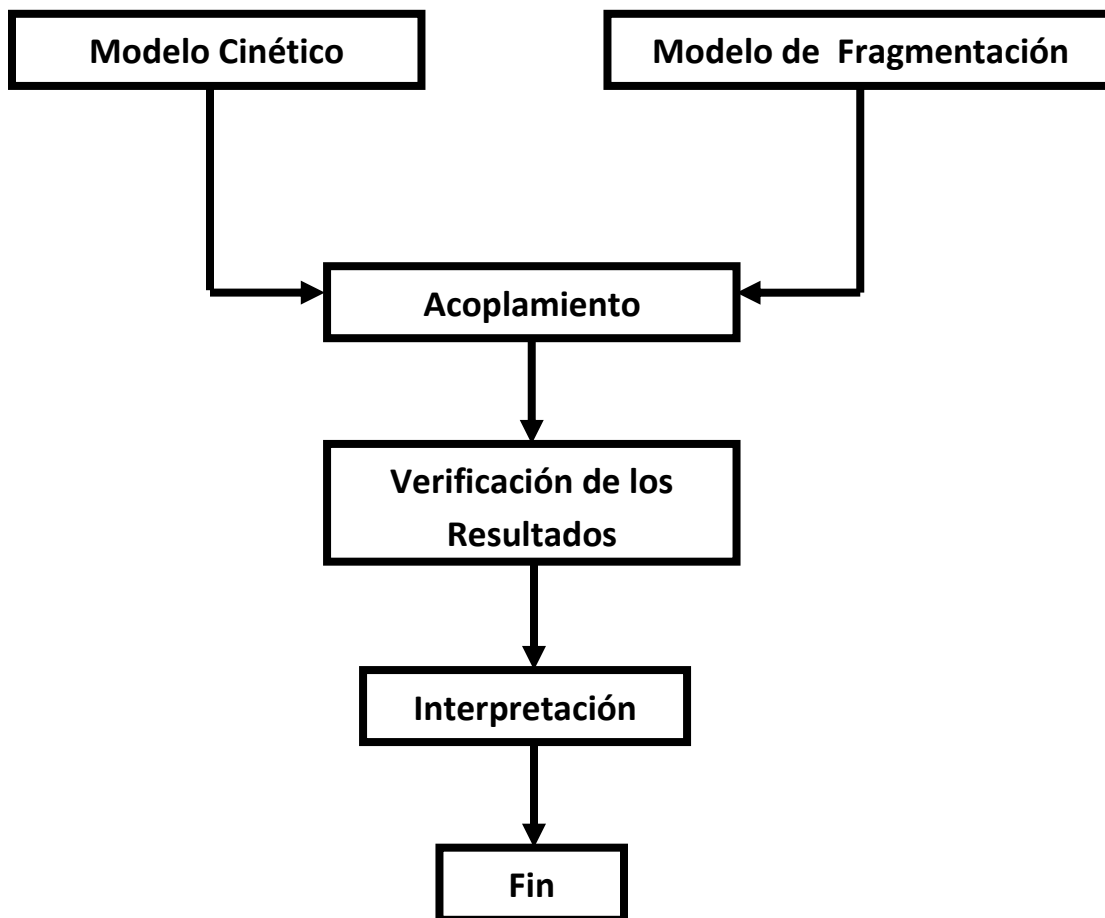
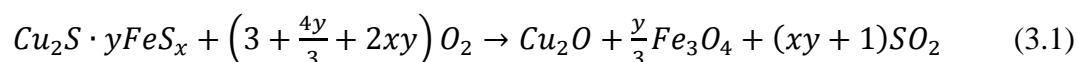


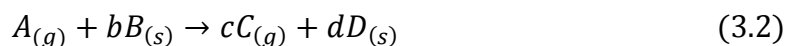
Figura 3.1 Estrategia General del Trabajo

La Figura 3.2 representa el mecanismo de reacción propuesto para la oxidación de las partículas. Inicialmente, la reacción ocurre en la superficie de la partícula, la cual es no porosa. Cuando esto ocurre, empezará a formarse la capa porosa de óxidos, de Fe_3O_4 y Cu_2O . Conforme avanza la reacción, el tamaño de la partícula aumenta, mientras que el núcleo de mata sin reaccionar disminuye progresivamente.

En este trabajo, las reacciones de oxidación son representadas por la siguiente reacción química heterogénea:



En base a observaciones experimentales de partículas oxidadas (Pérez-Tello 2001a) se plantea un modelo de núcleo decreciente, el cual se muestra esquemáticamente en la Figura 3.3. En este modelo, la mata sólida es no porosa, mientras la capa de óxidos es porosa. Para propósitos de simplicidad en el desarrollo del modelo cinético, la reacción de oxidación anterior se representa mediante la siguiente reacción química general:



donde A, B, C y D representan respectivamente, el oxígeno gaseoso (O_2), la mata sólida ($Cu_2S \cdot yFeS_x$), la capa de óxido ($Cu_2O + Fe_3O_4$) y el producto gaseoso (SO_2). Los símbolos b, c y d son los coeficientes estequiométricos de la reacción por mol de (O_2) consumido:

$$b = \frac{1}{\left[\frac{3}{2} + y\left(x + \frac{2}{3}\right)\right]} \quad (3.3)$$

$$c = \frac{xy + 1}{\left[\frac{3}{2} + y\left(x + \frac{2}{3}\right)\right]} \quad (3.4)$$

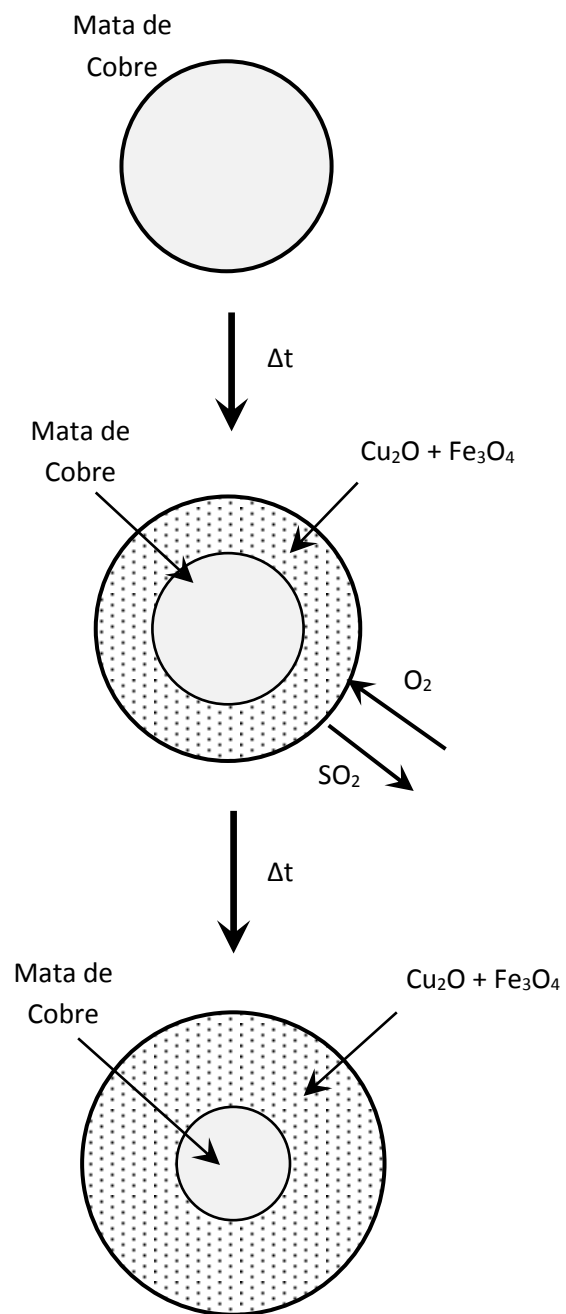


Figura 3.2 Modelo Propuesto para la Oxidación de Partículas de Mata de Cobre en Condiciones de Conversión Instantánea.

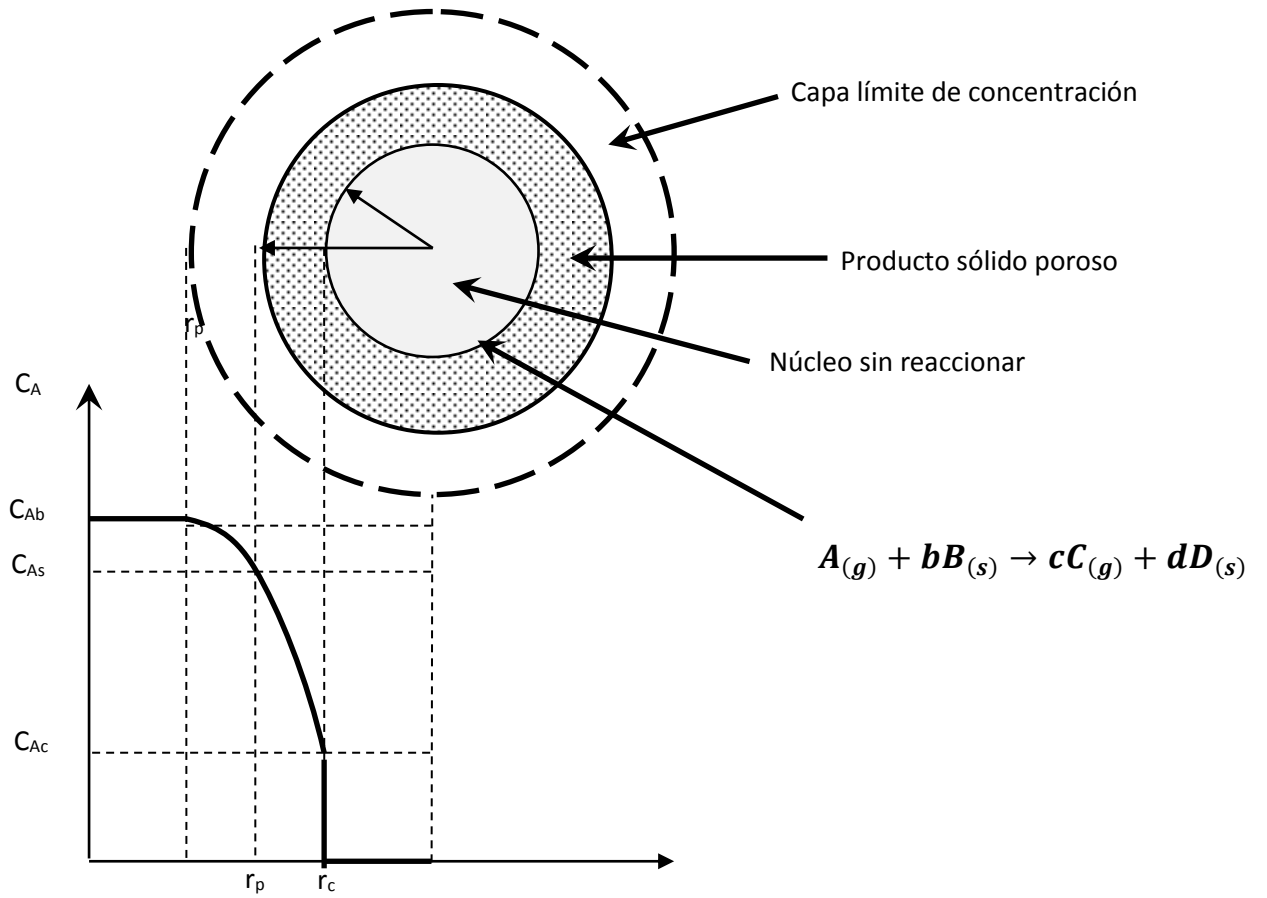


Figura 3.3 Modelo de Núcleo Decreciente para la Oxidación de Partículas de Mata de Cobre en Condiciones de Conversión Instantánea

$$d = \frac{1}{\left[\frac{3}{2} + y \left(x + \frac{2}{3}\right)\right]} \quad (3.5)$$

De acuerdo a la Figura 3.2, la oxidación de las partículas involucra los siguientes pasos: (1) El transporte del oxígeno gaseoso desde el seno del gas hacia la superficie de la partícula, (2) La difusión del oxígeno a través de la capa de óxidos, y (3) la reacción química de oxidación en la interfase mata-óxido. Adicionalmente se hacen las siguientes suposiciones:

- Régimen pseudoestacionario
- Temperatura constante
- Partículas esféricas
- La partícula se expande a una rapidez constante conforme avanza la reacción
- La reacción es controlada por la rapidez de transferencia de masa externa y la difusión del oxígeno en la capa de óxidos

En base a las anteriores suposiciones, la ecuación de continuidad para el oxígeno gaseoso en la capa de óxidos en condiciones de régimen estacionario resulta en:

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dC_A}{dr} \right) = 0 \quad (3.6)$$

Con:

$$CF1: \quad r = r_c \quad C_A = C_{Aeq}$$

$$CF2: \quad r = r_p \quad -D_{Aef} \frac{dC_A}{dr} = k_m (C_A - C_{Ab})$$

La condición frontera 1 expresa que en la superficie del núcleo sin reaccionar, la concentración de oxígeno es la del equilibrio. Debido a la alta temperatura a la cual se

lleva a cabo la reacción, se supuso que $C_{Aeq} = 0$; es decir, el oxígeno que llega a la superficie se consume instantáneamente.

La segunda condición frontera expresa que el oxígeno que llega desde el seno del gas a la superficie externa de la partícula, se transporta enteramente por difusión a través del producto poroso. La solución analítica de la Ecuación 3.6 sujeto a las condiciones frontera anteriores se detalla en el apéndice A. A partir de dicha solución, se obtiene la rapidez de consumo del O_2 en la interfase mata-óxido:

$$N_A|_{r_c} = \frac{r_p^2(C_{Ab} - C_{Aeq})}{r_c^2 \left[\frac{1}{k_m} + \frac{r_p}{r_c} \frac{(r_p - r_c)}{D_{Aef}} \right]} \quad (3.7)$$

De acuerdo a la estequiometría de la reacción (Ecuación 3.2) por cada mol de O_2 consumido en la interfase mata-óxido se consumen b moles de mata. Matemáticamente esto se expresa como:

$$N_A|_{r_c} = -\frac{\rho_B}{b} \frac{dr_c}{dt} \quad (3.8)$$

Sustituyendo la Ecuación 3.7 en la 3.8 y reorganizando se obtiene:

$$\frac{dr_c}{dt} = -\frac{b}{\rho_B} \frac{r_p^2(C_{Ab} - C_{Aeq})}{r_c^2 \left[\frac{1}{k_m} + \frac{r_p}{r_c} \frac{(r_p - r_c)}{D_{Aef}} \right]} \quad (3.9)$$

La solución de la Ecuación 3.9 proporciona el tamaño del núcleo decreciente de la partícula como función del tiempo de reacción. A partir de este valor, es posible calcular la composición instantánea de la partícula tomando en cuenta la estequiometría de la

reacción. Se hace notar que la solución de la Ecuación 3.9 requiere de integración numérica ya que las propiedades r_p , k_m , D_{Aef} son a su vez función del tiempo.

En el presente modelo, el radio externo de la partícula varía linealmente con el tiempo, con un tiempo de residencia máximo de 1 segundo, de acuerdo a la siguiente expresión:

$$r_p = r_i + ht \quad (3.10)$$

El coeficiente de transferencia de masa externo se calcula a partir de la siguiente correlación, (Bird et al., 2001):

$$Sh = 2 + 0.6Re_p^{1/2}Sc^{1/3} \quad (3.11)$$

donde:

$$Re_p = \frac{2r_p \langle U_g \rangle \rho}{\mu} \quad (3.12)$$

y:

$$Sc = \frac{\mu}{\rho D_{AB}} \quad (3.13)$$

A partir del valor de Sh obtenido mediante la Ecuación 3.11, el valor de k_m se obtiene por:

$$k_m = Sh \frac{D_{AB}}{d_p} \quad (3.14)$$

Asimismo, la difusividad efectiva del oxígeno en la capa de óxidos se calcula mediante:

$$D_{Aef} = D_{AB} \frac{\varepsilon}{\tau} \quad (3.15)$$

donde ε y τ son, respectivamente, la porosidad y tortuosidad de la capa de óxidos, y D_{AB} es la difusividad molecular del O_2 en el seno de la mezcla gaseosa. Esta última se estima a partir de la relación de la ecuación de Chapman-Enskog, (Bird et al. 2001):

$$D_{AB} = \frac{0.001858T^{\frac{3}{2}} \left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right)^{\frac{1}{2}}}{P\sigma_{AB}^2\Omega_D} \quad (3.16)$$

En este trabajo, el valor de la tortuosidad se fijó en $\tau = 200$. Dicho valor se especificó en base a la concordancia del modelo cinético con los datos experimentales.

La integración numérica de la Ecuación 3.9 simultáneamente con las Ecuaciones 3.10 a 3.15 se realizó mediante el método de Euler. Este método se seleccionó por su simplicidad matemática y por el hecho de que la Ecuación 3.9 es altamente no lineal, con cuatro términos en el lado derecho dependientes del tiempo (D_{AB}, k_m, r_p, r_c). Esto dificulta el uso de métodos numéricos de integración más rigurosos. En el presente trabajo se estableció un paso de integración $\Delta t = 10^{-4}$ s, con lo cual se garantizó la exactitud del método y la independencia de los resultados con el paso de integración.

En el método de Euler, la derivada total en la Ecuación 3.9 se aproxima mediante el cociente de los cambios discretos en la variable dependiente r_c con el cambio en el valor de la variable independiente t . El lado derecho de la ecuación 3.9 se evalúa al nivel de tiempo anterior m . El valor de r_c al tiempo nuevo ($m+1$) se calcula entonces mediante:

$$r_c^{m+1} = r_c^m + \left(\frac{dr_c}{dt} \right)^m \Delta t \quad (3.17)$$

donde el superíndice m indica el nivel de tiempo anterior, $m + 1$ el nivel de tiempo actual y Δt es el paso de integración.

Una vez obtenido el valor de r_c al nivel de tiempo $m + 1$, el volumen del núcleo al tiempo actual se calcula a través de:

$$V_c^{m+1} = \frac{4}{3}\pi(r_c^{m+1})^3 \quad (3.18)$$

Puesto que el volumen del núcleo está constituido por la mata, y ésta a su vez consiste de y moles de Cu_2S por cada mol de FeS_x se tiene que:

$$V_c^{m+1} = \frac{n_{Cu_2S}^{m+1}}{\hat{\rho}_{Cu_2S}} + \frac{yn_{Cu_2S}^{m+1}}{\hat{\rho}_{FeS_x}} \quad (3.19)$$

Despejando $n_{Cu_2S}^{m+1}$ de la ecuación anterior se obtiene:

$$n_{Cu_2S}^{m+1} = \frac{V_c^{m+1}}{\left(\frac{1}{\hat{\rho}_{Cu_2S}} + \frac{y}{\hat{\rho}_{FeS_x}}\right)} \quad (3.20)$$

Por estequiometria de la reacción (Ecuación 3.2), es posible calcular la cantidad de las otras especies en la partícula:

$$n_{FeS_x}^{m+1} = yn_{Cu_2S}^{m+1} \quad (3.21)$$

$$n_{Cu_2O}^{m+1} = n_{Cu_2S}^0 - n_{Cu_2S}^{m+1} \quad (3.22)$$

$$n_{Fe_3O_4}^{m+1} = \frac{y}{3} [n_{Cu_2S}^0 - n_{Cu_2S}^{m+1}] \quad (3.23)$$

El volumen de la capa de óxidos se obtiene de la siguiente manera:

$$V_{capa}^{m+1} = V_p^{m+1} - V_c^{m+1} \quad (3.24)$$

La capa de óxidos incluye huecos y óxidos de tal manera que:

$$V_{capa}^{m+1} = V_{huecos}^{m+1} + V_{óxidos}^{m+1} \quad (3.25)$$

El volumen ocupado por los óxidos se puede calcular a partir de su cantidad en la partícula, es decir:

$$V_{óxidos}^{m+1} = \frac{n_{Cu_2O}^{m+1}}{\hat{\rho}_{Cu_2O}} + \frac{n_{Fe_3O_4}^{m+1}}{\hat{\rho}_{Fe_3O_4}} \quad (3.26)$$

Por lo tanto, el volumen de los huecos en la capa de óxidos será:

$$V_{huecos}^{m+1} = V_p^{m+1} - V_c^{m+1} - V_{óxidos}^{m+1} \quad (3.27)$$

Sustituyendo la Ecuación 3.26 en la 3.27 se obtiene:

$$V_{huecos}^{m+1} = V_p^{m+1} - V_c^{m+1} - \frac{n_{Cu_2O}^{m+1}}{\hat{\rho}_{Cu_2O}} - \frac{n_{Fe_3O_4}^{m+1}}{\hat{\rho}_{Fe_3O_4}} \quad (3.28)$$

Por tanto, la porosidad actual puede calcularse mediante la siguiente relación:

$$\epsilon^{m+1} = \frac{V_{huecos}^{m+1}}{V_{capa}^{m+1}} \quad (3.29)$$

Sustituyendo la Ecuación 3.28 y 3.24 en 3.29 se obtiene:

$$\epsilon^{m+1} = \frac{V_p^{m+1} - V_c^{m+1} - \frac{n_{Cu_2O}^{m+1}}{\hat{p}_{Cu_2O}} - \frac{n_{Fe_3O_4}^{m+1}}{\hat{p}_{Fe_3O_4}}}{V_p^{m+1} - V_c^{m+1}} \quad (3.30)$$

A partir de los valores actuales de r_c, r_p, ϵ , los valores de difusividad efectiva del oxígeno gaseoso en la capa de óxidos D_{Aef} y el coeficiente de transferencia de masa k_m son actualizados para el siguiente paso de integración con las ecuaciones 3.14 y 3.15. Este procedimiento se realiza sucesivamente hasta alcanzar el tiempo de residencia de la partícula en el reactor.

3.2 Formulación del Modelo de Fragmentación

El presente modelo de fragmentación se basa en un enfoque Lagrangiano; es decir, se sigue la historia de partículas individuales desde su entrada a la cámara de reacción hasta el momento en que alcanzan el receptáculo. El modelo se representa esquemáticamente en la Figura 3.4 y parte de las siguientes suposiciones:

- a) Todas las partículas son esféricas
- b) Las partículas de mata inicial son no porosas
- c) La velocidad de las partículas es constante durante el vuelo

Otras suposiciones propias del modelo de fragmentación se detallan más adelante.

La suposición a) es común en los modelos de balance de población y se utiliza aquí por simplicidad matemática. La suposición b) está basada en observaciones de microscopía electrónica de barrido reportados por Asteljoki et al. (1991) y Pérez-Tello et al. (2001a).

En relación a la suposición c) se reconoce que las partículas en un horno de conversión industrial presentan velocidades diferentes entre sí dependiendo de su tamaño, ubicación, tiempo de residencia y condiciones hidrodinámicas en el reactor.

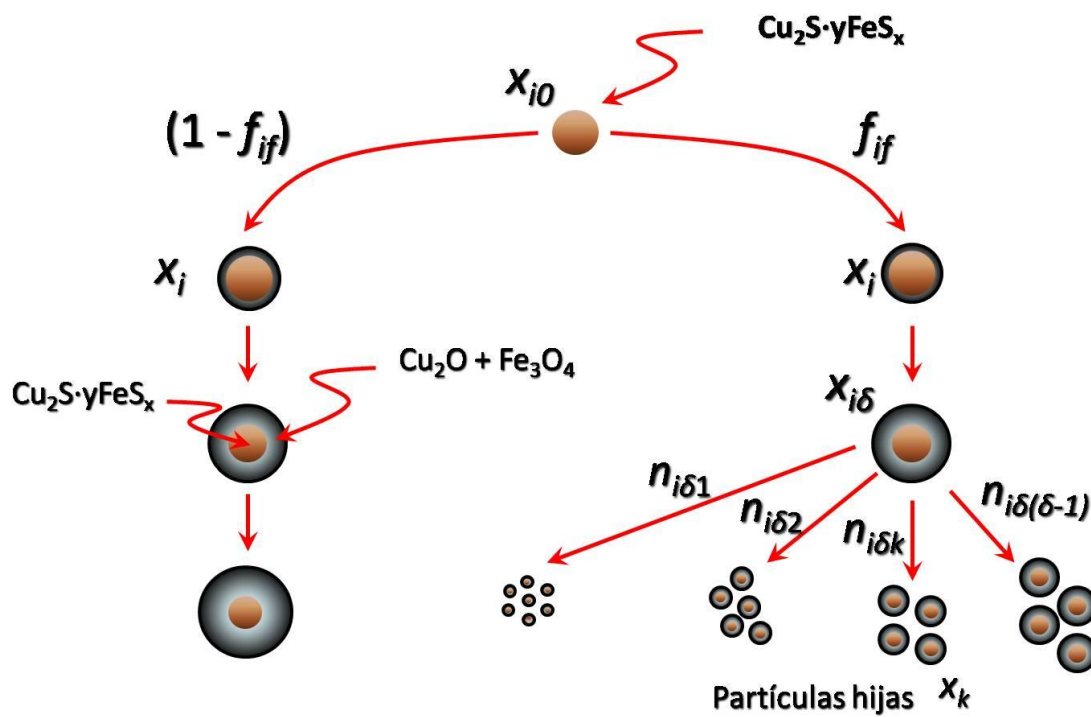


Figura 3.4 Diagrama Esquemático del Modelo de Fragmentación

En el horno a nivel laboratorio, los campos de velocidad obtenidos mediante simulación matemática en tres dimensiones (Perez-Tello et al. 2001b) indicaron que, a excepción de la región cercana al quemador del horno, el resto de la cámara se comportó como un reactor tipo pistón. Consecuentemente, la suposición c) no está muy alejada de las condiciones en las cuales se colectaron los datos experimentales.

En relación a la Figura 3.4, al entrar a la cámara de reacción una partícula de tamaño inicial x_{i0} se asume que empieza a expandirse a una rapidez constante g_i . Al cabo de un tiempo t , el diámetro de la partícula será:

$$x_i = x_{i0} + g_i t \quad i = 1, n \quad (3.31)$$

donde x_i es el tamaño de la partícula al tiempo t , en μm , t es el tiempo en s , y g_i está dada en $\mu\text{m}/s$. En la Ecuación 3.31, el subíndice i indica la i -ésima fracción de tamaño presente en la alimentación al horno. Puesto que la alimentación al horno consiste de una distribución de tamaños, el subíndice i se utiliza para seguir la trayectoria de cada fracción de tamaño durante su paso por el reactor. La variable n indica el total de tamaños utilizados para representar la distribución de partículas.

Durante el vuelo, la partícula se expande hasta que alcanza un tamaño crítico x_{ic} , donde:

$$x_{ic} = f_{ic}(x_{i0}) \quad i = 1, n \quad (3.32)$$

Para representar la posibilidad de que partículas de un mismo tamaño inicial x_{i0} tengan diferentes trayectorias dentro del horno, se asumió que del total de partículas de tamaño x_{i0} , solamente una fracción de ellas f_{if} logra fragmentarse. Por consiguiente, la fracción de partículas remanente $(1-f_{if})$ continúa expandiéndose en la cámara de reacción hasta alcanzar el receptáculo.

Las partículas dentro de la fracción f_{if} empiezan a fragmentarse cuando alcanzan el tamaño crítico x_{ic} . De acuerdo a la Ecuación 3.31, el tiempo al cual estas partículas alcanzan el diámetro crítico está dado por:

$$t_{ic} = \frac{x_{ic} - x_{i0}}{g_i} \quad i = 1, n \quad (3.33)$$

La fragmentación de estas partículas se asume que ocurre progresivamente a partir del tiempo crítico t_{ic} ; es decir:

$$f_i = f_i(t - t_{ic}) \quad i = 1, n \quad (3.34)$$

donde f_i es la fracción de partículas del tamaño inicial x_{i0} que se han fragmentado hasta el tiempo t .

Al ocurrir la fragmentación, se supone que la partícula madre de tamaño x_δ la cual proviene de la expansión del tamaño inicial x_{i0} produce $n_{i\delta k}^0$ partículas hijas de cada tamaño x_k inferior a x_δ . Si $n_{i\delta}^0$ es el número total de partículas hijas proveniente de dicha partícula madre, entonces $n_{i\delta}^0$ será:

$$n_{i\delta}^0 = \sum_{k=1}^{\delta-1} n_{i\delta k}^0 \quad i = 1, n \quad \delta = 2, n \quad (3.35)$$

Se define a $\lambda_{i\delta k}$ como la fracción de estas partículas que corresponden al tamaño x_k ; es decir:

$$\lambda_{i\delta k} = \frac{n_{i\delta k}^0}{n_{i\delta}^0} \quad i = 1, n \quad \delta = 2, n \quad k = 1, \delta - 1 \quad (3.36)$$

De la anterior definición se tiene que:

$$\sum_{k=1}^{\delta-1} \lambda_{i\delta k} = 1 \quad i = 1, n \quad \delta = 2, n \quad (3.37)$$

Al fragmentarse, la masa de la partícula madre se distribuye entre el total de las partículas hijas; es decir:

$$\rho_{i\delta} C_{\delta 3} x_{\delta}^3 = \sum_{k=1}^{\delta-1} C_{k 3} n_{i\delta k}^0 \rho_{i\delta k} x_k^3 \quad i = 1, n \quad \delta = 2, n \quad (3.38)$$

donde $C_{\delta 3}$ y $C_{k 3}$ son los factores geométricos de las partículas madre e hijas, respectivamente; $\rho_{i\delta}$ es la densidad aparente de la partícula madre de tamaño x_{δ} proveniente del tamaño inicial x_{i0} , y $\rho_{i\delta k}$ es la densidad aparente de las partículas hijas del tamaño x_k . En el presente modelo se supone que la densidad aparente de las partículas hijas es igual a la de la partícula madre; por tanto: $\rho_{i\delta} = \rho_{i\delta k}$. Adicionalmente se supone que la geometría esférica de las partículas se mantiene después de la fragmentación, por lo que: $C_{\delta 3} = C_{\delta k 3} = \pi/6$ y la Ecuación 3.38 se reduce a:

$$x_{\delta}^3 = \sum_{k=1}^{\delta-1} n_{i\delta k}^0 x_k^3 \quad i = 1, n \quad \delta = 2, n \quad (3.39)$$

La Ecuación 3.39 indica la conservación del volumen de la partícula madre al fragmentarse en las partículas hijas. Sustituyendo la ecuación 3.36 en la ecuación 3.39 y reorganizando se obtiene:

$$n_{i\delta}^0 = \frac{x_{\delta}^3}{\sum_{k=1}^{\delta-1} \lambda_{i\delta k} x_k^3} \quad i = 1, n \quad \delta = 2, n \quad (3.40)$$

La ecuación 3.40 indica que, conociendo el tamaño de la partícula madre x_{δ} y la proporción $\lambda_{i\delta k}$ en que ésta se fragmenta en los tamaños inferiores x_k , es posible

calcular el número total de partículas hijas $n_{i\delta}^0$ que produce una sola partícula madre. Una vez conocido $n_{i\delta}^0$, el número de partículas hijas producidas dentro de cada tamaño $n_{i\delta k}^0$ puede calcularse utilizando la ecuación 3.36.

Se define $n_{i\delta k}$ como el número total de partículas hijas de tamaño x_k , producidas por todas las partículas de tamaño inicial x_{i0} que entraron al reactor y que se fragmentaron en el tiempo t al alcanzar el tamaño x_δ . De lo anteriormente expuesto, se tiene que:

$$n_{i\delta k} = n_{i\delta k}^0 n_i f_i \quad i = 1, n \quad \delta = 2, n \quad (3.41)$$

donde f_i es la fracción de partículas del tamaño inicial x_{i0} que se han fragmentado hasta el tiempo t , y n_i es el número total de partículas de tamaño x_{i0} en la alimentación al reactor. Esta última se calcula mediante:

$$n_i = \frac{f_3(x_{i0})(\Delta x_{i0})W}{\rho_0 C_3 x_{i0}^3} \quad i = 1, n \quad \delta = 2, n \quad (3.42)$$

En la ecuación 3.42, el símbolo $f_3(x_{i0})$ es la función de densidad másica del tamaño x_{i0} en la alimentación al horno, Δx_{i0} es el intervalo de i -ésimo tamaño, y W es la masa total de todas las partículas de todos los tamaños alimentadas al horno.

La Ecuación 3.42 expresa la división entre la masa total de partículas de tamaño x_{i0} en la alimentación entre la masa de una partícula de tamaño x_{i0} .

De acuerdo con lo anterior, la masa de partículas de tamaño x_k que se produjeron por la fragmentación al tiempo t de todas las partículas de tamaño x_δ , las cuales provinieron de la fracción de tamaño inicial x_{i0} será:

$$m_{i\delta k} = n_{i\delta k} \rho_{i\delta k} C_3 x_k^3 \quad i = 1, n \quad \delta = k + 1, n \quad (3.43)$$

Consecuentemente, la masa de partículas de tamaño x_k que se produjeron por la fragmentación al tiempo t de todas las partículas de tamaño x_δ , provenientes de todos los tamaños iniciales x_{i0} en la alimentación será:

$$m_{\delta k} = \sum_{i=1}^n m_{i\delta k} \quad (3.43b)$$

Similarmente, la masa de partículas de tamaño x_k que se produjeron por la expansión de todas las partículas de tamaño inicial x_{l0} , donde $x_{l0} < x_k$ al tiempo t será:

$$m_{lk} = (1 - f_l)n_l\rho_{lk}C_3x_k^3 \quad l = 1, \quad k - 1 \quad (3.44)$$

La masa total de partículas de tamaño x_k al tiempo t , m_k , será entonces:

$$m_k = \sum_{\delta=k+1}^n m_{\delta k} + \sum_{l=1}^{k-1} m_{lk} \quad (3.45)$$

La función de densidad del tamaño x_k al tiempo t se obtiene mediante la expresión:

$$f_3(x_k) = \frac{m_k}{(\sum_{k=1}^n m_k)\Delta x_k} \quad (3.46)$$

La Ecuación 3.46 establece finalmente la expresión con la cual se calcula la función de densidad de la población de partículas a lo largo del reactor. Cuando ésta se calcula para el valor de $t = \tau$, donde τ es el tiempo de residencia, la función de densidad resultante es la del receptáculo del horno. Para cualquier otro valor de $t < \tau$, la función describe la distribución de tamaños de las partículas durante el vuelo.

3.2.1 Especificación de los Parámetros del Modelo

El modelo de expansión-fragmentación descrito anteriormente requiere la especificación de los siguientes parámetros:

- i) la rapidez de expansión g_i ;
- ii) el diámetro crítico x_{ic} ;
- iii) los cocientes de fragmentación $\lambda_{i\delta k}$,
- iv) la fracción f_i de partículas que se fragmenta al tiempo t , y
- v) la velocidad de desplazamiento de las partículas, v_i .

Con el fin de reducir el número de parámetros requeridos por el modelo se hicieron las siguientes simplificaciones:

- i) La rapidez de expansión se supuso independiente del tamaño:

$$g_i = g_j = g$$

- j) El diámetro crítico se supuso proporcional al tamaño inicial de las partículas:

$$x_{ic} = f_{ic} x_{i0} \quad i = 1, n \quad (3.47)$$

donde f_{ic} es un factor de proporcionalidad. En este trabajo, se asumió que este factor no depende del tamaño de partícula, es decir: $f_{ic} = f_{jc} = f_c$

- k) Los cocientes de fragmentación se estimaron mediante la siguiente expresión:

$$\lambda_{i\delta k} = k_i \left(\frac{x_k}{x_\delta} \right)^{\gamma_i} \ln \left(\frac{x_\delta}{x_k} \right) \quad i = 1, n \quad \delta = 2, n \quad (3.48)$$

donde k_i es una constante de proporcionalidad y γ_i es el parámetro de distribución de tamaños. La ecuación 3.48 es similar a los modelos utilizados para estimar la función de selección durante la molienda de minerales en molinos de bolas, (King 1973).

Nótese que el parámetro γ_i indica la forma en que la partícula se fragmenta. Valores de $\gamma_i \leq 0$ indican que la partícula madre tiende a generar preferentemente partículas finas y si $\gamma_i > 0$ la partícula se fragmenta uniformemente en todos los tamaños.

Sustituyendo la Ecuación 3.48 en la Ecuación 3.37, y haciendo notar que k_i puede salir fuera de la sumatoria, se obtiene:

$$k_i = \frac{1}{\sum_{k=1}^{\delta-1} \left(\frac{x_k}{x_\delta}\right)^{\gamma_i} \ln \frac{x_\delta}{x_k}} \quad i = 1, n \quad \delta = 2, n \quad (3.49)$$

Por lo tanto, el valor de $\lambda_{i\delta k}$ de acuerdo a la Ecuación 3.48 depende únicamente del valor de γ_i , ya que la constante k_i puede obtenerse a partir de la Ecuación 3.49 para cada tamaño de partícula x_δ . Para este estudio, el parámetro de distribución se asumió constante; es decir: $\gamma_i = \gamma_j = \gamma$.

iv) La fracción de partículas que se han fragmentado hasta el tiempo t se asumió que ocurre progresivamente de acuerdo a la siguiente expresión:

$$f_i = \frac{(t-t_{ic})}{(\tau-t_{ic})} f_{if} \quad i = 1, n \quad (3.50)$$

donde f_i es la fracción de partículas del tamaño inicial x_{i0} que se han fragmentado hasta el tiempo t , y τ_i es el tiempo de residencia de las partículas el cual se calcula como:

$$\tau_i = L/v_i \quad i = 1, n \quad (3.51)$$

En la ecuación 3.51, L es la longitud del reactor en m, y v_i es la velocidad de desplazamiento de las partículas, en m/s. Nótese que la Ecuación 3.50 cumple con las condiciones: $f_i(t_{ic}) = 0$ y $f_{ic}(\tau_i) = f_{if}$; para cualquier otro valor de $t < t_{ic}$, se asigna: $f_i(t_{ic}) = 0$

La fracción f_{if} de partículas que se fragmentan al llegar al receptáculo se asumió que sigue una relación lineal en una sección de la escala de fracciones de tamaño de las partículas alimentadas. La pendiente de esta línea recta es calculada de la siguiente manera:

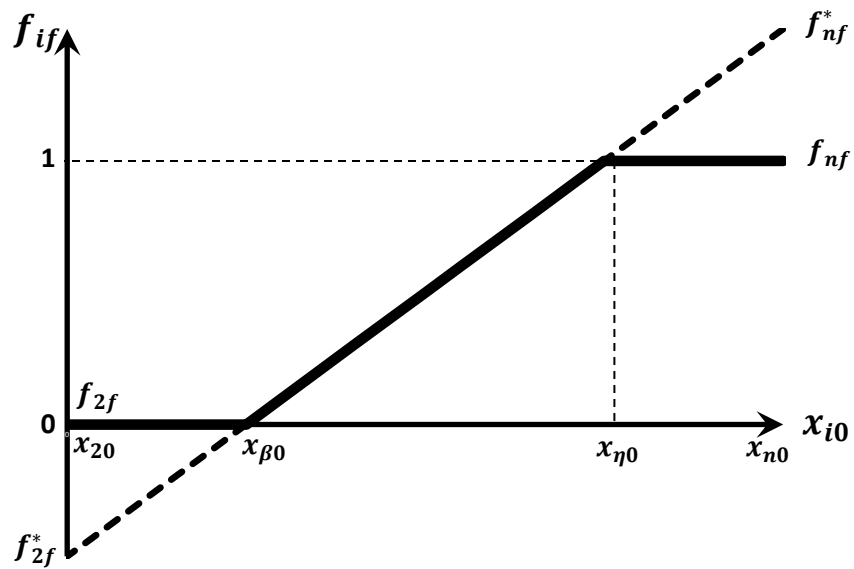
$$p = \frac{f_{nf}^* - f_{2f}^*}{x_{n0} - x_{20}} \quad (3.52)$$

La Figura 3.5 muestra los casos particulares de cómo puede variar f_{if} con respecto al tamaño de alimentación de las partículas.

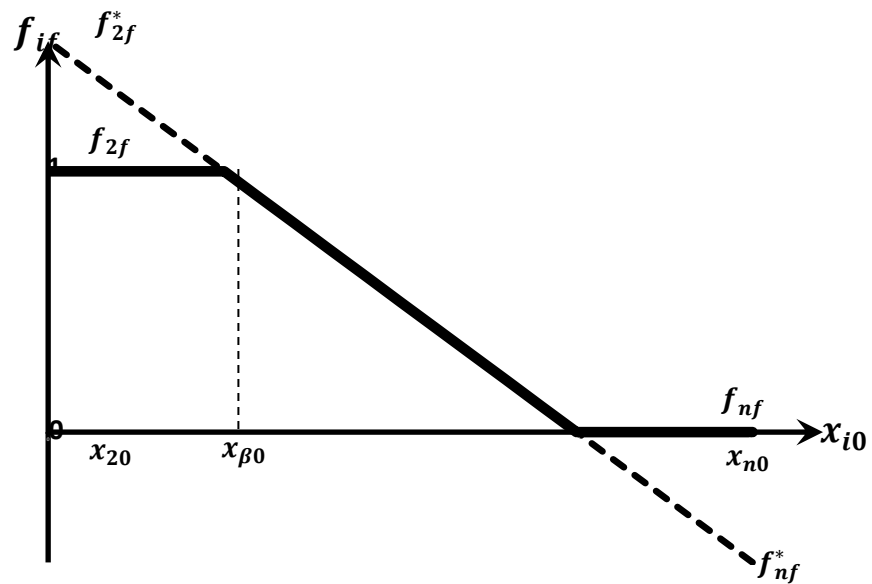
En la Ecuación 3.52, los símbolos f_{2f}^* y f_{nf}^* son parámetros ajustables sin significado físico. Se utilizan para determinar la pendiente de la recta que resulta al graficar la fracción de partículas que se fragmentan en el receptáculo f_{if} contra x_{i0} .

Estos parámetros se obtienen mediante extrapolación de dicha recta para x_{20} y x_{n0} (véase Figura 3.5). El tamaño x_{20} es el segundo más pequeño después del tamaño x_{10} . Por conveniencia numérica, se asumió que las partículas más finas en la discretización, x_{10} no se fragmentan.

Similarmente, x_{n0} es el tamaño de partícula más grande considerado en la discretización de tamaños, y se supuso que no se expande. Los valores de f_{if} varían entre cero y la unidad.



a)



b)

Figura 3.5 Representación Gráfica de las Ecuaciones 3.52 y 3.53 para a) $p > 0$ y b) $p < 0$

La Figura 3.5(a) representa el caso en que la pendiente p calculada mediante la Ecuación 3.52 es positiva, es decir que la fracción de partículas pequeñas que se fragmentan es inferior a la fracción de partículas más grandes que logran fragmentarse.

Para este caso, el valor de la fracción de partículas que sufren fragmentación al llegar al receptáculo se calcula mediante:

$$f_{if} = \begin{cases} 0, & x_{20} \leq x_{i0} \leq x_{\beta 0} & (3.53a) \\ p(x_{i0} - x_{\beta 0}), & x_{\beta 0} \leq x_{i0} \leq x_{\eta 0} & (3.53b) \\ 1, & x_{\eta 0} \leq x_{i0} \leq x_{n0} & (3.53c) \end{cases}$$

donde p es la pendiente calculada mediante la ecuación 3.52, $x_{\beta 0}$ es el tamaño de partícula donde se intersectan las rectas representadas por las Ecuaciones 3.53a y 3.53b. Análogamente, $x_{\eta 0}$ es el tamaño de partícula donde se intersectan las rectas las cuales son representadas por las Ecuaciones 3.53b y 3.53c.

Esto ocurre en sentido inverso cuando la pendiente de f_{if} es negativa, es decir, cuando la fracción de partículas pequeñas que se fragmentan es más grande que la fracción de partículas grandes que logran hacerlo. Esto se encuentra esquematizado en la Figura 3.5(b).

Para este caso, el parámetro f_{if} puede adquirir los siguientes valores:

$$f_{if} = \begin{cases} 1, & x_{20} \leq x_{i0} \leq x_{\beta 0} & (3.54a) \\ 1 + p(x_{i0} - x_{\beta 0}), & x_{\beta 0} \leq x_{i0} \leq x_{\eta 0} & (3.54b) \\ 0, & x_{\eta 0} \leq x_{i0} \leq x_{n0} & (3.54c) \end{cases}$$

donde p se calcula mediante la Ecuación 3.52, $x_{\beta 0}$ es el tamaño de partícula en la alimentación donde se intersectan las rectas representadas por las Ecuaciones 3.54a y

3.54b, mientras que $x_{\eta 0}$ es el tamaño de partícula de la alimentación donde se intersectan las rectas que son representadas por las Ecuaciones 3.54b y 3.54c.

Un caso particular de la Figura 3.5 ocurre cuando f_{if} conserva su comportamiento lineal en toda la escala de fracciones de tamaño, es decir, los valores de los parámetros f_{2f} y f_{nf} se encuentran entre cero y uno. En este caso $f_{2f}^* = f_{2f}$ y $f_{nf}^* = f_{nf}$.

En este caso la fracción de partículas que se fragmentan al llegar al receptáculo se puede obtener directamente de la relación:

$$f_{if} = f_{2f} + \left(\frac{f_{nf} - f_{2f}}{x_{n0} - x_{20}} \right) (x_{i0} - x_{20}) \quad i = 2, n \quad (3.55)$$

v) La velocidad de la partícula se asumió constante; es decir: $v_i = v_j = v$. El valor de v se fijó en 2.3 m/s (Pérez-Tello et al., 2001a); la longitud del reactor, L es de 2m.

Con las anteriores simplificaciones, el modelo final de expansión-fragmentación de las partículas consta de cinco parámetros: $g, f_c, \gamma, f_{2f}, f_{nf}$. Una vez especificados estos valores, es posible calcular la distribución de partículas en cualquier posición a lo largo del reactor.

3.2.2 Definición del Coeficiente de Contribución

Al contabilizar las partículas durante su oxidación, es importante conocer su procedencia, es decir de qué tamaños en la alimentación provienen. Este análisis tiene implicaciones prácticas ya que permitiría conocer el origen de los polvos producidos en el horno. En este trabajo, se define como polvos a toda partícula con un tamaño igual o menor de 20 μm , independientemente de su composición química.

En el presente trabajo se define a σ_{ik} como el coeficiente de contribución del tamaño inicial x_i al tamaño x_k en los productos oxidados al tiempo t , y se define como:

$$\sigma_{ik} = \frac{m_{ik}}{m_k} \quad i = 1, n \quad k = 1, n \quad (3.56)$$

donde m_{ik} es la masa de las partículas oxidadas de tamaño x_k que provienen de partículas de tamaño x_i alimentadas, y m_k es la masa de las partículas oxidadas de tamaño x_k .

Es decir, la suma de las contribuciones másicas de todos los tamaños x_i en la alimentación debe dar como resultado la masa total de tamaño x_k al tiempo t . Por conveniencia, se define el coeficiente de contribución acumulativo como:

$$\phi_{lk} = \sum_{i=1}^l \sigma_{ik} \quad k = 1, n \quad (3.57)$$

donde σ_{ik} representa el coeficiente de contribución que aporta el tamaño x_{i0} en la alimentación para que se formen partículas con un tamaño x_k al llegar al receptáculo y ϕ_{lk} representa el coeficiente de contribución acumulativo desde el tamaño más pequeño x_{i0} hasta el tamaño x_{l0} en la alimentación que contribuyen en la formación de partículas con un tamaño x_k que llegaron al receptáculo.

Los valores de ϕ_{lk} se encuentran entre cero y la unidad; ϕ_{lk} valdrá cero cuando ninguna partícula en la alimentación hasta el tamaño x_{l0} contribuye en la formación de la partícula de tamaño x_{lk} . Por otro lado, el coeficiente de contribución acumulativo ϕ_{lk} valdrá uno a partir del último tamaño x_{l0} en contribuir en la masa de las partículas en el receptáculo del tamaño x_k .

3.2.3 Definición del Coeficiente de Distribución

De manera similar se define el coeficiente de distribución β_{ik} del tamaño inicial x_i hacia el tamaño x_k en los productos oxidados como:

$$\beta_{ik} = \frac{m_{ik}}{m_{i0}} \quad i = 1, n \quad k = 1, n \quad (3.58)$$

donde m_{ik} es la masa de las partículas oxidadas de tamaño x_k que provienen de partículas de tamaño x_i alimentadas, y m_{i0} es la masa de las partículas del tamaño inicial x_i en la alimentación al horno.

A diferencia del coeficiente de contribución σ_{ik} , la sumatoria de los coeficientes de distribución β_{ik} para un tamaño determinado x_i no será igual a la unidad. Esto es:

$$\sum_{i=1}^n \beta_{ik} \neq 1 \quad k = 1, n \quad (3.59)$$

Lo anterior es debido a que la masa de las partículas de tamaño x_{i0} en la alimentación no se conserva a lo largo del reactor como resultado de la reacción de oxidación.

Si se desea conocer el destino final de la masa que entra en un determinado tamaño de partícula a la cámara de reacción es muy importante analizar el coeficiente de distribución.

Mediante el coeficiente de distribución se puede determinar cómo se distribuye la masa que entra con un tamaño determinado de partícula, en los diferentes tamaños que llegan al receptáculo. Así se puede tener una idea qué tanta masa se distribuye en partículas más pequeñas que las alimentadas debido a la fragmentación, y qué tanto se distribuye en partículas más grandes debido a la expansión.

De igual manera se define el coeficiente de distribución acumulativo de la siguiente manera:

$$B_{il} = \sum_{k=1}^l \beta_{ik} \quad i = 1, n \quad (3.60)$$

donde β_{ik} es el coeficiente de distribución que determina la relación entre la masa del tamaño x_{i0} en la alimentación que llegó al receptáculo con un tamaño x_k y la masa total inicial de las partículas con un tamaño x_{i0} que fueron alimentadas y B_{il} representa el coeficiente de distribución acumulativo con el que podemos determinar la cantidad de masa de partículas alimentadas con un tamaño inicial x_{i0} que se ha distribuido desde los tamaños más pequeños hasta cualquier tamaño x_l de partícula en el receptáculo en el cual se distribuye su masa.

El valor de B_{il} puede oscilar entre 0 y 1, pero no necesariamente el valor máximo debe ser uno, ya que existen pérdidas de masa durante la cámara de reacción y si sumamos todas las masas en las cuales se distribuyó la masa alimentada no necesariamente debe ser igual a la masa a la entrada de la cámara de reacción.

En forma general, los coeficientes de contribución y distribución definidos anteriormente pueden determinarse en cualquier posición a lo largo del reactor. En este trabajo, por simplicidad se evaluaron únicamente en el receptáculo.

3.3 Cálculo de la Composición Química de la Población de Partículas

Como resultado de la reacción de oxidación entre la mata y el oxígeno gaseoso, la composición de la población de las partículas varía a lo largo del horno. En la sección 3.1 se describe el modelo cinético desarrollado para calcular la composición de las partículas individuales que entran al reactor hasta antes de su fragmentación.

Sin embargo, es de interés determinar la composición química de la población de partículas a lo largo del reactor. La composición química de una determinada fracción de tamaño en el reactor puede provenir de partículas que se oxidaron y expandieron, así como de partículas que resultaron de la fragmentación de otras grandes con diferente grado de oxidación.

Por otro lado, durante la experimentación (Pérez-Tello et al. 2001a), el análisis químico de las partículas oxidadas se realizó en muestras colectadas en posiciones particulares del horno, e incluyeron todos los tamaños de la población de partículas. Por lo tanto, es de interés predecir la composición global de las partículas a lo largo del reactor, con el fin de comparar las predicciones del modelo con los datos experimentales.

El punto de partida es el balance de masa para la especie química s presente en una partícula madre de tamaño x_δ al cabo de la fragmentación:

$$\rho_{i\delta} C_3 x_\delta^3 \omega_{i\delta}^s = \sum_{k=1}^{\delta-1} n_{i\delta k}^0 \rho_{i\delta k} C_3 x_k^3 \omega_{i\delta k}^s \quad i = 1, n \quad \delta = 1, n \quad (3.61)$$

donde $\omega_{i\delta}^s$ es la fracción masa de la especie s en la partícula madre de tamaño x_δ , proveniente a su vez del tamaño inicial x_{i0} , y $\omega_{i\delta k}^s$ es la fracción masa de la especie s en las partículas hijas de tamaño x_k .

En el presente modelo, la especie s puede representar compuestos químicos (Cu_2S , FeS_x , Cu_2O , Fe_3O_4) o elementos químicos (S , Fe , O , Cu), con la condición de que se cumpla la relación:

$$\sum_{s=1}^S \omega_{i\delta}^s = \sum_{s=1}^S \omega_{i\delta k}^s = 1 \quad i = 1, n \quad \delta = 1, n \quad (3.62)$$

donde S es el número total de especies presentes en la partícula.

Puesto que la densidad aparente de las partículas madre e hijas se supone iguales, y el factor de forma es constante, la anterior expresión se reduce a:

$$x_{\delta}^3 \omega_{i\delta}^s = \sum_{k=1}^{\delta-1} n_{i\delta k}^0 x_k^3 \omega_{i\delta k}^s \quad i = 1, n \quad \delta = 2, n \quad (3.63)$$

Efectuando la sumatoria en ambos de la ecuación para todas las especies presentes en las partículas, y notando que el término x_{δ}^3 en el lado izquierdo puede salir de la sumatoria, se tiene:

$$x_{\delta}^3 \sum_{s=1}^S \omega_{i\delta}^s = \sum_{s=1}^S \sum_{k=1}^{\delta-1} n_{i\delta k}^0 x_k^3 \omega_{i\delta k}^s \quad i = 1, n \quad \delta = 2, n \quad (3.64)$$

De acuerdo a la Ecuación 3.62, la sumatoria del lado izquierdo es igual a la unidad, y al lado derecho como los términos $n_{i\delta k}^0$ y x_k^3 no dependen del número de especies en la partícula, es decir de s , pueden salir de la sumatoria, y por la Ecuación 3.62 la cual expresa que $\sum_{s=1}^S \omega_{i\delta k}^s = 1$, la Ecuación 3.64 se reduce a:

$$x_{\delta}^3 = \sum_{k=1}^{\delta-1} n_{i\delta k}^0 x_k^3 \quad i = 1, n \quad \delta = 2, n \quad (3.65)$$

Es decir, la suposición de la igualdad de densidades aparentes entre las partículas hijas y madre equivalen a suponer que tras la fragmentación, la composición química de la partícula madre se mantiene entre las partículas hijas:

$$\omega_{i\delta k}^s = \omega_{i\delta}^s \quad i = 1, n \quad \delta = 1, n \quad (3.66)$$

Por tanto, la masa de la especie s en las partículas hijas de tamaño x_k que se produjeron por la fragmentación al tiempo t de todas las partículas de tamaño x_δ , las cuales provinieron de la fracción de tamaño inicial x_{i0} será:

$$m_{i\delta k}^s = \omega_{i\delta}^s m_{i\delta k} \quad i = 1, n \quad \delta = 2, n \quad (3.67)$$

donde $m_{i\delta k}$ se obtiene de la Ecuación 3.43.

Consecuentemente, la masa de la especie s en las partículas de tamaño x_k que se produjeron por la fragmentación al tiempo t de todas las partículas de tamaño x_δ , provenientes de todos los tamaños iniciales x_{i0} en la alimentación será:

$$m_{\delta k}^s = \sum_{i=1}^n m_{i\delta k}^s \quad \delta = k + 1, n \quad (3.68)$$

Similarmente, la masa de la especie s en las partículas de tamaño x_k que se produjeron por la expansión de todas las partículas de tamaño inicial x_{l0} , donde $x_{l0} < x_k$ al tiempo t será:

$$m_{lk}^s = \omega_{lk}^s m_{lk} \quad l = 1, k - 1 \quad (3.69)$$

donde m_{lk} se obtiene a partir de la ecuación 3.44.

La masa total de la especie s en todas las partículas de tamaño x_k al tiempo t , será entonces:

$$m_k^s = \sum_{\delta=k+1}^n m_{\delta k}^s + \sum_{l=1}^{k-1} m_{lk}^s \quad k = 1, n \quad (3.70)$$

La composición en fracción peso de la especie s en todas las partículas de tamaño x_k se obtiene mediante:

$$\omega_k^s = \frac{m_k^s}{m_k} \quad k = 1, n \quad (3.71)$$

donde m_k se calcula a partir de la Ecuación 3.45.

Adicionalmente, es de interés calcular la composición de la especie s en toda la población de partículas presente al tiempo t , la cual se define como Ω^s . Ésta se obtiene sumando la masa de la especie s presente en todos los tamaños y dividiendo entre la masa total de la población de partículas en ese tiempo:

$$\Omega^s = \frac{\sum_{k=1}^n m_k^s}{\sum_{k=1}^n m_k} \quad (3.72)$$

Se hace notar que Ω^s es el valor que experimentalmente se determinó a lo largo del horno, así como en el receptáculo, por lo cual es una variable de respuesta para la verificación del modelo.

3.3.2 Funciones de Densidad por Especie

Una forma alternativa de representar la distribución de las especies en la población de partículas es mediante la siguiente función de densidad por especie, la cual se define como:

$$f_3^s(x_k) = \frac{m_k^s}{(\sum_{k=1}^n m_k^s) \Delta x_k} \quad k = 1, n \quad (3.73)$$

La función $f_3^s(x_k)$ representa la forma en que la masa total de la especie s en un tiempo determinado se distribuye entre los diferentes tamaños de la población de partículas. Se hace notar la diferencia en el significado físico de la función $f_3^s(x_k)$ en relación con la composición ω_k^s obtenido mediante la Ecuación 3.71. La función de densidad $f_3^s(x_k)$ posee la propiedad:

$$\int_0^{\infty} f_3^s(x) dx = 1 \quad (3.74)$$

3.4. Acoplamiento y Verificación del Modelo Matemático

La Figura 3.6 muestra la estrategia general para el acoplamiento de los modelos cinético y de fragmentación descritos con anterioridad, así como su verificación con datos experimentales. El modelo completo fue codificado en lenguaje Fortran 90. Su listado se anexa en el Apéndice D de este trabajo.

El objetivo de esta etapa del trabajo fue determinar los valores de los parámetros del modelo: $g, f_c, \gamma, f_{2f}, f_{nf}$ que proporcionan las mejores predicciones de los datos experimentales en términos de la distribución de tamaño, composición química de las partículas oxidadas y cantidad de polvo contenido en el receptáculo.

Para lo anterior, se utilizaron las correlaciones desarrolladas por Pérez-Tello et al. (2002) para la alimentación y productos y se tomaron éstas como los valores experimentales. Ésta es una aproximación aceptable ya que en todos los casos las correlaciones concordaron satisfactoriamente con los valores experimentales (Pérez-Tello et al. 2001a).

Para la alimentación, las funciones de densidad se representaron mediante la siguiente expresión:

$$f_3(x) = bx^c e^{-ax} \quad (3.75)$$

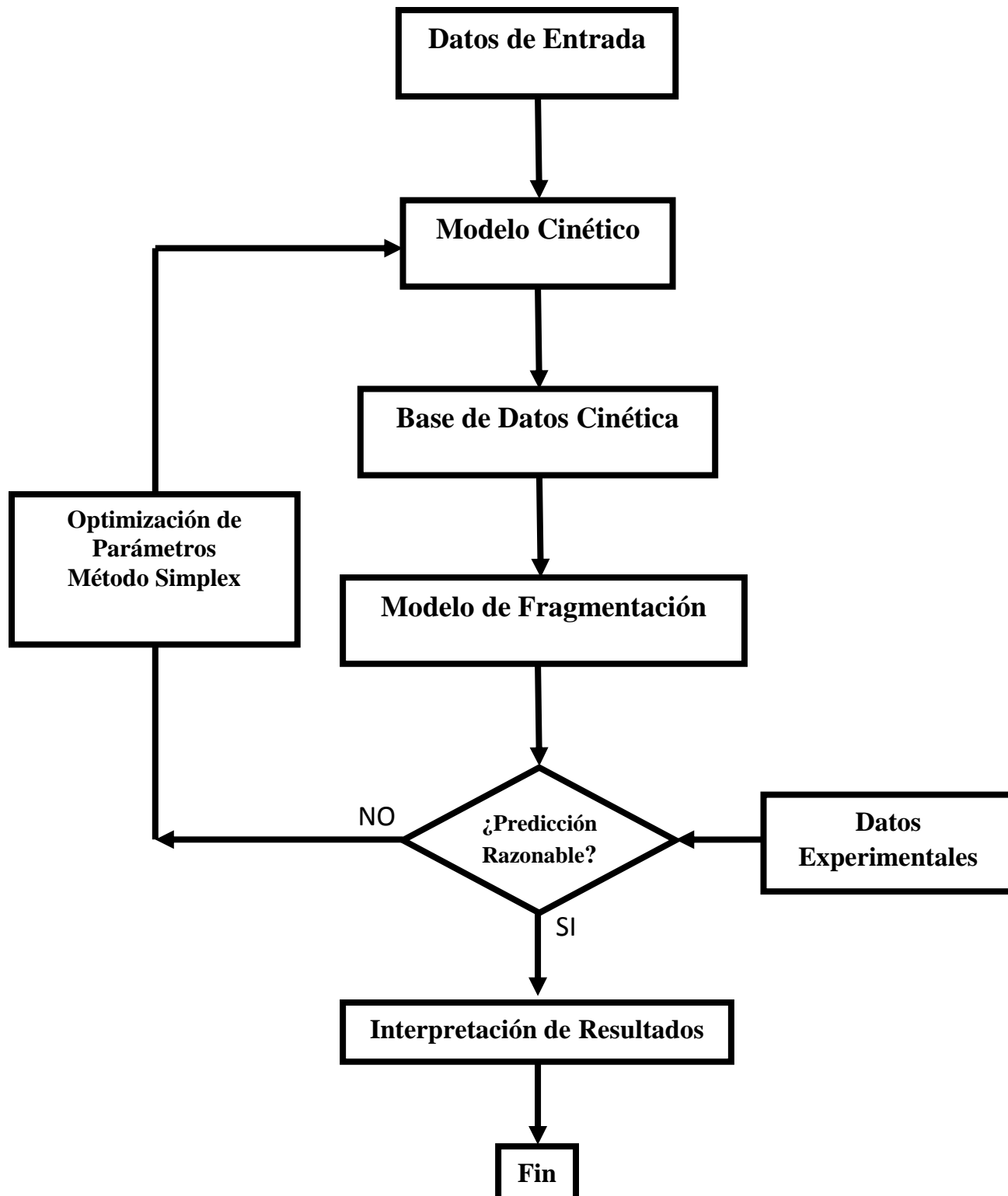


Figura 3.6 Estrategia General de Cálculo del Trabajo

Para los productos oxidados en el receptáculo, las funciones de densidad se representaron mediante:

$$g_3(x) = b_1 x^{c_1} e^{-a_1 x} + b_2 x^{c_2} e^{-a_2 x} \quad (3.76)$$

En las ecuaciones 3.75 y 3.76, los símbolos $a, b, c, a_1, b_1, c_1, a_2, b_2, c_2$ son parámetros reportados por Pérez-Tello et al., 2002 a las diferentes condiciones experimentales probadas en el horno a nivel laboratorio.

La Ecuación 3.75 es el punto de partida para calcular la cantidad de partículas en cada tamaño en la alimentación, mediante la Ecuación 3.42. Para lo anterior se llevó a cabo una discretización de los tamaños de partícula. En este trabajo se definió a $n = 300$.

Para cada tamaño de partícula se calculó la composición química de una partícula individual a lo largo de su trayectoria dentro de la cámara de reacción, utilizando el modelo cinético descrito en la sección 3.1 y fijando un valor para la rapidez de expansión, g . Para estos cálculos se supuso que las partículas no se fragmentan hasta llegar al receptáculo. Como resultado de dichos cálculos, se genera una base de datos cinética conteniendo la posición, composición química y tamaño de cada partícula a lo largo del reactor. Dicha información se almacena en disco para ser utilizada por el modelo de fragmentación.

Al concluirse la construcción de la base de datos cinética, se activa el modelo de fragmentación descrito en la sección 3.2. A lo largo del reactor se calcula la masa y composición de cada tamaño de partícula hasta llegar al receptáculo, partiendo de un conjunto preestablecido de valores de $f_c, \gamma, f_{2f}, f_{nf}$ y la información almacenada en la base de datos cinética. Al llegar al receptáculo, la distribución de tamaños resultando obtenida por la Ecuación 3.46 se comparó con la distribución experimental representada por la Ecuación 3.76.

En este trabajo, el grado de concordancia entre la predicción del modelo y los datos experimentales se determinó mediante el parámetro de correlación:

$$r^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n [g_3(x_i) - f_3(x_i)]^2}{\sum_{i=1}^n [g_3(x_i) - \overline{g_3(x_i)}]^2} \quad (3.77)$$

donde $g_3(x_i)$ es el i -ésimo valor experimental de la función de densidad, obtenida por la Ecuación 3.76, $f_3(x_i)$ es el i -ésimo valor de la función de densidad calculada por la Ecuación 3.44, $\overline{g_3(x_i)}$ es el promedio experimental de la función de densidad y n es el número total de datos utilizados en la discretización de tamaños.

El objetivo es que el valor de r^2 obtenido mediante la Ecuación 3.77 se aproxime lo más posible a la unidad. Si esto no se logra, los parámetros $g, f_c, \gamma, f_{2f}, f_{nf}$ son modificados con el fin de generar una nueva iteración y repetir el procedimiento.

Para la generación del nuevo conjunto de parámetros se utilizó el método Simplex autoajutable, (Press, et al. 1996). Típicamente, la convergencia se alcanzó en aproximadamente 400 iteraciones.

Una vez alcanzada la convergencia de acuerdo a la Ecuación 3.77, se realizó la comparación de las predicciones del modelo para otras variables de respuesta, tales como la cantidad de polvo generado durante el experimento, y la composición química de la población de partículas, descrita en la sección 3.3.

El procedimiento anterior se aplicó a cada una de las 20 condiciones experimentales reportadas por Pérez-Tello et al., 2001a. El conjunto de parámetros así obtenidos se correlacionaron con las condiciones experimentales, a fin de identificar tendencias que faciliten la comprensión de los fenómenos de fragmentación de las partículas.

CAPÍTULO 4

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

4.1 Cinética de Partículas Individuales

Es de importancia conocer las propiedades individuales de las partículas durante su estancia en la cámara de reacción, ya que estos datos son utilizados para determinar las propiedades de la población de partículas en cualquier punto del reactor. Al conocer la cinética individual de las partículas y la evolución de sus propiedades se generó una base de datos extensa la cual fue utilizada por el modelo de fragmentación, cuyos resultados se presentan en la sección 4.2 de este trabajo.

En esta sección se presentan los resultados obtenidos del modelo cinético. En la Tabla 4.1 se especifican los valores que se requieren para resolver el modelo los cuales son constantes, porque son concernientes al material, el cual es el mismo para todas las condiciones experimentales. Los valores que deben especificarse y varían de un experimento a otro incluyen la concentración de oxígeno en el gas de proceso y la velocidad de expansión de la partícula. El primero corresponde a una de las condiciones experimentales que se variaron en este sistema, y la velocidad de expansión se obtuvo como resultado de la optimización de los parámetros del modelo que mejor representaran las funciones de densidad másica experimentales.

Con el fin de abreviar la discusión de resultados, en esta sección se presenta como ejemplo de cálculo el correspondiente al Experimento 17 de la Tabla 4.2. Éste comprende el material sin cribar, es decir con una fracción de tamaño en la alimentación $<149 \mu\text{m}$, y condiciones de $0.25 \text{ kg O}_2/\text{kg mata}$, 70% de O_2 en el gas de proceso. El valor de la velocidad de expansión para este caso es de $58.13 \mu\text{m/s}$.

Tabla 4.1 Propiedades de la mata y del sistema requeridas por el modelo cinético

Propiedad	Símbolo	Valor Constante
Presión (atm)	P	0.86
Temperatura (K)	T	1100
Tortuosidad	τ	200
Densidad másica de la mata (kg/m ³)	ρ	5404
Densidad Molar de Cu ₂ O (kgmol/m ³)	$\hat{\rho}_{Cu_2O}$	37.7
Densidad Molar de Fe ₃ O ₄ (kgmol/m ³)	$\hat{\rho}_{Fe_3O_4}$	22.4
Velocidad de desplazamiento de las partículas (m/s)	v_d	2.3
Difusividad Molecular del O ₂ en N ₂ (m ² /s)*	D_{AB}	2.16 x 10 ⁻⁴

*Calculada con la ecuación de Chapman-Enskog:

$$D_{AB} = \frac{0.001858T^{\frac{3}{2}} \left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right)^{\frac{1}{2}}}{P \sigma_{AB}^2 \Omega_D}$$

a la temperatura y presión que se especifica en la tabla.

4.1.1 Evolución de la Masa de la Partícula

En la Figura 4.1 se presenta la evolución de la masa de la partícula para diferentes tamaños iniciales. Como se puede observar, para los tamaños más pequeños, 5 y 10 μm el cambio en la masa es muy rápido, perdiendo en menos de 300 ms alrededor del 10 % de su masa. Puede observarse que el 10% es el valor máximo que las partículas pueden perder, ya que se conserva el 90% de su masa hasta finalizar el tiempo de reacción. Esto concuerda satisfactoriamente con el cálculo realizado en base a la estequiometría de la Ecuación 3.2, la cual indica que si las partículas reaccionan completamente, pierden 10.04% de su masa inicial.

La masa que la partícula pierde es el azufre que se transforma en SO_2 y es liberado a la fase gaseosa, aunque debe ser considerada la cantidad de oxígeno capturado por la reacción de oxidación, lo cual está limitado por la estequiometría de la reacción.

Conforme se aumenta el tamaño de partícula, la pérdida de masa se vuelve más lenta, alcanzando en el caso del tamaño de partícula de 20 μm la pérdida del 10% después de 900 ms. En el caso de partículas más grandes, esta pérdida se reduce conservándose alrededor del 95.5% y 99% para las partículas con un tamaño inicial de 50 y 150 μm respectivamente, en un tiempo de residencia de 1 s en la cámara de reacción.

4.1.2 Porosidad de la Capa de Óxidos

La Figura 4.2 muestra los resultados del modelo cinético en relación a la evolución de la porosidad de la capa de óxidos de la partícula para los seis tamaños en forma individual. Como se puede observar, los valores de la porosidad para los tamaños pequeños aumentan, volviéndose su gráfica asintótica hacia la unidad, alrededor de los 600 ms de entrar a la cámara de reacción. Estos se deriva de la suposición del modelo, en la cual se establece que las partículas crecen de tamaño a una rapidez constante.

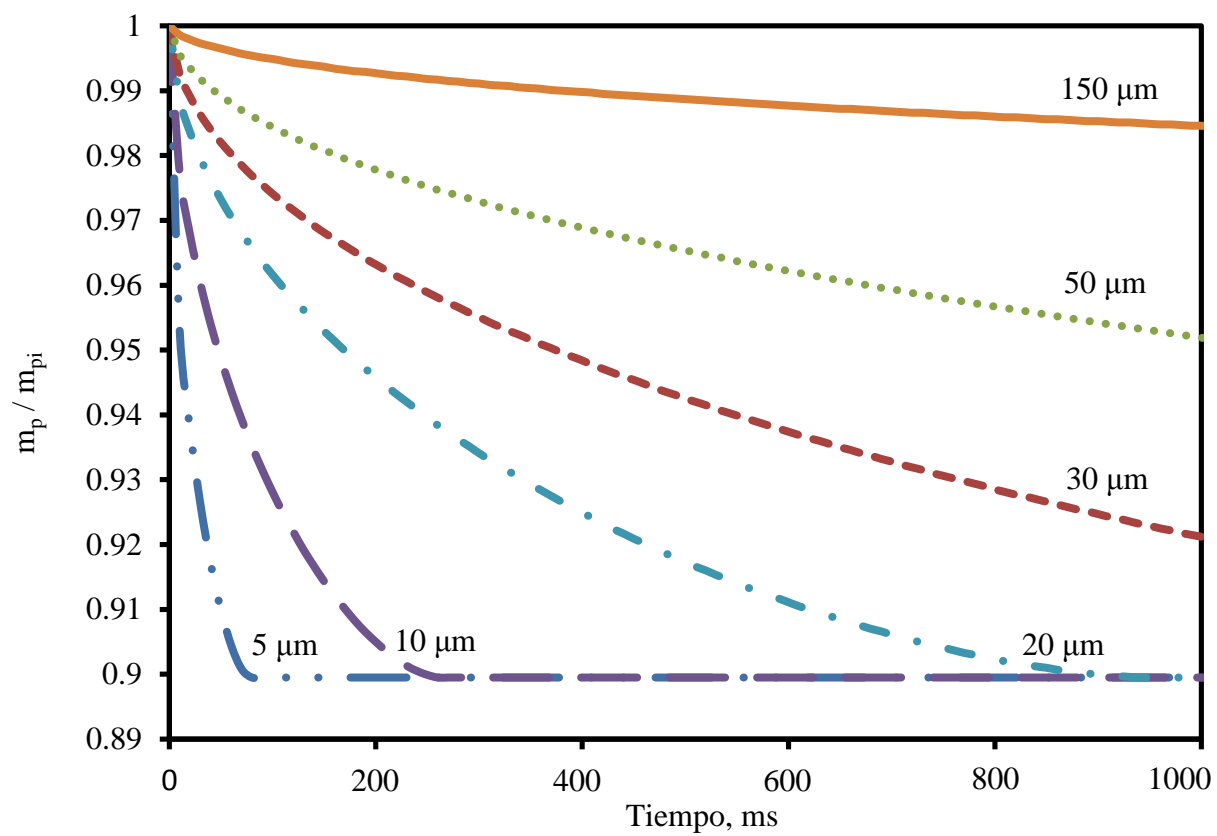


Figura 4.1 Evolución de la Masa de la Partícula en Función del Tamaño Inicial

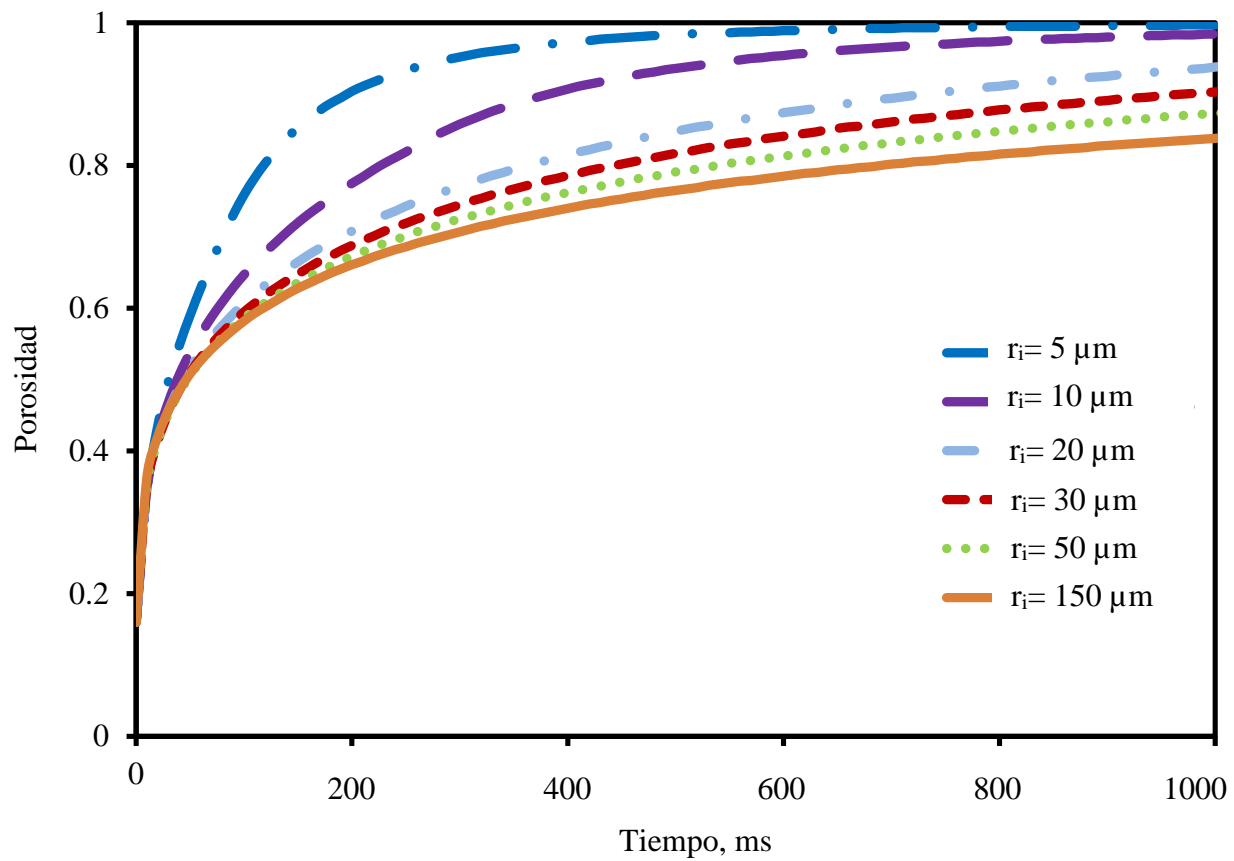


Figura 4.2 Evolución de la Porosidad de la Capa de Oxidos en Función del Tamaño Inicial.

Para tamaños superiores a 20 μm se observa un crecimiento más lento de los valores de la porosidad, llegando un valor mínimo alrededor de 0.8 para el tamaño más grande analizado de 150 μm .

Resumiendo lo anterior, el tamaño inicial de la partícula tiene una relación inversa en los valores finales de la porosidad de la capa de óxidos. Para tamaños pequeños de partícula, los valores finales de porosidad son más altos y para los tamaños más grandes, los valores de porosidad son más pequeños.

4.1.3 Grado de Conversión

El grado de conversión de la reacción de oxidación de acuerdo al modelo de núcleo decreciente está dada por: Levenspiel, 1962.

$$X = 1 - \left(\frac{r_c}{r_i}\right)^3 \quad (4.1)$$

La secuencia que se sigue para la obtención de esta ecuación, se encuentra detallada en el Apéndice A de este trabajo. En la Figura 4.3 se muestran los resultados obtenidos a partir del modelo cinético para los seis tamaños de partícula en la alimentación anteriormente descritos en términos de la evolución del grado de conversión conforme avanzan en la cámara de reacción.

En esta figura puede observarse que el grado de conversión depende ampliamente del tamaño inicial de la partícula. La velocidad de conversión es muy alta para las partículas más pequeñas alimentadas, disminuyendo al aumentar su tamaño.

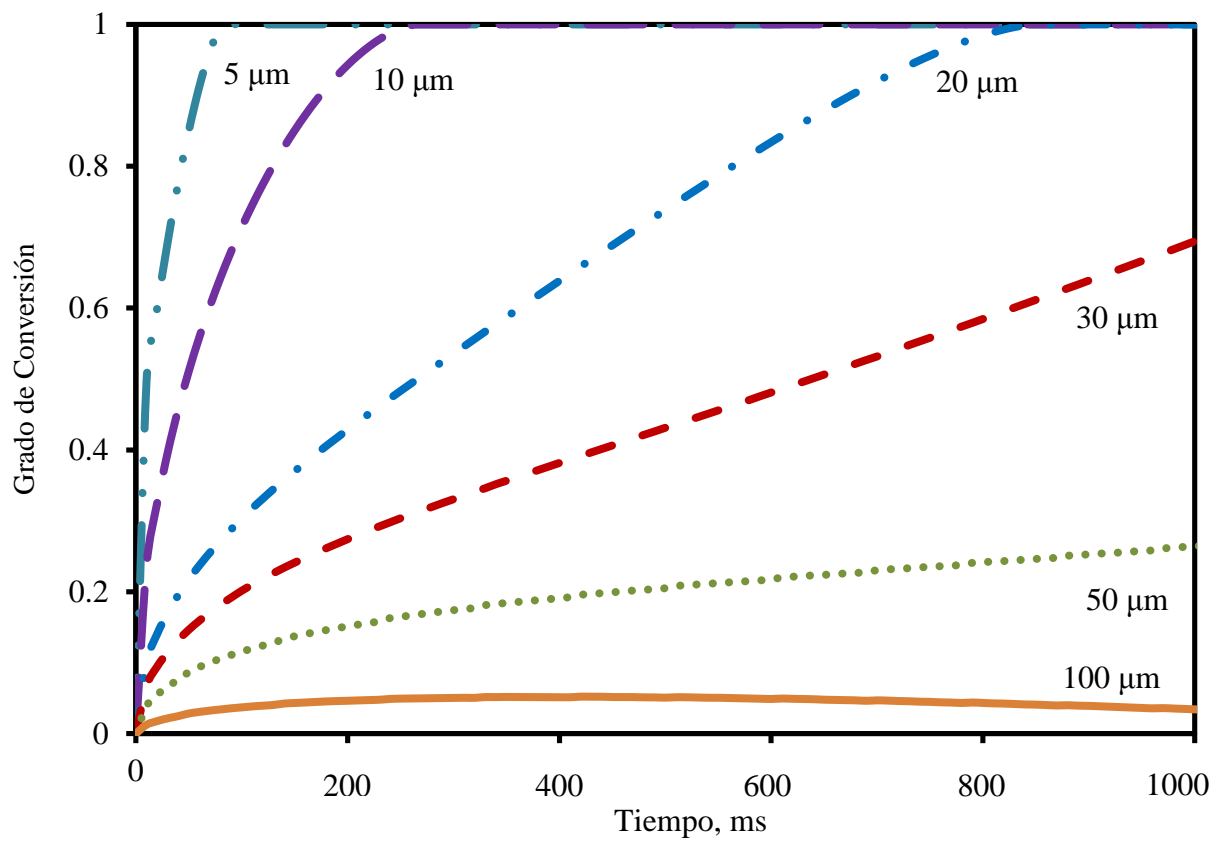


Figura 4.3 Evolución del Grado de Conversión de la Partícula en Función del Radio Inicial

El valor final del grado de reacción disminuye al aumentar el tamaño de partícula; en las partículas pequeñas (0-20 μm) el valor final es igual a la unidad, es decir, la partícula reacciona completamente, lográndose esto en tiempos menores a 200 ms, mientras que el valor final del grado de conversión para las partículas con tamaño inicial mayor (30 μm en adelante) es menor a la unidad. El grado de conversión final disminuye su valor conforme se incrementa la magnitud del tamaño de partícula a la entrada a la cámara de reacción.

4.1.4 Azufre Remanente en la Partícula

La cantidad de azufre que permanece en la partícula con respecto al que contenía originalmente, es un parámetro importante el cual está relacionado con el grado de conversión de la partícula y la eficiencia del proceso; siendo, el principal objetivo del convertidor, la eliminación de azufre. En la Figura 4.4 se muestra la evolución de la cantidad de azufre que permanece en la partícula. En esta figura se observa que para los tamaños más pequeños (5-10 μm) se alcanza un grado de eliminación de azufre del 100% en tiempos de 100 y 250 ms respectivamente. Al observar a la partícula que inició con un radio de 20 μm se observa que al igual que las anteriores alcanza un grado de eliminación de azufre del 100% en un tiempo más largo, alrededor de los 1000 ms. El grado de eliminación final de azufre es mayor al disminuir el tamaño inicial de las partículas. En esta figura se observa que para partículas con un tamaño menor a las 20 μm se elimina todo el azufre en un tiempo menor a los 1000 ms. Para el mismo tiempo de reacción, las partículas con un tamaño superior a las 20 μm no eliminaron la totalidad de azufre.

Con lo anterior se concluye que la rapidez de eliminación de azufre depende del tamaño de partícula en la alimentación. A menor tamaño inicial, mayor rapidez de eliminación de azufre y viceversa.

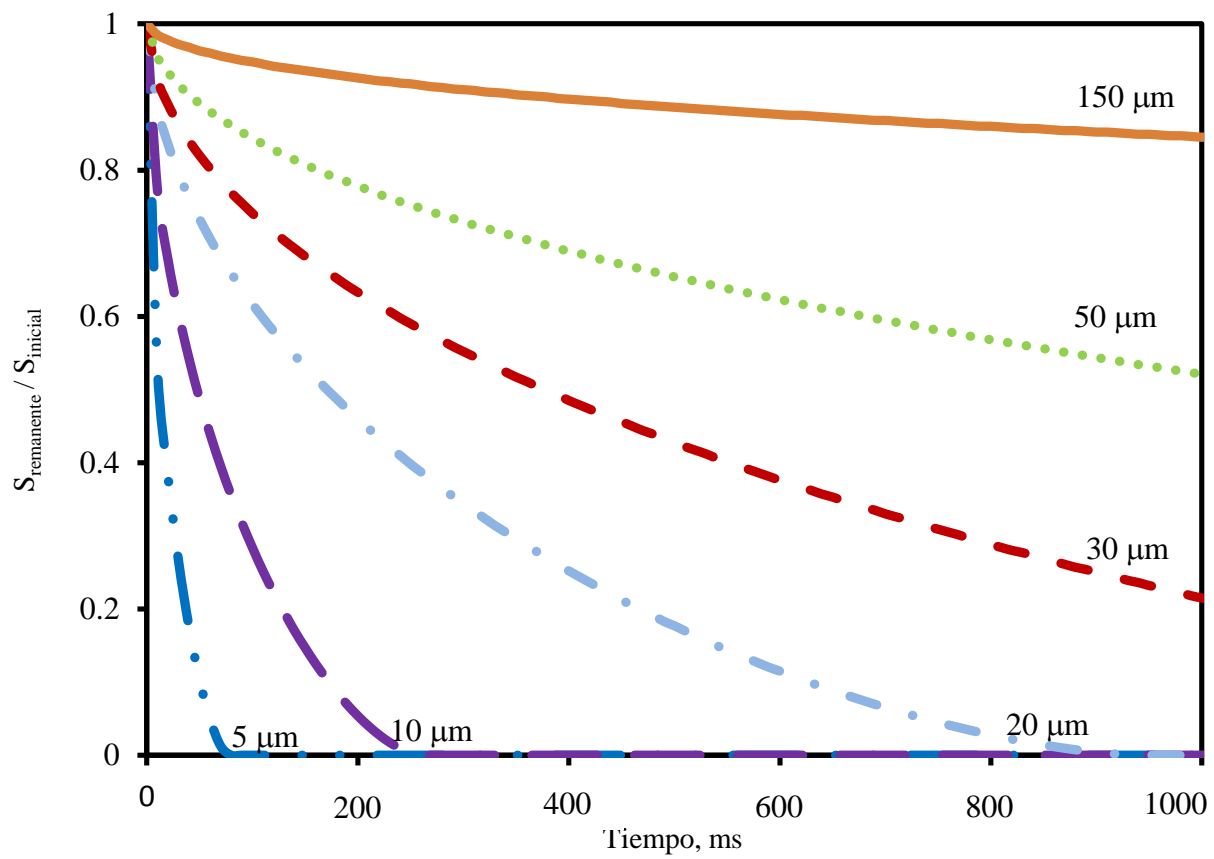


Figura 4.4 Evolución del Azufre en Función del Tamaño Inicial

4.1.5 Coeficiente de Transferencia de Masa

El coeficiente de transferencia de masa es una propiedad importante, ya que determina la facilidad con la cual el oxígeno se transporta desde el seno del gas hacia la superficie de la partícula. De acuerdo a la ecuación 3.14, dicho coeficiente depende del tamaño actual de la partícula, por lo cual es importante determinar su valor durante el vuelo de las partículas en la cámara de reacción.

La Figura 4.5 muestra los valores del coeficiente de transferencia de masa relativos a su valor en la alimentación k_m para diferentes tamaños de partícula en la entrada a la cámara de reacción. Se puede observar que el coeficiente de transferencia de masa tiene una descenso de hasta un 80% con respecto a su valor inicial en la partícula más pequeña, dado que el tamaño de la partícula, como se mencionó anteriormente aumenta su tamaño más de 6 veces, y dado que la correlación utilizada para su determinación es inversamente proporcional al diámetro de la partícula, viéndose afectado su valor.

Esto indica que no se puede despreciar la transferencia de masa externa y que es importante conocer su evolución en el tiempo. Al incrementarse el tamaño inicial la disminución en el valor de este parámetro con respecto al inicial es más lento.

Para los tamaños de 50 y 150 μm , los valores del cociente $\frac{k_m}{k_{mi}}$ son 0.7 y 0.9 respectivamente. Es decir, que el valor de k_m se reduce de 10 a 30% con respecto a su valor al inicio de la reacción. Lo anterior afecta a la velocidad de reacción, ya que al disminuir el valor de k_m , el transporte del oxígeno hacia la superficie de la partícula se vuelve más difícil.

Resumiendo, el valor del coeficiente de transferencia de masa tiene una caída más significativa al disminuir el tamaño de las partículas a la entrada del reactor, disminuyendo su valor en menor proporción cuando se incrementa su tamaño.

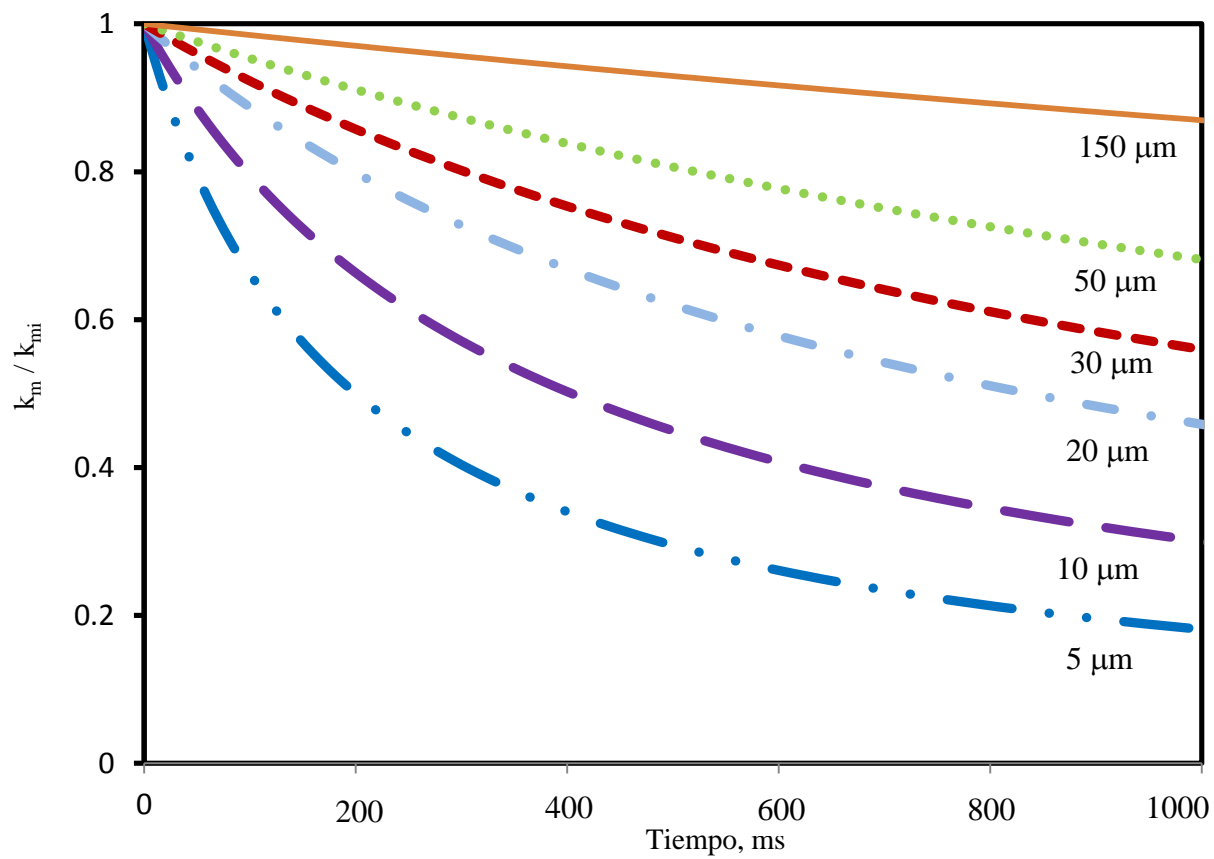


Figura 4.5 Evolución del Coeficiente de Transferencia de Masa en Función del Tamaño Inicial

En el Apéndice B de este trabajo, se incluyen resultados del modelo cinético para partículas individuales para otras propiedades las cuales están relacionadas con el grado de conversión de la partícula. Dichos resultados no son discutidos aquí por brevedad.

4.2 Validación del Modelo Matemático

4.2.1 Distribución de Tamaños en el Receptáculo

En la Tabla 4.2 se muestran las condiciones de cada experimento, los valores resultantes de los parámetros del modelo y los valores del parámetro de correlación r^2 obtenida en cada caso. Los valores de r^2 variaron entre 0.906 y 0.991, siendo el valor promedio 0.947. Esto indica que el grado de confiabilidad del modelo es aceptable en términos generales.

Con el fin de abreviar la discusión de este capítulo, se han elegido tres de los casos de la Tabla 4.2 para su análisis. Los resultados completos de este trabajo se anexan en el Apéndice C. Los casos de estudio corresponden a los experimentos 7, 15 y 17, los cuales pertenecen a diferentes fracciones de alimentación. Los experimentos 7 y 15 se seleccionaron porque sus comportamientos son similares a otros que se obtuvieron en su fracción de tamaño, buscando mostrar así una mayor representatividad de las corridas realizadas. El experimento 17 es de particular interés ya que corresponde a la distribución de tamaños de la mata sólida sin cribar.

El primer caso es el mostrado en la Figura 4.6, que corresponde al experimento 7. Se observa que la curva experimental es continua en todo el dominio de valores de tamaño de partícula y se ha podido reproducir razonablemente en los intervalos de 0-10 μm , 35-55 μm y de 90 μm en adelante. Dichos intervalos representan la mayor parte de la curva; en el intervalo de 10-35 μm se presenta la formación de un mínimo.

Tabla 4.2 Condiciones experimentales y resultados del modelo matemático

Corrida No.	Fracción de Tamaño de Partícula (μm)	Relación Oxígeno- Mata, $\text{kg O}_2/\text{kg mata}$	Contenido de Oxígeno en el Gas de Proceso (% vol)	g	γ	f_{2f}	f_{nf}	f_c	r^2
1	<37	0.25	70	56.92	-2.414	0.658	-0.056*	1.103	0.980
2	<37	0.33	70	18.14	-2.368	0.873	-1.617*	1.000	0.991
3	<37	0.25	100	54.65	-2.538	0.833	-0.147*	1.223	0.960
4	<37	0.33	100	54.69	-2.699	0.800	-0.417*	1.320	0.976
5	37-74	0.25	70	17.79	-2.268	0.225	1.148+	1.100	0.979
6	37-74	0.33	70	38.42	-2.508	0.605	0.911	1.220	0.922
7	37-74	0.25	100	18.95	-2.332	0.311	0.813	1.110	0.962
8	37-74	0.33	100	40.29	-2.530	0.813	0.512	1.240	0.955
9	74-105	0.25	70	6.09	-2.620	0.236	0.626	1.000	0.939
10	74-105	0.33	70	17.24	-2.560	0.386	1.033+	1.070	0.921
11	74-105	0.25	100	6.31	-2.482	0.026	1.081+	1.000	0.928
12	74-105	0.33	100	25.94	-2.660	0.597	0.703	1.100	0.913
13	105-149	0.25	70	5.00	-2.763	-0.223*	1.274+	1.000	0.906
14	105-149	0.33	70	13.28	-2.620	0.453	0.736	1.020	0.945
15	105-149	0.25	100	6.43	-2.664	0.171	0.993	1.000	0.947
16	105-149	0.33	100	12.27	-2.813	0.154	1.122+	1.030	0.906
17	<149	0.25	70	58.13	-2.356	-0.020*	1.449+	1.039	0.986
18	<149	0.33	70	46.83	-2.753	-0.060*	1.747+	1.071	0.954
19	<149	0.25	100	59.59	-2.730	0.211	0.999	1.196	0.928
20	<149	0.33	100	50.71	-2.644	0.434	1.115+	1.172	0.939

* f_{2f} o f_{nf} según corresponda

+ f_{nf}

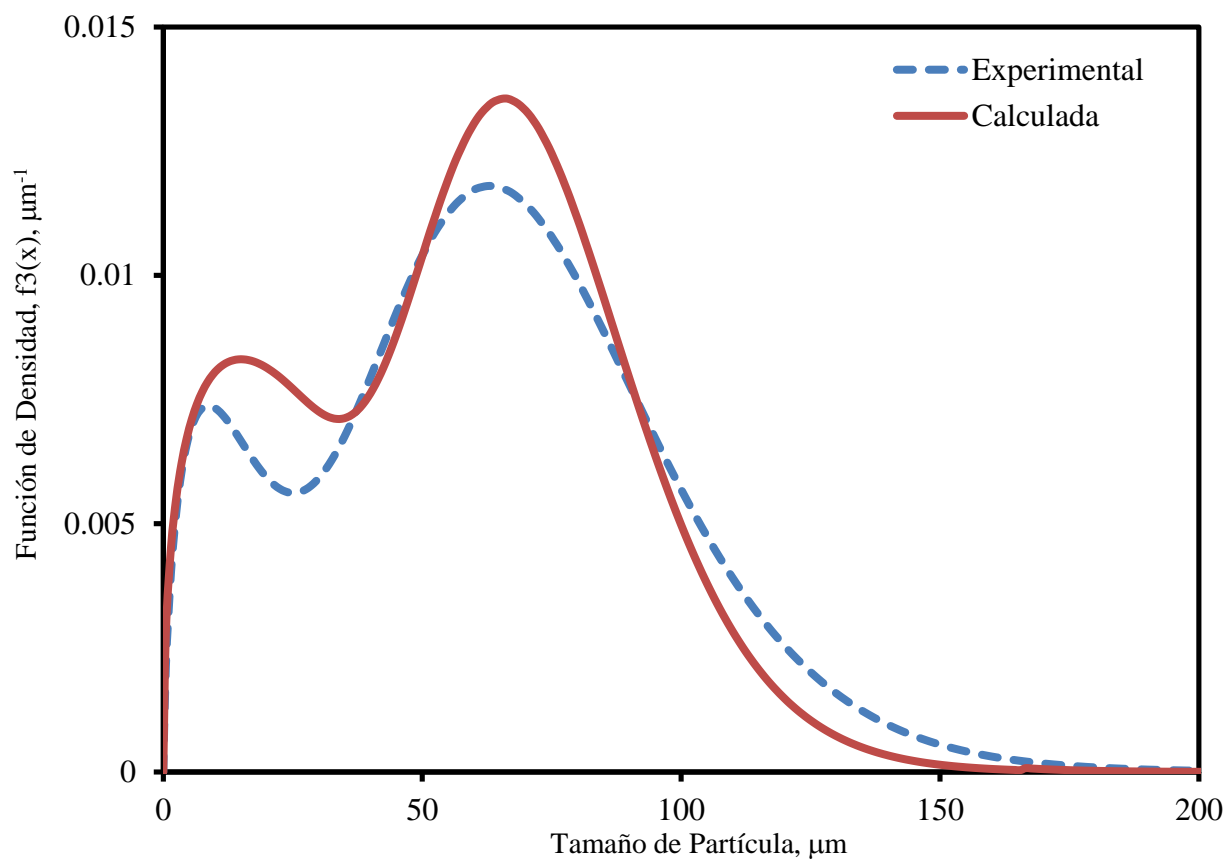


Figura 4.6 Funciones de Densidad Experimental y Calculada para el experimento No.7.
Condiciones Experimentales: 37-74 μm , Relación Oxígeno-Mata 0.25kg O₂/kg mata,
100% O₂ en Gas de Proceso. $r^2 = 0.962$

El punto mínimo calculado por el modelo se encuentra ligeramente desplazado a la derecha y sobreestimado en relación al valor experimental. A pesar de lo anterior, el valor de r^2 es alto, e igual a 0.962.

El segundo caso se presenta en la Figura 4.7 y corresponde al experimento 15. En este caso, el valor de correlación r^2 fue de 0.947. Se muestra una concordancia aceptable entre las predicciones del modelo y los datos experimentales. Los puntos mínimos y máximos de las funciones de densidad se calcularon con aceptable precisión y, en general, la curva calculada por el modelo es similar a la curva experimental siendo continua en todo el dominio de valores de tamaño de partícula.

En el intervalo de 0 a 15 μm se observa una ligera subestimación de los datos experimentales. Esta región corresponde a los polvos, los cuales son producidos por la fragmentación de las partículas grandes. La predicción precisa de la función de densidad en esta región fue particularmente difícil para todos los experimentos y requiere de un refinamiento posterior del modelo matemático.

El tercer caso corresponde al experimento 17. Los resultados se muestran en la Figura 4.8. Esta alimentación representa la mata sólida sin cribar y fue seleccionada porque las condiciones del experimento 17 son las típicas de operación del horno industrial. Para este caso, el valor del coeficiente de correlación r^2 fue de 0.986, el cual indica una buena aproximación. La Figura 4.8 muestra una excelente concordancia entre los valores calculados por el modelo y los datos experimentales. La parte de 150-300 μm indica que el modelo predice la expansión de las partículas ligeramente mayor a la observada en la curva experimental.

Los resultados discutidos anteriormente así como los mostrados en el Apéndice C, indican que el modelo reproduce razonablemente los mecanismos de expansión y fragmentación de las partículas de matas de cobre durante su oxidación en el reactor a nivel laboratorio.

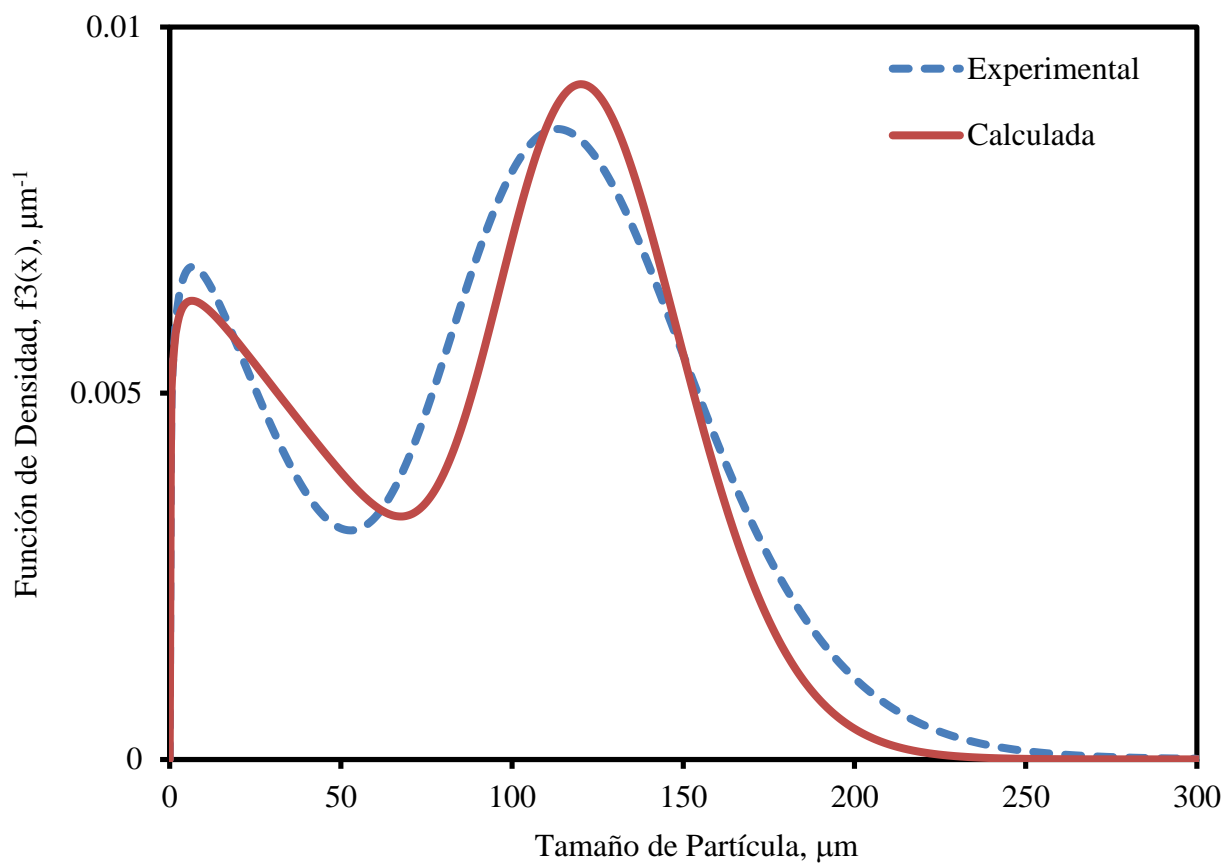


Figura 4.7 Funciones de Densidad Experimental y Calculada para el Experimento No.15. Condiciones Experimentales: 105-149 μm , Relación Oxígeno-Mata 0.25kg O_2 /kg mata, 100% O_2 en Gas de Proceso. $r^2 = 0.946$

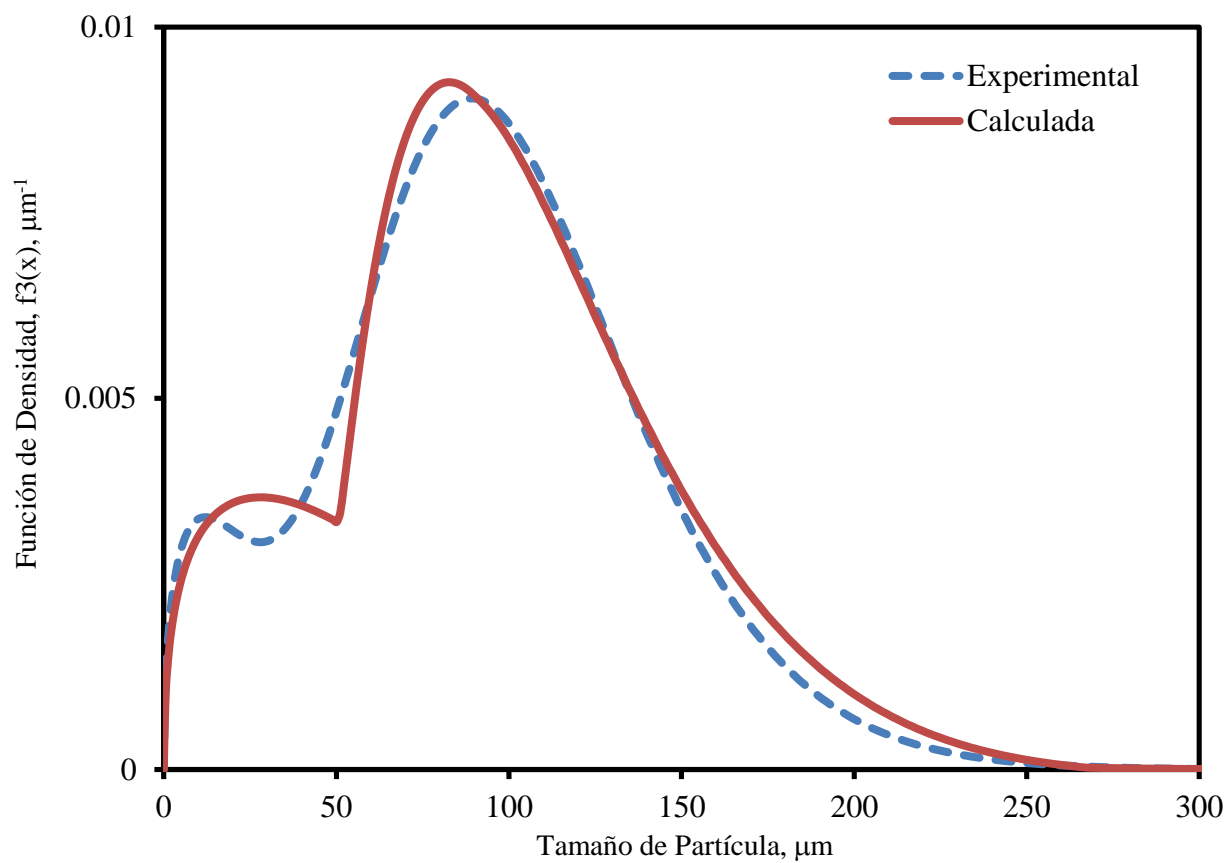


Figura 4.8 Funciones de Densidad Experimental y Calculada para el Experimento No.17.
Condiciones Experimentales: $<149 \mu\text{m}$, Relación Oxígeno-Mata $0.25\text{kg O}_2/\text{kg mata}$,
 $70\% \text{O}_2$ en Gas de Proceso. $r^2 = 0.986$

La Tabla 4.3 muestra una comparación entre los resultados obtenidos con el presente modelo y el reportado por Pérez-Tello et al. (2008), en el cual no se incluyen las reacciones de oxidación de las partículas. En relación a los parámetros de los modelos, la diferencia más notoria se refiere al parámetro de distribución de tamaños γ , el cual en el presente modelo se encuentra acotado hacia valores más negativos. El resto de los parámetros son de valor similar.

El valor promedio de r^2 aumentó de 0.914 a 0.947. Es decir, el presente modelo en general concuerda mejor con los datos experimentales que el reportado por Perez-Tello et al. (2008). Esto es atribuible a la inclusión de las reacciones de oxidación, así como a las modificaciones en el cálculo de los parámetros γ , f_{2f} y f_{nf} realizadas en el presente trabajo.

Una contribución adicional del presente trabajo se refiere a la predicción de la composición química de las partículas y su verificación con datos experimentales.

4.2.2 Cantidad de Polvo en el Receptáculo

Un punto importante en el proceso de conversión instantánea se refiere a la cantidad de polvo en los productos oxidados. Como se estableció previamente, dicho polvo provoca problemas operacionales en los equipos subsecuentes al horno de conversión, en particular la caldera y el precipitador electrostático. En este trabajo, se define polvo como cualquier partícula de tamaño igual o menor a 20 μm , independientemente de su composición química.

De acuerdo a las propiedades de las funciones de densidad, la fracción en peso de la población de partículas en el receptáculo con un tamaño igual o inferior a 20 μm está dada por:

Tabla 4.3 Comparación del presente modelo de fragmentación
con el reportado por Pérez-Tello et al. (2008)

Parámetro	Modelo Anterior	Este trabajo
	Perez-Tello et al. (2004)	
g ($\mu\text{m/s}$)	5 - 60	5 - 60
γ	(-3.5) - (-0.5)	(-2.3) - (-2.8)
f_{2f}	0.1 - 0.79	0 - 0.87
f_{nf}	0.15 - 1.0	0 - 1.0
f_c	1.02 - 1.2	1.0 - 1.32
r^2	0.77 - 0.99	0.9 - 0.99
r^2 promedio	0.914	0.947

$$F_{20,r} = \int_0^{20} f_3(x) dx \quad (4.2)$$

La Figura 4.9 muestra que la mayoría de los puntos están muy cercanos a la línea de 45° lo cual indica que la cantidad de polvo en el receptáculo calculado por el modelo matemático concuerda razonablemente con los datos experimentales. Se puede observar también que la mayoría de los puntos se encuentran por debajo de la línea a 45°, lo cual indica que en general el modelo tiende a subestimar la cantidad de polvo. El error más pequeño en el cálculo de la cantidad de polvo en el receptáculo fue de -0.3% y el máximo de -15%. El promedio de error se determinó en 5.3%.

4.2.3 Azufre Remanente en las Partículas

Para esta sección se han considerado los mismos casos discutidos con anterioridad, con el fin de estudiar el azufre que permanece en la población de partículas durante su vuelo en la cámara de reacción hasta llegar al receptáculo. En la Figura 4.10 se muestran los resultados para el experimento 7; la línea continua representa las predicciones del modelo matemático, mientras que los puntos corresponden a los datos experimentales.

Este caso corresponde a una alimentación de partículas pequeñas (37-74 μm). En general se observó una disminución en la cantidad de azufre a lo largo de la cámara de reacción tanto en los datos obtenidos con el modelo como en los experimentales. Al analizarse la pendiente de la curva, se observa que es negativa en todo el intervalo, lo cual puede traducirse como la rapidez con la que se elimina el azufre. Conforme aumenta la distancia en el reactor se puede ver que la pendiente se vuelve menos negativa, tendiendo a volverse cero llegando a un valor constante al final del tiempo de residencia de las partículas en la cámara de reacción.

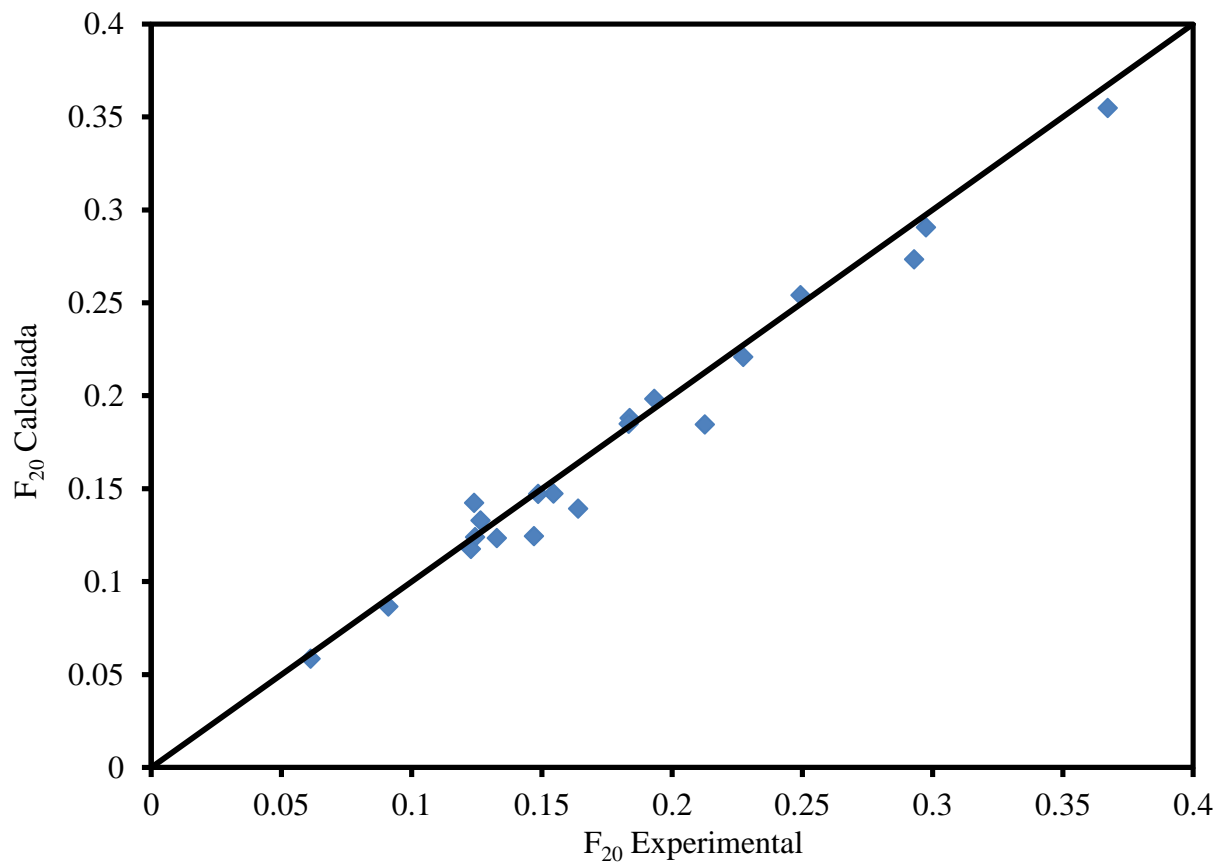


Figura 4.9. Comparación Entre las Fracciones de Polvo en el Receptáculo Calculadas y Experimentales

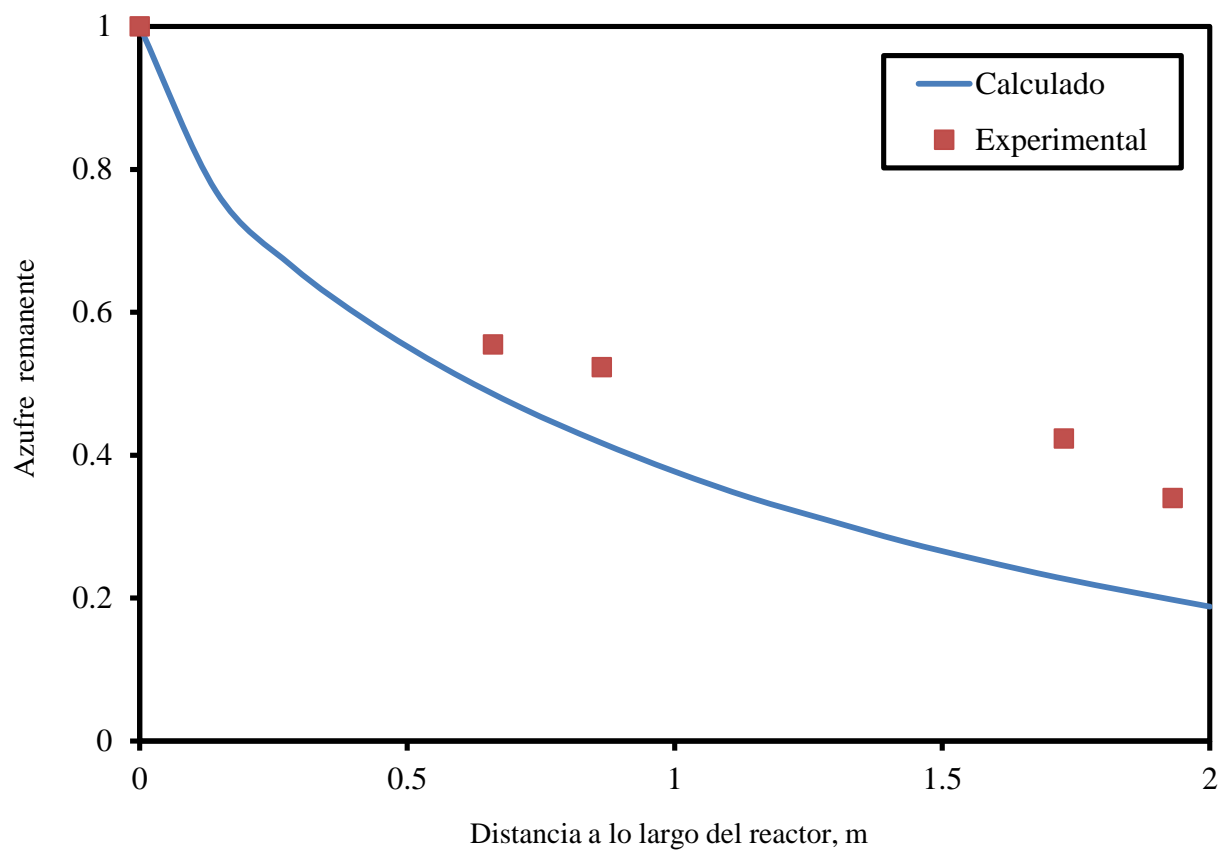


Figura 4.10 Evolución de la Fracción de Azufre Remanente en la Población de Partículas a lo Largo del Reactor para el Experimento No.7. Condiciones Experimentales: 37-74 μm , Relación Oxígeno-Mata 0.25kg O₂/kg mata, 100% O₂ en Gas de Proceso.

La tendencia a la baja en la cantidad de azufre en la población de partículas corresponde a la esperada. Se observa una subestimación de los valores calculados con respecto a los valores muestreados en el sistema experimental, dado que en el receptáculo el modelo predijo que permanece un 30% del azufre inicial, mientras que el valor real experimental es del 34 %. Se observó además que la rapidez de disminución de la cantidad de azufre remanente calculada es muy similar a la experimental representando sus valores de una manera razonable.

El segundo caso que se analiza es el correspondiente al experimento 15. En este experimento, la alimentación al reactor consistió de partículas de tamaño intermedio (105-149 μm). Los resultados se muestran en la Figura 4.11.

Las condiciones de operación para este experimento son 0.25 kg O_2 /kg Mata y 100% de O_2 en el gas de proceso. En esa figura se puede observar que al igual que en el caso anterior, la gráfica presenta una pendiente negativa, pero menos inclinada, lo cual nos indica que el azufre se está eliminando a una rapidez menor. Los valores que se presentan en este caso son cantidades de azufre que permanece en la población de partículas en una concentración alta, y por lo tanto el grado de eliminación de azufre, o de oxidación es pequeño, del orden del 40% al llegar al receptáculo.

Al igual que en el experimento anterior, la tendencia a la baja de azufre que permanece en la población de partículas es lo que se esperaba, ya que en los resultados de cinética de partículas individuales se observó que al aumentar el tamaño de alimentación de las partículas, la eliminación de azufre descendía.

El siguiente caso es el correspondiente al experimento 17, el cual se realizó con material sin cribar, $<149 \mu\text{m}$. En la Figura 4.12 se muestran los resultados para este experimento. En este caso, la rapidez de consumo de azufre en los primeros 50 cm es muy alta, permaneciendo el 60 % del azufre inicialmente presente en población de partículas.

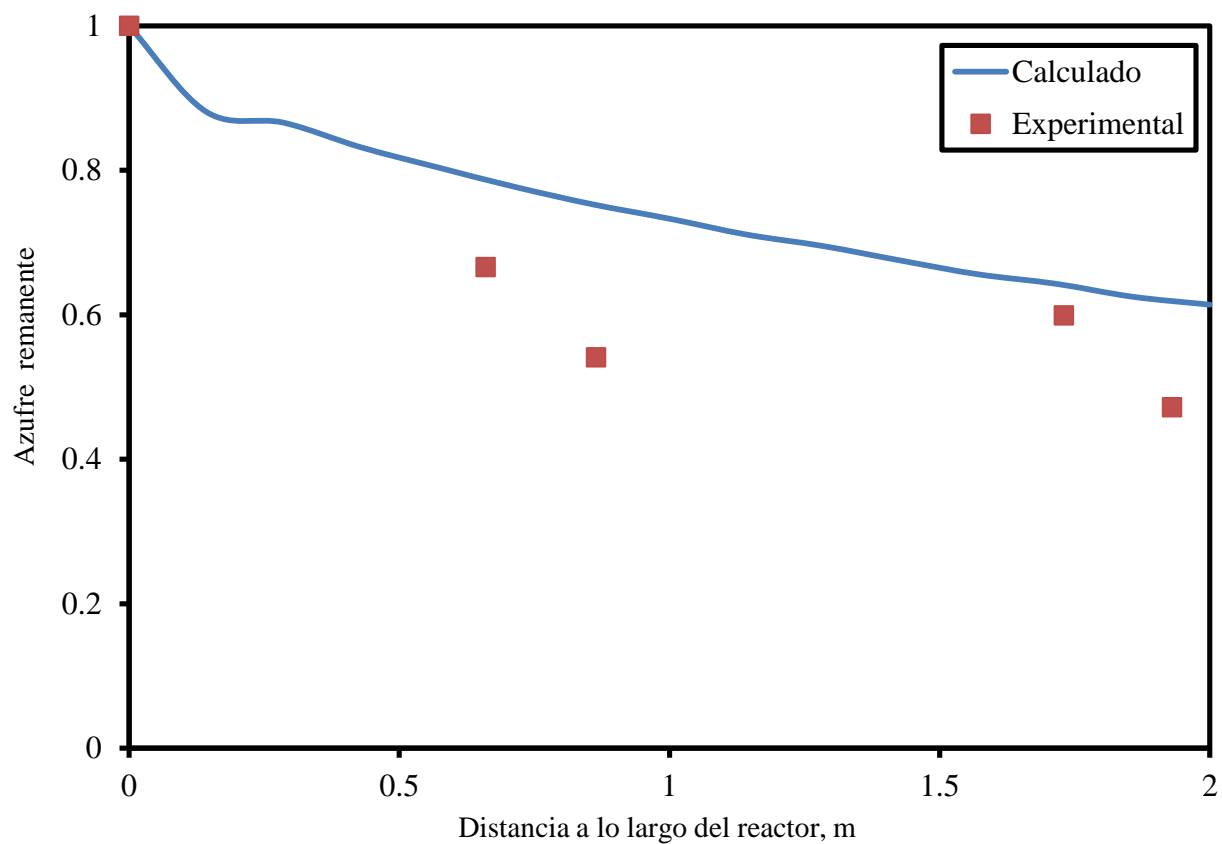


Figura 4.11 Evolución de la Fracción de Azufre Remanente en la Población de Partículas a lo Largo del Reactor para el Experimento No.15. Condiciones Experimentales: 105-149 μ m, Relación Oxígeno-Mata 0.25kg O₂/kg mata, 100% O₂ en Gas de Proceso.

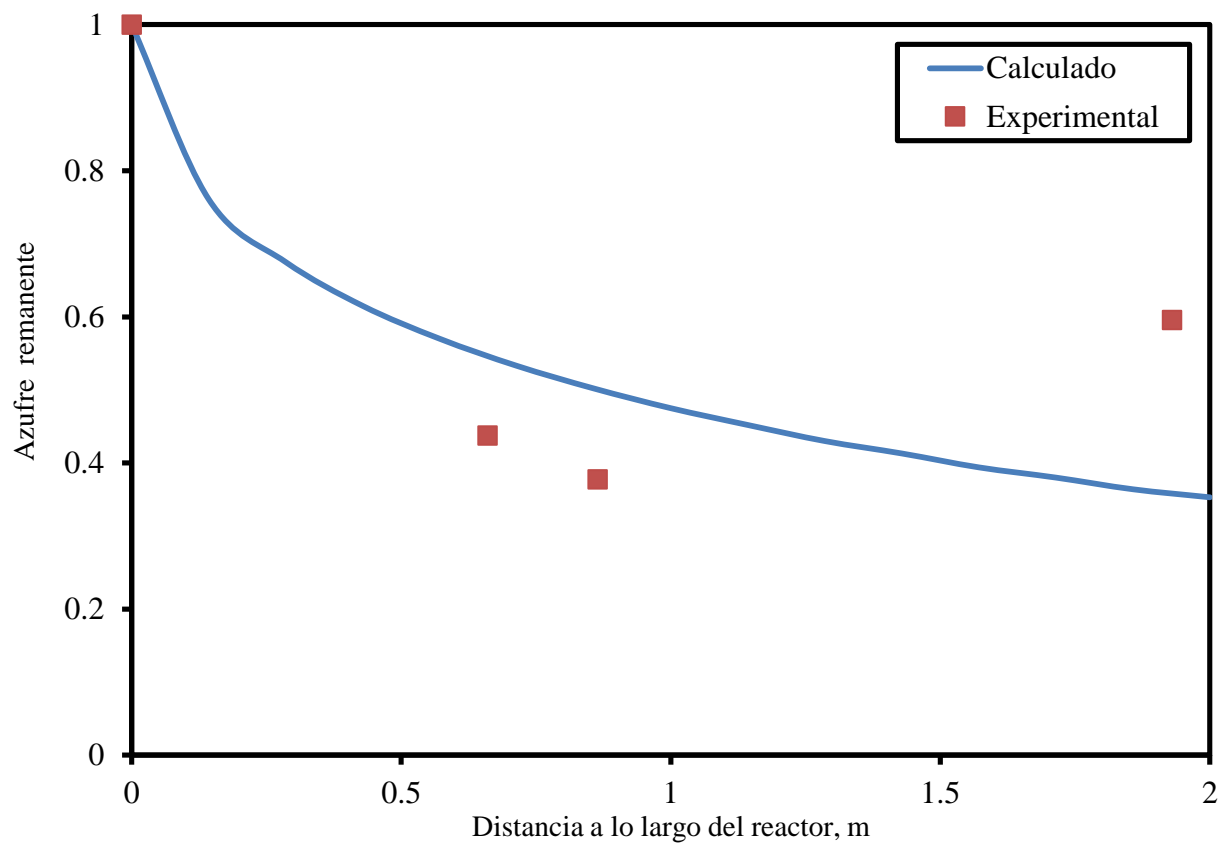


Figura 4.12 Evolución de la Fracción de Azufre Remanente en la Población de Partículas a lo Largo del Reactor para el Experimento No.17. Condiciones Experimentales: $<149\mu\text{m}$, Relación Oxígeno-Mata $0.25\text{kg O}_2/\text{kg mata}$, $70\% \text{O}_2$ en Gas de Proceso.

Posteriormente la rapidez de eliminación de azufre disminuye: al cabo de 1.5 m se elimina el 20%, permaneciendo el 40% en la población de partículas.

Se puede esperar un grado menor de eliminación de azufre por ser la fracción de tamaños alimentados más grande. Sin embargo, en esta fracción se tiene una amplia distribución de tamaños de partículas, lo que hace que el comportamiento de la población sea diferente. Las predicciones del modelo discrepan de los experimentales, esto puede deberse a la dificultad al llevar a cabo el muestreo en el sistema experimental.

Una evaluación global de los resultados de esta sección, indica que el presente modelo representa con un razonable grado de exactitud los diversos fenómenos que ocurren en las partículas de mata de cobre durante su oxidación en la cámara de reacción del horno de conversión instantáneo a nivel laboratorio. Por lo tanto, el modelo puede ser utilizado para analizar el proceso desde un punto de vista fundamental. Dicho análisis se presenta en la siguiente sección.

4.3 Análisis del Proceso de Conversión Instantánea

4.3.1 Evolución de la Distribución de Tamaños en la Cámara de Reacción

En la Figura 4.13 se muestran los resultados de la distribución de tamaños calculada por el presente modelo matemático para el experimento 7. Este caso corresponde a una alimentación de partículas pequeñas (37-74 μm). En general, se observa un cambio progresivo en la forma de las curvas de la función de densidad conforme la población de partículas se desplaza a lo largo del reactor.

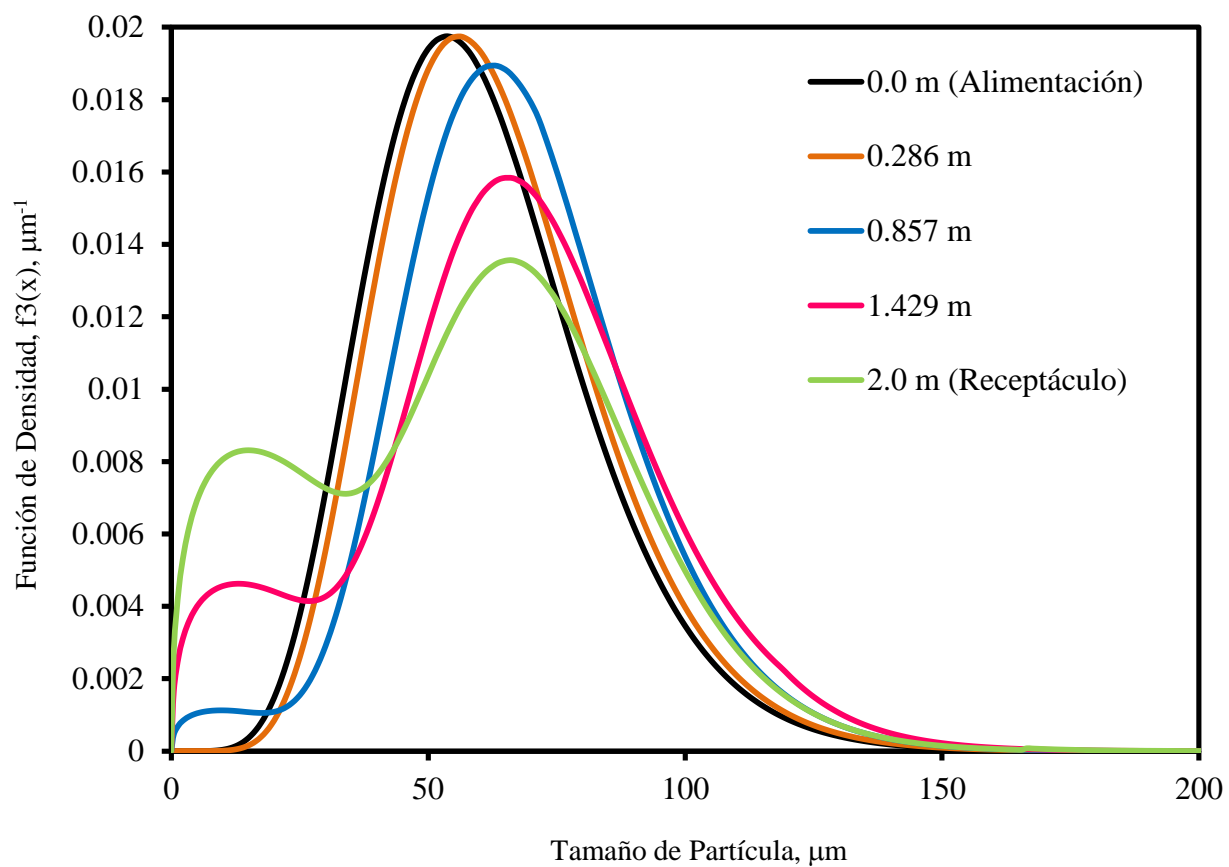


Figura 4.13 Evolución de la Función de Densidad a través del Recorrido por la Cámara de Reacción, Experimento No.7. Condiciones Experimentales: 37-74 μm , Relación Oxígeno-Mata 0.25kg O_2 /kg mata, 100% O_2 en Gas de Proceso.

A una distancia de 0.286 m a partir de la entrada, se observa solamente el fenómeno de expansión; esto se manifiesta en un desplazamiento general de la curva de alimentación hacia la derecha; es decir, hacia valores más grandes de tamaño de partícula. A partir de 0.857 m en adelante se empieza a observar la fragmentación. Ésta se manifiesta en la curva de dos formas básicas: (a) la función de densidad de los tamaños pequeños, en particular de 0-40 μm , se incrementa conforme pasa el tiempo, y (b) la función de densidad de los tamaños mayores, en particular en el intervalo de 50-150 μm aumenta hasta una posición de 1.429 m y empieza a disminuir hasta llegar al receptáculo.

De acuerdo a la Figura 4.13, el tiempo de residencia de las partículas en el horno es un factor importante en la generación de polvo; es decir, en la producción de partículas con tamaño inferior a 20 μm . Puede observarse que el avance del tiempo lleva consigo la producción de partículas de tamaños considerados como polvo fino no deseado.

El segundo caso que se analiza es el correspondiente al experimento 15. En este experimento, la alimentación al reactor consistió de partículas de tamaño intermedio (74-105 μm). Los resultados se muestran en la Figura 4.14.

En esta figura se puede observar que desde la alimentación hasta el receptáculo el valor de la función de densidad de las partículas pequeñas, es decir, menores a 50 μm aumenta conforme avanzan en el reactor. Asimismo, no es perceptible el fenómeno de expansión de las partículas grandes, puesto que el valor de su función de densidad disminuye consistentemente con el tiempo. A partir de una distancia de 0.857 m se va formando un máximo en las partículas pequeñas, alrededor de 10 μm , esto nos indica la presencia de fragmentación de partículas grandes generando partículas consideradas como polvo muy fino. Aún cuando el valor de correlación para este experimento fue muy alto, hay una subestimación para la predicción de partículas en tamaños pequeños.

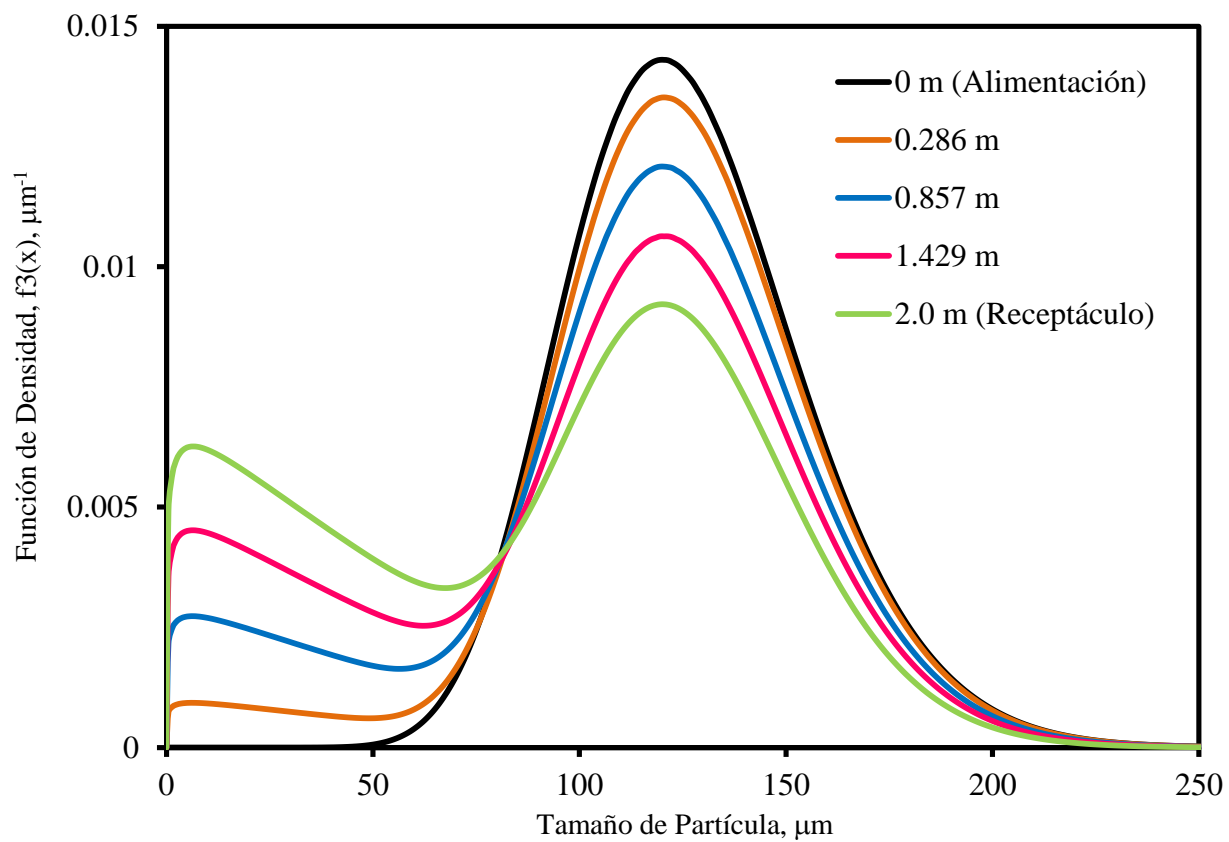


Figura 4.14 Evolución de la Función de Densidad a través del Recorrido por la Cámara de Reacción, Experimento No.15. Condiciones Experimentales: 105-149 μm , Relación Oxígeno-Mata 0.25kg O_2 /kg mata, 100% O_2 en Gas de Proceso.

El tercer caso se muestra en la Figura 4.15 y corresponde al experimento 17. Este caso representa el material sin cribar, es decir $<149 \mu\text{m}$, en el cual se puede observar en su alimentación que posee una distribución muy amplia en tamaño de partícula. Se observa en general un desplazamiento paulatino de la curva de función de densidad hacia la derecha; es decir, hacia los tamaños mayores, lo cual indica la expansión de las partículas. Simultáneamente, se observa una fragmentación progresiva, lo cual se manifiesta en un aumento de la función de densidad en el intervalo de tamaño de 0-50 μm .

Comparativamente con los casos mostrados en las Figuras 4.13 y 4.14, los cambios observados en la Figura 4.15 son menores. Éstos se observan como una elevación de la función de densidad en el intervalo de 0-50 μm . Asimismo se observa la generación de un punto mínimo que se desplaza hacia los tamaños mayores conforme las partículas se desplazan a lo largo del reactor.

La formación de un punto mínimo en la función de densidad se debe fundamentalmente a que la masa de las partículas que se expanden no es compensada por la masa de las partículas que se fragmentan. La primera parte de las curvas antes del punto mínimo representa a las partículas que se produjeron por fragmentación. La segunda parte de la curva, después del punto mínimo, representa a las partículas que se expandieron.

La formación de un punto mínimo en la función de densidad (y por lo tanto la presencia de dos máximos) puede atribuirse a la turbulencia presente en el reactor, la cual es representada indirectamente en el modelo por el parámetro f_i . De este modo, partículas idénticas que ingresan simultáneamente en un mismo punto al reactor, pueden seguir trayectorias diferentes en la cámara de reacción hasta alcanzar el receptáculo; esto afecta tanto su tamaño final como su composición química.

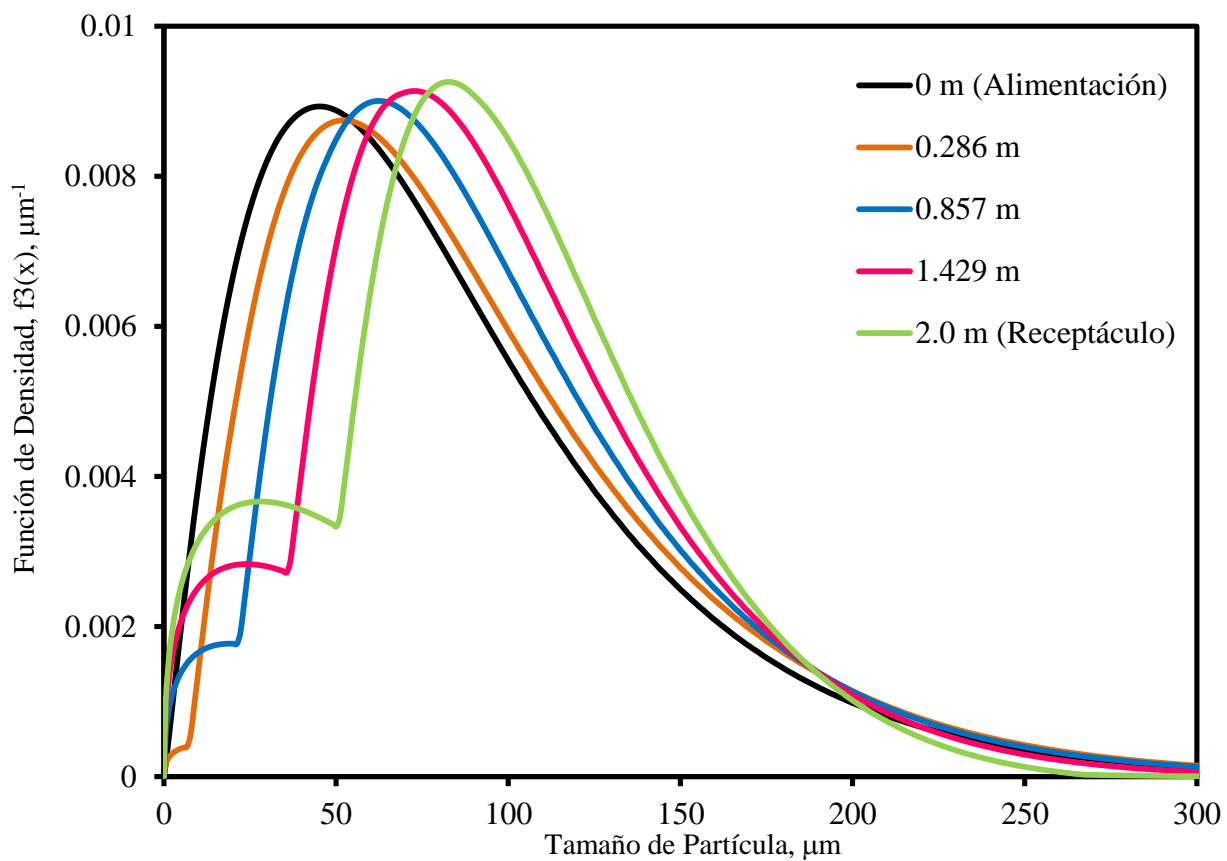


Figura 4.15 Evolución de la Función de Densidad a través del Recorrido por la Cámara de Reacción, Experimento No.17. Condiciones Experimentales: $<149 \mu\text{m}$, Relación Oxígeno-Mata $0.25\text{kg O}_2/\text{kg mata}$, $70\% \text{O}_2$ en Gas de Proceso.

4.3.2 Correlación de los parámetros del Modelo con las Condiciones Experimentales

En base a los resultados de las secciones anteriores, se considera que los valores numéricos de los parámetros del modelo matemático representan razonablemente los fenómenos físicos que ocurren durante la oxidación de las partículas en horno a nivel laboratorio. En esta sección se pretende obtener un mejor entendimiento de dichos fenómenos, correlacionando los valores de los parámetros del modelo con las condiciones experimentales reportadas en la Tabla 4.1.

Rapidez de Expansión

En la Figura 4.16 se presenta el comportamiento de la rapidez de expansión como función del tamaño promedio de partícula de la alimentación, la relación oxígeno-mata y la concentración de oxígeno en el gas de proceso. Este parámetro presenta valores entre 5 y 59.6 $\mu\text{m/s}$.

Como se mencionó anteriormente, la alimentación con tamaños $<149 \mu\text{m}$ representa la mata sólida sin cribar. Su tamaño promedio es de 75 μm .

Esta es una alimentación con una amplia distribución de tamaños, tal como se muestra en la Figura 4.15. En general, los resultados obtenidos con esta alimentación no siguieron las tendencias observadas para el resto de las fracciones cribadas.

Es posible que el grado de dispersión en su función de densidad de la alimentación $<149 \mu\text{m}$ sea el causante de esto. Por lo anterior, en todas las figuras de esta sección los resultados para la alimentación de $<149 \mu\text{m}$ se representan individualmente, sin conectarse con los resultados de las fracciones cribadas.

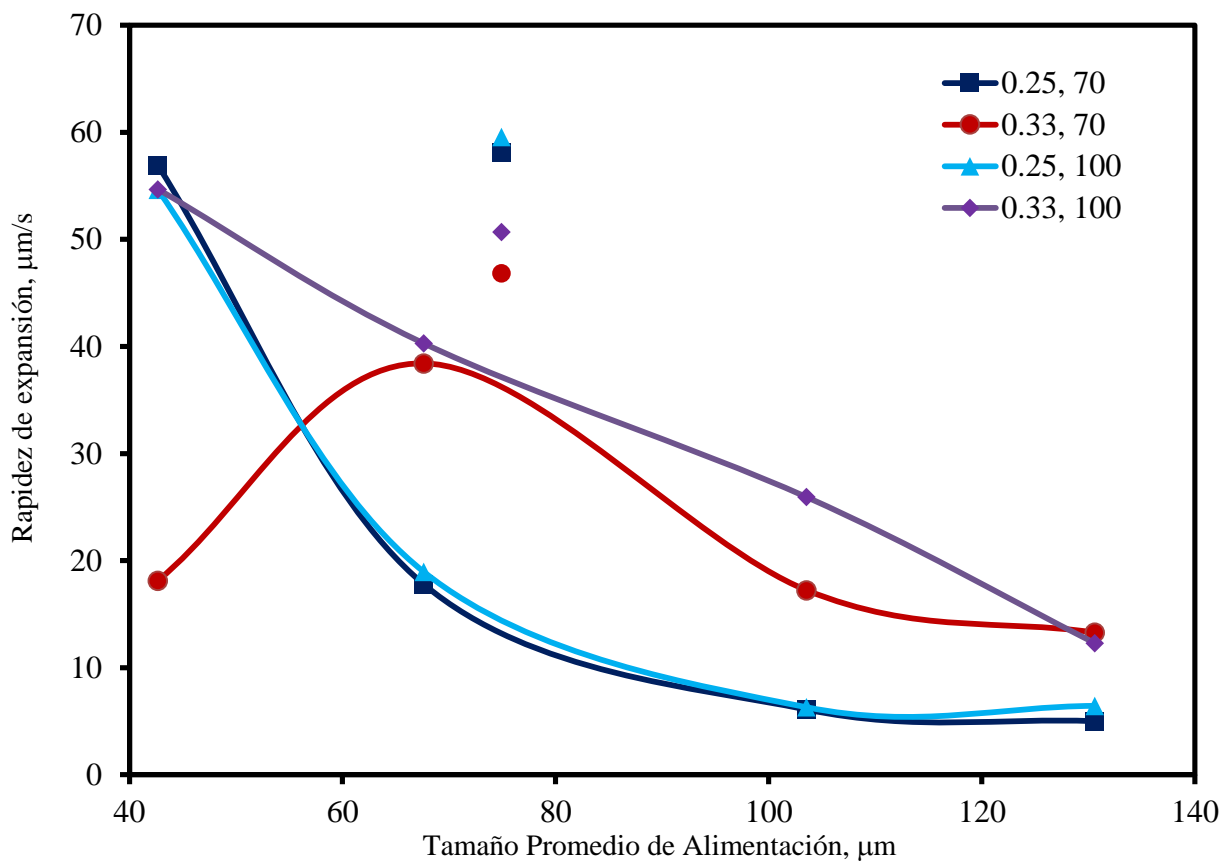


Figura 4.16 Efecto de las Variables de Operación Sobre la Rapidez de Expansión, g

En la Figura 4.16 se observa que la relación oxígeno-mata afecta a la rapidez de expansión. Los valores de la rapidez de expansión, g cuando la relación es de 0.33 kg O₂/kg mata son mayores que cuando la relación es de 25 kg O₂/kg de mata a excepción del tamaño promedio de partícula más pequeño, es decir, para una alimentación de partículas <37μm y 70% de O₂ en el gas de proceso. Consecuentemente, a mayor relación oxígeno-mata se tiene una mayor velocidad de expansión, g , a excepción de ese caso.

Una explicación a lo anterior es la siguiente: al disponer las partículas de una mayor cantidad de oxígeno para reaccionar, la oxidación procede a un mayor grado de conversión lo que ocasiona un mayor crecimiento de las partículas.

El contenido de oxígeno en el gas de proceso no afecta significativamente a la rapidez de expansión, sólo en el caso de partículas pequeñas, y para una relación constante de oxígeno-mata pudo observarse que la concentración de oxígeno afectó de una manera considerable. Para valores constantes de tamaño de partícula y relación oxígeno-mata, los valores de la rapidez de expansión g para contenidos de oxígeno de 70% y 100% son similares, a excepción del caso anteriormente mencionado.

Estos son resultados no esperados ya que a mayor concentración de oxígeno se espera que se acelere la oxidación de las partículas. Esta es la explicación más sensata para el caso ya discutido en donde hubo una diferencia significativa en el valor de g para partículas pequeñas e igual relación oxígeno-mata. Este mismo comportamiento no esperado se observó en los datos experimentales.

El aumento del tamaño promedio en la alimentación produce un efecto de disminución en la rapidez de expansión. Es decir, las partículas más pequeñas se expanden más rápidamente que las partículas grandes. Estos resultados concuerdan satisfactoriamente con las observaciones experimentales de Pérez-Tello et al., 2001a.

En general, la Figura 4.16 indica que la variable de operación que más afecta a la rapidez de expansión es el tamaño de partícula de la alimentación, seguida por la relación de oxígeno-mata; la concentración de oxígeno no tiene efecto significativo sobre g , sólo en un caso en particular.

Parámetro de Distribución, γ

La Figura 4.17 muestra los valores del parámetro γ en función de las condiciones de operación. Se observa que todos los valores del parámetro de distribución de tamaños, γ son negativos; esto en general indica una fragmentación orientada hacia los tamaños de partícula finos. Los valores de γ varían entre -2.268 y -2.813.

En general se observa una disminución del parámetro γ hacia valores más negativos conforme aumenta el tamaño de partícula de la alimentación. Los efectos de las condiciones de operación se observan en la misma proporción para todos los tamaños de partícula. Puede observarse en esta figura que el parámetro que parece más significativo es la relación oxígeno mata sobre γ tomando valores más cercanos a cero para la relación oxígeno/mata de 0.25 kg O₂/kg mata, y valores más negativos de γ cuando la relación oxígeno-mata es de 0.33 kg O₂/kg mata.

La concentración de oxígeno en el gas de proceso tiene poco efecto sobre los valores del parámetro de distribución de tamaños, γ , y en general se observa que al aumentar la concentración de oxígeno los valores de γ se vuelven más negativos.

Se espera que la fragmentación sea más fina cuando el tamaño de alimentación sea grande. Esto es debido a la mayor cantidad de azufre contenido en las partículas, lo que a su vez produce una cantidad mayor de SO₂ con el consecuente calor de reacción y fragmentación de las mismas. Por lo anterior, los resultados de la Figura 4.17 en general son consistentes con las expectativas.

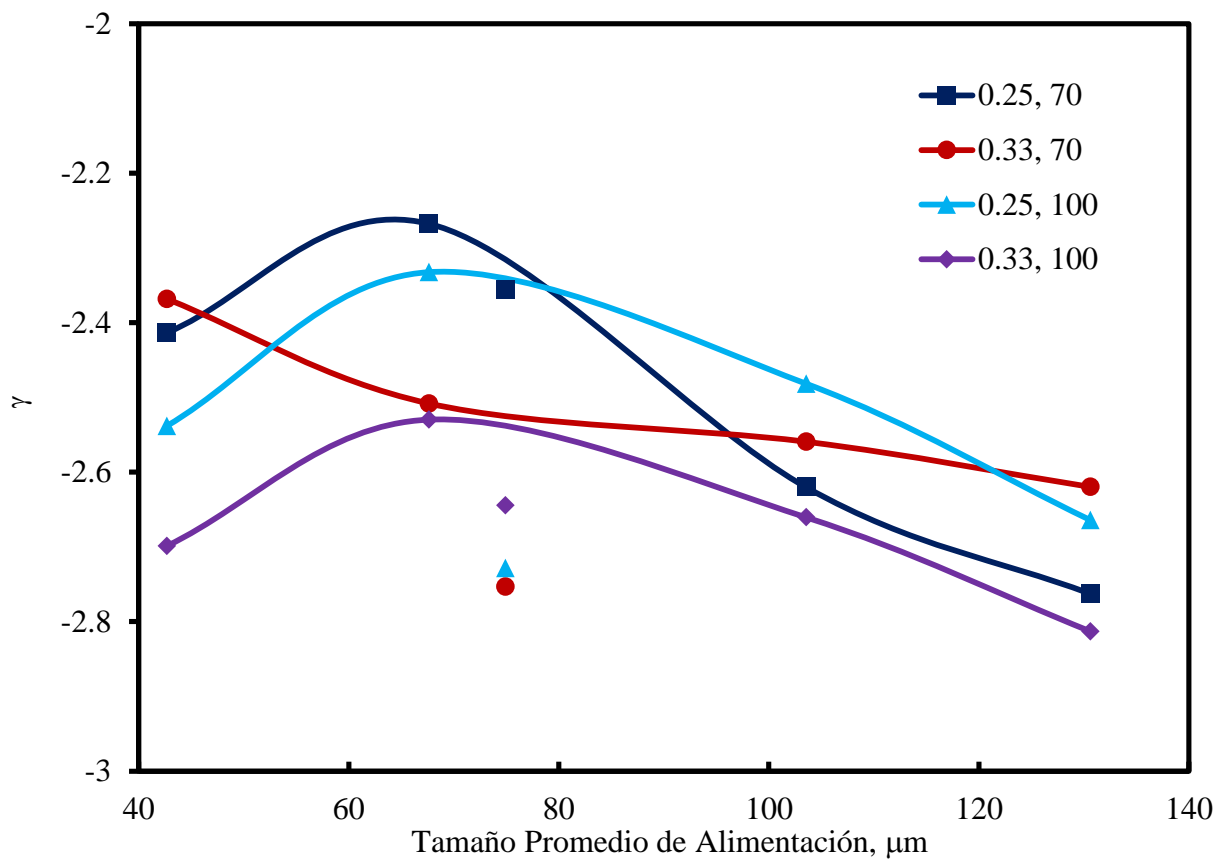


Figura 4.17 Efecto de las Variables de Operación Sobre el Parámetro de Distribución, γ

Parámetro f_{2f}

La Figura 4.18 muestra los valores de este parámetro en función de las condiciones de operación. Sus valores oscilaron entre 0 y 0.873. La tendencia indica que este parámetro disminuye en general con el tamaño de partícula. Esta no era la tendencia esperada. Se esperaba que, para una concentración de oxígeno y relación de oxígeno-mata fijos, las curvas serían líneas paralelas al eje x , ya que, en igualdad de condiciones de experimentación, las partículas más pequeñas se comportarían de igual manera, sin importar de qué otros tamaños de partícula estuvieran acompañadas en la alimentación.

Puesto que el valor de f_{2f} fue estimado mediante ajuste a los datos experimentales, el hecho de que este parámetro varíe con el tamaño de partícula de la alimentación sugiere dos posibilidades: (1) la aglomeración de partículas en el receptáculo, lo que disminuyó la cantidad de partículas finas, y consecuentemente subestimando su cantidad, y (2) el escape de partículas finas por arrastre con el gas de proceso, con lo cual estas partículas no fueron cuantificadas en los experimentos. El modelo no toma en cuenta estas posibilidades.

Por otro lado, en general, cuando la relación oxígeno-mata es de 0.33 kg O₂/kg mata, el valor de f_{2f} es mayor que a 0.25 kg O₂/kg mata para una misma concentración de oxígeno en el gas de proceso. Este es un resultado esperado porque a mayor cantidad de oxígeno disponible, las reacciones proceden a mayor conversión y por lo tanto es más probable la fragmentación.

El efecto de la concentración de oxígeno no es claro pero en la mayor parte de las gráficas, con una relación oxígeno-mata fija, tienden a ser mayores cuando aumenta la cantidad de oxígeno en el gas de proceso.

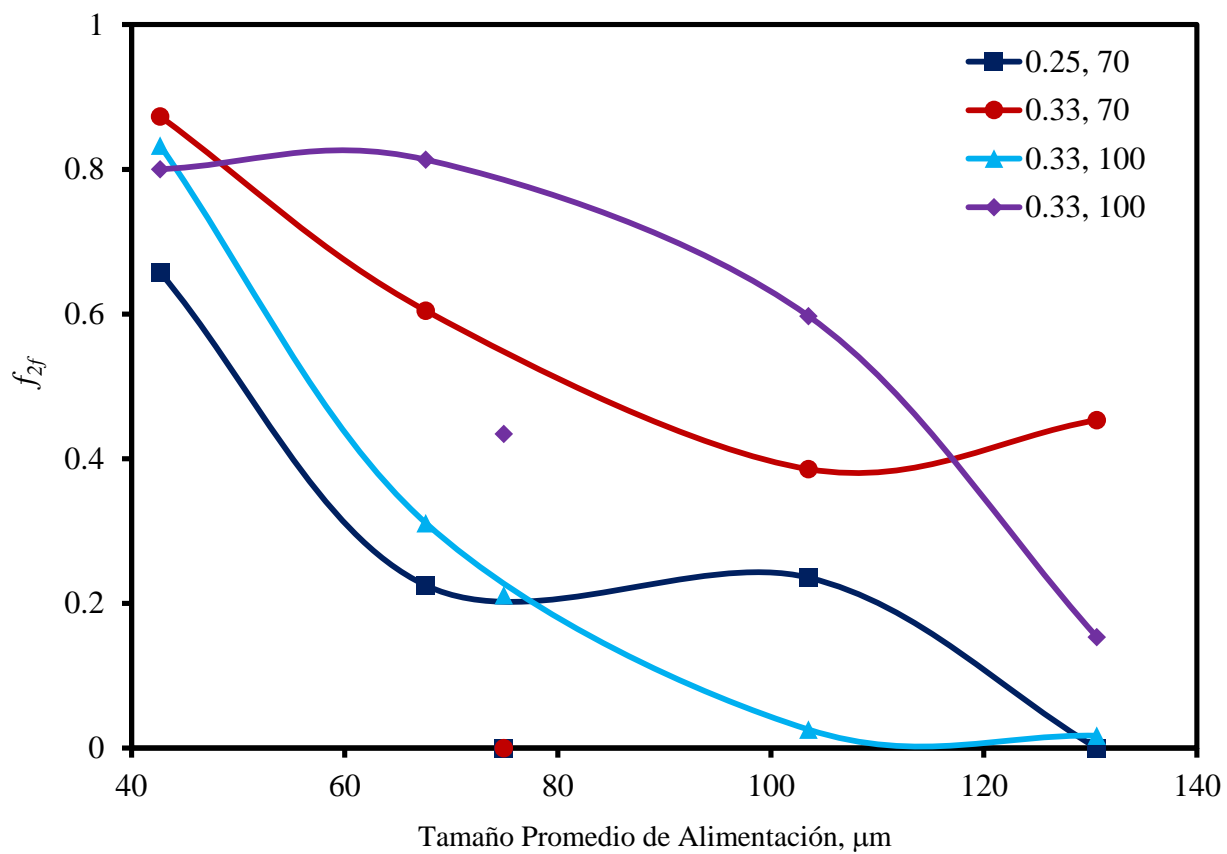


Figura 4.18 Efecto de las Variables de Operación Sobre el Parámetro f_{2f}

Debe observarse que de las veinte condiciones experimentales que se reprodujeron en este modelo, sólo tres presentaron valores de f_{2f} igual a cero de los cuales dos corresponden al material sin cribar. Esto quiere decir que, para estas condiciones experimentales, ninguna partícula pequeña pudo fragmentarse.

Parámetro f_{nf}

El comportamiento de este parámetro en función de las variables de operación se muestra en la Figura 4.19. Sus valores varían entre 0 y 1. Similarmente al caso de f_{2f} , se esperaba que este parámetro no fuera función del tamaño promedio de partícula de la alimentación. Aunque este comportamiento no se cumple, la tendencia es más razonable que en el caso de f_{2f} .

En este caso, f_{nf} en general aumenta con el tamaño de la alimentación. Esto indica que las partículas más grandes se fragmentan en mayor grado cuando están en compañía de otras partículas grandes, lo cual sugiere que el choque de partículas puede ser otro factor de fragmentación, posiblemente en la cercanía del quemador, que es donde la densidad de partículas es más alta.

El efecto de la relación oxígeno-mata es claro. En general cuando ésta aumenta, el valor de f_{nf} disminuye para una concentración de oxígeno en el gas de proceso constante. El valor de la concentración de oxígeno sobre f_{nf} no es claro. En general, los valores de f_{nf} son mayores que los valores de f_{2f} es decir, las partículas más grandes se fragmentan más que las más pequeñas, lo cual concuerda satisfactoriamente con las observaciones experimentales.

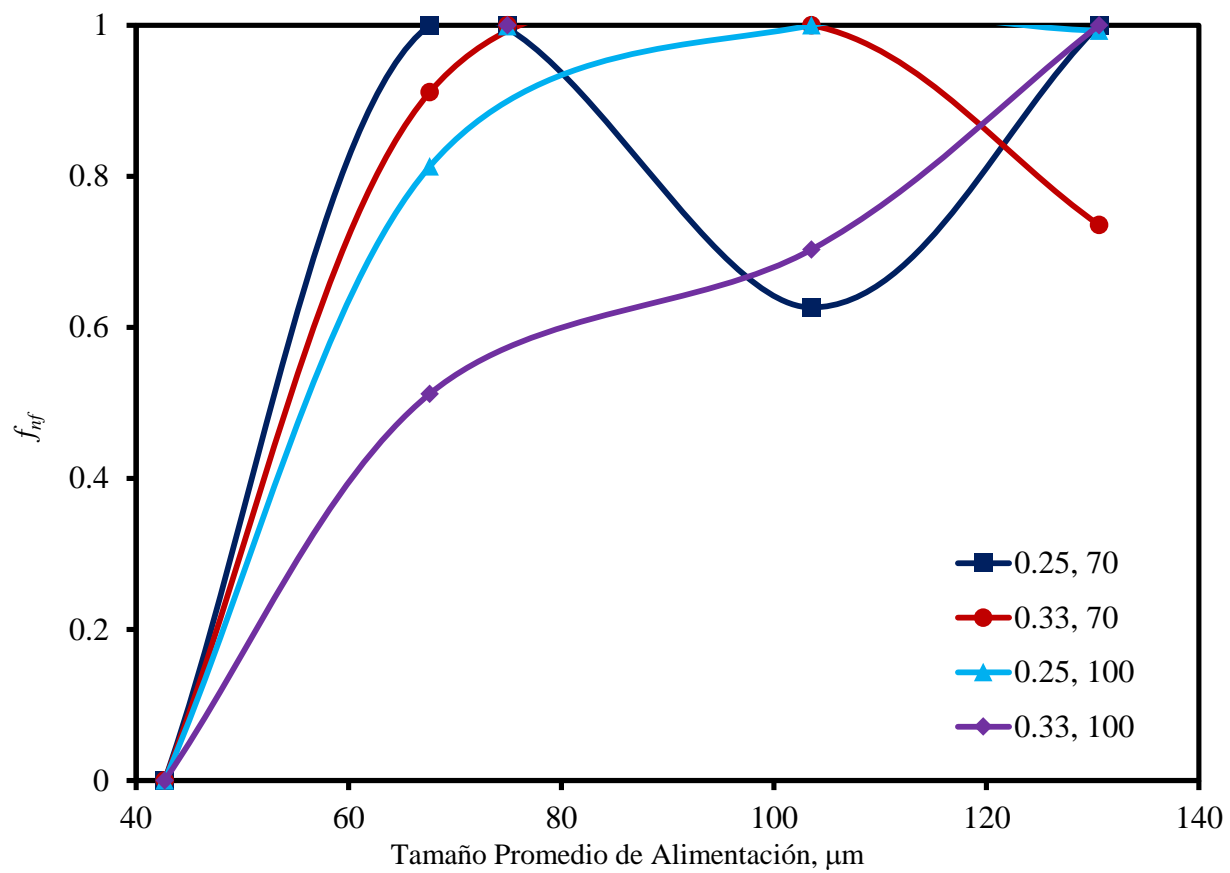


Figura 4.19 Efecto de las Variables de Operación Sobre el Parámetro f_{nf}

Es importante notar que de las veinte condiciones experimentales que se representaron en este trabajo, cuatro presentaron valores de f_{nf} igual a cero, y todos corresponden a los experimentos con tamaño de alimentación más pequeño, es decir, $<37\mu\text{m}$ el cual corresponde a un tamaño promedio de alimentación de $42.6\ \mu\text{m}$, lo cual indica que ninguna de las partículas más grandes en esta fracción de tamaño pudo fragmentarse. Asimismo, se observa que en ocho ocasiones f_{nf} fue igual a la unidad, estos corresponden a diferentes condiciones experimentales y diferente tamaño de partícula promedio en la alimentación, indicando que todas las partículas más grandes en esos experimentos sufrieron fragmentación.

Factor de Diámetro Crítico, f_c

El comportamiento de este factor se muestra en la Figura 4.20. Sus valores oscilan entre 1 y 1.32. El valor de f_c igual a 1 significa que las partículas inician su fragmentación desde el momento en que entran al reactor. El valor máximo de f_c igual a 1.32 indica que como máximo las partículas crecen un 32% en su diámetro antes de empezar a fragmentarse.

La Figura 4.20 muestra que el valor de f_c disminuye conforme se incrementa el tamaño promedio de alimentación de las partículas.

En general, el factor de diámetro crítico disminuye con el tamaño de partícula en la alimentación. Esto significa que las partículas pequeñas se expanden en mayor medida antes de iniciar su fragmentación mientras que las partículas grandes se expanden relativamente poco antes de empezar a fragmentarse. Esto concuerda con el comportamiento experimental observado. Por otro lado, se espera que el factor f_c se incremente al aumentar el tamaño de partícula. Esto en base a que las partículas más pequeñas muestren una menor resistencia a la fragmentación por poseer menor área superficial.

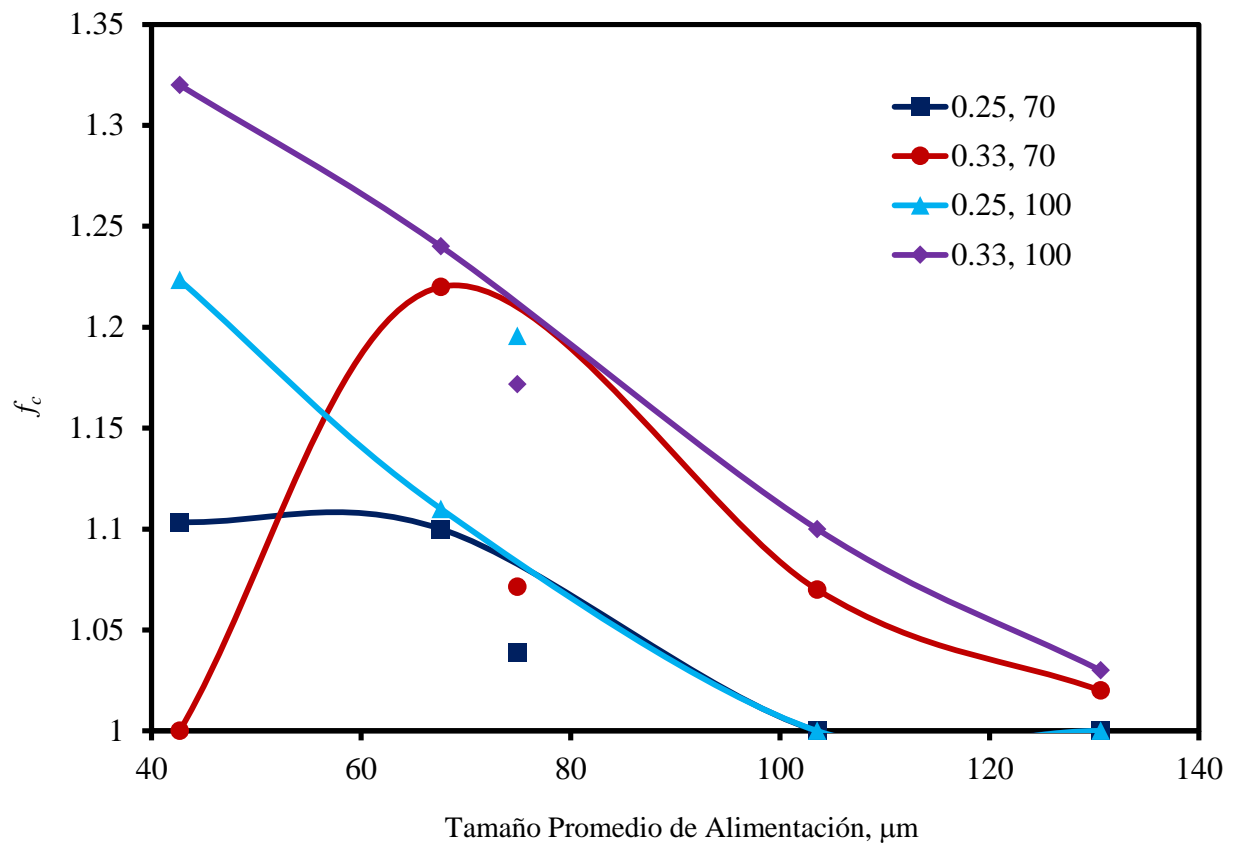


Figura 4.20 Efecto de las Variables de Operación
Sobre el Factor de Diámetro Crítico, f_c

Asimismo se observa que f_c se incrementa conforme la relación oxígeno-mata aumenta y no es afectado significativamente por la concentración de oxígeno en el gas de proceso. La excepción es el caso de las partículas más pequeñas, $<37 \mu\text{m}$ donde se observa que el valor de f_c con una concentración de 70% de oxígeno en el gas de proceso cae abruptamente.

4.3.3 Generación de Polvo

Un punto de interés práctico en el proceso de conversión instantánea es la cantidad de polvo generado durante la oxidación de las partículas en la cámara de reacción. En este trabajo, se definió el porcentaje de generación de polvo como la masa de partículas de tamaño igual o inferior a $20 \mu\text{m}$ que fueron producidas durante el proceso de conversión instantánea referidas a la masa total de sólidos alimentada al reactor. Esto se expresa matemáticamente como:

$$\% \text{ Gen. Polvo} = \frac{m_r F_{20,r} - m_a F_{20,a}}{m_a} \quad (4.3)$$

donde m_r y m_a son la masa total de la población de partículas en el receptáculo y la alimentación, respectivamente. Similarmente, los símbolos $F_{20,r}$ y $F_{20,a}$ representan la fracción masa de partículas de polvo en dichas poblaciones.

Cabe subrayar que de acuerdo a la ecuación anterior, el porcentaje de generación de polvo puede ser de signo positivo o negativo. En el primer caso representa un incremento de la masa de partículas de polvo durante la oxidación. En el segundo caso representa el consumo de la masa de polvo durante la oxidación.

La Figura 4.21 muestra los valores de generación de polvo calculado a partir de la Ecuación 4.3 en función de las condiciones de operación.

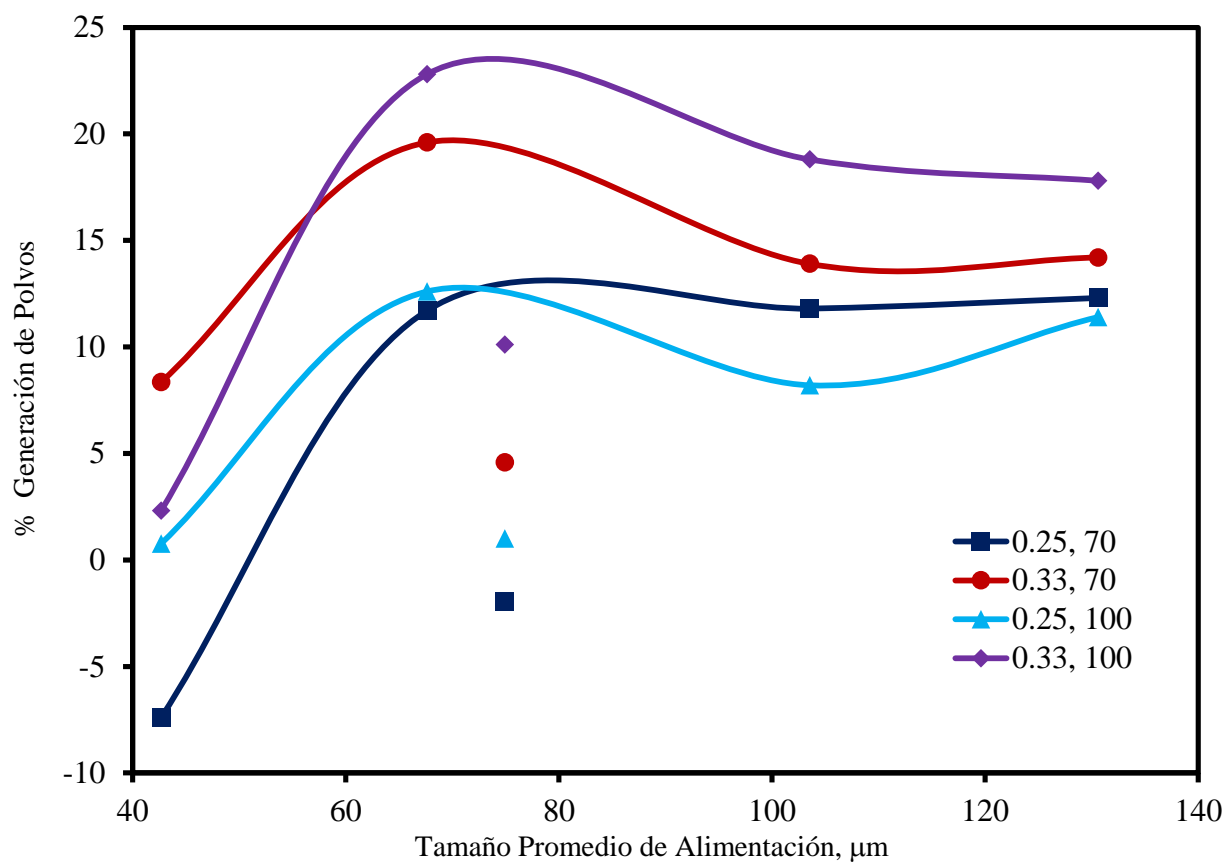


Figura 4.21 Efecto de las Variables de Operación Sobre la Generación de Polvos

En esta gráfica, los símbolos que no han sido unidos por líneas continuas representan los experimentos realizados con material original sin cribar. En general, los datos experimentales con dicho material no siguieron las tendencias de los materiales cribados. Es posible que esto se deba a que el material sin cribar presenta una amplia distribución de tamaños, por lo cual el tamaño promedio no representa un valor representativo de dicha fracción, requiriéndose del uso de la desviación estándar.

La Figura 4.21 indica un aumento del porcentaje de polvo producido al incrementarse el tamaño promedio de la alimentación. Este resultado era el esperado ya que tomando en cuenta los resultados anteriores, las partículas más grandes tienden a fragmentarse en mayor proporción.

En esta figura es notable la amplia variación en los valores de la generación de polvo, dependiendo de las condiciones de operación del horno. Los valores oscilan desde -7% indicando la reducción en la masa de polvo durante el proceso, hasta el 23%, indicando que la masa de polvo generado durante la operación representa más de la quinta parte de la masa total de partículas alimentadas al horno.

La Figura 4.21 indica que la generación de polvo sufre un incremento sustancial cuando el tamaño promedio en la alimentación se incrementa de 42 a 67 μm . Cuando $\langle x_f \rangle$ es menor a 42 μm , la generación de polvo es inferior al 10% en todos los casos y puede incluso ser negativa.

Por otro lado, el efecto de la relación oxígeno-mata es significativo, ya que al aumentar su valor de 0.25 a 0.33 kg O_2/kg mata se incrementa notablemente la generación de polvo en todos los casos. El efecto de la relación oxígeno mata es más evidente para tamaños en la alimentación inferiores a 100 μm .

Estos resultados sugieren que la generación de polvo puede ser minimizada si la alimentación al reactor se mantiene en un tamaño máximo de 47 μm y bajo condiciones

de oxidación estequiométricas (0.25 kg O₂/kg mata). Para valores promedio en la alimentación mayores a 67 μm, la generación de polvo en general representa al menos el 10% de la masa alimentada.

La concentración de oxígeno en el gas de proceso no parece tener un efecto significativo sobre la generación de polvo.

4.3.4 Coeficiente de Contribución Acumulativo

En el presente apartado se presentan ejemplos de aplicación de los coeficientes de contribución definidos en el Capítulo 3. Con el fin de abreviar la discusión, el análisis se presenta para los experimentos 7, 15 y 17 discutidos con anterioridad.

El coeficiente de contribución acumulativo fue definido en el Capítulo 3 como:

$$\phi_{lk} = \sum_{i=1}^l \sigma_{ik} \quad k = 1, n \quad (3.58)$$

La Figura 4.22 muestra los valores de ϕ_{lk} calculados para el experimento número 7. La forma de leer esta gráfica es la siguiente: para determinar los tamaños de partícula en la alimentación (valores de las abscisas) que contribuyen a la formación de un determinado tamaño en el receptáculo (eje de las ordenadas), se traza una línea recta horizontal para $x_k = \text{constante}$ hasta que el valor de ϕ_{lk} sea diferente de cero.

Este primer valor corresponde con el tamaño más pequeño de $x_{i0, \text{mín}}$, en la alimentación que contribuye al tamaño x_k en el receptáculo. Al prolongarse la línea recta más allá de este primer punto, se ubicará el valor de $x_{i0, \text{máx}}$ a partir del cual el valor de ϕ_{lk} se vuelve igual a la unidad. Este segundo punto corresponde al tamaño más grande en la alimentación que contribuye a la masa de x_k .

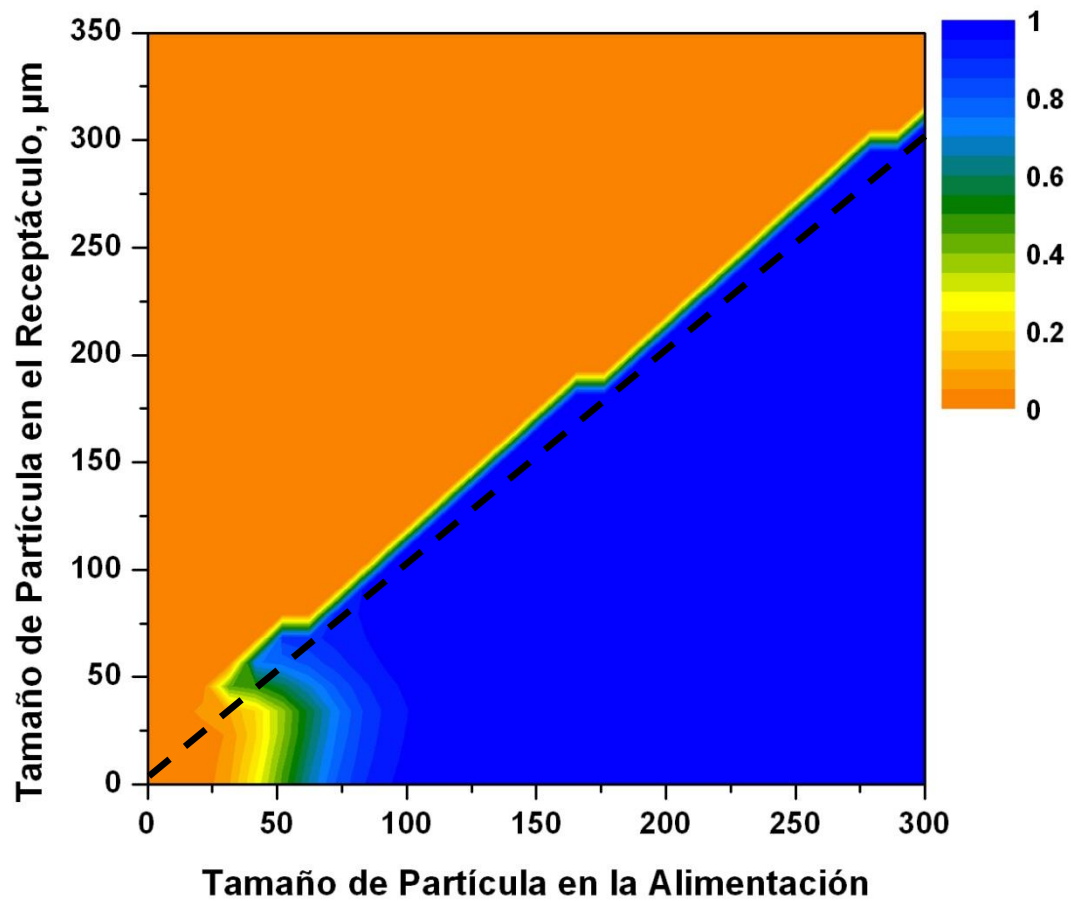


Figura 4.22 Coeficientes de Contribución Acumulativos para el Experimento No.7.
Condiciones Experimentales: 37-74 μm , Relación Oxígeno-Mata 0.25 kg O_2/kg Mata,
100% de O_2 en Gas de Proceso

La prolongación de la línea recta para tamaños mayores $x_{i0} > x_{i0,máx}$ no producirá alteraciones en el valor ϕ_{lk} , lo que significa que dichos tamaños no contribuyen a la masa de x_k . Con ayuda de la línea de 45° punteada puede observarse si una partícula en la alimentación contribuyó en la formación de tamaños menores en el receptáculo, es decir, determinar cuando una partícula se fragmenta. Así mismo con la ayuda de esta línea se puede observar si una partícula en la alimentación contribuyó en la formación de partículas con tamaños mayores en el receptáculo, es decir, determinar cuando las partículas se expanden.

De manera general se puede observar que la formación de polvo en el receptáculo se ve favorecida por las partículas que se alimentan en un intervalo de tamaño de 25 a 90 μm , mientras que la formación de partículas grandes se ve favorecida por las partículas más grandes alimentadas.

Es de interés observar que existe una franja muy pequeña donde ocurren todos los cambios en el coeficiente de contribución, que se presenta principalmente en los tamaños más grandes alimentados, las cuales favorecen la formación de partículas grandes al llegar al receptáculo.

El análisis de la Figura 4.22 indica en general que las fracciones de tamaño en el receptáculo provienen de fracciones de tamaño estrechas en la alimentación. Esto se refleja por el hecho de que los valores de ϕ_{lk} cambian de cero a la unidad en intervalos pequeños de x_{i0} . Asimismo, en general las partículas de la alimentación contribuyen preferencialmente a las fracciones de tamaño similares en el receptáculo. Como ejemplo, las partículas de tamaño 200-250 μm en la alimentación contribuyen a partículas de tamaño 210-270 μm en el receptáculo, lo cual indica que estas partículas alimentadas solamente se expandieron y en una proporción muy pequeña con respecto a su tamaño inicial.

La excepción a este comportamiento lo constituyen las fracciones de tamaño en el receptáculo de 0-50 μm , las cuales incluyen los polvos. Dichas fracciones provienen de las partículas en la alimentación de 25-90 μm , aproximadamente.

Los valores de los coeficientes de contribución acumulativos para el experimento No. 15 se presenta en la Figura 4.23. Siguiendo la metodología de análisis del ejemplo anterior, se observa que las partículas en la alimentación que contribuyen a las partículas de polvo en el receptáculo se encuentran en el intervalo de 80-180 μm . Asimismo se observa que las partículas más grandes de la alimentación contribuyen a tamaños similares en el receptáculo.

La Figura 4.24 muestra los valores de ϕ_{lk} para el experimento número 17. Este experimento es especialmente relevante, ya que representa las condiciones de operación típicas en un horno de conversión instantánea a nivel industrial.

A diferencia de los casos discutidos con anterioridad, en esta figura se puede observar que las partículas en la alimentación que tienden a producir partículas pequeñas al llegar al receptáculo se hallan en un amplio intervalo de tamaños, desde 30 hasta 200 μm . Asimismo se observa que las partículas grandes en el receptáculo (250-350 μm) provienen de la expansión de las partículas grandes (250-300 μm) en la alimentación.

Desde un punto de vista práctico, los resultados anteriores son desfavorables ya que sugieren que bajo las condiciones típicas de operación del horno, el polvo producido proviene de la mayor parte de las partículas de la alimentación.

Los resultados anteriores ratifican las observaciones experimentales que indican que el tamaño de partícula afecta significativamente la producción de partículas finas en un reactor de conversión instantánea

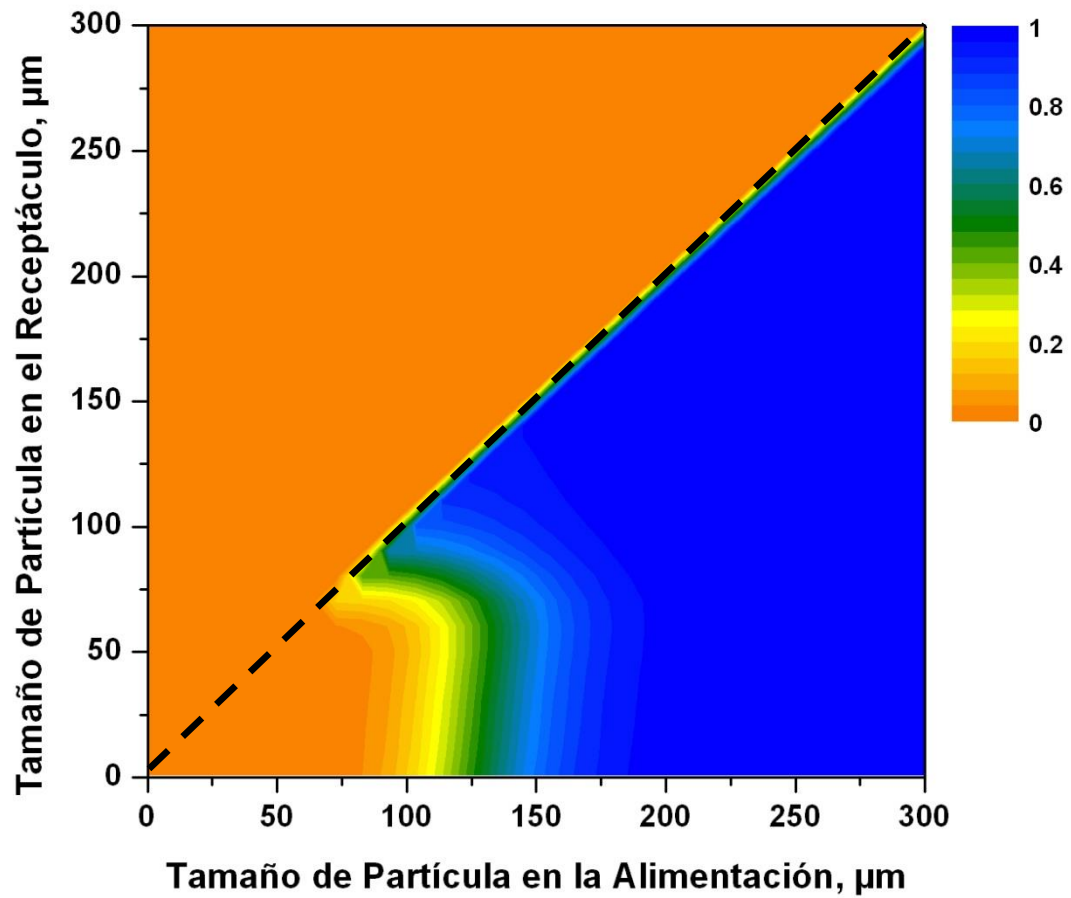


Figura 4.23 Coeficientes de Contribución Acumulativos para el Experimento No.15
Condiciones Experimentales: 105-149 μm , Relación Oxígeno-Mata 0.25 kg O_2/kg Mata,
100% de O_2 en Gas de Proceso

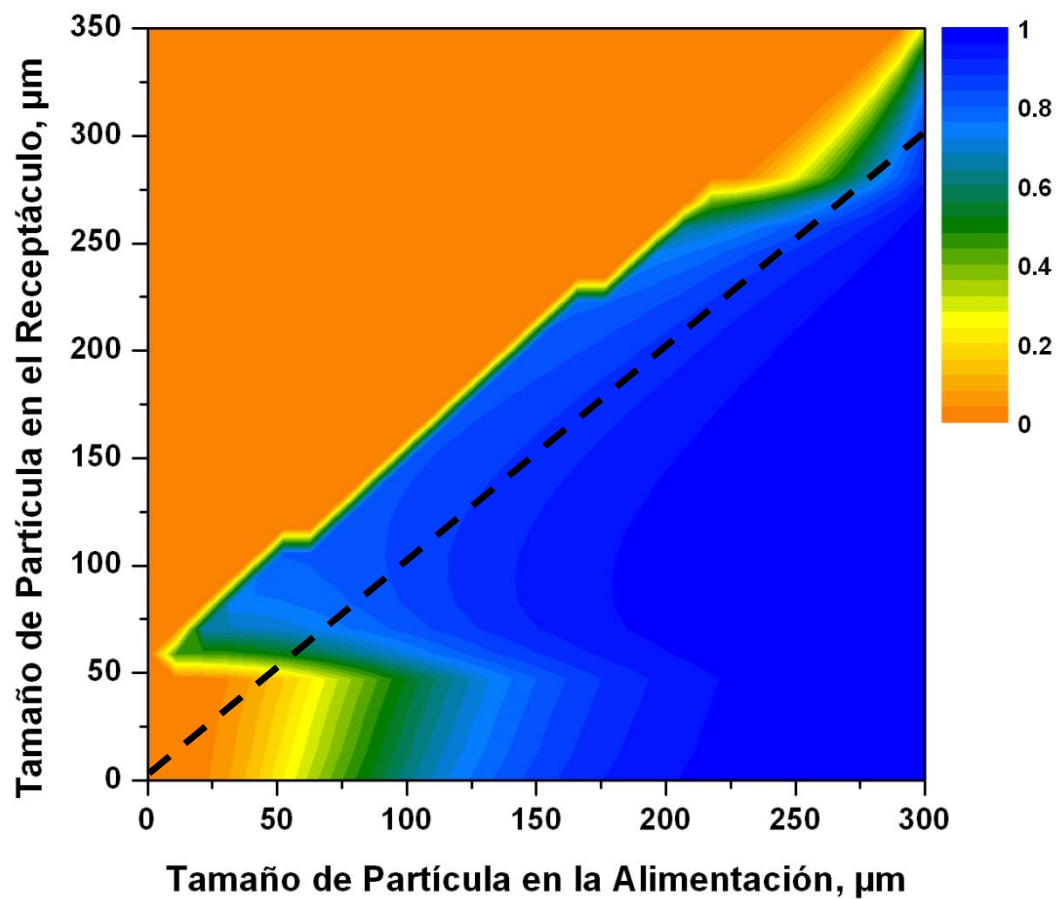


Figura 4.24 Coeficientes de Contribución Acumulativos para el Experimento No.17
Condiciones Experimentales: $<149 \mu\text{m}$, Relación Oxígeno-Mata $0.25 \text{ kg O}_2/\text{kg Mata}$,
 70% de O_2 en Gas de Proceso

En general, el intervalo de tamaño de partícula en la alimentación que produce polvo se incrementa al incrementar el tamaño de partícula promedio de la alimentación. Asimismo, las partículas grandes en la alimentación tienden a producir partículas de tamaño similar como resultado de su expansión durante el vuelo en la cámara de reacción.

4.3.5 Coeficiente de Distribución Acumulativo

El coeficiente de distribución acumulativo fue definido en el Capítulo 3 como:

$$B_{il} = \sum_{k=1}^l \beta_{ik} \quad i = 1, n \quad (3.61)$$

El objetivo de B_{il} es determinar el destino final en el receptáculo de la masa que entra en un determinado tamaño de partícula a la cámara de reacción. El valor de B_{il} puede oscilar entre 0 y 1. Sin embargo, su valor máximo dependerá de la pérdida de masa de las partículas durante su vuelo en la cámara de reacción, por lo que puede ser inferior a la unidad.

La Figura 4.25 muestra los valores de B_{il} calculados para el experimento número 7. La forma de leer esta gráfica es la siguiente: para determinar los tamaños de partícula en el receptáculo (eje de las ordenadas) hacia los cuales se distribuye un determinado tamaño en la alimentación (eje de las abscisas), se traza una línea recta vertical para un valor de $x_{i0} = \text{constante}$ hasta que el valor de B_{il} sea diferente de cero.

Este primer valor corresponde con el tamaño más pequeño de $x_{k,min}$ hacia el cual se distribuye la masa del tamaño x_{i0} en la alimentación.

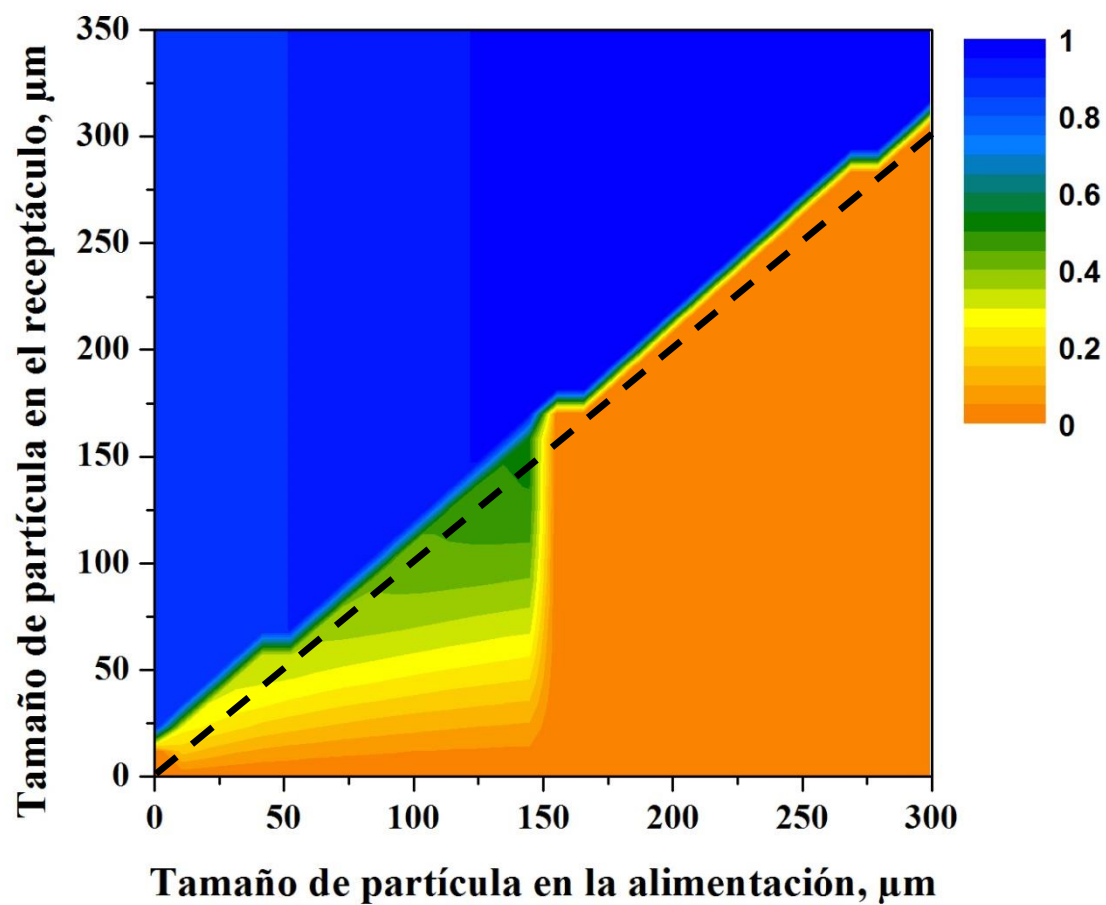


Figura 4.25 Coeficientes de Distribución para el Experimento No. 7
Condiciones Experimentales: 37-74 μm , Relación Oxígeno-Mata 0.25 kg O_2 /kg Mata,
100% de O_2 en Gas de Proceso

Al prolongarse la línea recta más allá de este primer punto, se ubicará el valor de $x_{k,máx}$ a partir del cual el valor de B_{il} se vuelve constante. Este segundo punto corresponde al tamaño más grande en el receptáculo hacia el cual se distribuye la masa del tamaño x_{i0} en la alimentación. La prolongación de la línea recta para tamaños mayores $x_k > x_{k,máx}$ no producirá alteraciones en el valor de B_{il} , lo que significa que la masa de las partículas del tamaño x_{i0} no se distribuirá hacia dichos tamaños.

En esta figura se observan dos regiones claramente diferenciadas. Primeramente, se observa que la masa de los tamaños 0-150 μm de la alimentación tienden a distribuirse en un amplio intervalo de tamaños en el receptáculo: 20-175 μm . En contrapartida, los tamaños en la alimentación mayores a 150 μm tienden a distribuirse en intervalos estrechos de tamaños en el receptáculo. Asimismo es notorio que la masa perdida por las fracciones de tamaño pequeñas en la alimentación es considerablemente mayor que la masa perdida por las partículas grandes. Lo anterior es consistente con los resultados del modelo cinético discutido con anterioridad.

Asimismo se hace notar que la mayoría de la masa de las partículas de la alimentación en la primera región (0-150 μm) se distribuyó en fracciones de tamaño menores, es decir, todas ellas sufrieron fragmentación extensiva. De manera contraria ocurrió con la masa de las partículas de la alimentación de la segunda región (150-300 μm) la cual se distribuyó en partículas con un tamaño mayor al llegar al receptáculo.

Los fenómenos de expansión y fragmentación en la Figura 4.25 se encuentran separados entre sí por medio de la línea de 45°. Los valores del coeficiente de distribución acumulativo por encima de esta línea indican que las partículas de la alimentación correspondientes se expandieron para llegar al tamaño indicado en el receptáculo. Asimismo, los valores por debajo de la línea de 45° indican que las partículas de la

alimentación correspondientes se fragmentaron para llegar al tamaño indicado en el receptáculo.

La Figura 4.26 muestra los resultados para el experimento número 15. A diferencia del caso anterior, se observa una sola región la cual indica que la masa de las partículas de la alimentación se distribuye en un amplio intervalo de tamaños en el receptáculo. Se hace notar que las partículas finas en la alimentación (0-20 μm) tienden a distribuirse en fracciones de tamaño más grandes en el receptáculo como resultado de su expansión.

Por el contrario, las partículas grandes en la alimentación (225-300 μm) tienden a distribuirse solamente en fracciones de tamaño más pequeñas en el receptáculo como resultado de su fragmentación.

Los valores de los coeficientes de distribución acumulativos para el experimento No. 17 se presenta en la Figura 4.27. Al igual que en el caso anterior, en general la masa de las partículas alimentadas se distribuye en un amplio intervalo de tamaños en las partículas que llegaron al receptáculo. Se puede observar que la masa de las partículas más pequeñas en la alimentación (0-50 μm) que se distribuyeron hacia las partículas de polvo (0-20 μm) es nula, tendiendo a formar partículas más grandes debido a su expansión en reactor.

En contrapartida, la masa de las partículas de la alimentación que más se distribuye hacia el polvo en el receptáculo es el de las partículas grandes alimentadas al reactor (100-200 μm). En general, la masa de las partículas grandes en la alimentación tiende a distribuirse hacia partículas más pequeñas que ellas, es decir, sufren fragmentación.

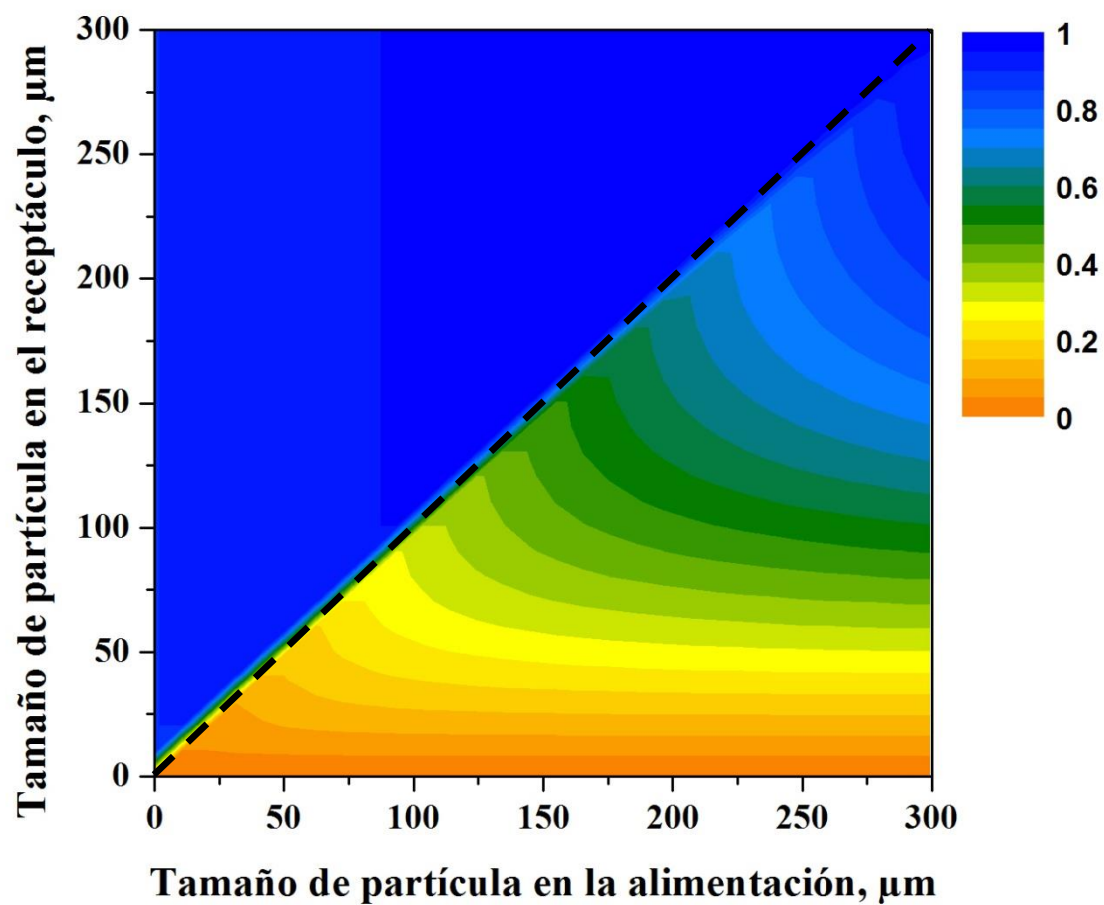


Figura 4.26 Coeficientes de Distribución para el Experimento No. 15
Condiciones Experimentales: 105-149 μm , Relación Oxígeno-Mata 0.25 kg O_2 /kg Mata,
100% de O_2 en Gas de Proceso

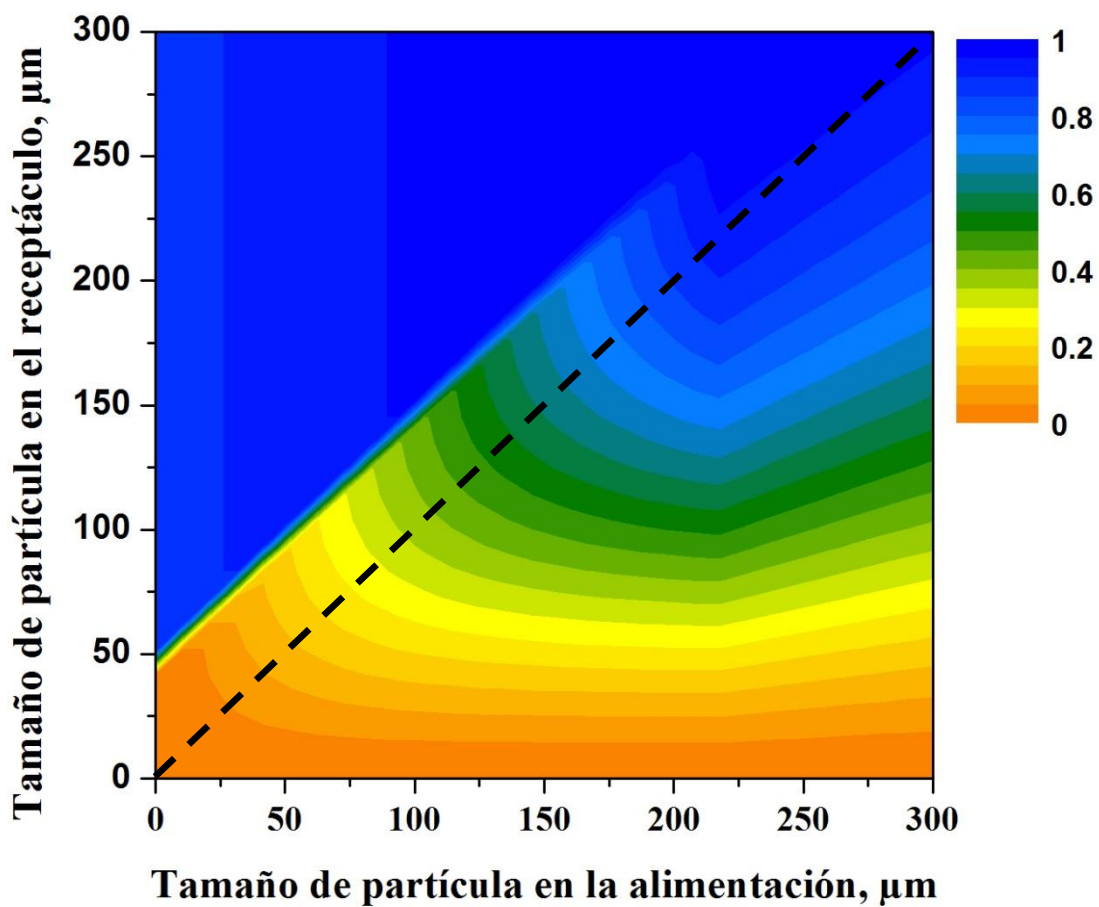


Figura 4.27 Coeficientes de Distribución Acumulativos para el Experimento No. 17
Condiciones Experimentales: $<149 \mu\text{m}$, Relación Oxígeno-Mata $0.25 \text{ kg O}_2/\text{kg Mata}$,
 70% de O_2 en Gas de Proceso

4.3.6 Funciones de Densidad por Elemento

La finalidad de esta sección es describir las funciones de densidad calculadas mediante la Ecuación 3.74 para los elementos: Cu, Fe, S y O en la población de partículas del receptáculo.

La Figura 4.28 muestra los resultados para el experimento número 7. La función de densidad de Cu y Fe en el receptáculo son idénticas porque la masa de Cu y Fe permanece constante hasta llegar al receptáculo, es decir no hay eliminación de estos elementos hacia la fase gaseosa durante la oxidación distribuyéndose de igual manera en la población de partículas.

Debe aclararse que aunque estas funciones de densidad son idénticas, esto no significa que la masa de dichos elementos en las partículas sea igual, sino que la masa de los elementos Cu y Fe se distribuye de manera idéntica en la población de partículas conforme ésta viaja a lo largo del reactor. Este resultado se deriva de la definición de la función de densidad dada en la Ecuación 3.74 y de las siguientes suposiciones del presente modelo: (1) que tanto el Cu como el Fe permanecen en todo momento en la fase sólida durante la oxidación, y (2) que la composición química de las partículas no se altera al cabo de la fragmentación. Como resultado de lo anterior, el presente modelo supone que la relación atómica Cu/Fe en las partículas se mantiene constante.

Se observa en la Figura 4.28 que la función de densidad para el oxígeno está desplazada hacia la izquierda con respecto a las funciones de densidad para Cu, Fe y S, es decir hacia los tamaños más pequeños y que la mayor parte de la masa de oxígeno en la población de partículas se encuentra distribuida en el intervalo de tamaños de partícula de 50 a 70 μm . Para explicar este comportamiento es necesario tomar en cuenta los resultados de las secciones 4.1.3, 4.4 y 4.5.

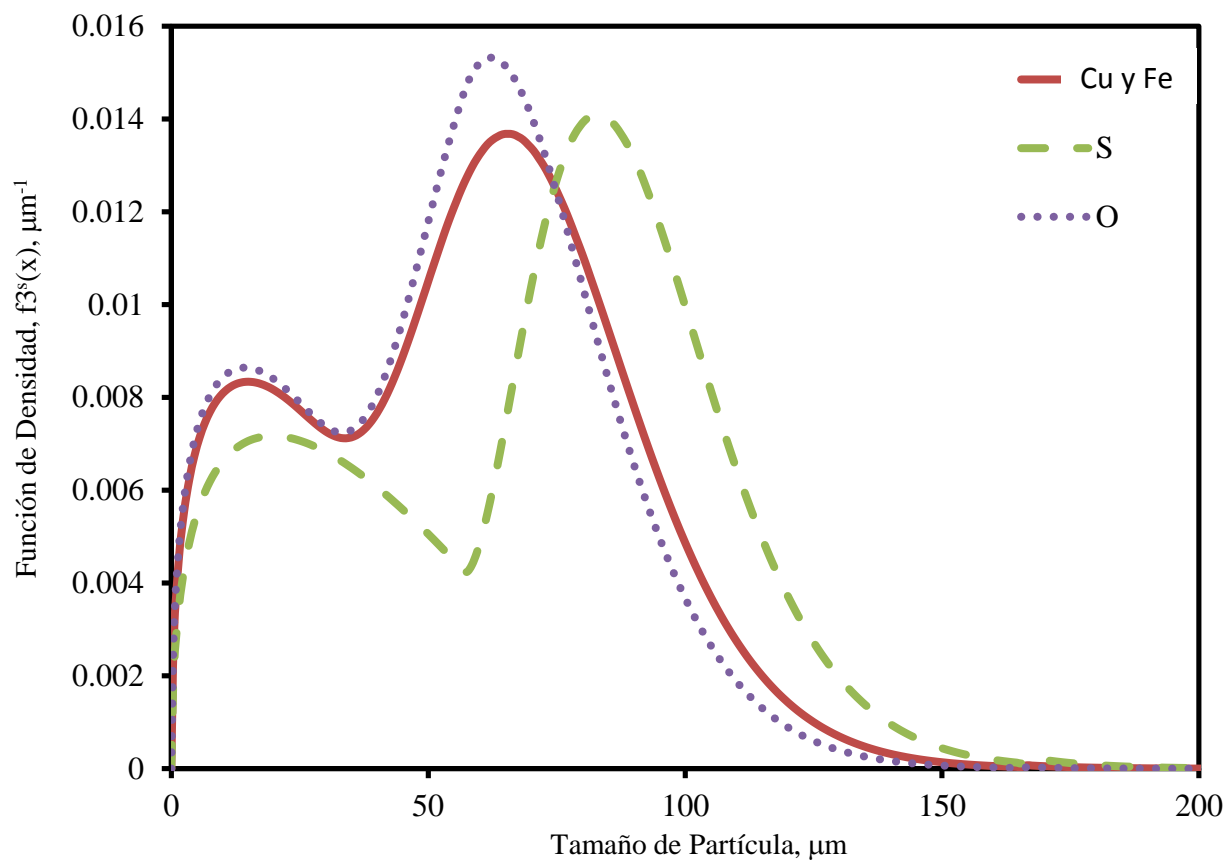


Figura 4.28 Funciones de Densidad para las Especies en el Receptáculo para el Experimento No.7. Condiciones Experimentales: 37-74 μm , Relación Oxígeno-Mata 0.25kg O_2 /kg mata, 100% O_2 en Gas de Proceso.

Según la Figura 4.25, la masa de las partículas en la alimentación que se distribuye en este intervalo de tamaño de partícula al llegar al receptáculo proviene de: 1) partículas pequeñas de 20-50 μm que se expandieron y terminaron con un tamaño entre 50 y 70 μm aportando hasta un 80% de su masa inicial. De acuerdo a la Figura 4.3, estas son partículas que alcanzan un alto grado de oxidación; 2) partículas pequeñas en la alimentación (30-70 μm) que se expandieron y fragmentaron para alcanzar un tamaño en el receptáculo dentro de este intervalo las cuales alcanzan un grado de conversión alto (70-100%) distribuyendo alrededor del 25% de su masa inicial a estas partículas y 3) partículas de tamaño intermedio en la alimentación (75-100 μm) que alcanzan un grado de oxidación intermedio (0.2–0.6) y que aportan cerca del 10% de su masa a este tamaño de partícula en el receptáculo.

Asimismo se observa que los valores de la función de densidad de oxígeno para partículas mayores a 100 μm son muy pequeños. De acuerdo a la discusión del coeficiente de contribución estas partículas provienen de partículas grandes alimentadas (mayor a 75 μm) alcanzando grados de oxidación intermedio a muy bajo. Adicionalmente, de acuerdo a la Figura 4.6 la función de densidad para partículas de ese tamaño es muy pequeña lo cual hace que la función de densidad para esas especies para esos tamaños también lo sea.

La Figura 4.29 presenta las funciones de densidad de Cu, Fe, S y O para el experimento número 15. De manera similar al análisis para el ejemplo anterior se observa que la función de densidad para el oxígeno se encuentra desplazada hacia los tamaños más pequeños con respecto a las funciones de densidad para el Cu, Fe y S. Se puede observar también que entre sí las cuatro funciones de densidad no presentan variaciones significativas. Esto concuerda con la Figura 4.26, ya que la masa de las partículas se distribuye en un intervalo muy amplio de tamaños en el receptáculo.

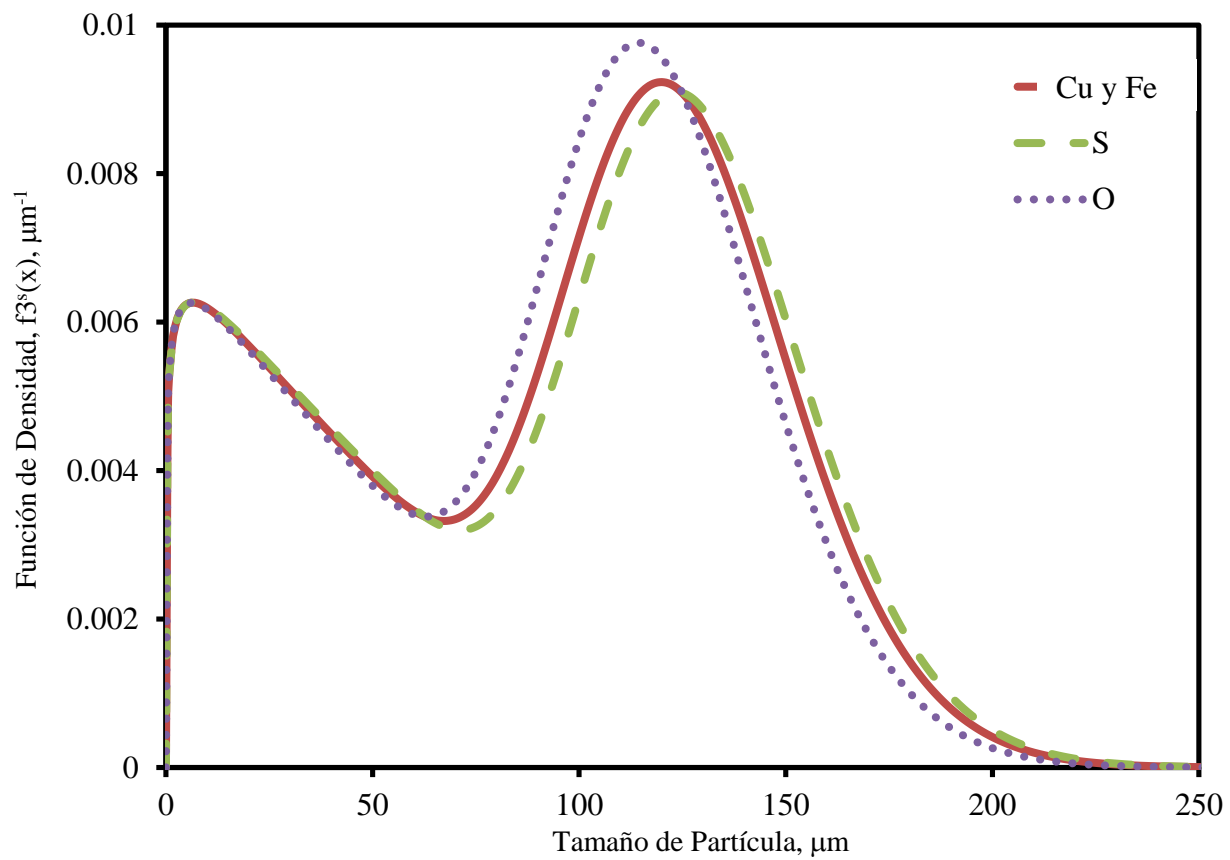


Figura 4.29 Funciones de Densidad para las Especies en el Receptáculo para el Experimento No.15.
Condiciones Experimentales: 105-149 μm ,
Relación Oxígeno-Mata 0.25kg O₂/kg mata, 100% O₂ en Gas de Proceso.

El máximo observado para la función de densidad para el oxígeno alrededor de 100-120 μm puede explicarse porque en esta fracción de tamaño aún se presenta la expansión y fragmentación de partículas más pequeñas a ese intervalo de tamaños y por lo tanto con un grado de oxidación alto, además que de acuerdo a la Figura 4.7 la distribución de tamaños de las partículas en ese intervalo es máxima incrementando la presencia de este elemento.

Las funciones de densidad para Cu, Fe, S y O para el experimento 17 se encuentran representadas en la Figura 4.30. A pesar que de acuerdo a la Figura 4.8 la distribución de tamaños presenta un máximo en el intervalo de 0-50 μm la función de densidad para el oxígeno se ve desfavorecida esto es que de acuerdo a la Figura 4.27 las partículas que distribuyen su masa en este intervalo de tamaño en el receptáculo son partículas grandes en la alimentación que se expandieron y luego se fragmentaron y de acuerdo a los datos cinéticos con un grado de oxidación muy pobre, consecuentemente incrementando el contenido de azufre.

En el intervalo de tamaño de 50-100 μm se observa un incremento muy significativo de la función de densidad para el oxígeno con respecto a las otras funciones de densidad debido a la distribución tan grande de la masa de las partículas con un tamaño inicial pequeño (50-100 μm) en este intervalo de tamaños en el receptáculo, los cuales, de acuerdo a los resultados cinéticos presentan altos grados de oxidación, además que la fracción de partículas en este intervalo de tamaños es alta.

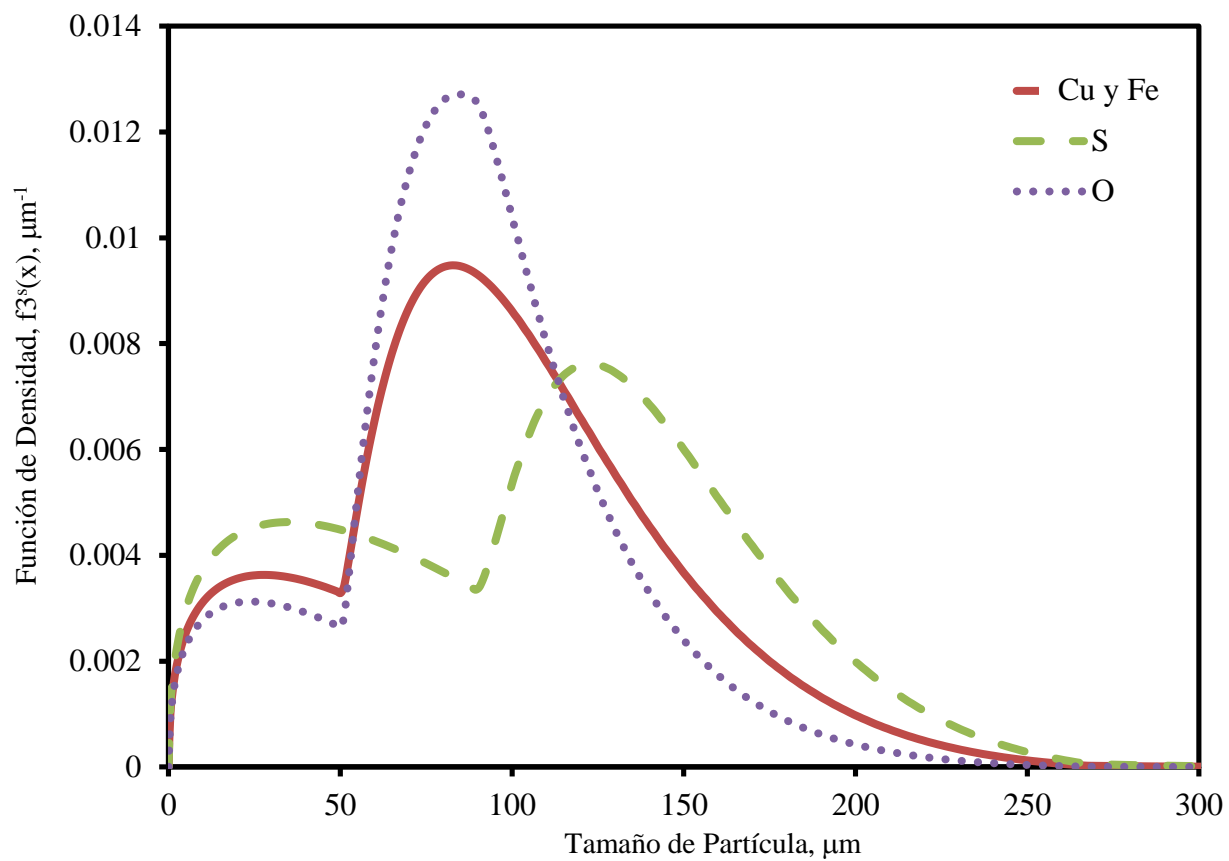


Figura 4.30 Funciones de Densidad para las Especies en el Receptáculo para el Experimento No.17.
Condiciones Experimentales: $<149\mu\text{m}$,
Relación Oxígeno-Mata $0.25\text{kg O}_2/\text{kg mata}$, $70\% \text{O}_2$ en Gas de Proceso.

4.3.7 Composición Química por Fracción de Tamaños en el Receptáculo

En esta sección se discute la composición química en fracción peso de las partículas para los diferentes tamaños en la población de partículas al llegar al receptáculo ω_k^S .

El primer caso en ser analizado es la corrida experimental número 7. La composición por tamaño de la población de partículas se muestra en la Figura 4.31. En esta figura, se observa una tendencia a disminuir la composición de Cu y O en un intervalo de 60-300 μm conforme aumenta la fracción de tamaño. Esto es porque de acuerdo a la Figura 4.25 la tendencia a la expansión de partículas grandes con un bajo grado de conversión incrementa al ir aumentando el tamaño de partícula, incrementándose así la cantidad de azufre presente.

En esta figura puede observarse también la formación de un máximo en la composición de oxígeno en el intervalo de 50-60 μm . Este máximo se presenta en el mismo intervalo en la función de densidad de oxígeno mostrado en la Figura 4.28 correspondiente al mismo experimento y como se pudo explicar, es en este intervalo donde puede observarse de la Figura 4.25 que aumenta la distribución de la masa de partículas pequeñas y por lo tanto con un alto grado de oxidación que se expandieron hasta este intervalo estos tamaños, generando así una concentración mínima de azufre por el alto contenido de oxígeno. En esta figura puede observarse también que el hierro se mantiene aparentemente constante en todos los tamaños, debido a que la masa inicial de hierro es muy pequeña y cualquier cambio en la masa total de las partículas no afecta significativamente el valor de la composición de este elemento.

El segundo caso en ser analizado es el correspondiente al experimento número 15. La composición de la población de partículas para este experimento se presenta en la Figura 4.32. En esta figura se puede observar una disminución gradual en el contenido de cobre y oxígeno a partir un tamaño de partícula en el receptáculo de 100 μm .

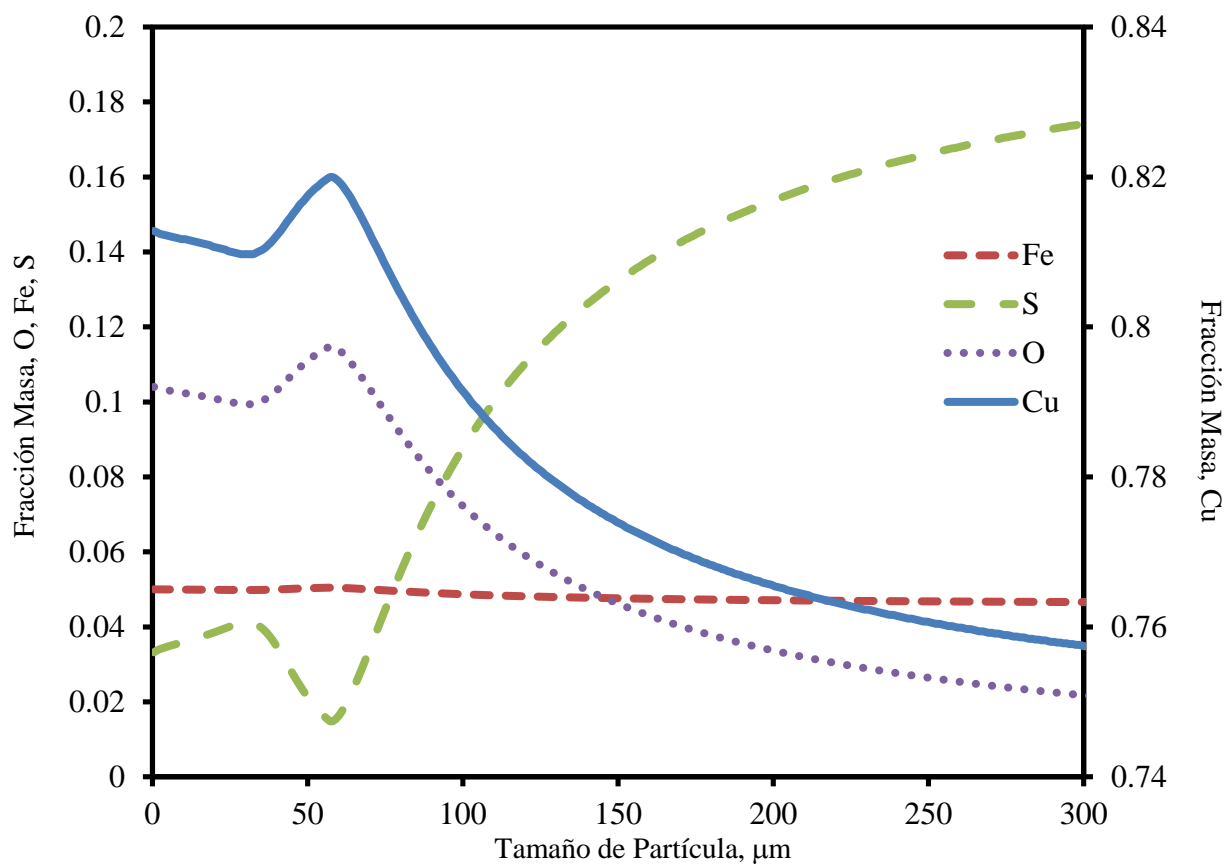


Figura 4.31 Composición por Tamaño de Partículas en el Receptáculo en Fracción Masa por Especie para el Experimento No.7. Condiciones Experimentales: 37-74 μm , Relación Oxígeno-Mata 0.25kg O_2 /kg mata, 100% O_2 en Gas de Proceso.

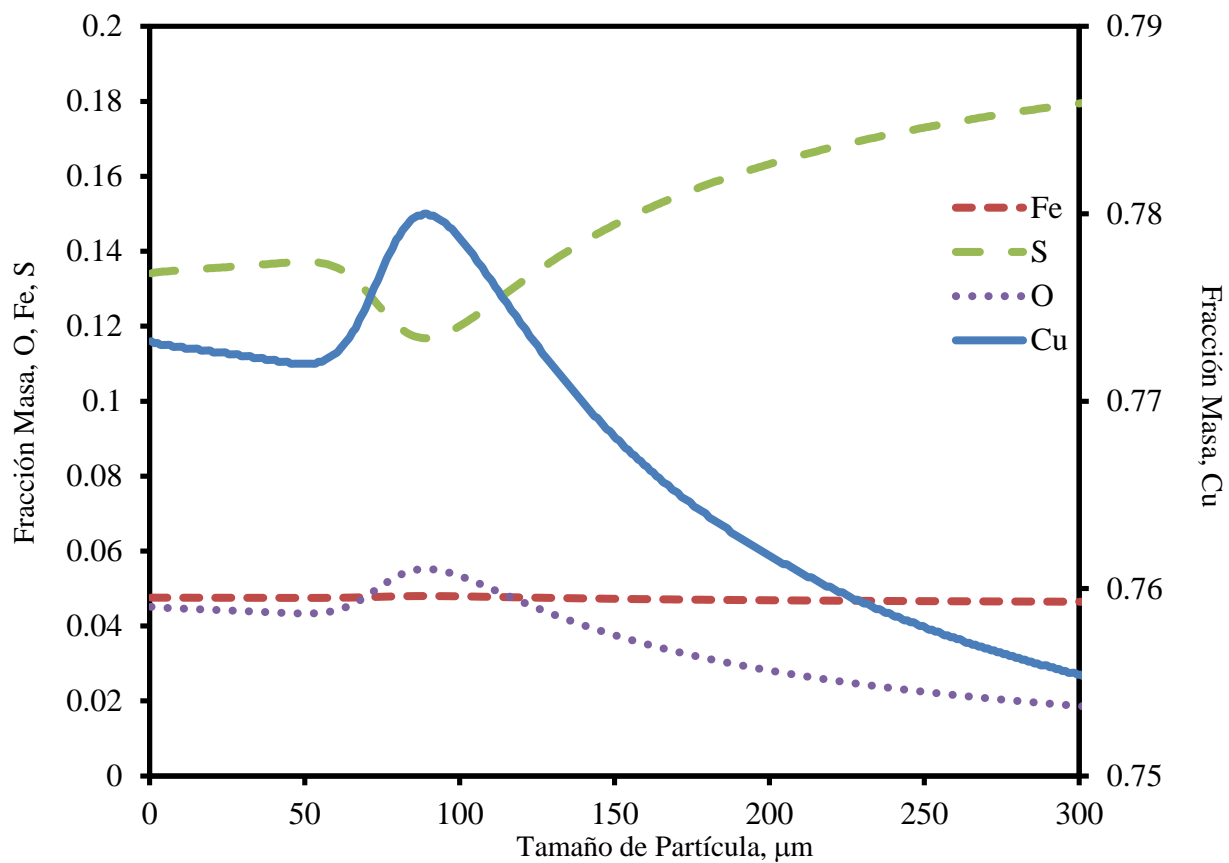


Figura 4.32 Composición de las Partículas en el Receptáculo en Fracción Masa por Especie para el Experimento No.15. Condiciones Experimentales: 105-149 μm , Relación Oxígeno-Mata 0.25kg O₂/kg mata, 100% O₂ en Gas de Proceso.

Los cambios en la composición por tamaño de partícula son mucho menos abruptos que en el caso anterior, dado que según la Figura 4.26 la distribución de la masa de las partículas alimentadas se presenta en un intervalo muy grande de tamaños al llegar al receptáculo.

En la Figura 4.32 se observa un valor máximo en el intervalo de tamaño de 90-110 μm dado que la contribución de partículas en la alimentación con un alto grado de oxidación en ese tamaño de partícula en el receptáculo es muy grande. Las tendencias a la baja del contenido de oxígeno y azufre producen como consecuencia una concentración de azufre en la partícula.

En la Figura 4.33 se presenta la composición por tamaño de partícula para el experimento 17. En esta figura se puede observar, al igual que en los casos anteriores, una disminución gradual del contenido de oxígeno y cobre al aumentar la fracción de tamaño de las partículas en el receptáculo a partir de los 86 μm en adelante.

Se observa un valor máximo en el contenido de oxígeno para las partículas en un intervalo de tamaño de 90-100 μm coincidiendo con el máximo presentado en la función de densidad para el oxígeno observado en la Figura 4.30, esto es, de acuerdo a la Figura 4.27 debido a la distribución tan grande de la masa de las partículas con un tamaño inicial pequeño (50-100 μm) en este intervalo de tamaños en el receptáculo, los cuales, de acuerdo a los resultados cinéticos presentan altos grados de oxidación, además que la fracción de partículas en este intervalo de tamaños es alta, provocando como consecuencia una concentración mínima de azufre en este intervalo de tamaños.

Debe observarse que también hay fragmentación de partículas grandes (100-300 μm) con un grado de conversión bajo y llegan al receptáculo con un tamaño que dentro del intervalo de 90-100 μm pero la masa de azufre que aportan a este tamaño no compensa la cantidad tan alta de oxígeno que aportan las partículas pequeñas.

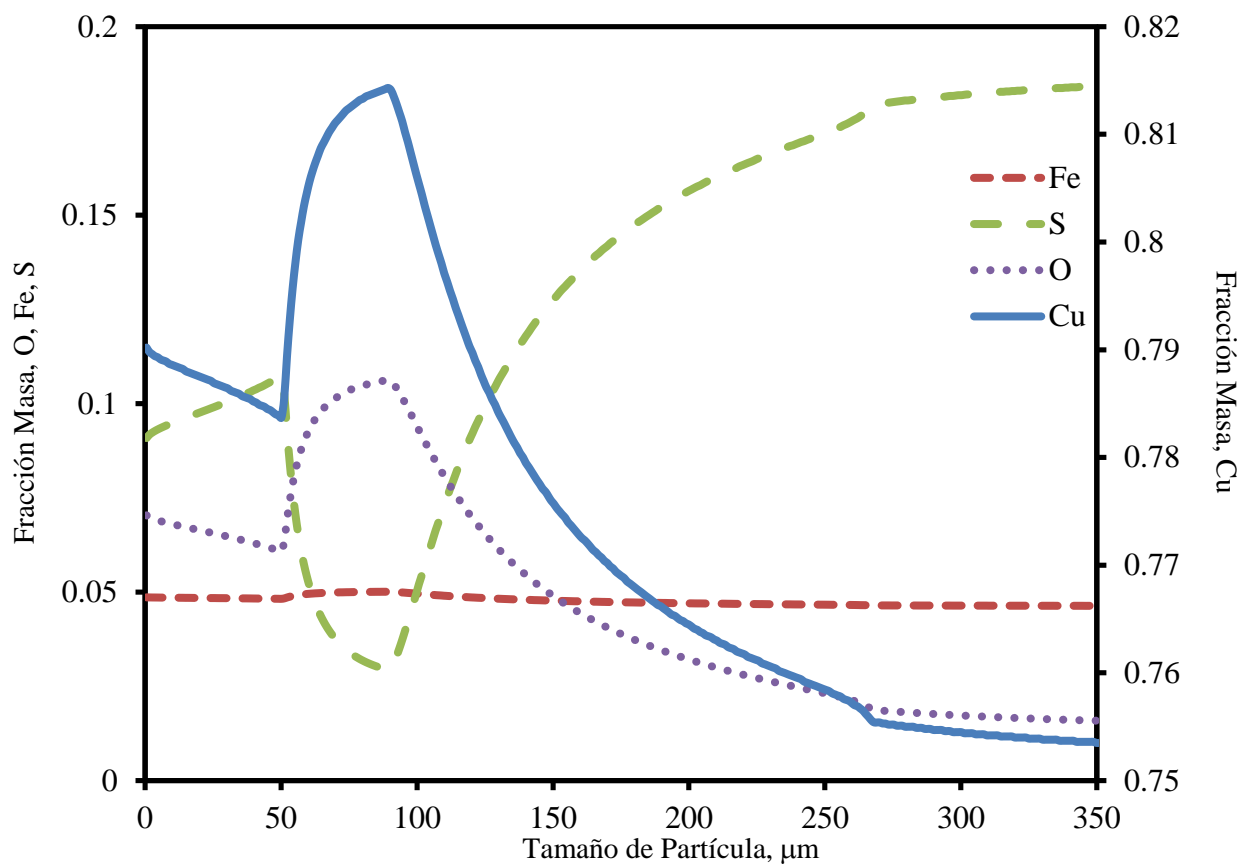


Figura 4.33 Composición de las Partículas en el Receptáculo en Fracción Masa por Especie para el Experimento No.17. Condiciones Experimentales: $<149\mu\text{m}$, Relación Oxígeno-Mata $0.25\text{kg O}_2/\text{kg mata}$, $70\% \text{O}_2$ en Gas de Proceso.

CAPÍTULO 5

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

5.1 Conclusiones

Los resultados de este trabajo pueden resumirse como sigue:

- 1) Se desarrolló un modelo matemático que predice la composición y distribución de tamaños en la fragmentación de partículas de mata de cobre en condiciones de conversión instantánea.
- 2) Las predicciones del modelo muestran una concordancia razonable con los datos experimentales obtenidos en un horno a nivel laboratorio en términos de la distribución de tamaños en el receptáculo, la cantidad de polvo en el receptáculo y el azufre remanente en las partículas.
- 3) Los parámetros del modelo variaron en los siguientes intervalos: rapidez de expansión, g : 5-59.6 $\mu\text{m/s}$; parámetro de distribución, γ : -2.268 y -2.813; parámetro f_{2f} : 0 y 0.873; parámetro f_{nf} : 0 y 1; factor de diámetro crítico, f_c :1 y 1.320. Se estableció su comportamiento en función de las condiciones experimentales.
- 4) El porcentaje de generación de polvo estimada por el presente modelo varió entre -7.4 y 22.8%. El porcentaje de error en la estimación de la cantidad de polvo en el receptáculo varió entre 0.3 y 16% con un promedio 5.6%.

- 5) El porcentaje de generación de polvo aumenta al incrementar el tamaño promedio de alimentación, la relación oxígeno-mata y el tiempo de residencia en el reactor. La concentración de oxígeno en el gas de proceso no presenta un efecto significativo.
- 6) La minimización en la generación de polvo se predice al disminuir lo más posible el tamaño de partícula en la alimentación y suministrar oxígeno en relación estequiométrica.
- 7) A partir del análisis de los coeficientes de contribución acumulativos, se encontró que las fracciones de tamaño de la alimentación que pueden producir polvos se reducen conforme se procesa el material cribado.
- 8) A partir del análisis de los coeficientes de distribución acumulativos, se encontró que al incrementar el tamaño promedio de la alimentación, se incrementa la distribución de la masa de la alimentación en un mayor número de tamaños del receptáculo.
- 9) La distribución de tamaños y composición química de las partículas en el receptáculo dependen ampliamente de las condiciones de operación del reactor. Esto se refleja en las funciones de densidad de los elementos y la composición química de las fracciones de tamaño en el receptáculo.
- 10) Los resultados de este trabajo muestran el uso potencial del modelo matemático para futuros estudios en esta área.

5.2 Recomendaciones

- 1) Incorporar al modelo matemático la posible formación de CuO en la capa de óxidos como resultado de la sobreoxidación de las partículas.
- 2) Mejorar las predicciones del modelo en la región de tamaños de 0-20 μm , donde se subestiman los valores de la función de densidad en el receptáculo.
- 3) Incorporar el balance de energía para estimar la temperatura de la partícula a lo largo de su trayectoria de reacción.
- 4) Realizar mayor experimentación para generar datos para validar el modelo matemático en términos de distribución de tamaño y composición química.
- 5) Realizar un estudio a detalle sobre los resultados de los coeficientes de distribución y contribución con el fin de detectar posibles tendencias relacionadas con las condiciones de operación del horno.

APÉNDICE A

Desarrollo del Modelo Cinético

La ecuación de continuidad para el oxígeno gaseoso en la capa de óxidos en régimen estacionario se expresa como:

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dC_A}{dr} \right) = 0 \quad (A.1)$$

la cual corresponde a la Ecuación 3.6 del texto principal. La ecuación (A.1) se resuelve con las siguientes condiciones en la frontera:

$$r = r_c \quad C_A = C_{Aeq} \quad C.F.1$$

$$r = r_p \quad -D_A \frac{dC_A}{dr} = k_m (C_A^I - C_{Ab}) \quad C.F.2$$

La primera condición frontera expresa que en la superficie del núcleo, la concentración de oxígeno es la del equilibrio debido a la temperatura tan alta con la que se lleva a cabo la reacción se supuso que $C_{Aeq} = 0$, es decir el oxígeno que llega a la superficie del núcleo se consume inmediatamente.

La segunda condición frontera expresa que el oxígeno que llega desde el seno del fluido, se transporta enteramente por difusión a través del producto poroso.

Integrando la ecuación A.1:

$$\int d \left(r^2 \frac{dC_A}{dr} \right) = 0 \cdot dr \quad (A.2)$$

se obtiene:

$$r^2 \frac{dC_A}{dr} = C_1 \quad (A.3)$$

Despejando $\frac{dC_A}{dr}$ de A.3 se obtiene:

$$\frac{dC_A}{dr} = \frac{C_1}{r^2} \quad (\text{A. 4})$$

Integrando A.4:

$$\int dC_A = \frac{C_1}{r^2} dr \quad (\text{A. 5})$$

se obtiene:

$$C_A = -\frac{C_1}{r} + C_2 \quad (\text{A. 6})$$

Debe despejarse $\frac{dC_A}{dr}$ de la C.F.2 :

$$\frac{dC_A}{dr} = -\frac{k_m}{D_A} (C_A^I - C_{Ab}) \quad (\text{A. 7})$$

para sustituirla en la Ecuación A.3 la cual nos proporciona C_1 :

$$C_1 = -\frac{k_m}{D_A} r_p^2 (C_A^I - C_{Ab}) \quad (\text{A. 8})$$

Se sustituye C_1 en la ecuación A.6:

$$C_A = \frac{k_m}{D_A} \frac{r_p^2}{r} (C_A^I - C_{Ab}) + C_2 \quad (\text{A. 9})$$

Utilizando la primera condición frontera considerando que $C_{Aeq} = 0$ y sustituyendo en A.9:

$$0 = \frac{k_m r_p^2}{D_A r_c} (C_A^I - C_{Ab}) + C_2 \quad (A.10)$$

Despejando C_2 de A.10 se obtiene C_2 :

$$C_2 = -\frac{k_m r_p^2}{D_A r_c} (C_A^I - C_{Ab}) \quad (A.11)$$

y sustituyendo en A.9 se obtiene el perfil de concentraciones de oxígeno en la partícula:

$$C_A = \frac{k_m r_p^2 (C_{Ab} - C_A^I)}{D_A r r_c} (r - r_c) \quad (A.12)$$

Con ayuda de la C.F.2 se obtiene el flux de oxígeno en la superficie de la partícula evaluando la derivada de la ecuación A.12 obteniendo:

$$N_A|_{r_p} = \frac{(C_{Ab} - C_{Ae})}{\frac{1}{k_m} + \frac{r_p}{r_c} \frac{(r_p - r_c)}{D_A}} \quad (A.13)$$

Como lo expresa la C.F.2 el oxígeno que llega desde el seno del fluido a la superficie de la partícula se transporta enteramente por difusión hacia el núcleo. En régimen estacionario, el flujo de oxígeno que llega a la superficie de la partícula es igual al flujo de oxígeno que llega al núcleo reaccionante:

$$A_p N_A|_{r_p} = A_c N_A|_{r_c} \quad (A.14)$$

Por lo tanto:

$$N_A|_{r_c} = \frac{A_p}{A_c} N_A|_{r_p} \quad (A.15)$$

Sustituyendo A.13 en la Ecuación A.15 se puede conocer el flux de oxígeno en la superficie del núcleo considerando que $A_p = 4\pi r_p^2$ y $A_c = 4\pi r_c^2$:

$$N_A|_{r_c} = \frac{r_p^2 (C_{Ab} - C_{Ae})}{r_c^2 \left(\frac{1}{k_m} + \frac{r_p (r_p - r_c)}{r_c D_A} \right)} \quad (A.16)$$

donde A_p es al área de la partícula, $C_{A,b}$ es la concentración de oxígeno en el seno del fluido, $C_{A,e}$ es la concentración de equilibrio que en nuestro caso se supone igual a cero, k_m es el coeficiente de transferencia de masa externo, r_p es el radio de la partícula, r_c es el radio del núcleo y D_A es la difusividad efectiva interna. La Ecuación A.16 corresponde a la Ecuación 3.7 del texto principal.

De acuerdo a la siguiente reacción química, la cual corresponde a la Ecuación 3.2 del escrito:



por cada mol de oxígeno consumido se consumen b moles de mata, matemáticamente esto se expresa como:

$$4\pi r_c^2 N_A|_{r_c} = -\frac{1}{b} \frac{d}{dt} \left(\hat{\rho}_B \cdot \frac{4\pi r_c^3}{3} \right) \quad (A.18)$$

sustituyendo la Ecuación A.16 en A.18 y reorganizando se obtiene:

$$\frac{dr_c}{dt} = -\frac{b}{\hat{\rho}_B} \frac{r_p^2 (C_{Ab} - C_{Ae})}{r_c^2 \left[\frac{1}{k_m} + \frac{r_p (r_p - r_c)}{r_c D_{Aef}} \right]} \quad (\text{A. 19})$$

Siendo la ecuación A.19, la Ecuación 3.9 que se presenta en el cuerpo de este trabajo. La solución de esta ecuación diferencial es relevante ya que proporciona el tamaño del núcleo decreciente de la partícula conforme avanza la reacción. A partir de este valor, es posible calcular la composición instantánea de la partícula tomando en cuenta la estequiometría de la reacción. Se hace notar que la solución de la Ecuación A.19 requiere de integración numérica ya que las propiedades r_p, k_m, D_{Aef} son a su vez función del tiempo.

Se define a X como el consumo fraccional del sólido, es decir:

$$X = \frac{\text{Moles de Sólido Consumido}}{\text{Moles de Sólido Iniciales}}$$

Para el modelo de núcleo decreciente, lo anterior se expresa de la siguiente manera:

$$X = \frac{\hat{\rho}_B \left(\frac{4}{3} \pi r_i^3 - \frac{4}{3} \pi r_c^3 \right)}{\hat{\rho}_B \frac{4}{3} \pi r_i^3} \quad (\text{A. 20})$$

Esta ecuación puede transformarse para obtener la siguiente relación:

$$X = 1 - \left(\frac{r_c}{r_i}\right)^3 \quad (A.21)$$

La Ecuación A.21 corresponde a la Ecuación 4.1 del texto principal de este trabajo. Puesto que r_c varía a lo largo de la trayectoria de la partícula, la Ecuación A.21 expresa el grado de conversión de la partícula conforme avanza el tiempo.

APÉNDICE B

Resultados del Modelo Cinético para Partículas Individuales

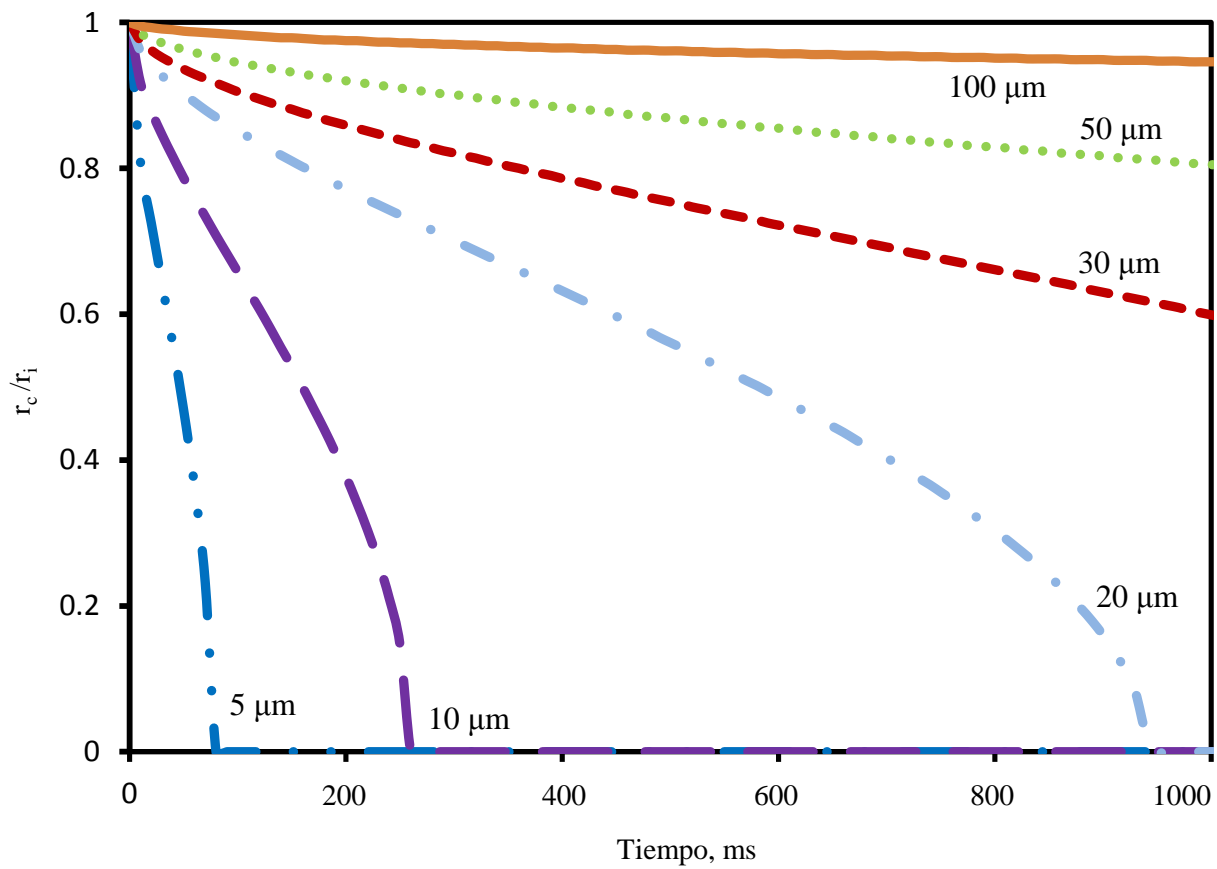


Figura B.1 Evolución del Radio del Núcleo en Función del Tamaño Inicial

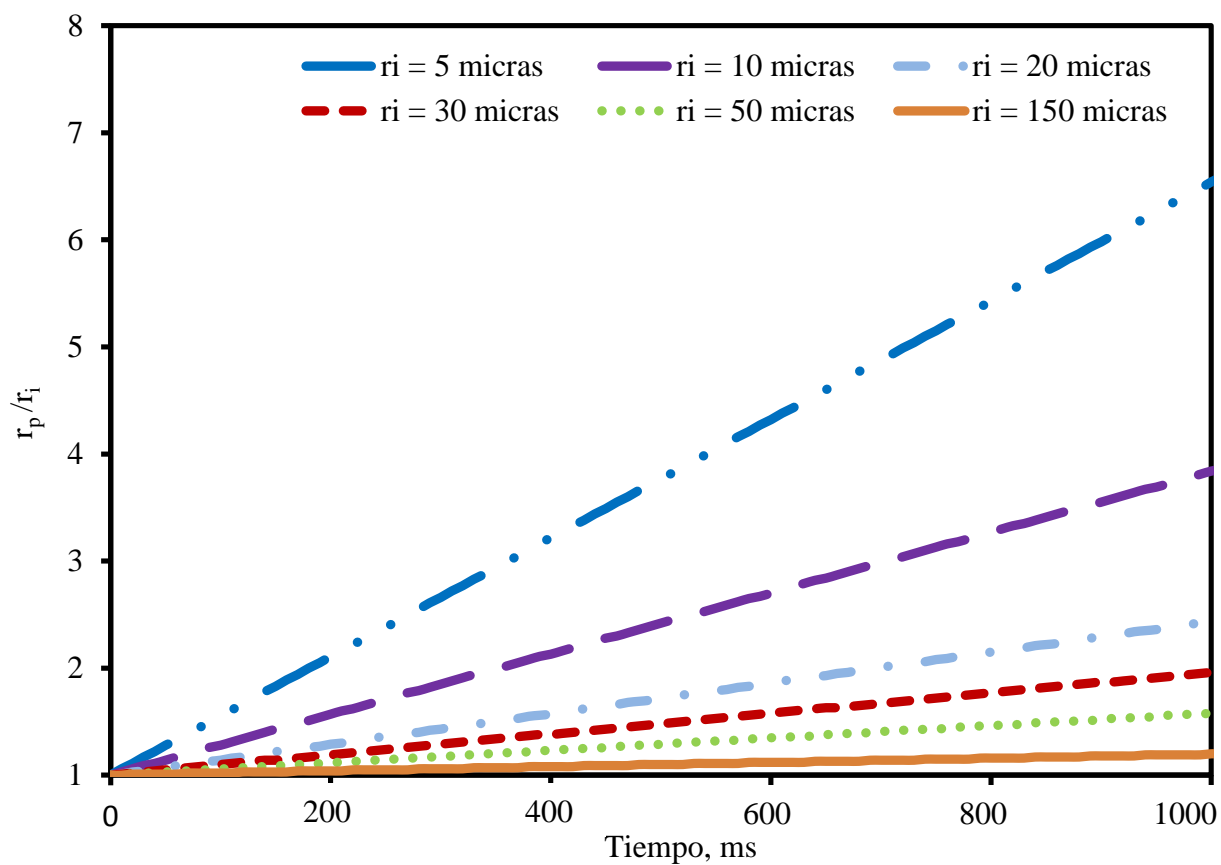


Figura B.2 Evolución del Radio de la Partícula en Función del Tamaño Inicial

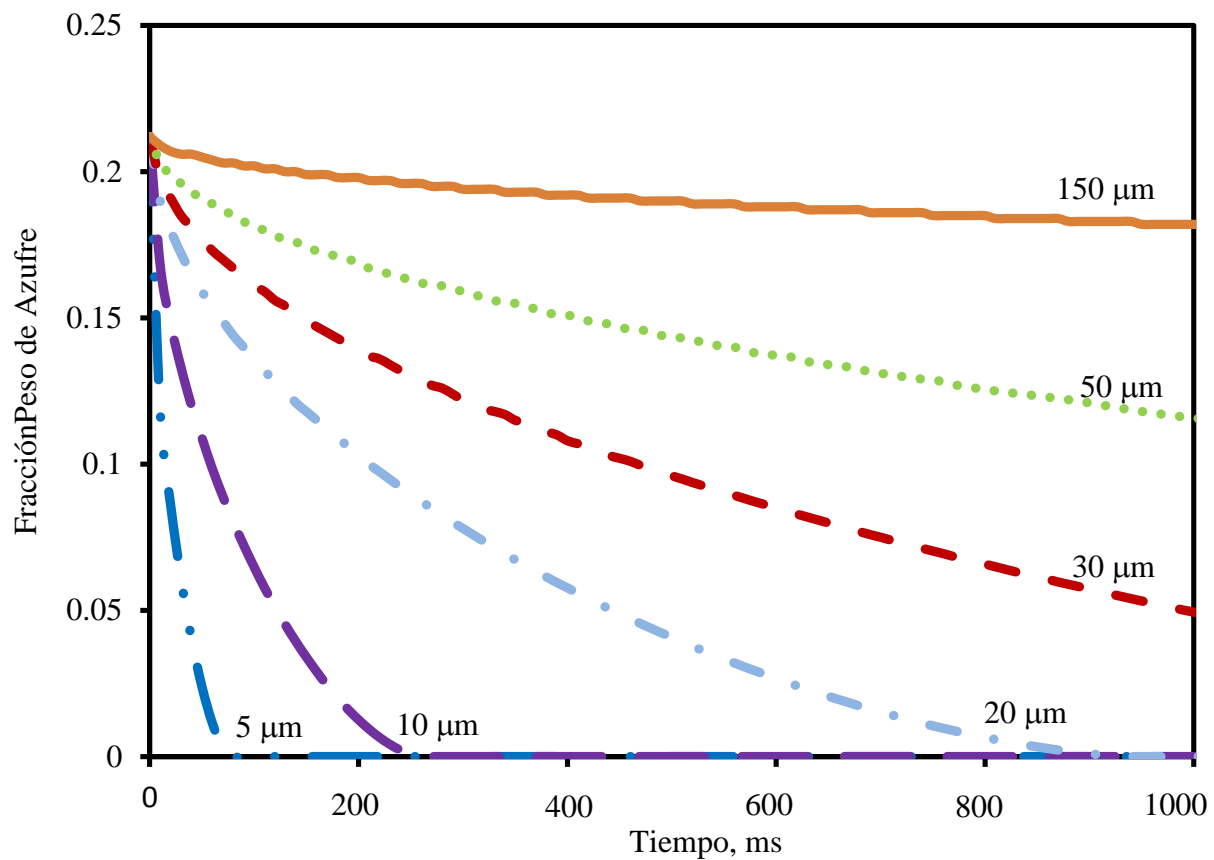


Figura B.3 Evolución de la Fracción Peso de Azufre en Función del Tamaño Inicial

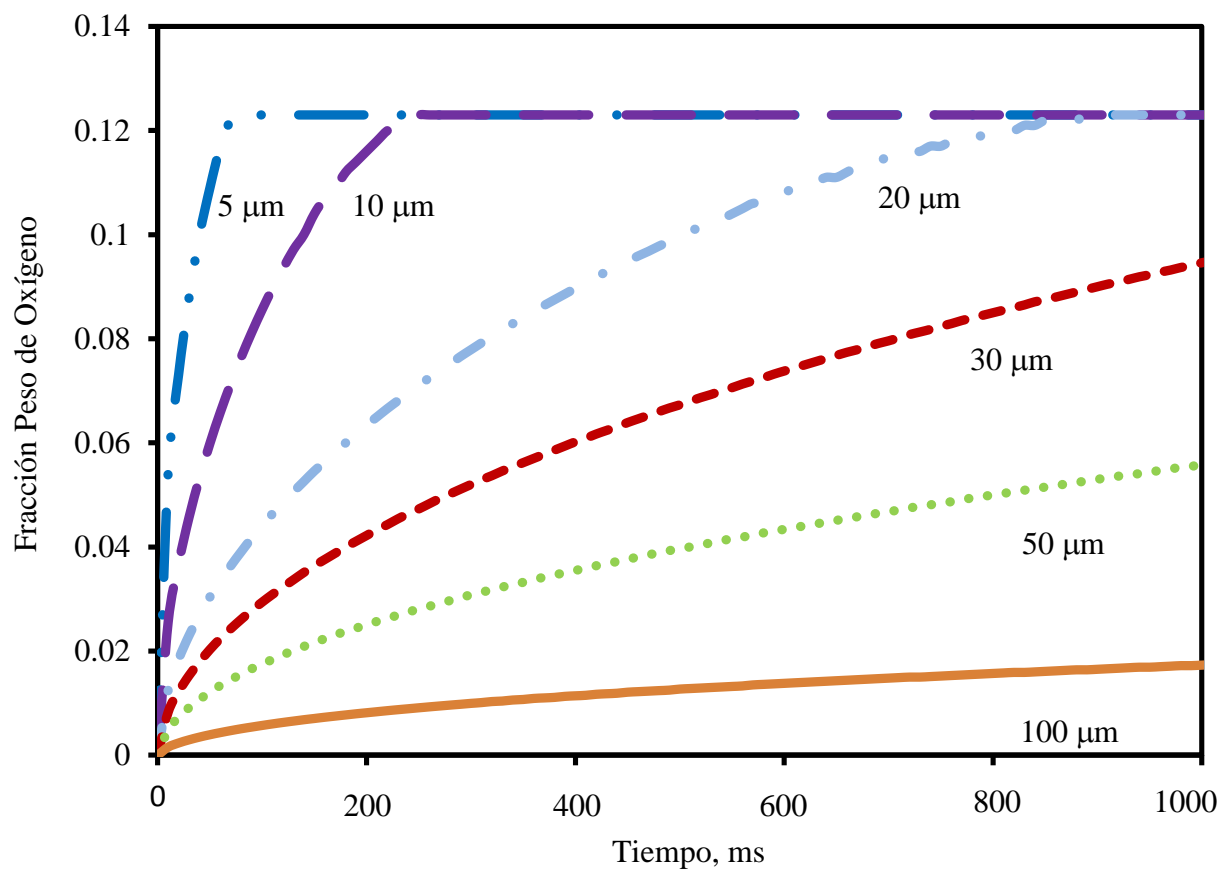


Figura B.4 Evolución de la Fracción Peso de Oxígeno en Función del Tamaño Inicial

APÉNDICE C

Resultados del Modelo de Fragmentación

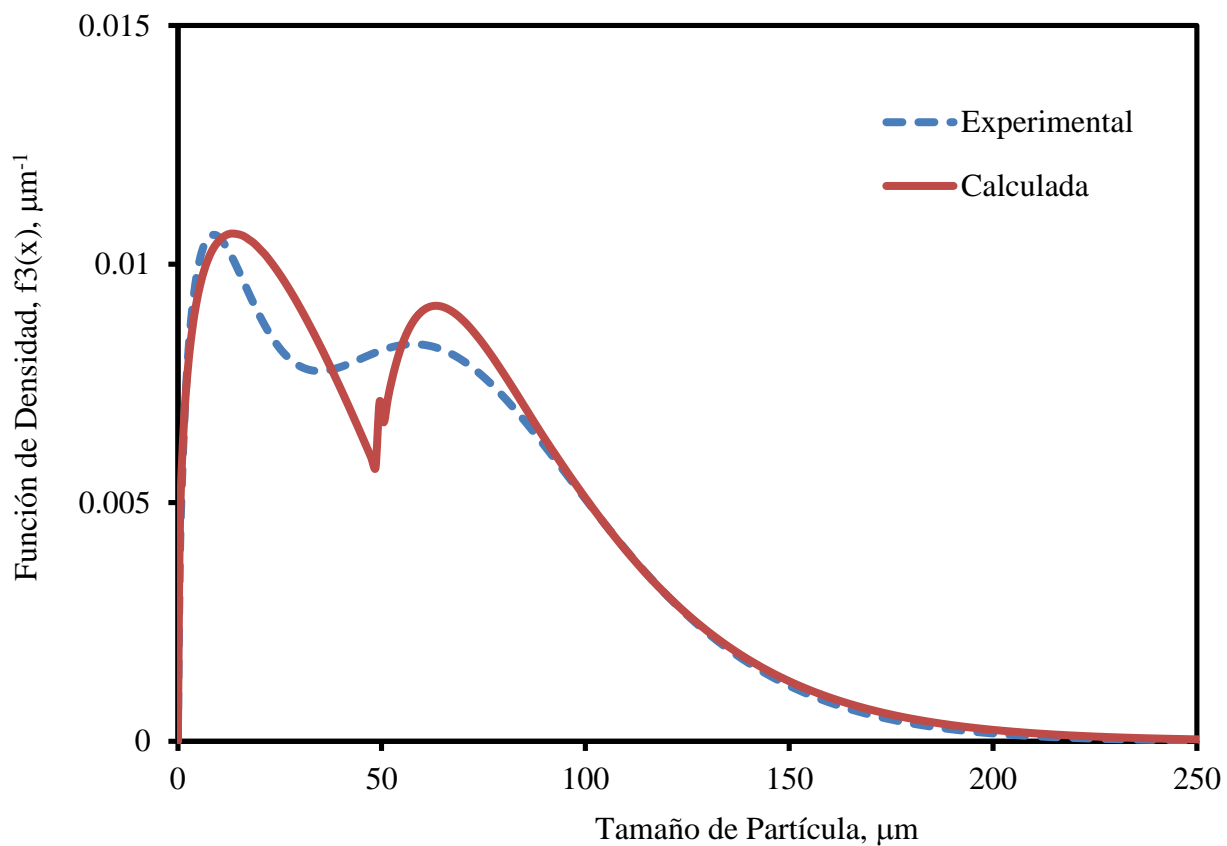


Figura C.1 Funciones de Densidad Experimental y Calculada para el experimento No.1.
Condiciones Experimentales: $<37\mu\text{m}$, Relación Oxígeno-Mata $0.25\text{kg O}_2/\text{kg mata}$,
 $70\% \text{ O}_2$ en Gas de Proceso. $r^2 = 0.980$

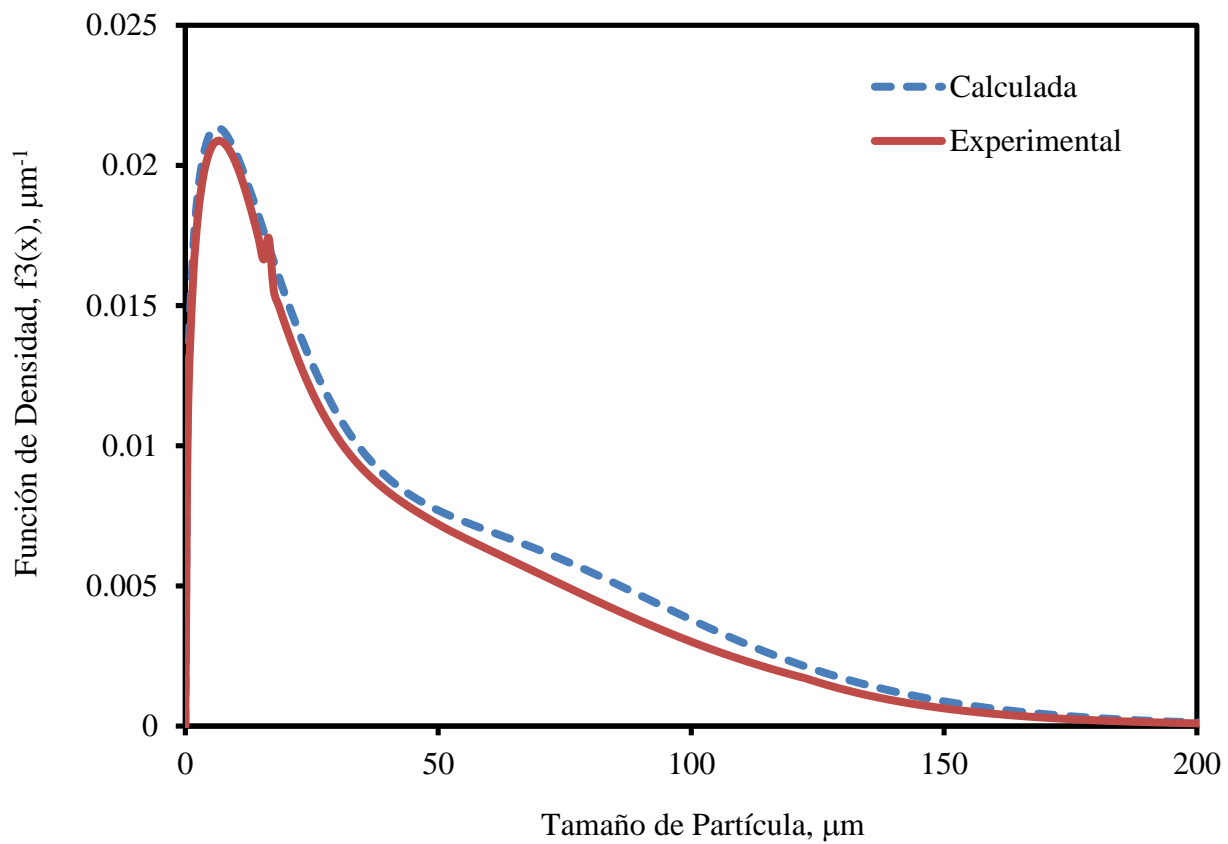


Figura C.2 Funciones de Densidad Experimental y Calculada para el experimento No.2.
Condiciones Experimentales: $<37\mu\text{m}$, Relación Oxígeno-Mata $0.33\text{kg O}_2/\text{kg mata}$,
 $70\% \text{O}_2$ en Gas de Proceso. $r^2 = 0.991$

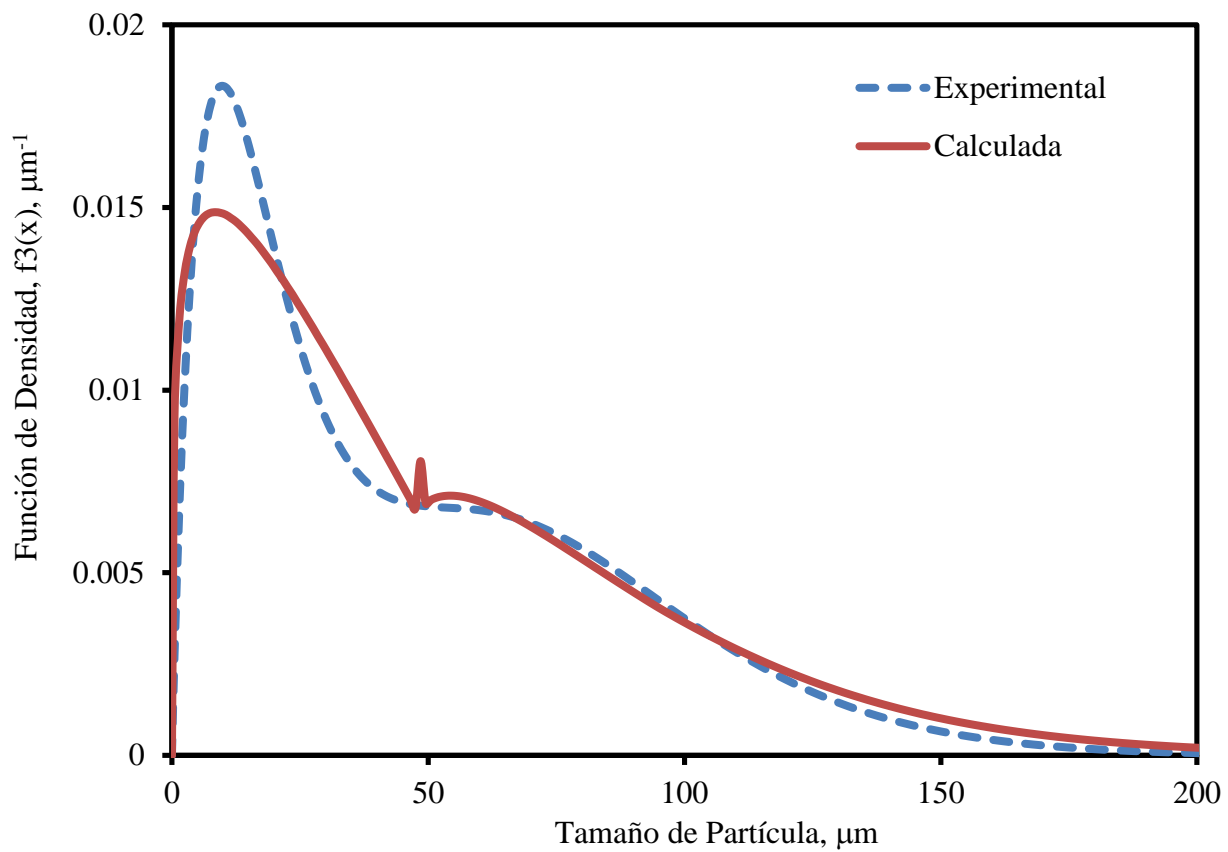


Figura C.3 Funciones de Densidad Experimental y Calculada para el experimento No.3.
Condiciones Experimentales: $<37\mu\text{m}$, Relación Oxígeno-Mata $0.25\text{kg O}_2/\text{kg mata}$,
 $100\% \text{O}_2$ en Gas de Proceso. $r^2 = 0.960$

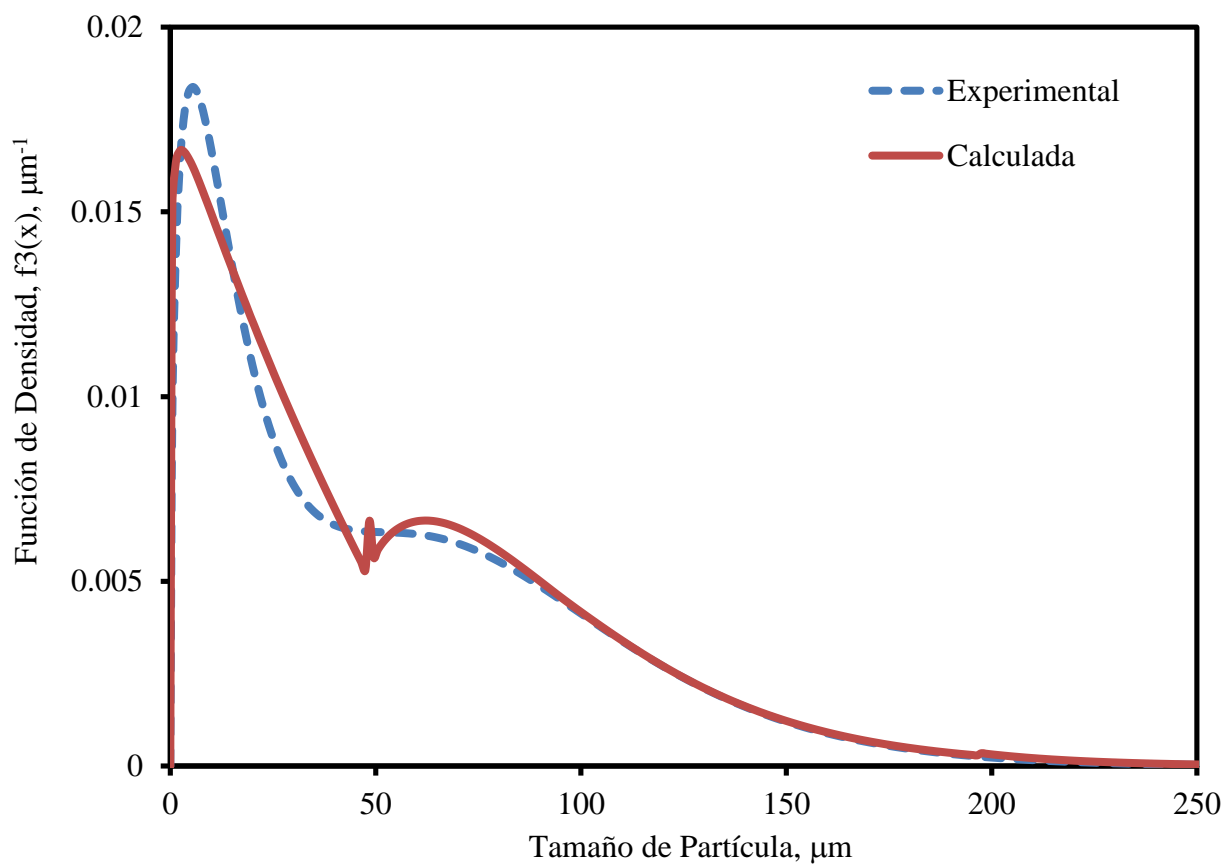


Figura C.4 Funciones de Densidad Experimental y Calculada para el experimento No.4.
Condiciones Experimentales: $<37\mu\text{m}$, Relación Oxígeno-Mata $0.33\text{kg O}_2/\text{kg mata}$,
 $100\% \text{O}_2$ en Gas de Proceso. $r^2 = 0.976$

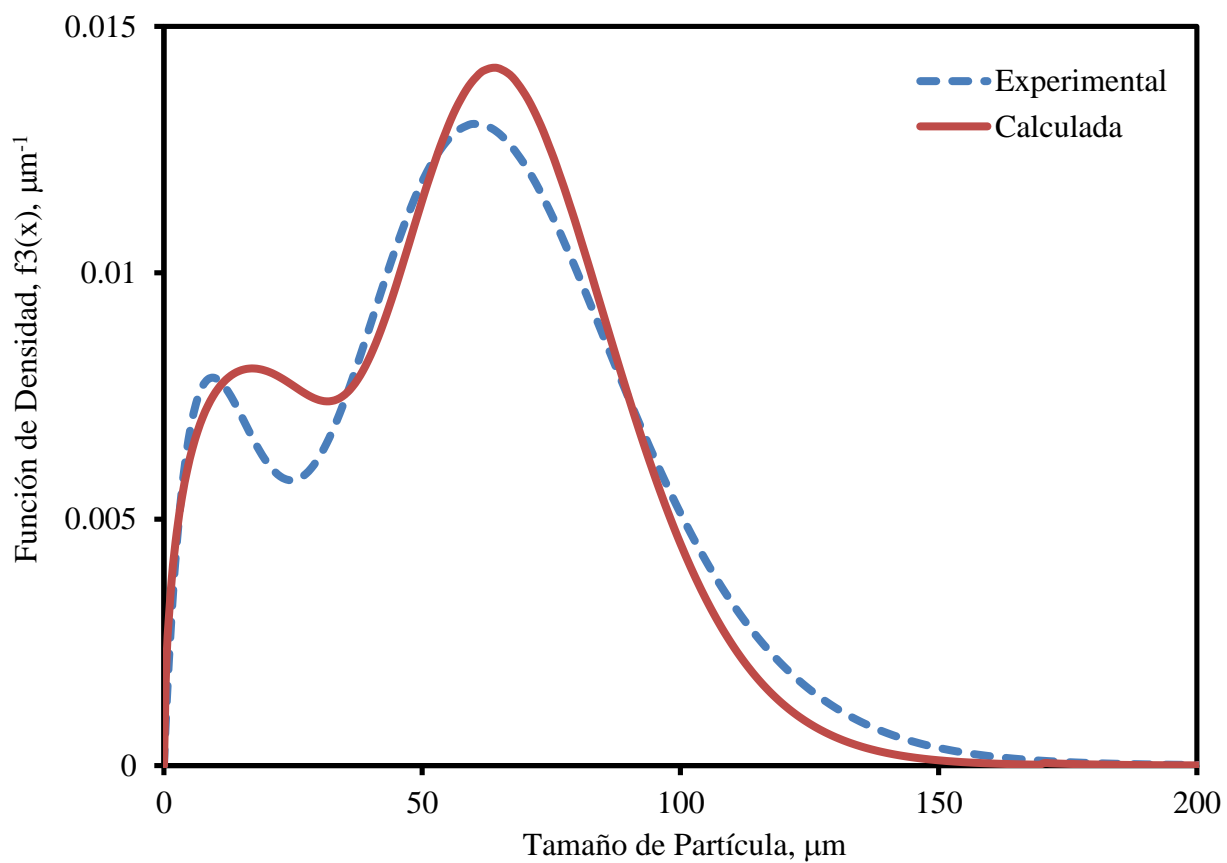


Figura C.5 Funciones de Densidad Experimental y Calculada para el experimento No.5.
Condiciones Experimentales: 37-74 μm , Relación Oxígeno-Mata 0.25kg O_2 /kg mata,
70% O_2 en Gas de Proceso. $r^2 = 0.979$

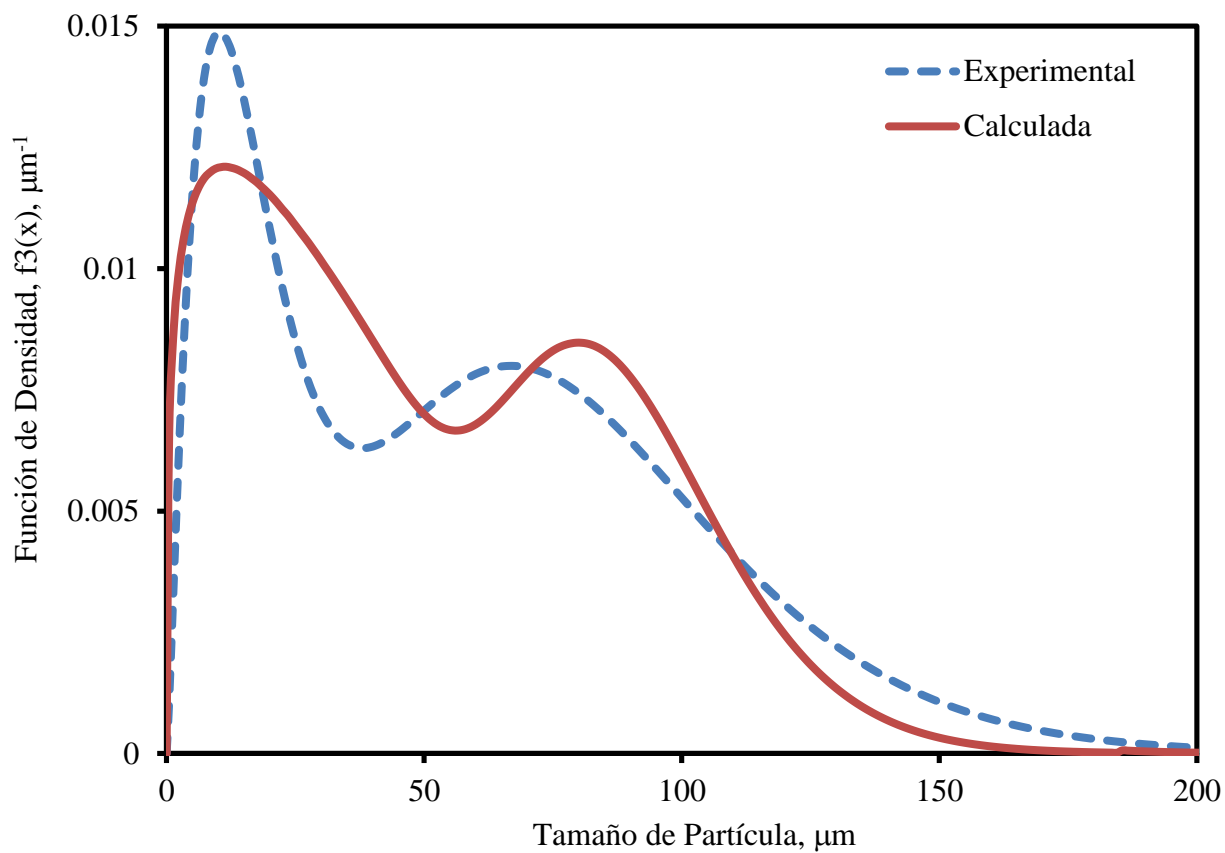


Figura C.6 Funciones de Densidad Experimental y Calculada para el experimento No.6.
Condiciones Experimentales: 37-74 μm , Relación Oxígeno-Mata 0.33kg O₂/kg mata,
70% O₂ en Gas de Proceso. $r^2 = 0.922$

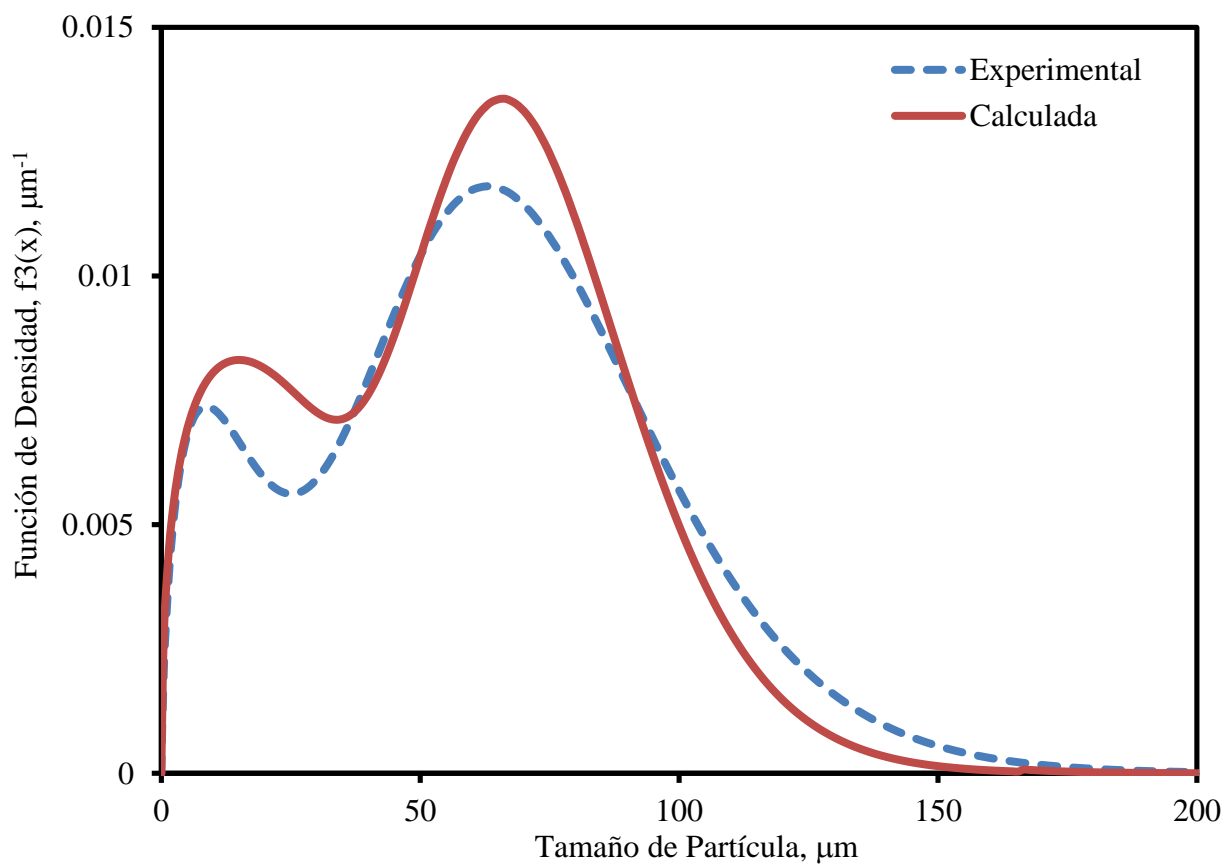


Figura C.7 Funciones de Densidad Experimental y Calculada para el experimento No.7.
Condiciones Experimentales: 37-74 μm , Relación Oxígeno-Mata 0.25kg O_2 /kg mata,
100% O_2 en Gas de Proceso. $r^2 = 0.962$

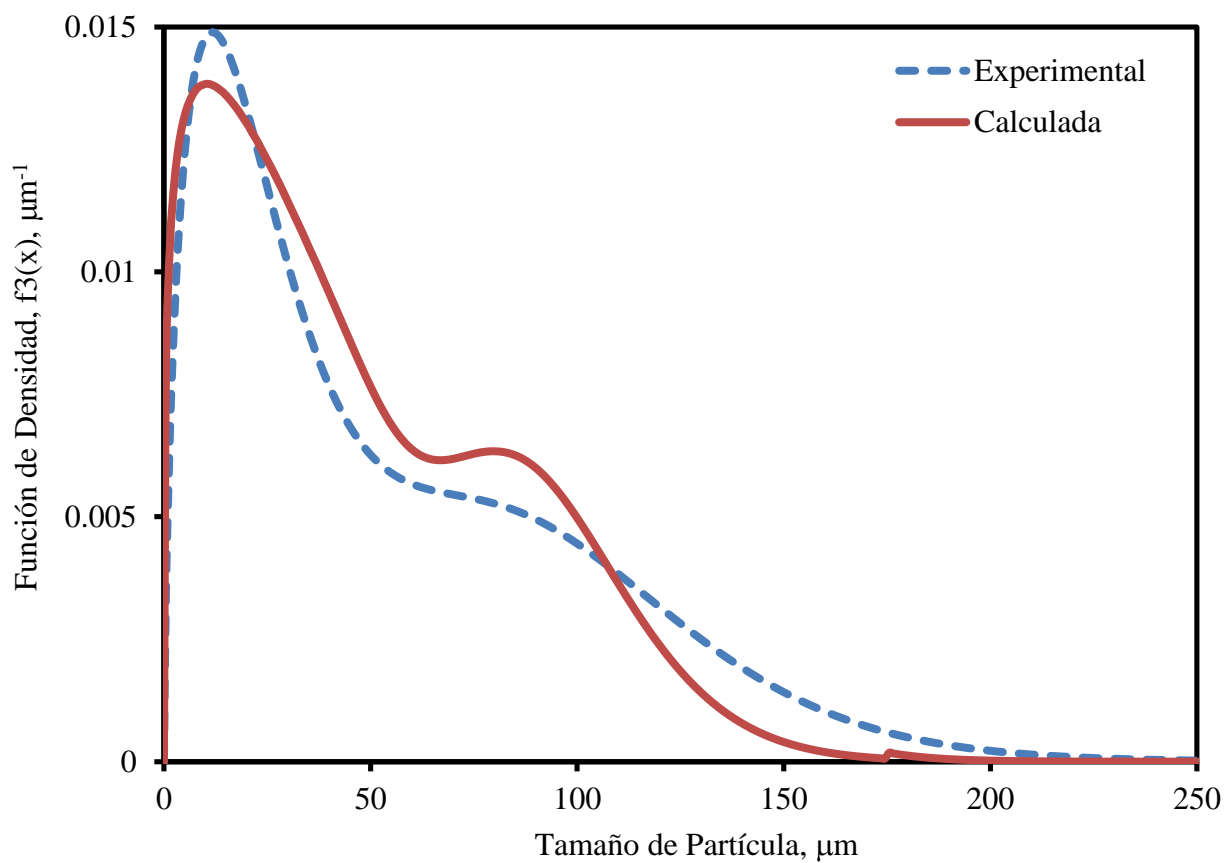


Figura C.8 Funciones de Densidad Experimental y Calculada para el experimento No.8.
Condiciones Experimentales: 37-74 μm , Relación Oxígeno-Mata 0.33kg O_2 /kg mata,
100% O_2 en Gas de Proceso. $r^2 = 0.955$

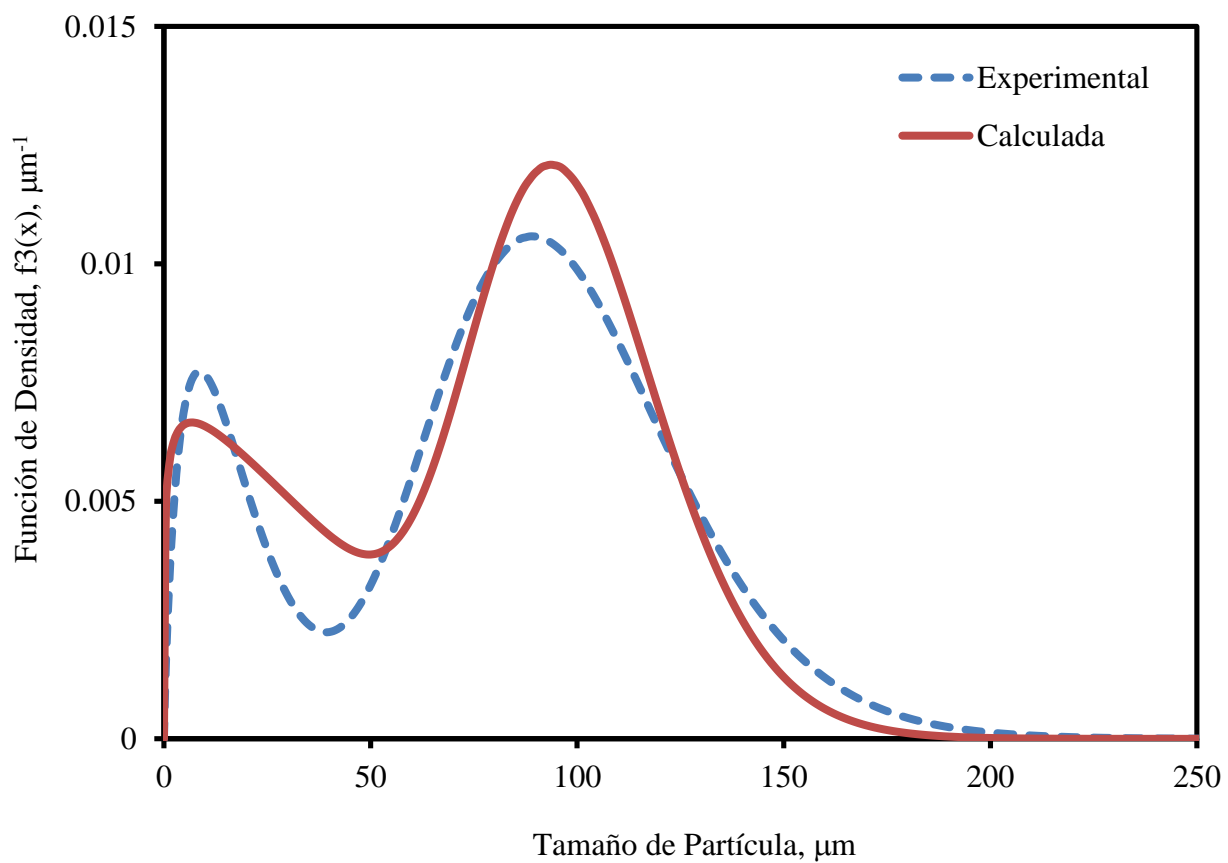


Figura C.9 Funciones de Densidad Experimental y Calculada para el experimento No.9.
Condiciones Experimentales: 74-105 μm , Relación Oxígeno-Mata 0.25kg O_2 /kg mata,
70% O_2 en Gas de Proceso. $r^2 = 0.939$

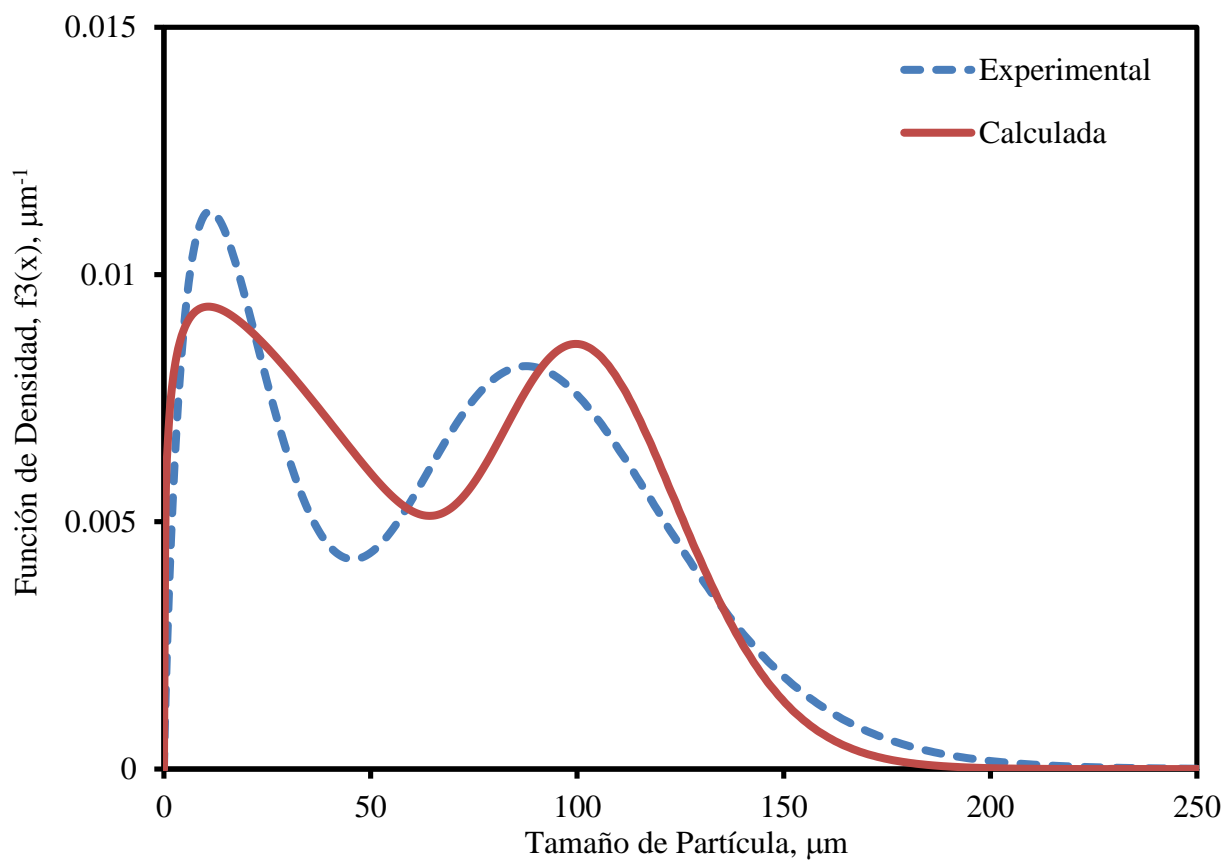


Figura C.10 Funciones de Densidad Experimental y Calculada para el experimento No.10.
Condiciones Experimentales: 74-105 μm , Relación Oxígeno-Mata 0.33kg O_2 /kg mata,
70% O_2 en Gas de Proceso. $r^2= 0.921$

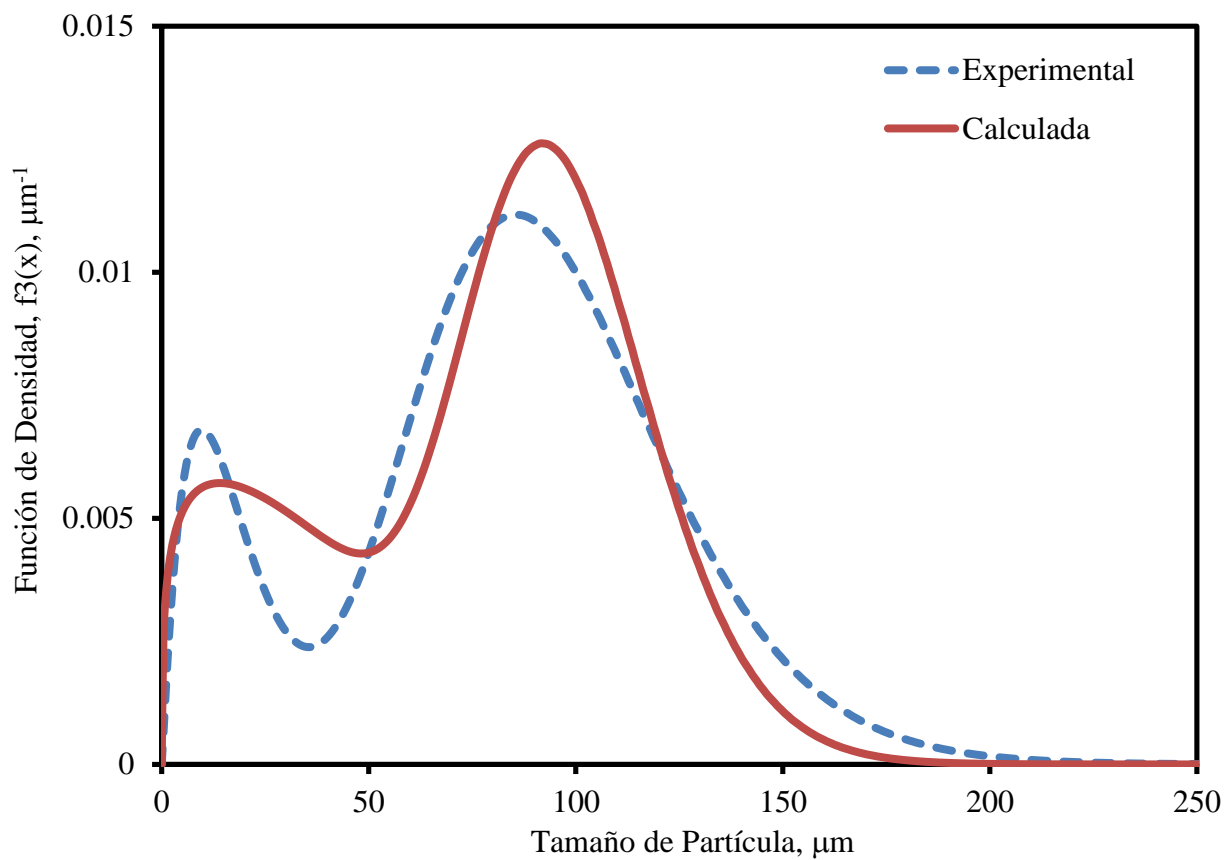


Figura C.11 Funciones de Densidad Experimental y Calculada para el experimento No.11.
Condiciones Experimentales: 74-105 μm , Relación Oxígeno-Mata 0.25kg O_2 /kg mata,
100% O_2 en Gas de Proceso. $r^2 = 0.928$

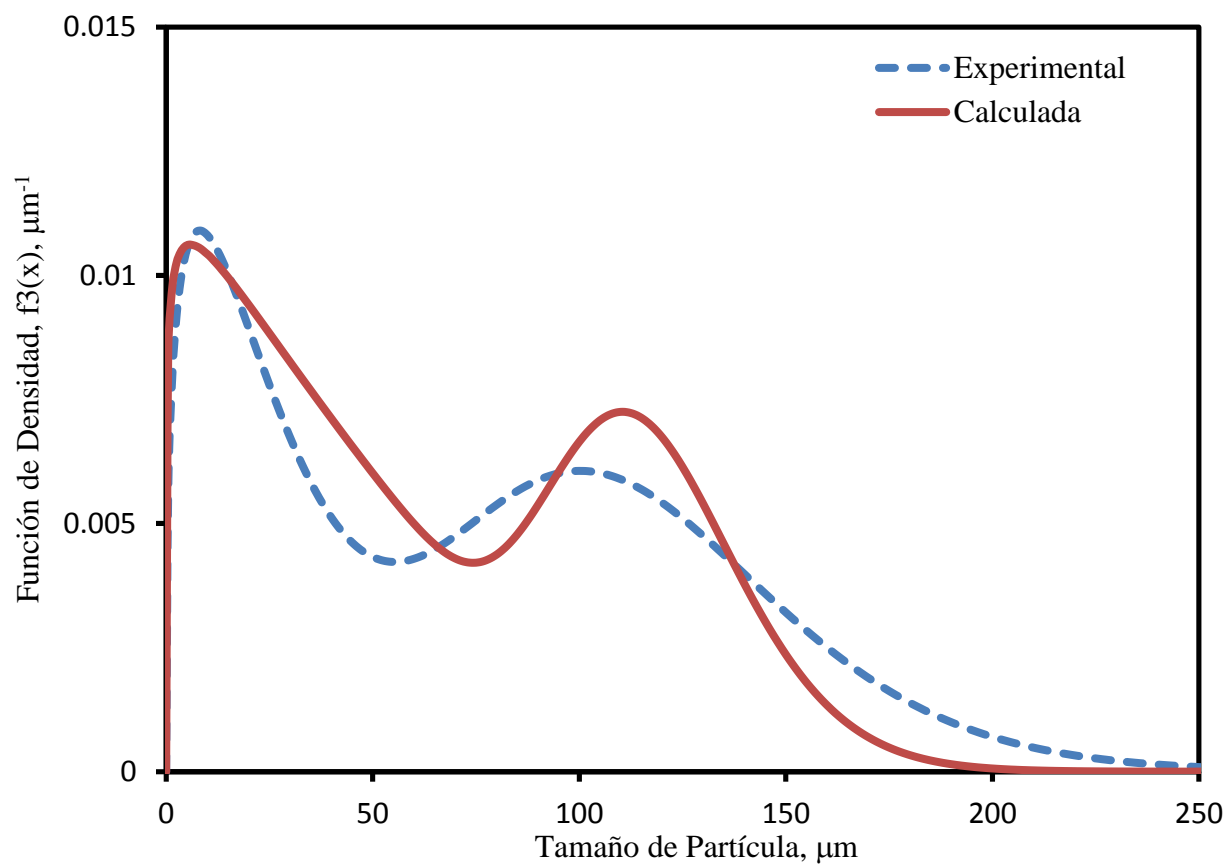


Figura C.12 Funciones de Densidad Experimental y Calculada para el experimento No.12.
Condiciones Experimentales: 74-105 μm , Relación Oxígeno-Mata 0.33kg O₂/kg mata,
100% O₂ en Gas de Proceso. $r^2 = 0.913$

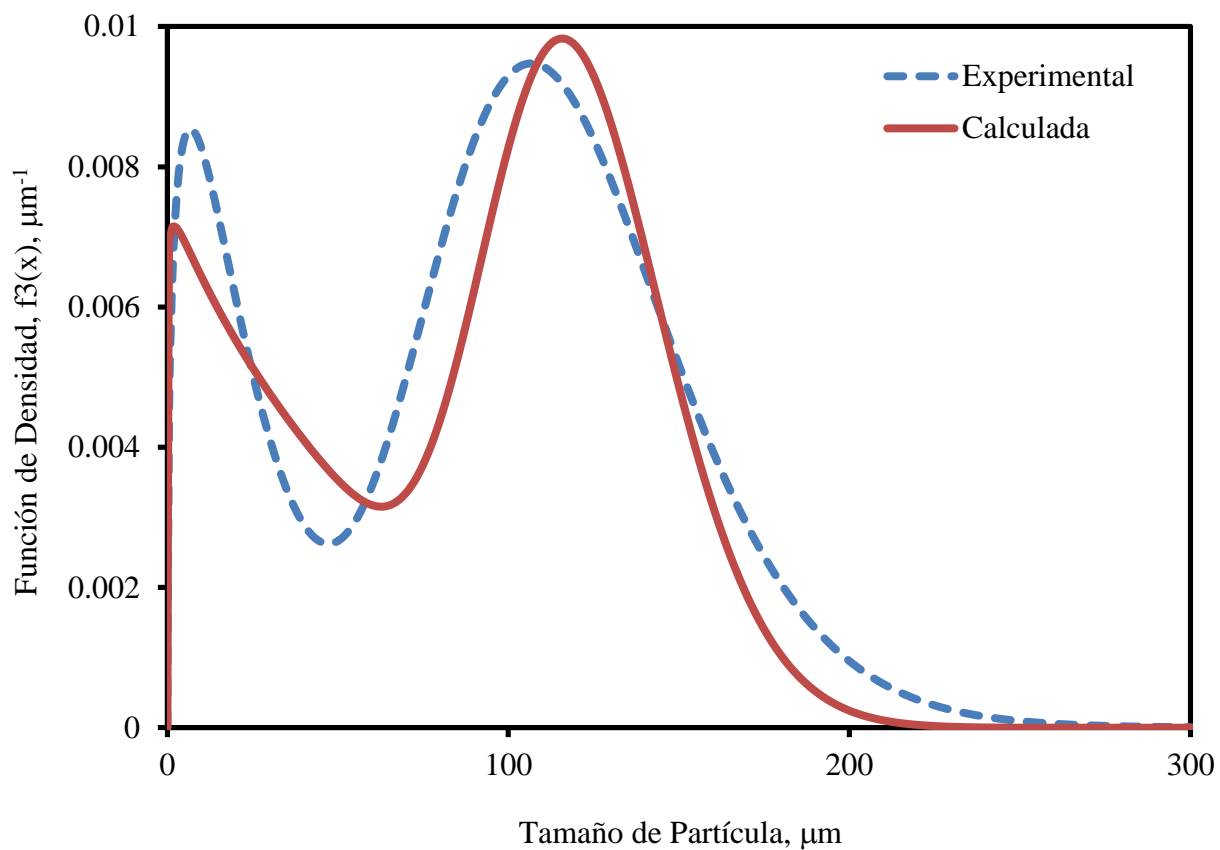


Figura C.13 Funciones de Densidad Experimental y Calculada para el experimento No.13.
Condiciones Experimentales: 105-149 μm , Relación Oxígeno-Mata 0.25kg O_2/kg mata,
70% O_2 en Gas de Proceso. $r^2 = 0.906$

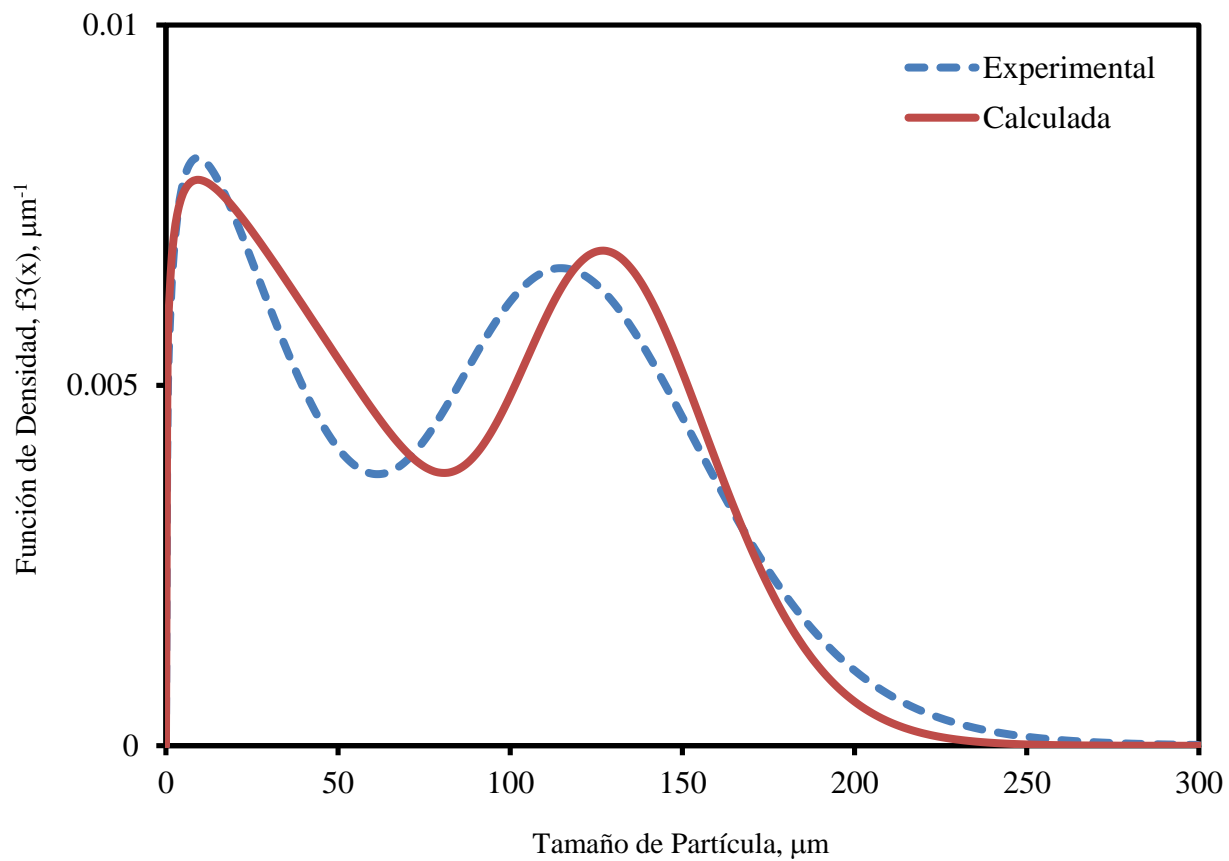


Figura C.14 Funciones de Densidad Experimental y Calculada para el experimento No.14.
Condiciones Experimentales: 105-149 μm , Relación Oxígeno-Mata 0.33kg O_2 /kg mata,
70% O_2 en Gas de Proceso. $r^2= 0.945$

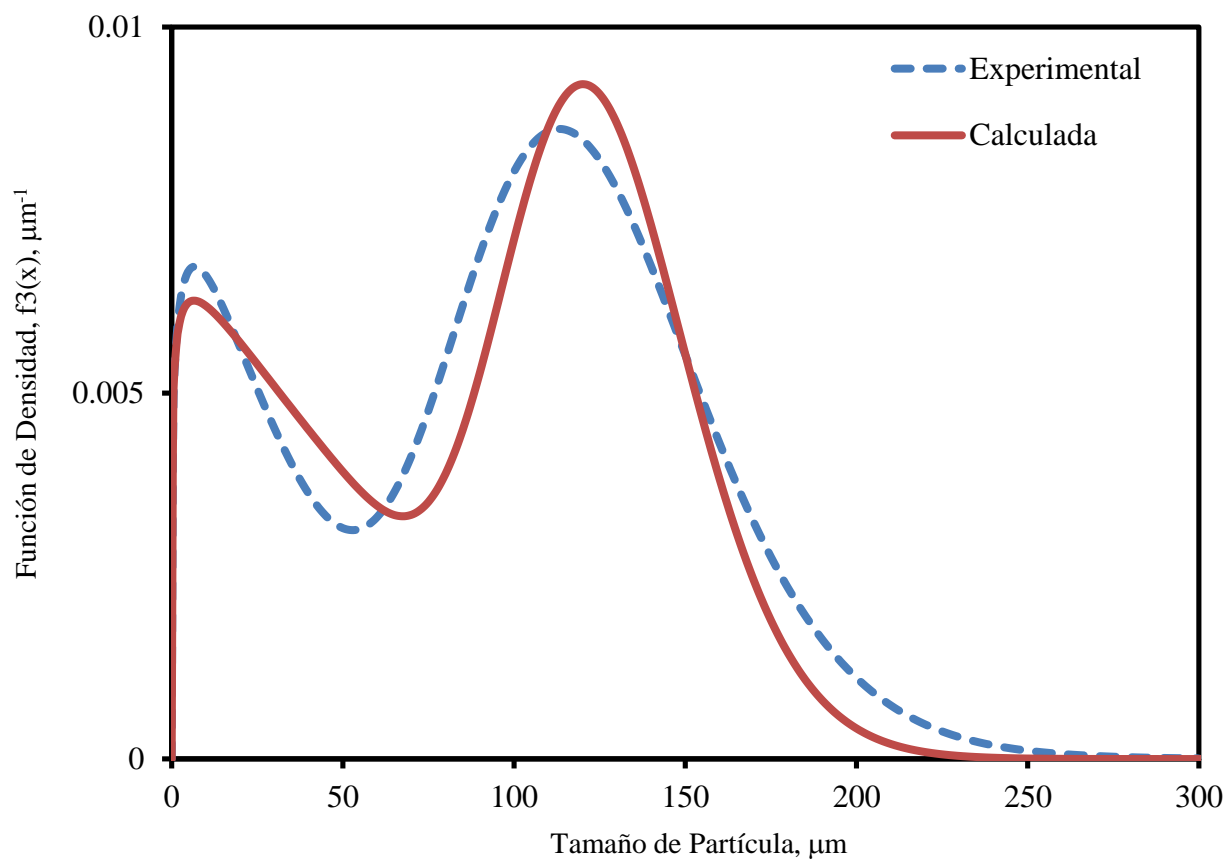


Figura C.15 Funciones de Densidad Experimental y Calculada para el experimento No.15. Condiciones Experimentales: 105-149 μm , Relación Oxígeno-Mata 0.25kg O_2 /kg mata, 100% O_2 en Gas de Proceso. $r^2 = 0.947$

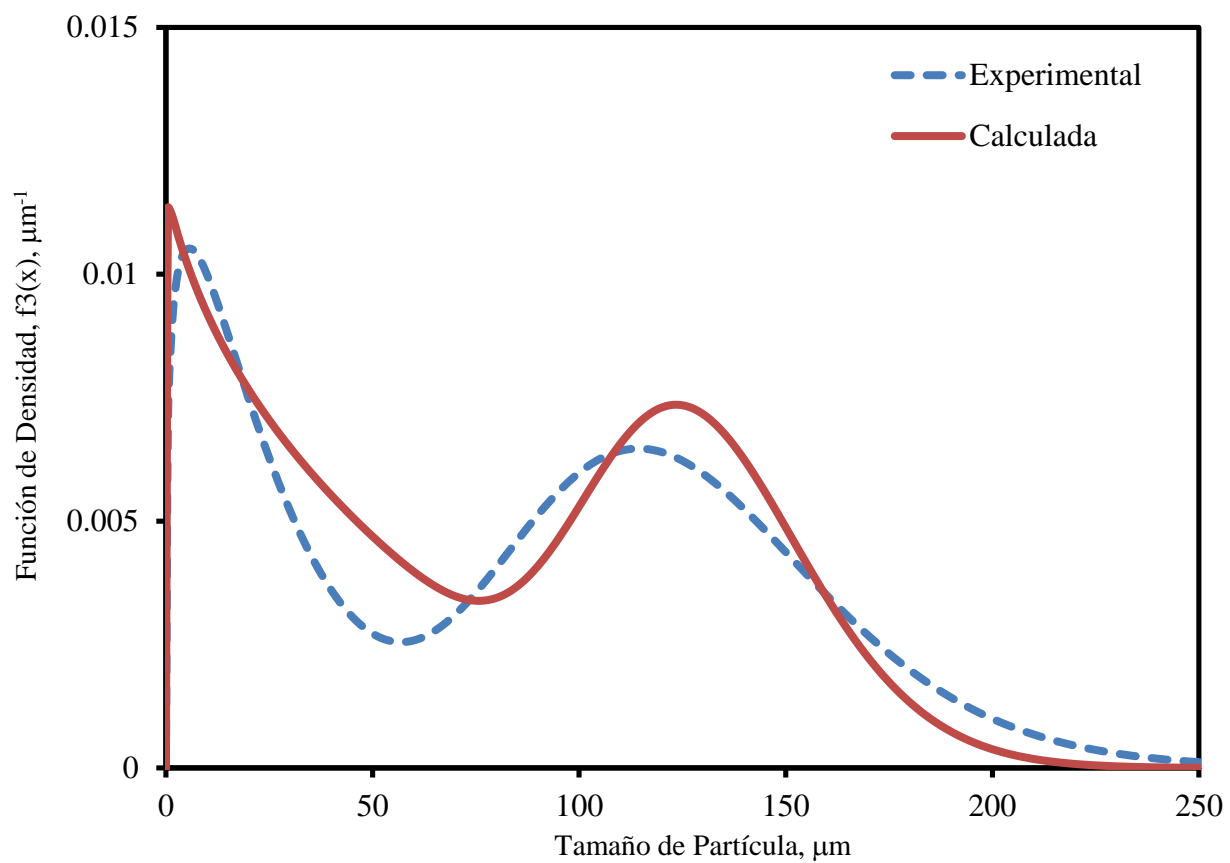


Figura C.16 Funciones de Densidad Experimental y Calculada para el experimento No.16.
Condiciones Experimentales: 105-149 μm , Relación Oxígeno-Mata 0.33kg O_2 /kg mata,
100% O_2 en Gas de Proceso. $r^2 = 0.906$

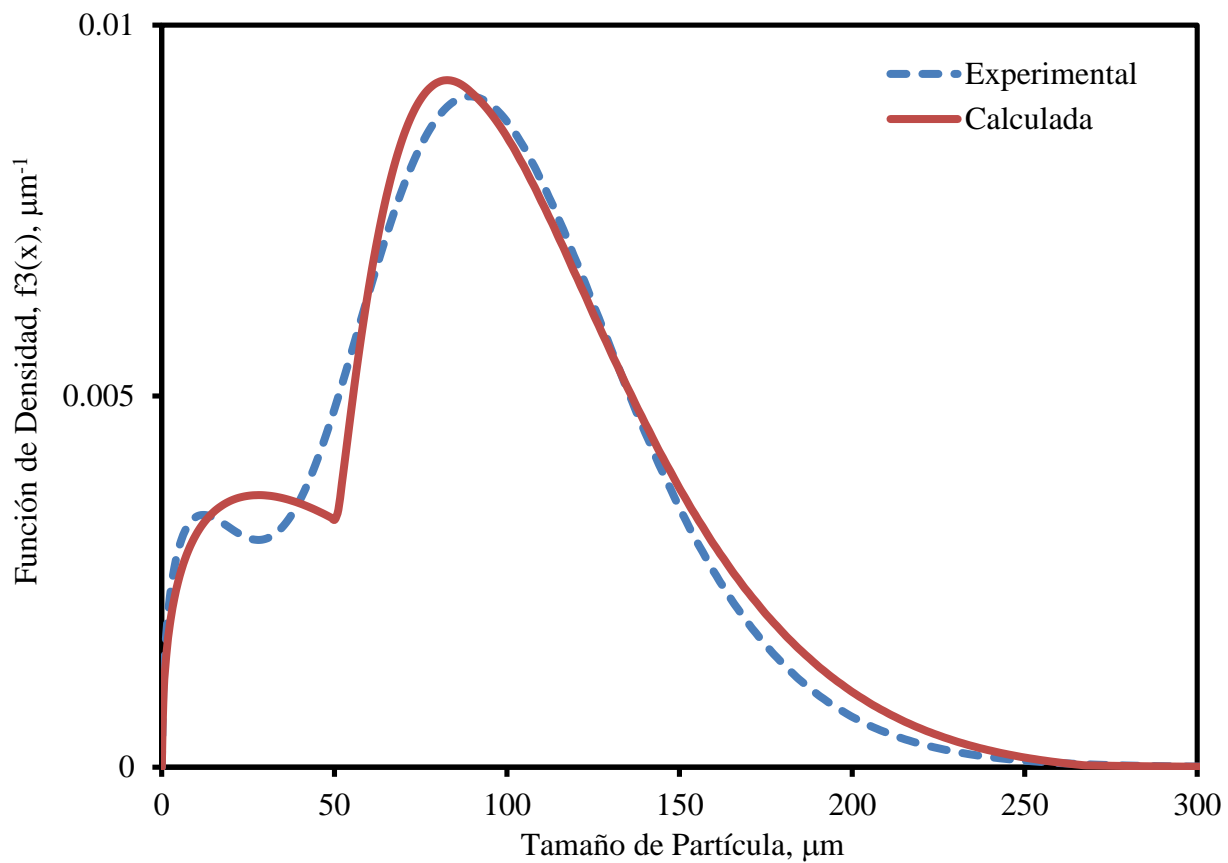


Figura C.17 Funciones de Densidad Experimental y Calculada para el experimento No.17.
Condiciones Experimentales: $<149 \mu\text{m}$, Relación Oxígeno-Mata $0.25\text{kg O}_2/\text{kg mata}$,
 $70\% \text{O}_2$ en Gas de Proceso. $r^2 = 0.986$

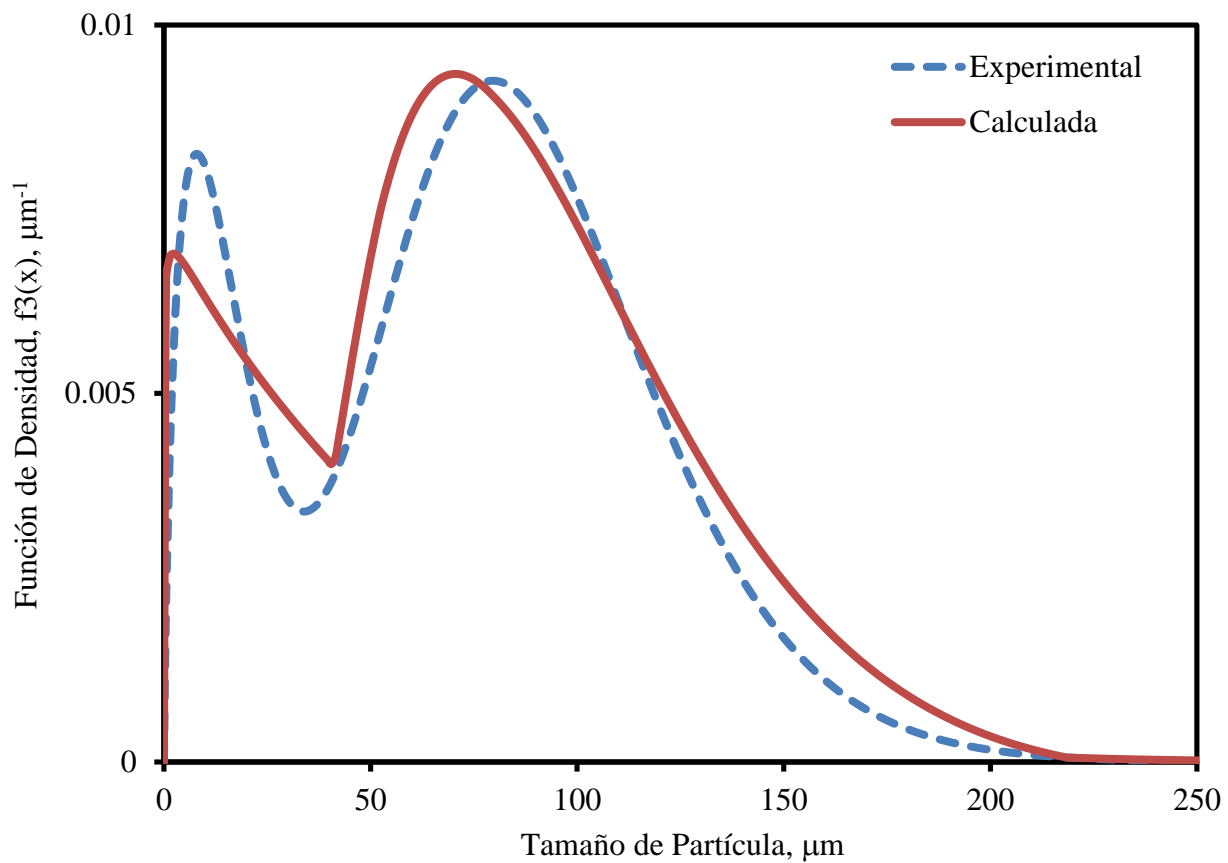


Figura C.18 Funciones de Densidad Experimental y Calculada para el experimento No.18.
Condiciones Experimentales: $<149 \mu\text{m}$, Relación Oxígeno-Mata $0.33\text{kg O}_2/\text{kg mata}$,
 $70\% \text{O}_2$ en Gas de Proceso. $r^2 = 0.954$

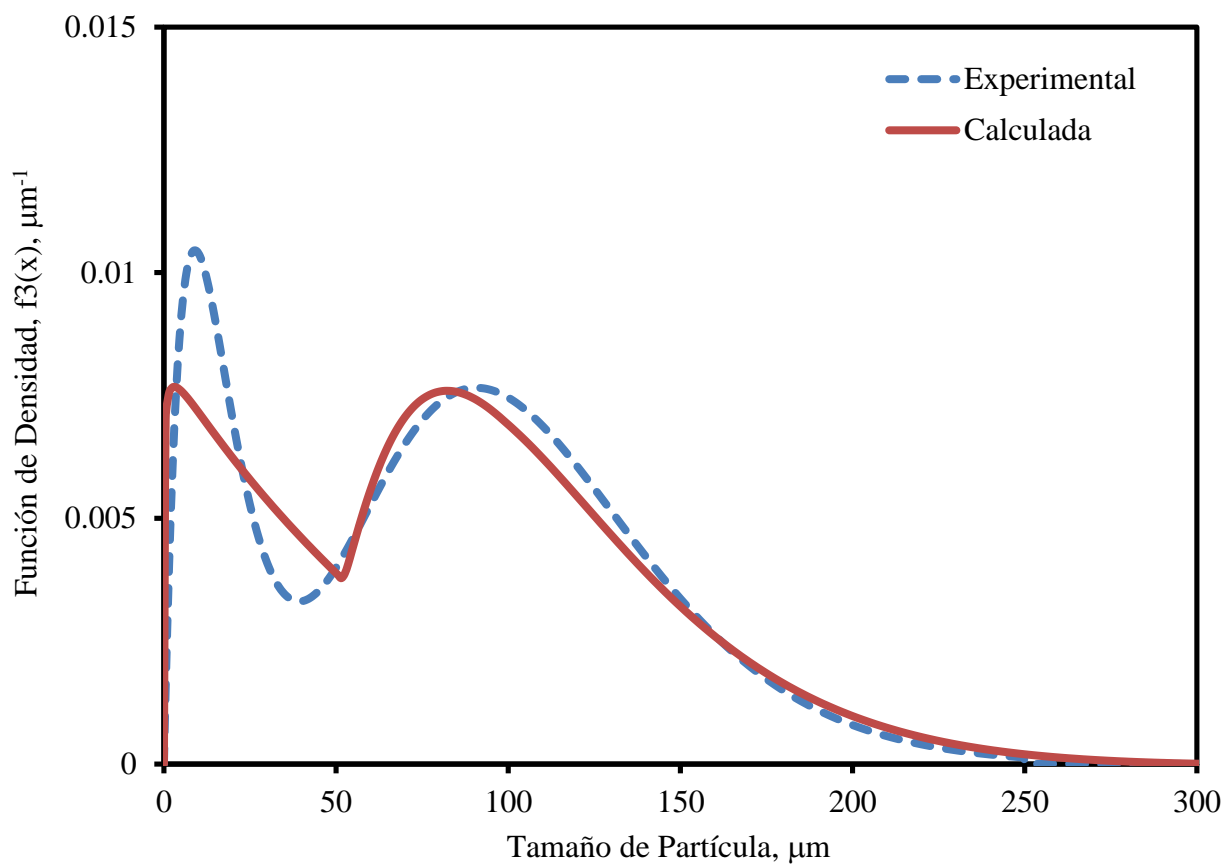


Figura C.19 Funciones de Densidad Experimental y Calculada para el experimento No.19.
Condiciones Experimentales: $<149 \mu\text{m}$, Relación Oxígeno-Mata $0.25\text{kg O}_2/\text{kg mata}$,
 $100\% \text{O}_2$ en Gas de Proceso. $r^2 = 0.928$

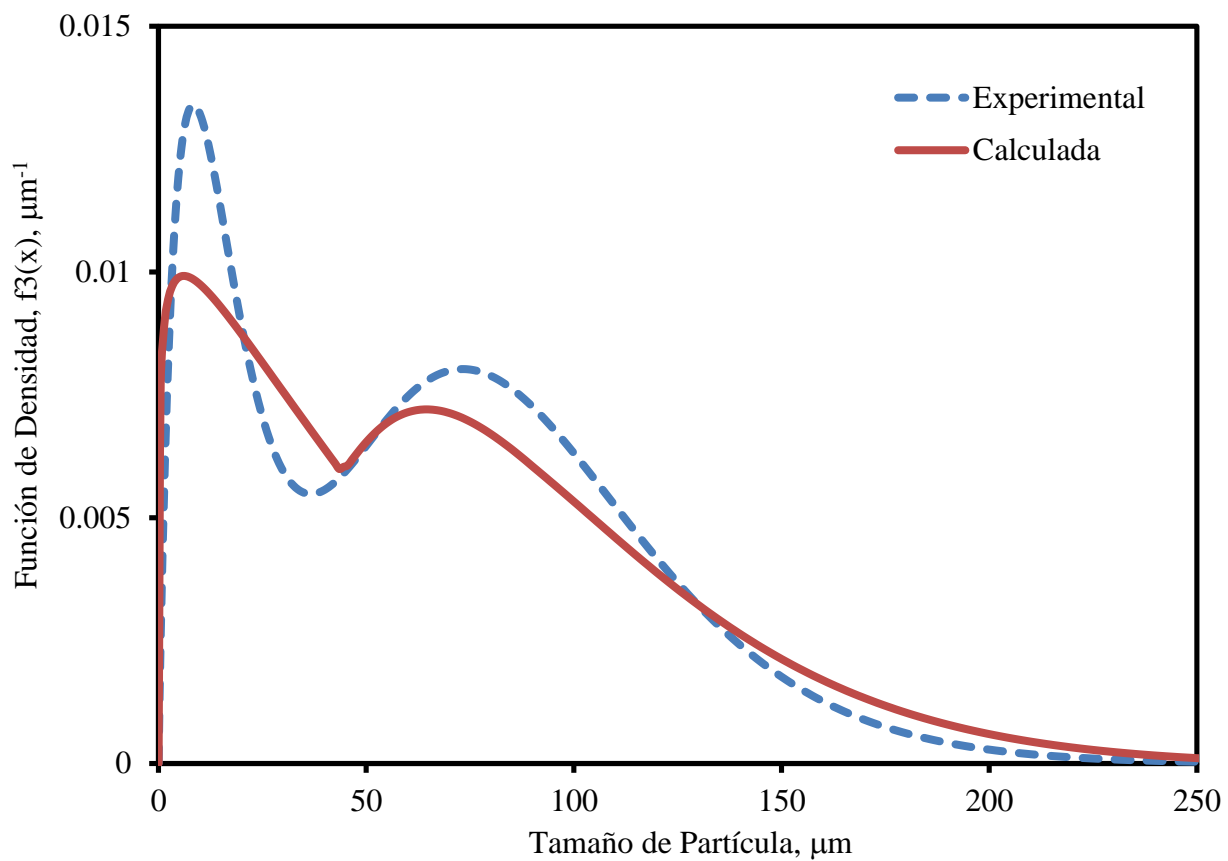


Figura C.20 Funciones de Densidad Experimental y Calculada para el experimento No.20.
Condiciones Experimentales: $<149 \mu\text{m}$, Relación Oxígeno-Mata $0.33\text{kg O}_2/\text{kg mata}$,
 $100\% \text{O}_2$ en Gas de Proceso. $r^2 = 0.939$

Tabla C.1 Porcentaje de generación de polvos y porcentaje de error cometido en su predicción para todas las condiciones experimentales

Corrida No.	Fracción de Tamaño de Partícula (μm)	Relación Oxígeno-Mata (kg O₂/kg mata)	Contenido de Oxígeno en el Gas de Proceso (% vol)	% Error en la cantidad de polvo en el receptáculo	% Generación de Polvos
1	<37	0.25	70	2.397	-7.4
2	<37	0.33	70	-3.377	8.35
3	<37	0.25	100	-6.658	.765
4	<37	0.33	100	-2.253	2.31
5	37-74	0.25	70	5.142	11.7
6	37-74	0.33	70	-2.816	19.6
7	37-74	0.25	100	14.931	12.6
8	37-74	0.33	100	2.006	22.8
9	74-105	0.25	70	-0.322	11.8
10	74-105	0.33	70	-4.534	13.9
11	74-105	0.25	100	-4.812	8.2
12	74-105	0.33	100	2.693	18.8
13	105-149	0.25	70	-15.26	12.3
14	105-149	0.33	70	-0.875	14.2
15	105-149	0.25	100	-4.156	11.4
16	105-149	0.33	100	0.928	17.8
17	<149	0.25	70	-4.351	-1.94
18	<149	0.33	70	-6.863	4.58
19	<149	0.25	100	-15.009	5.96
20	<149	0.33	100	-13.129	10.1

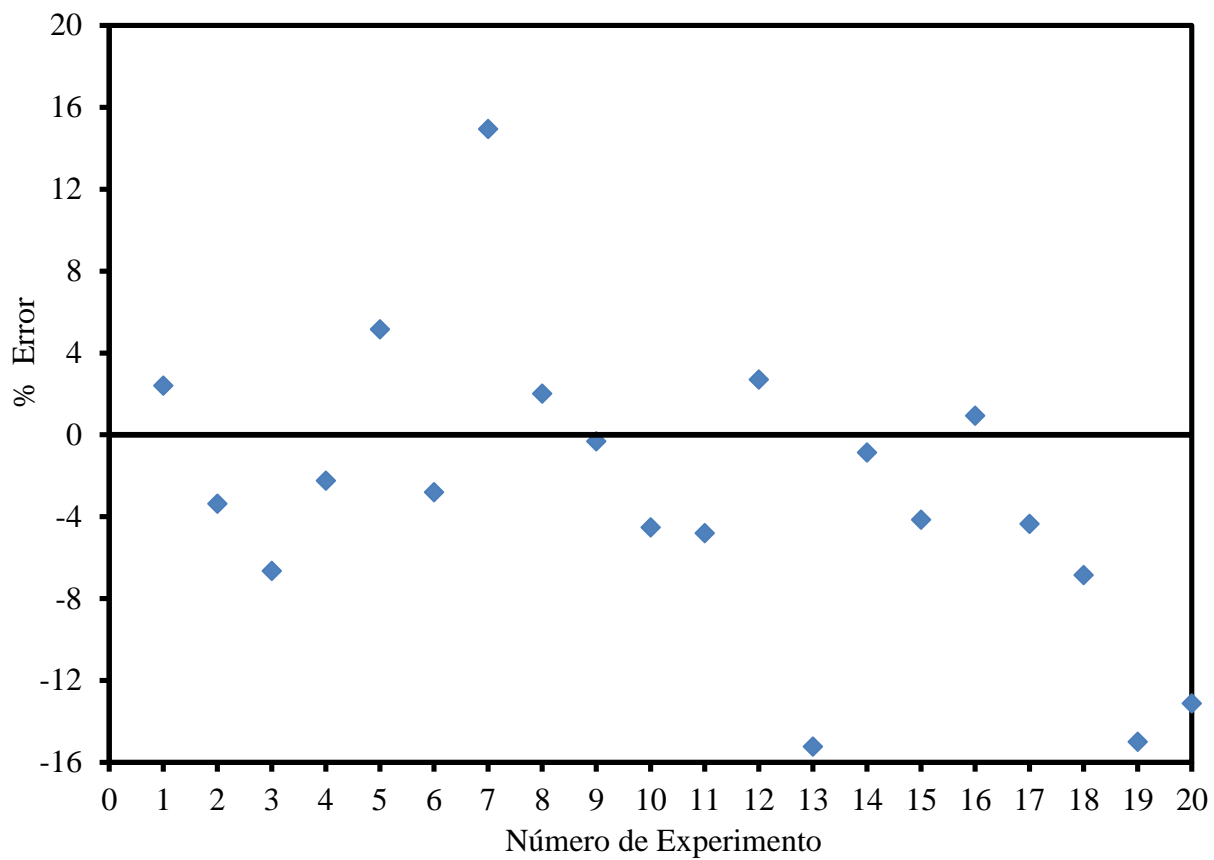


Figura C.21 Porcentaje de Error en la Predicción de Generación de Polvos por Número de Experimento

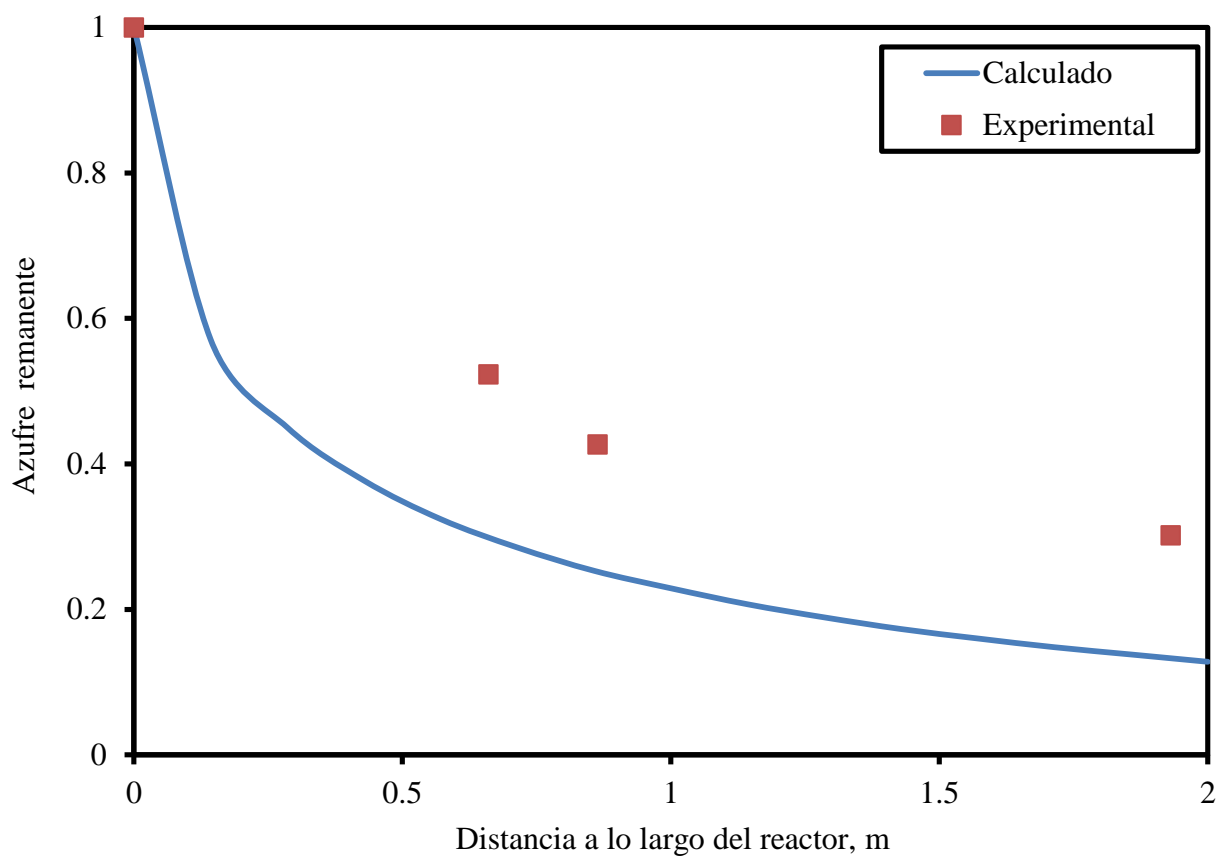


Figura C.22 Evolución de la Fracción de Azufre Remanente en la Población de Partículas a lo Largo del Reactor para el Experimento No.1. Condiciones Experimentales: $<37\mu\text{m}$, Relación Oxígeno-Mata $0.25\text{kg O}_2/\text{kg mata}$, $70\% \text{ O}_2$ en Gas de Proceso.

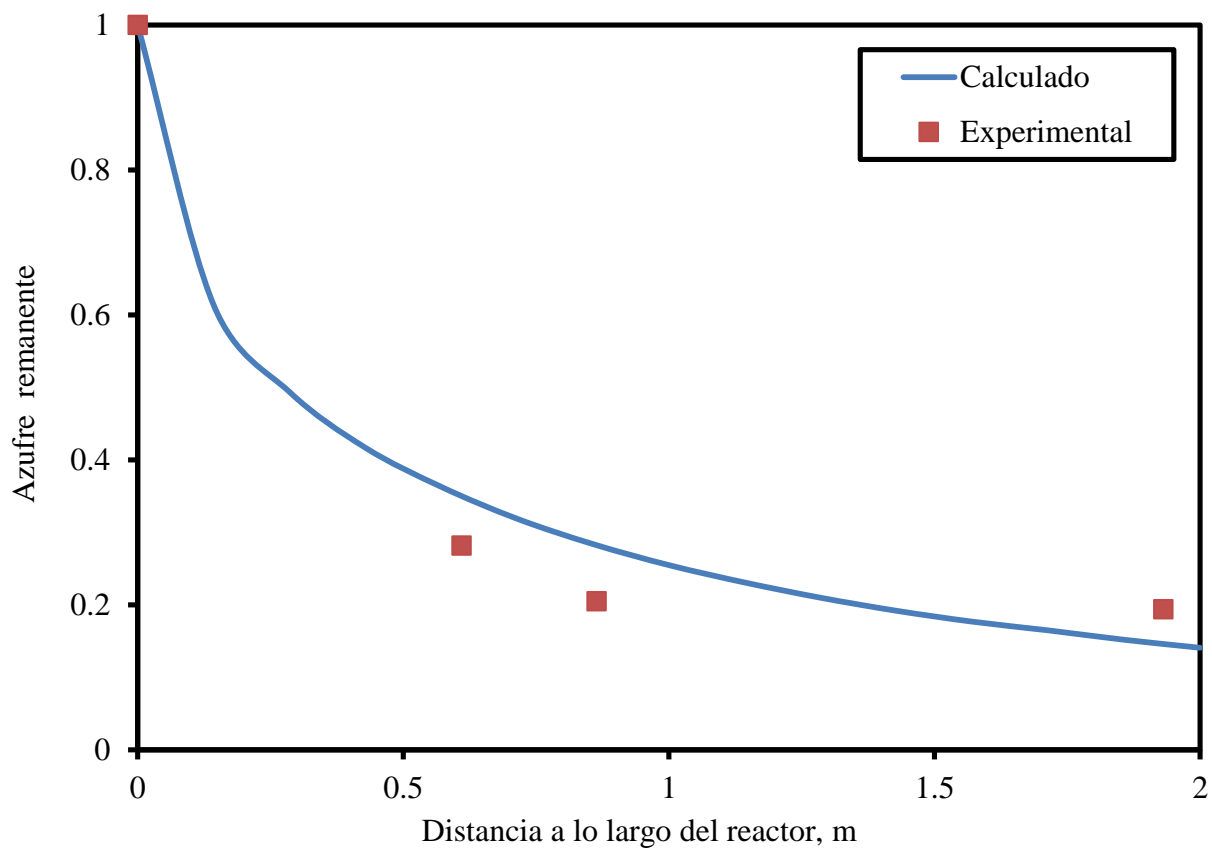


Figura C.23 Evolución de la Fracción de Azufre Remanente en la Población de Partículas a lo Largo del Reactor para el Experimento No.2. Condiciones Experimentales: $<37\mu\text{m}$, Relación Oxígeno-Mata $0.33\text{kg O}_2/\text{kg mata}$, 70% O_2 en Gas de Proceso.

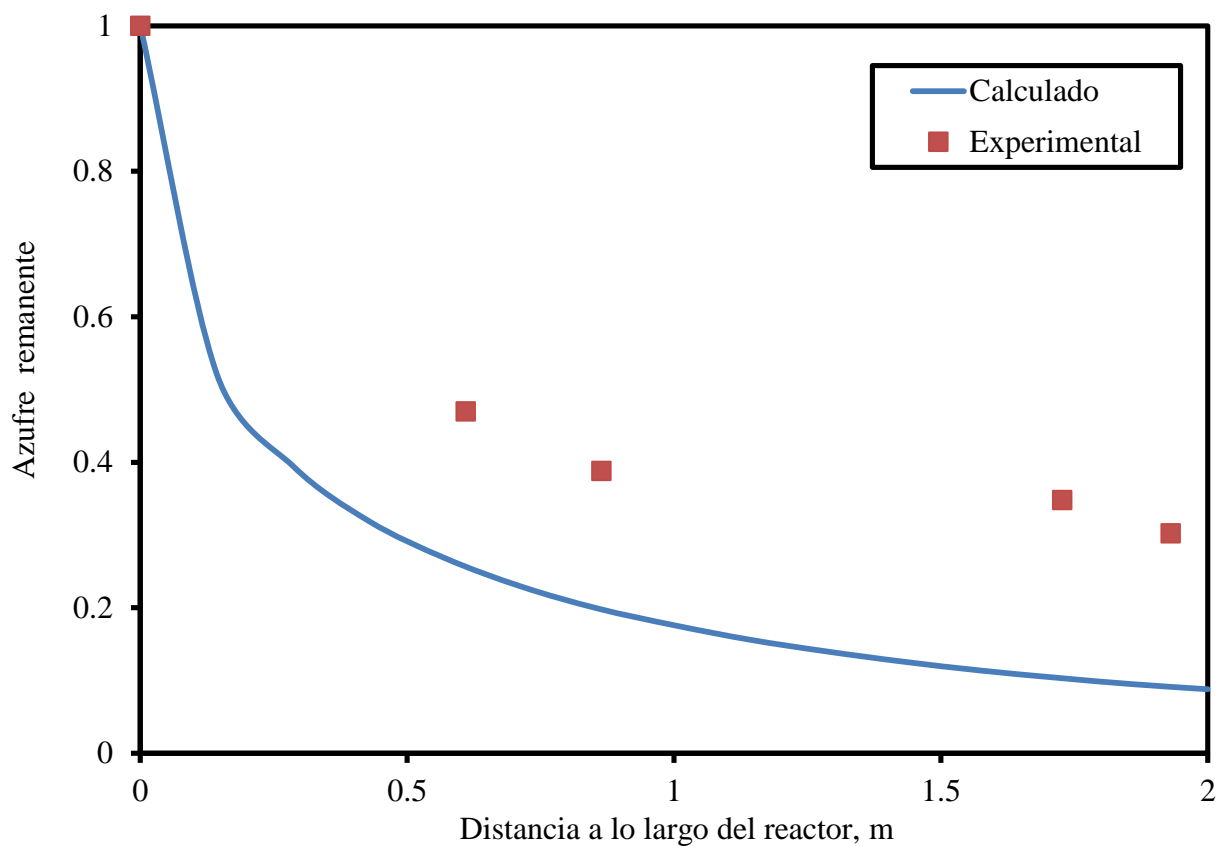


Figura C.24 Evolución de la Fracción de Azufre Remanente en la Población de Partículas a lo Largo del Reactor para el Experimento No.3. Condiciones Experimentales: $<37\mu\text{m}$, Relación Oxígeno-Mata $0.25\text{kg O}_2/\text{kg mata}$, $100\% \text{O}_2$ en Gas de Proceso.

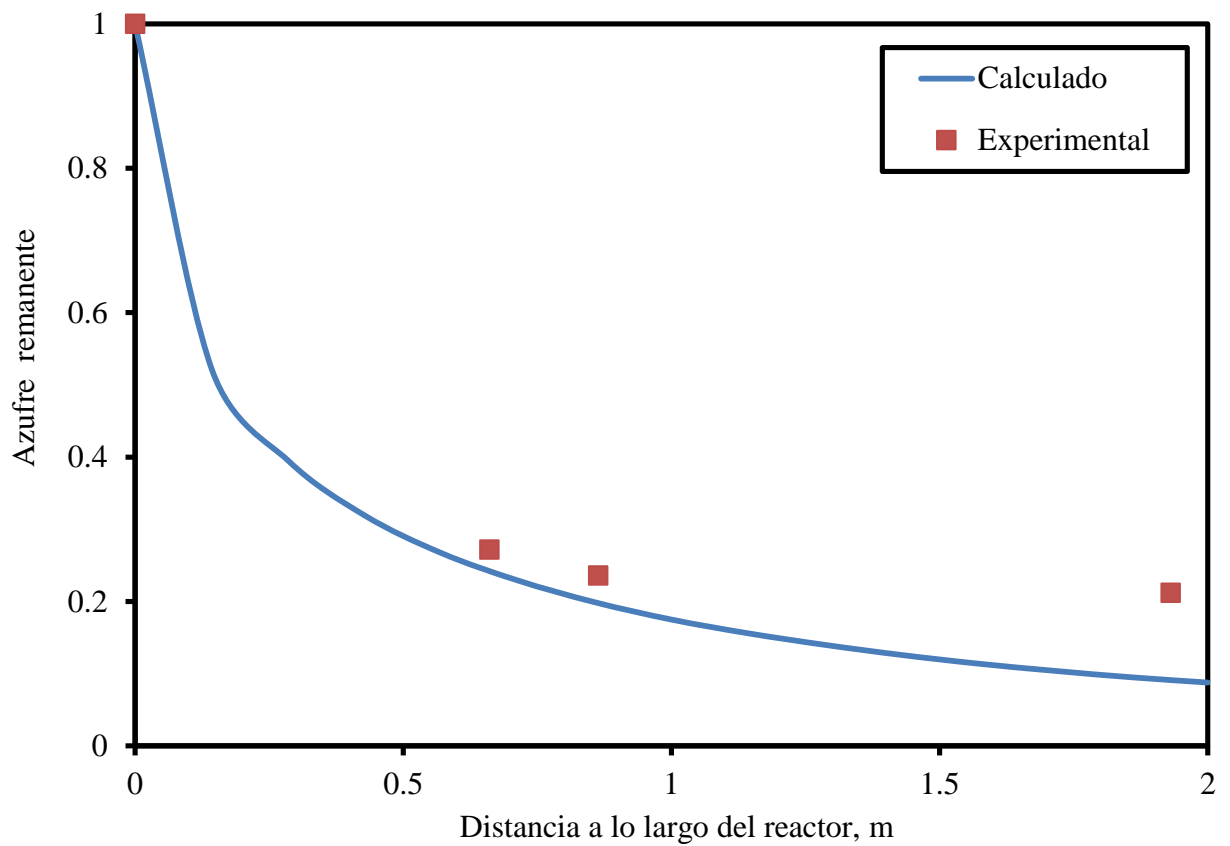


Figura C.25 Evolución de la Fracción de Azufre Remanente en la Población de Partículas a lo Largo del Reactor para el Experimento No.4. Condiciones Experimentales: $<37\mu\text{m}$, Relación Oxígeno-Mata $0.33\text{kg O}_2/\text{kg mata}$, $100\% \text{O}_2$ en Gas de Proceso.

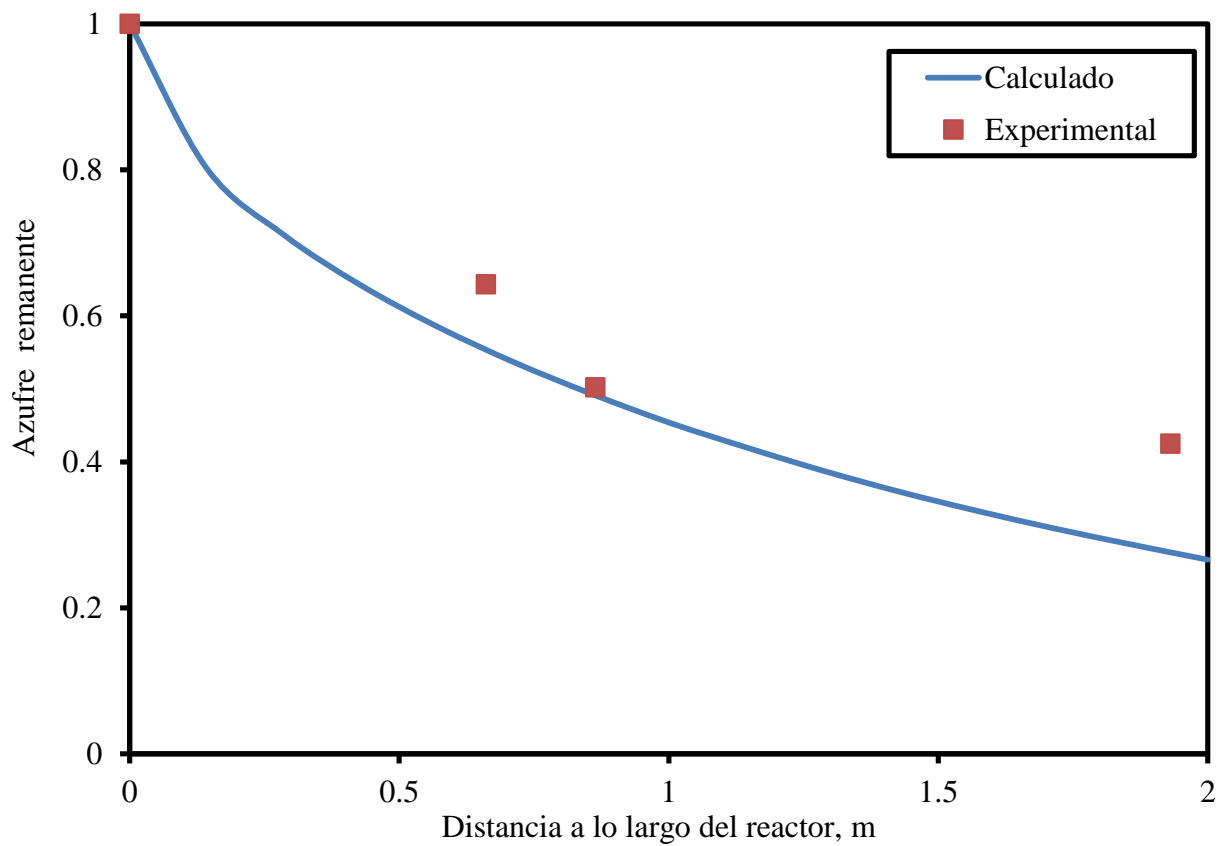


Figura C.26 Evolución de la Fracción de Azufre Remanente en la Población de Partículas a lo Largo del Reactor para el Experimento No.5. Condiciones Experimentales: 37-74 μm , Relación Oxígeno-Mata 0.25kg O₂/kg mata, 70% O₂ en Gas de Proceso.

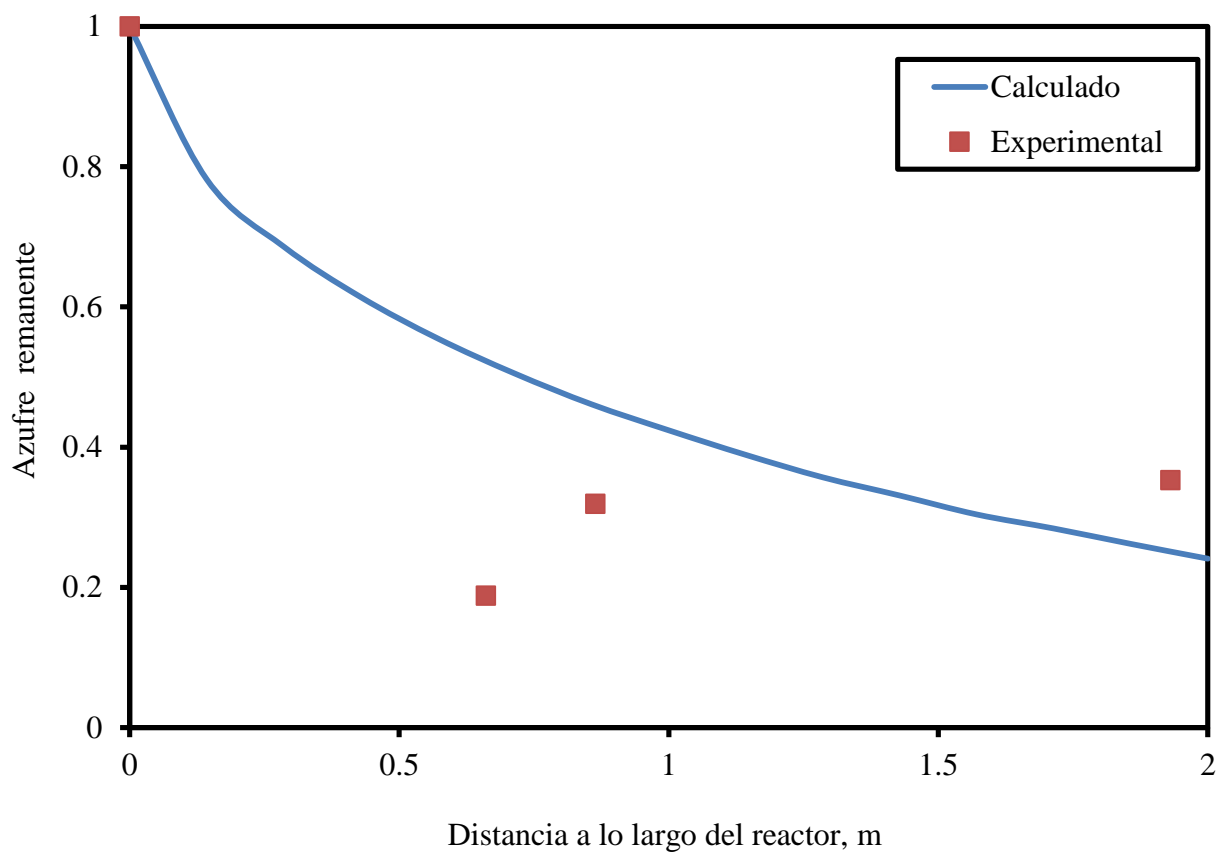


Figura C.27 Evolución de la Fracción de Azufre Remanente en la Población de Partículas a lo Largo del Reactor para el Experimento No.6. Condiciones Experimentales: 37-74 μ m, Relación Oxígeno-Mata 0.33kg O₂/kg mata, 70% O₂ en Gas de Proceso.

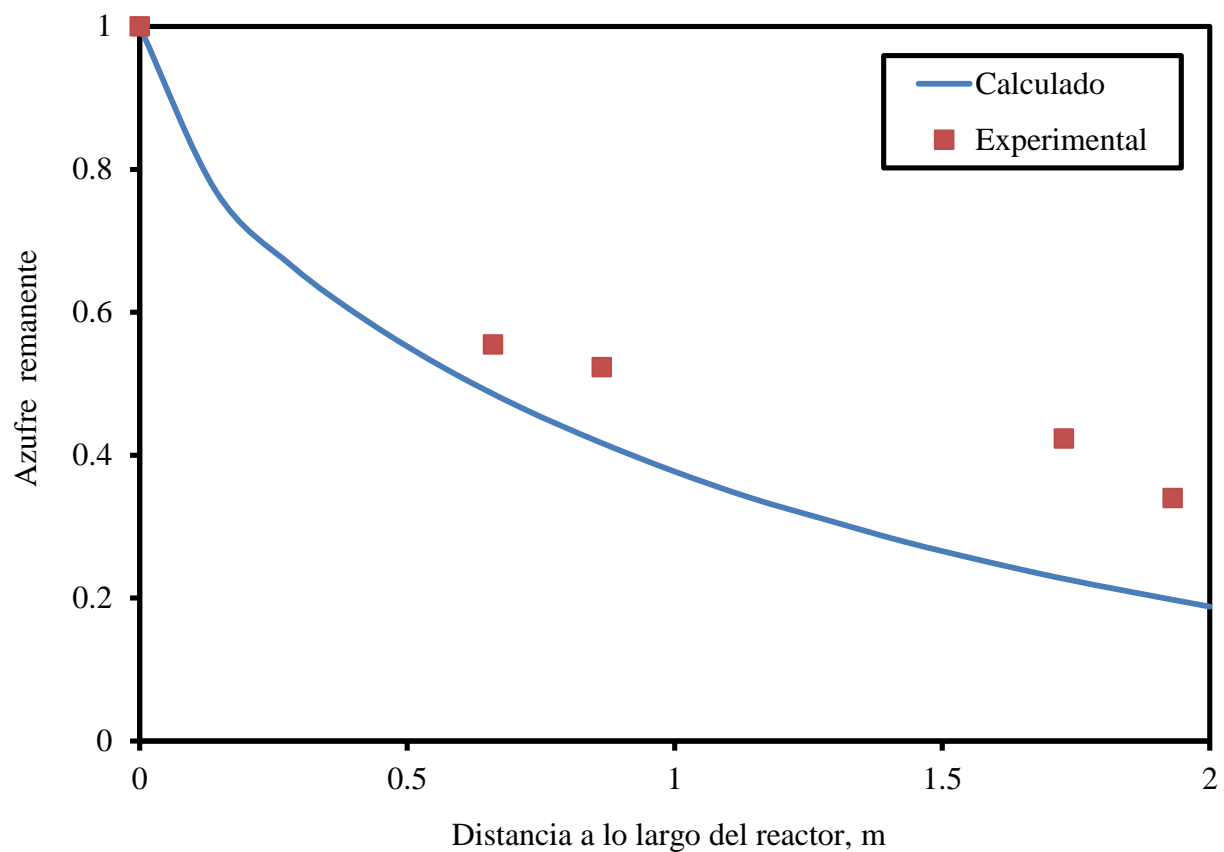


Figura C.28 Evolución de la Fracción de Azufre Remanente en la Población de Partículas a lo Largo del Reactor para el Experimento No.7. Condiciones Experimentales: 37-74 μ m, Relación Oxígeno-Mata 0.25kg O₂/kg mata, 100% O₂ en Gas de Proceso.

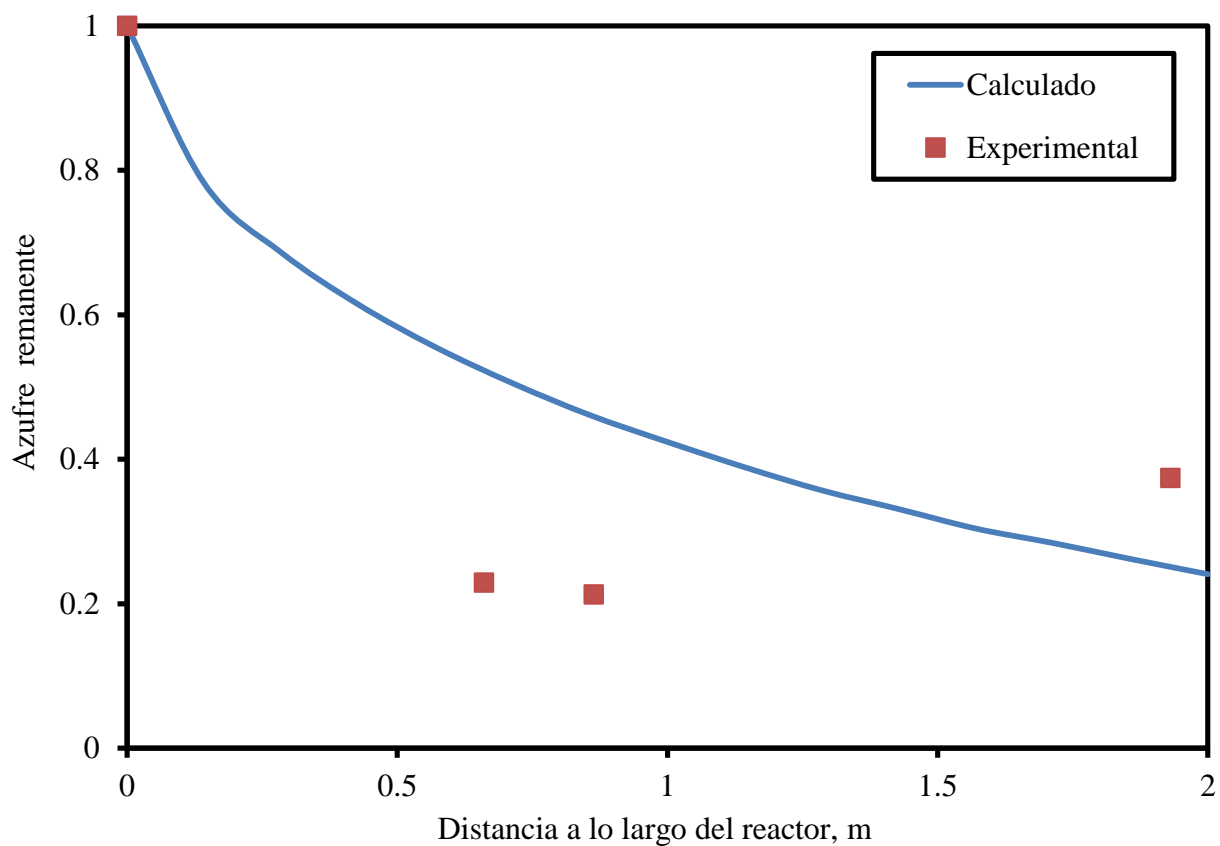


Figura C.29 Evolución de la Fracción de Azufre Remanente en la Población de Partículas a lo Largo del Reactor para el Experimento No.8. Condiciones Experimentales: 37-74 μ m, Relación Oxígeno-Mata 0.33kg O₂/kg mata, 100% O₂ en Gas de Proceso.

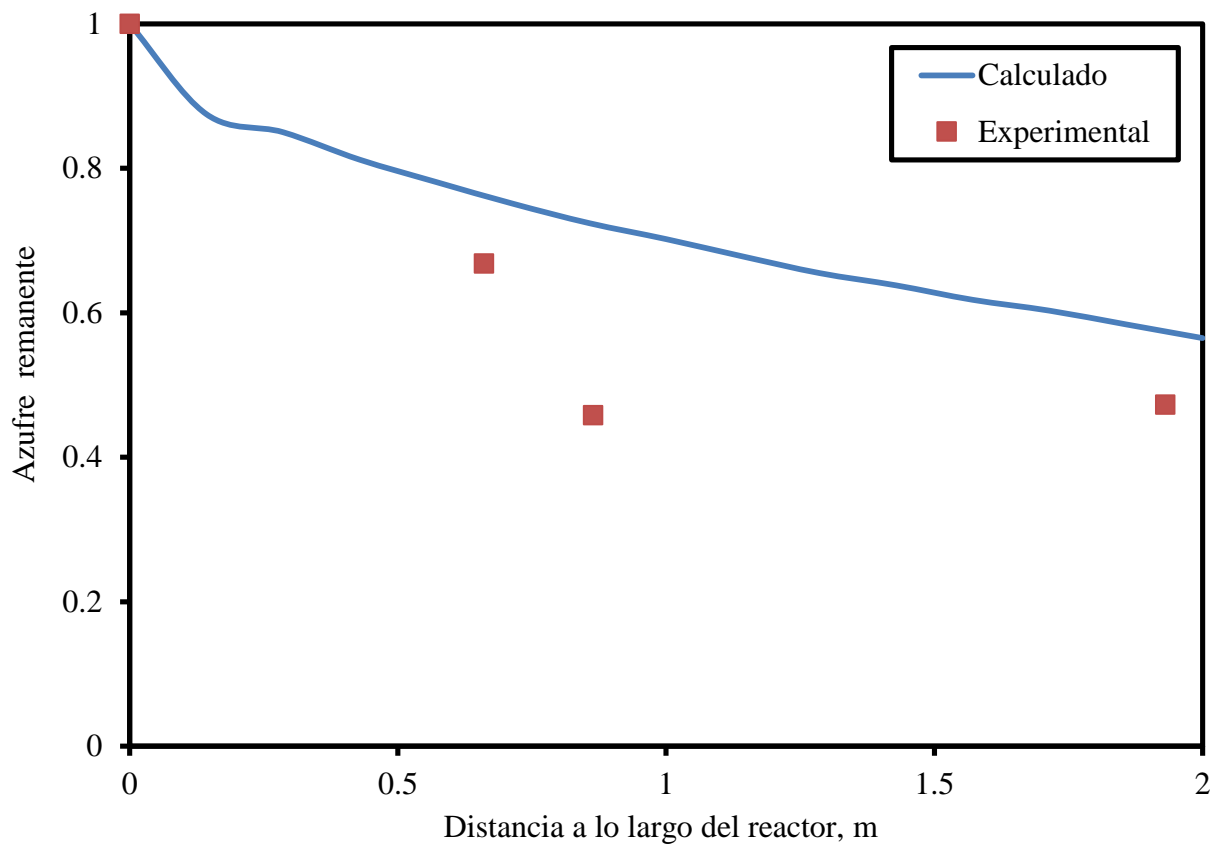


Figura C.30 Evolución de la Fracción de Azufre Remanente en la Población de Partículas a lo Largo del Reactor para el Experimento No.9. Condiciones Experimentales: 74-105 μ m, Relación Oxígeno-Mata 0.25kg O₂/kg mata, 70% O₂ en Gas de Proceso.

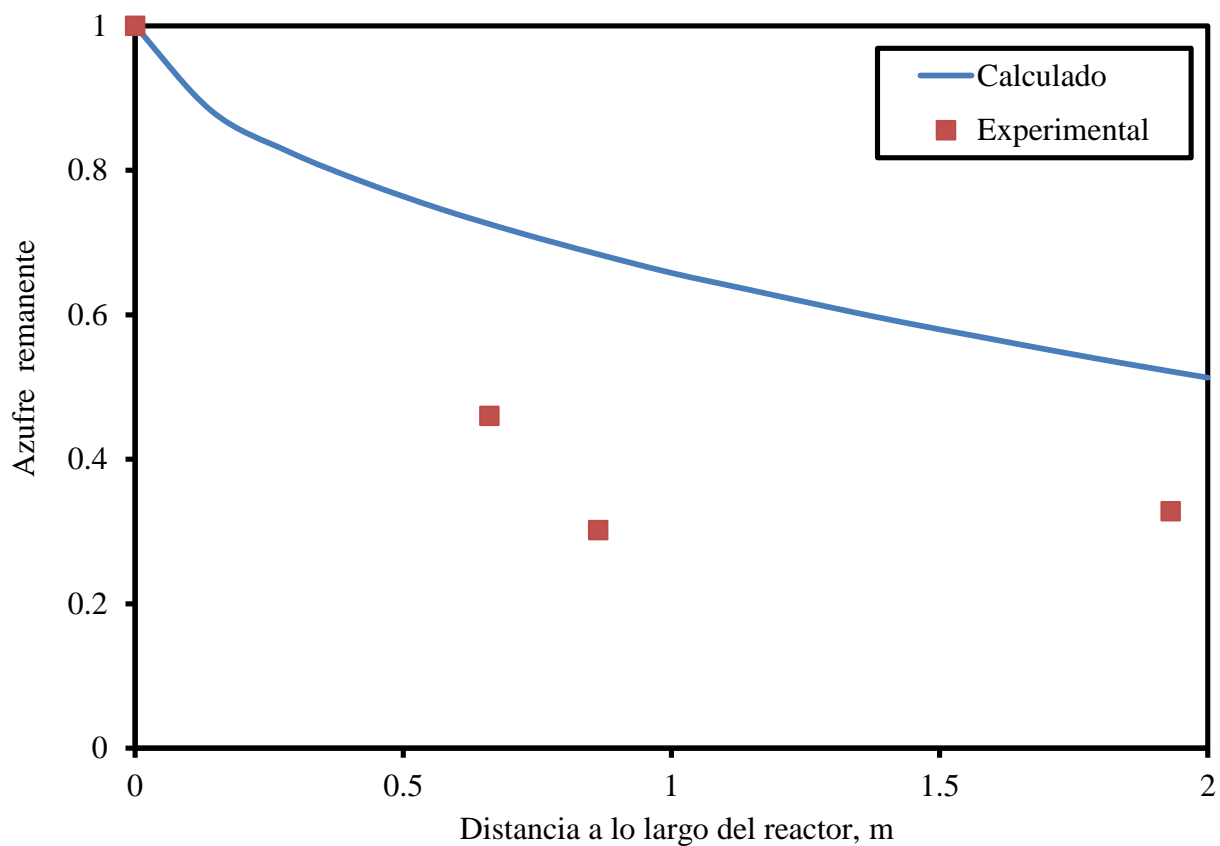


Figura C.31 Evolución de la Fracción de Azufre Remanente en la Población de Partículas a lo Largo del Reactor para el Experimento No.10. Condiciones Experimentales: 74-105 μ m, Relación Oxígeno-Mata 0.33kg O₂/kg mata, 70% O₂ en Gas de Proceso.

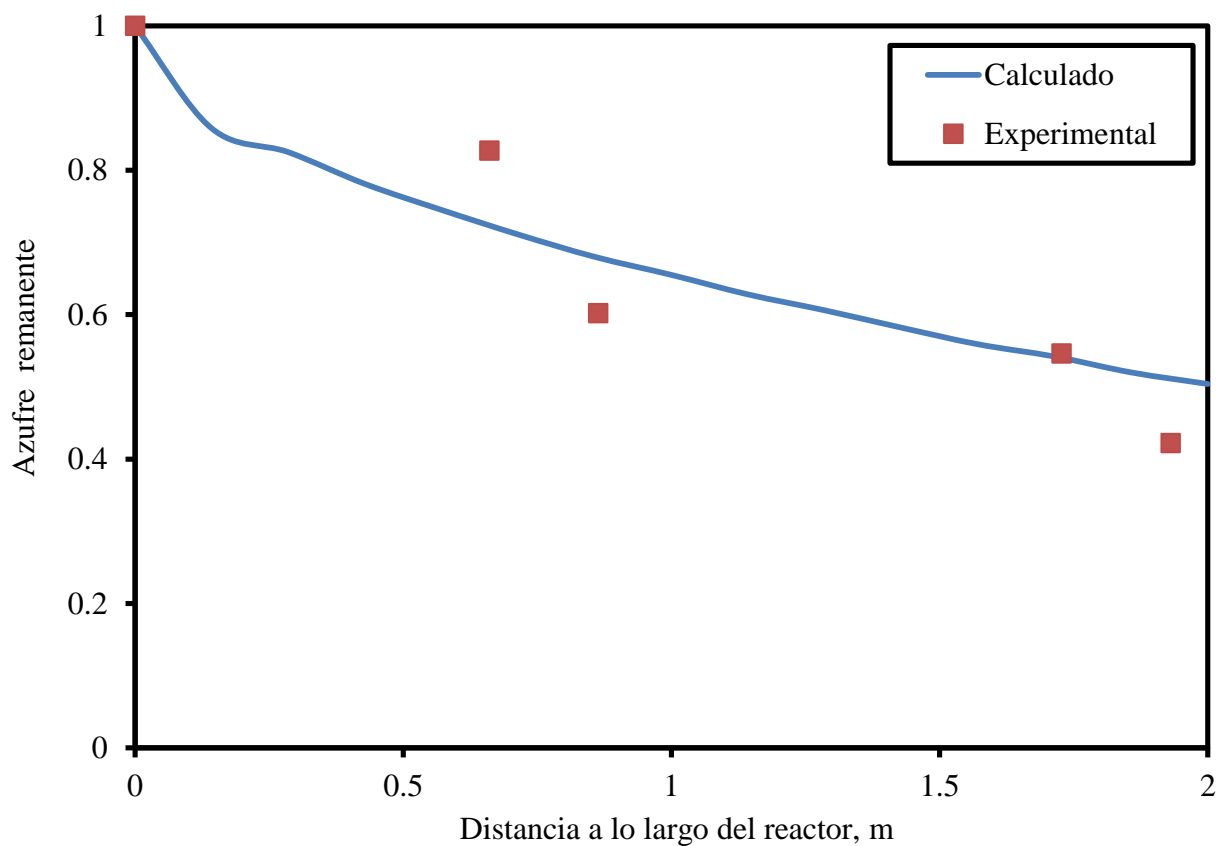


Figura C.32 Evolución de la Fracción de Azufre Remanente en la Población de Partículas a lo Largo del Reactor para el Experimento No.11. Condiciones Experimentales: 74-105 μ m, Relación Oxígeno-Mata 0.25kg O₂/kg mata, 100% O₂ en Gas de Proceso.

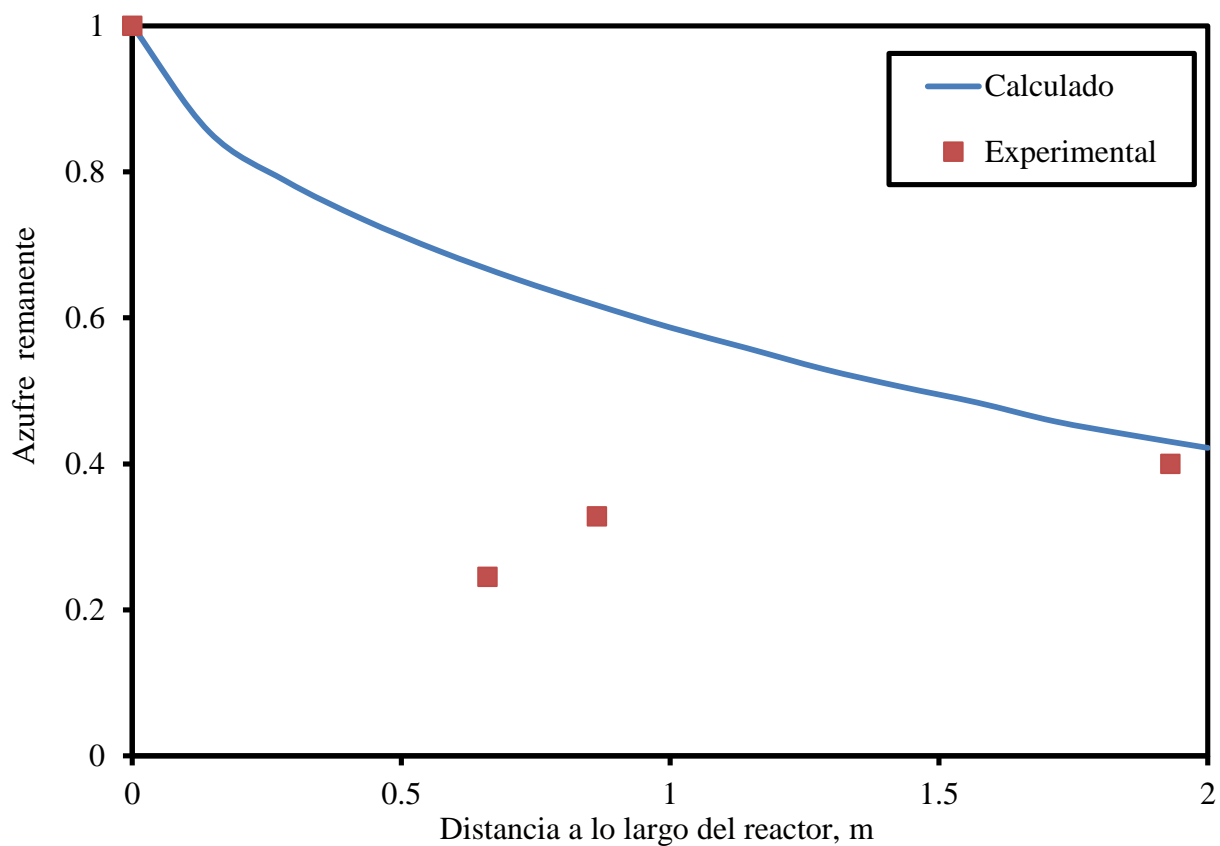


Figura C.33 Evolución de la Fracción de Azufre Remanente en la Población de Partículas a lo Largo del Reactor para el Experimento No.12. Condiciones Experimentales: 74-105 μ m, Relación Oxígeno-Mata 0.33kg O₂/kg mata, 100% O₂ en Gas de Proceso.

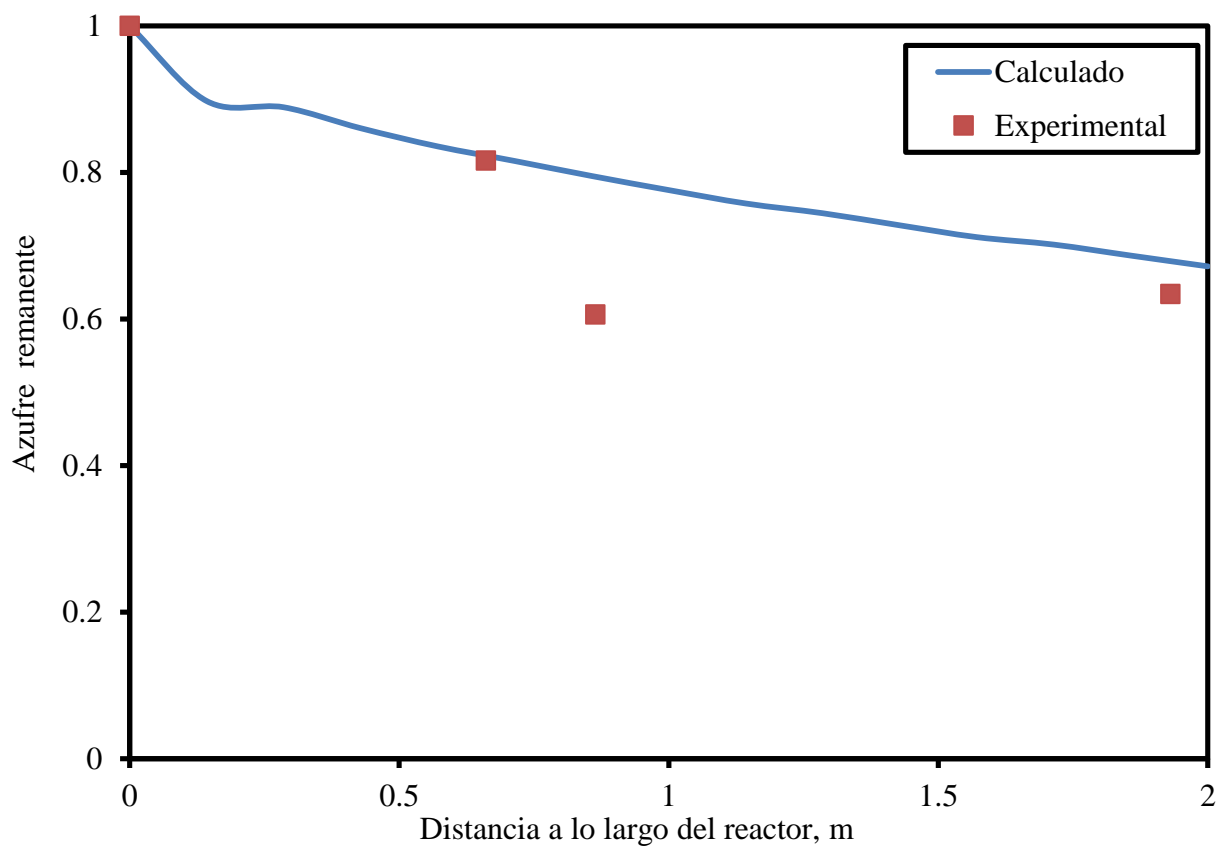


Figura C.34 Evolución de la Fracción de Azufre Remanente en la Población de Partículas a lo Largo del Reactor para el Experimento No.13. Condiciones Experimentales: 105-149 μ m, Relación Oxígeno-Mata 0.25kg O₂/kg mata, 70% O₂ en Gas de Proceso.

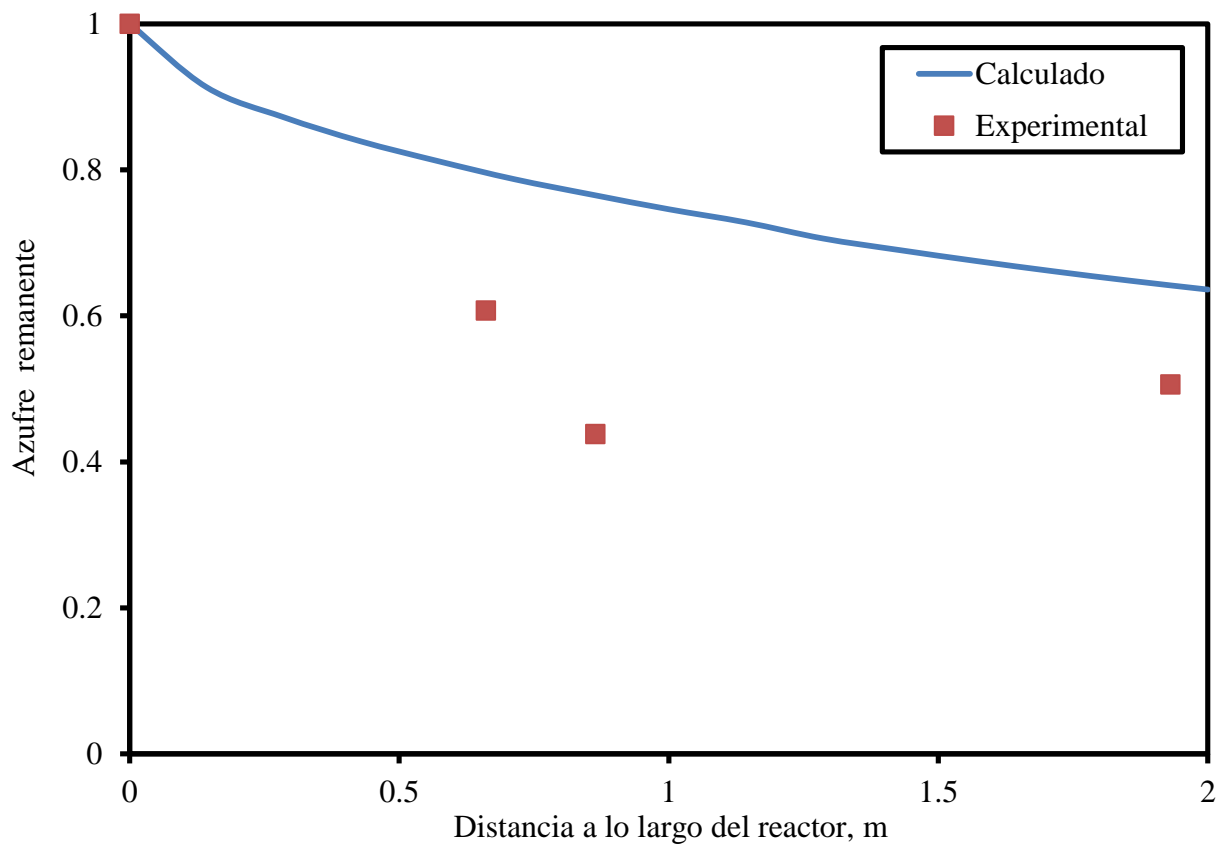


Figura C.35 Evolución de la Fracción de Azufre Remanente en la Población de Partículas a lo Largo del Reactor para el Experimento No.14. Condiciones Experimentales: 105-149 μ m, Relación Oxígeno-Mata 0.33kg O₂/kg mata, 70% O₂ en Gas de Proceso.

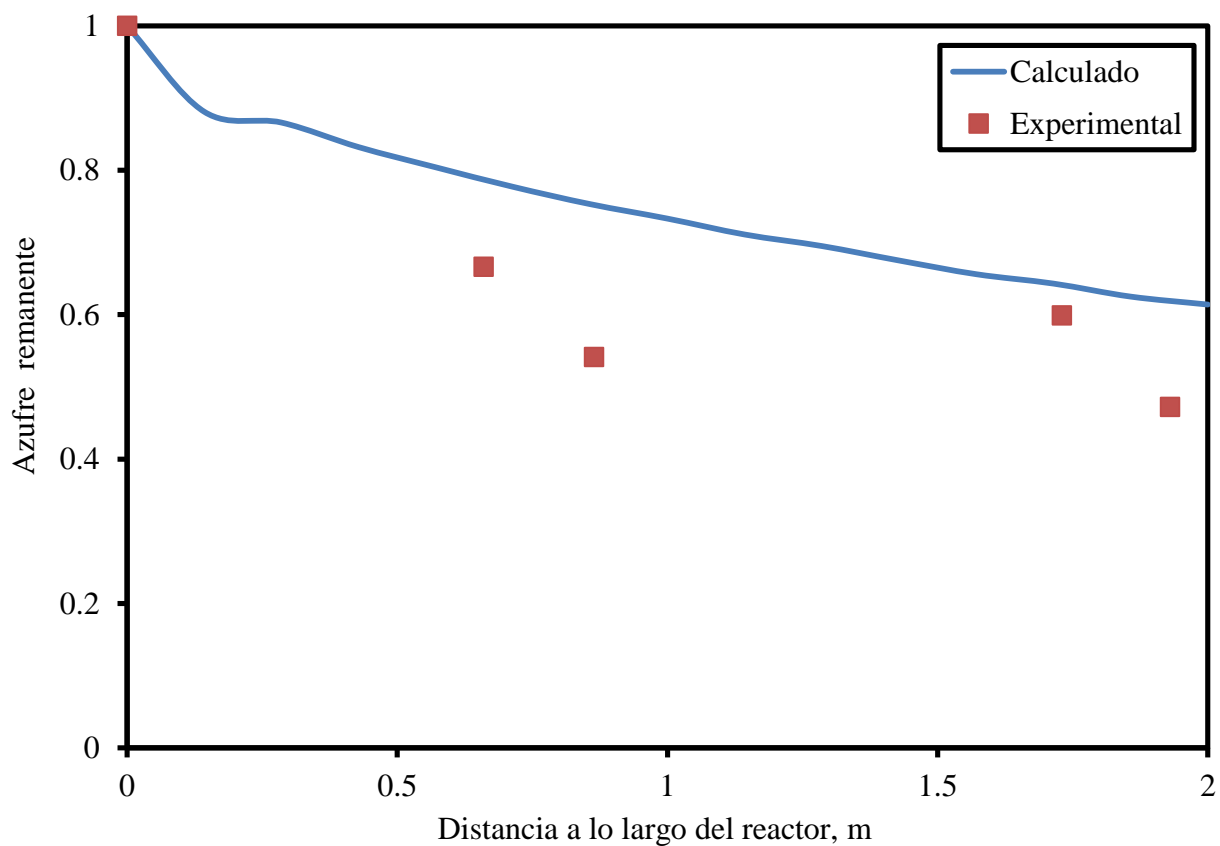


Figura C.36 Evolución de la Fracción de Azufre Remanente en la Población de Partículas a lo Largo del Reactor para el Experimento No.15. Condiciones Experimentales: 105-149 μm , Relación Oxígeno-Mata 0.25kg O₂/kg mata, 100% O₂ en Gas de Proceso.

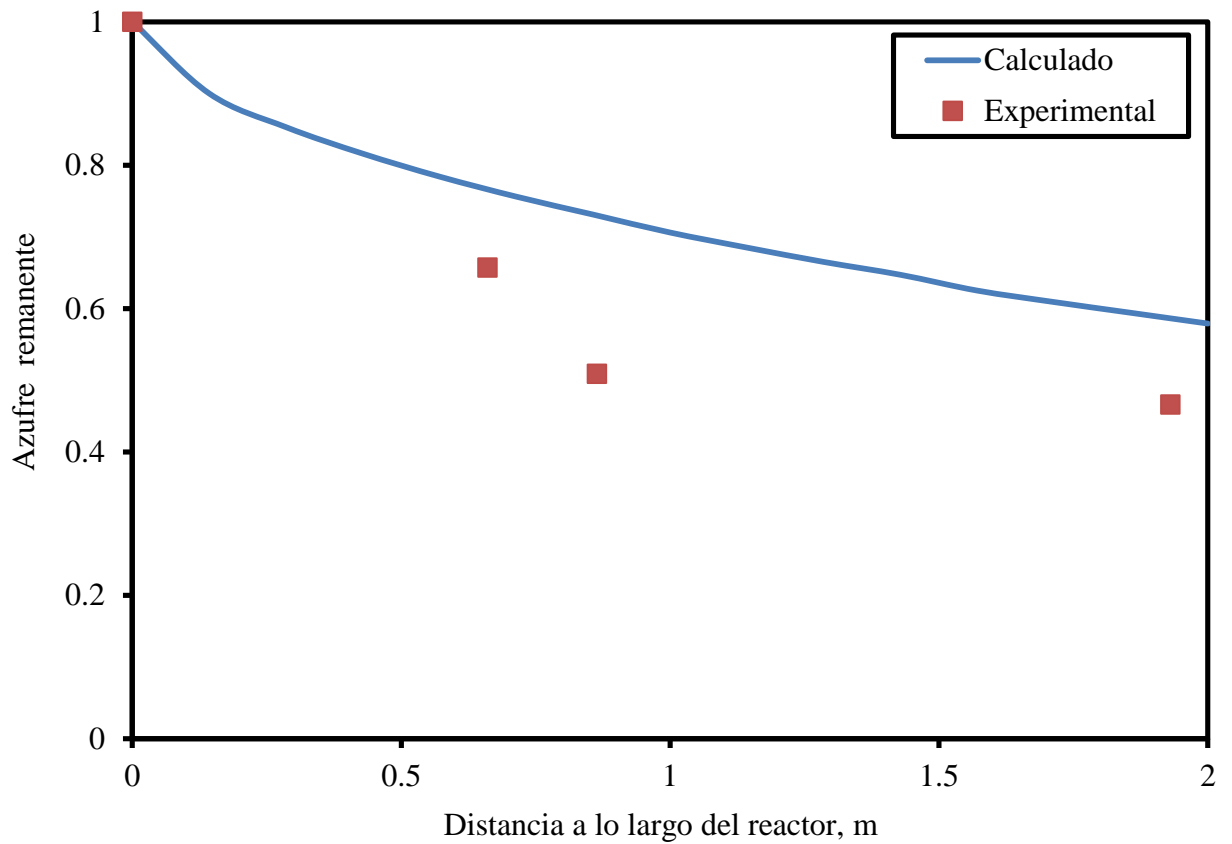


Figura C.37 Evolución de la Fracción de Azufre Remanente en la Población de Partículas a lo Largo del Reactor para el Experimento No.16. Condiciones Experimentales: 105-149 μ m, Relación Oxígeno-Mata 0.33kg O₂/kg mata, 100% O₂ en Gas de Proceso.

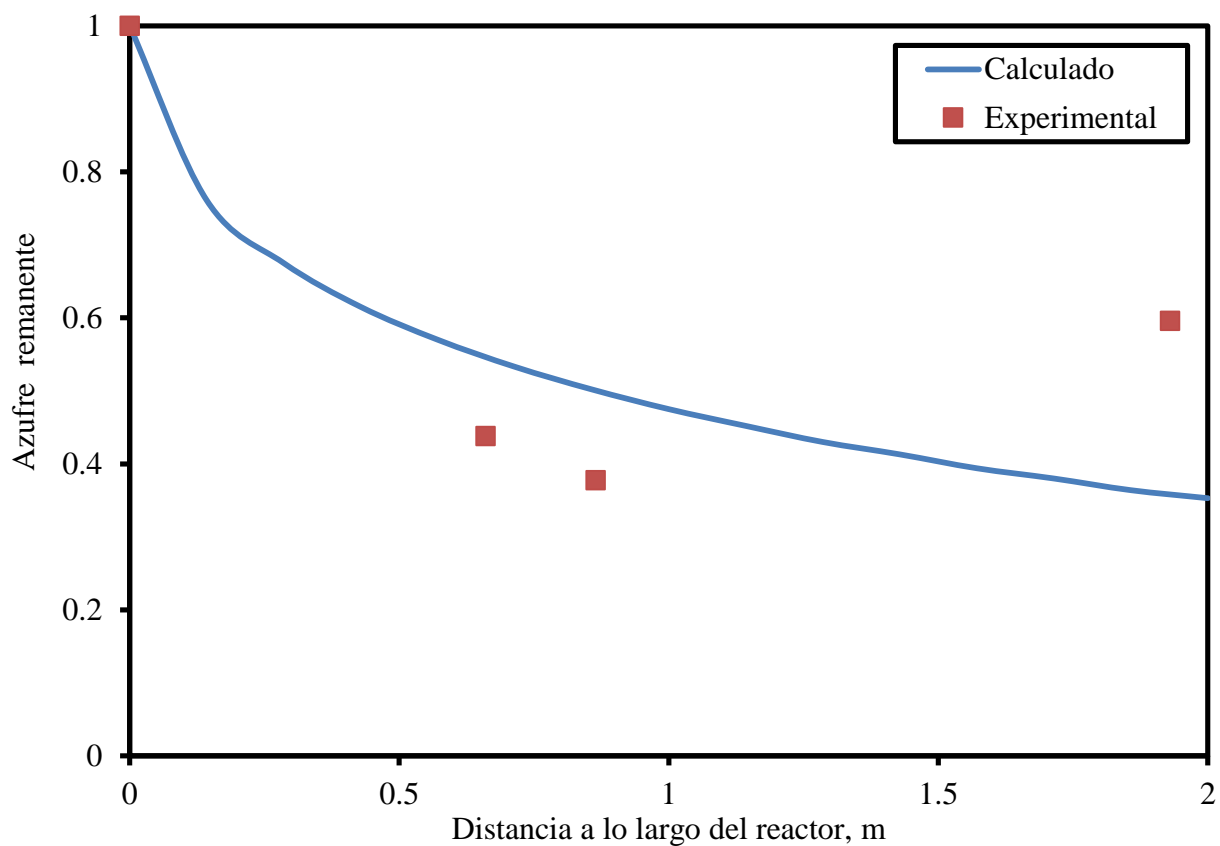


Figura C.38 Evolución de la Fracción de Azufre Remanente en la Población de Partículas a lo Largo del Reactor para el Experimento No.17. Condiciones Experimentales: $<149\mu\text{m}$, Relación Oxígeno-Mata $0.25\text{kg O}_2/\text{kg mata}$, $70\% \text{O}_2$ en Gas de Proceso.

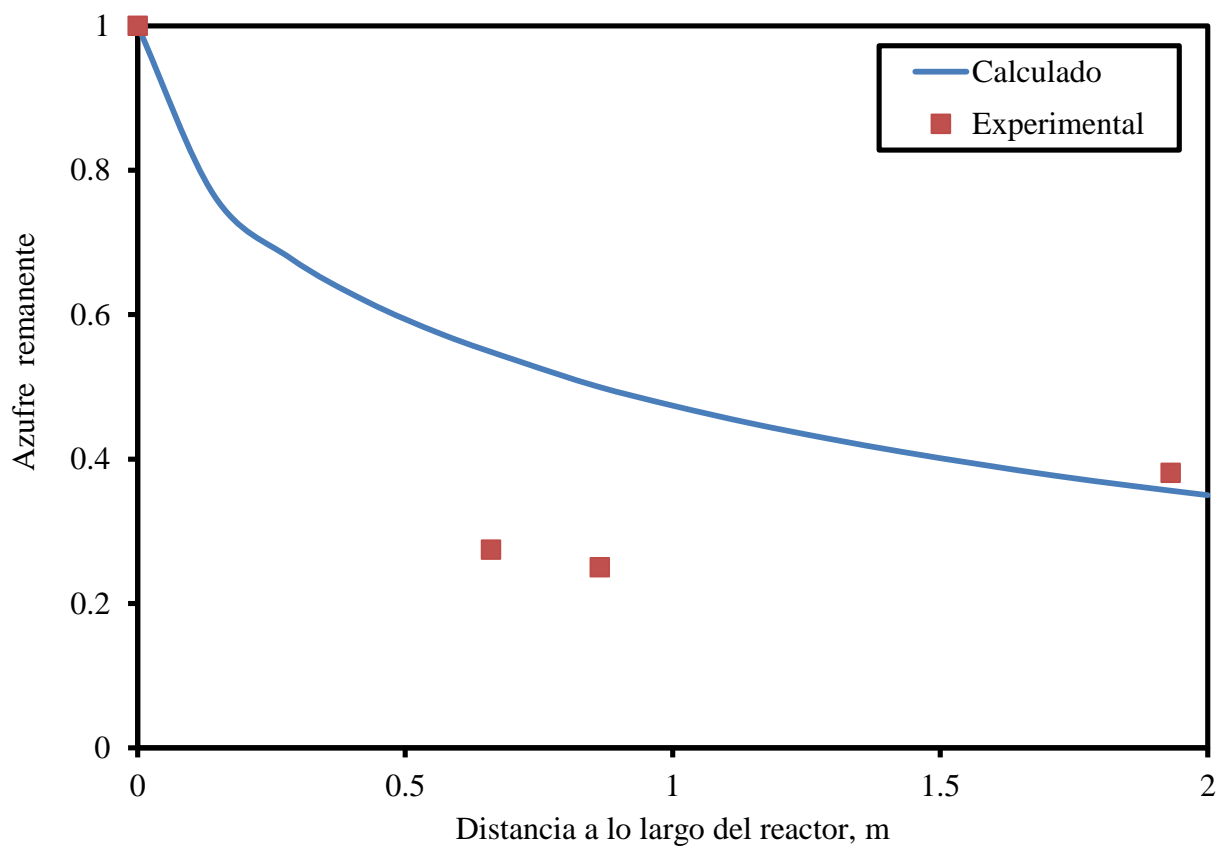


Figura C.39 Evolución de la Fracción de Azufre Remanente en la Población de Partículas a lo Largo del Reactor para el Experimento No.18. Condiciones Experimentales: $<149\mu\text{m}$, Relación Oxígeno-Mata $0.33\text{kg O}_2/\text{kg mata}$, $70\% \text{O}_2$ en Gas de Proceso.

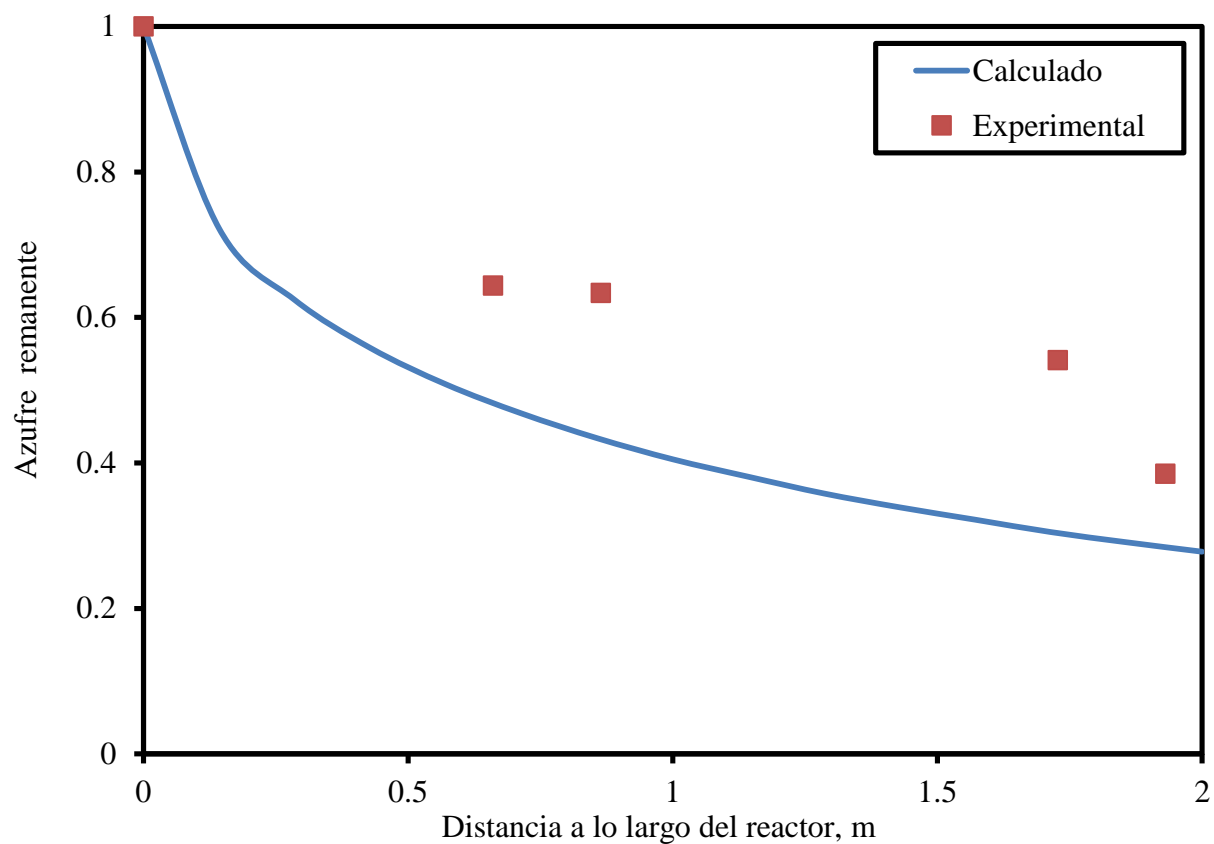


Figura C.40 Evolución de la Fracción de Azufre Remanente en la Población de Partículas a lo Largo del Reactor para el Experimento No.19. Condiciones Experimentales: $<149\mu\text{m}$, Relación Oxígeno-Mata $0.25\text{kg O}_2/\text{kg mata}$, $100\% \text{O}_2$ en Gas de Proceso.

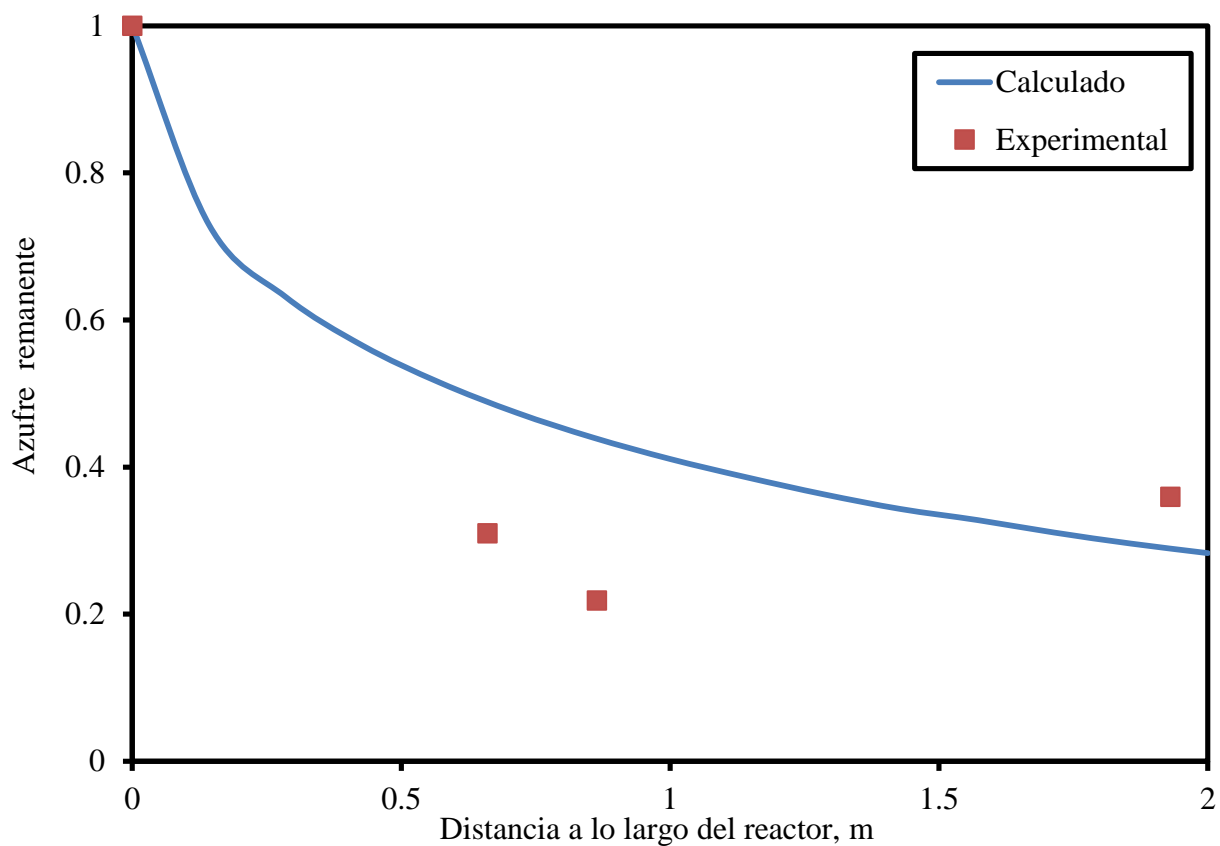


Figura C.41 Evolución de la Fracción de Azufre Remanente en la Población de Partículas a lo Largo del Reactor para el Experimento No.20. Condiciones Experimentales: $<149\mu\text{m}$, Relación Oxígeno-Mata $0.33\text{kg O}_2/\text{kg mata}$, $100\% \text{O}_2$ en Gas de Proceso.

APÉNDICE D

Programa de Cómputo

(Disco Compacto Adjunto)

BIBLIOGRAFÍA

- Asteljoki, J.A., Bailey, L.K., George, D.B. and Rodolff, D.W.: *J. Met.*, 1985, vol. 20, pp. 245-250
- Asteljoki, J.A., and Kyto, S.M.I: TMS Technical Paper No. A86-57, TMS-AIME, Warrendale, PA, 1986.
- Bird, Robert Byron, 1960. *Transport phenomena* / R. Byron Bird, Warren E. Stewart, Edwin N. Lightfoot-- 2a ed.-- New York : Editorial John Wiley, c2002, xii, 895 p. : Il.; 26 cm.ISBN 0-471-41077-2.
- Biswas, A.K. and Davenport, W.G. *El Cobre: Metalurgia Extractiva*. Editorial Limusa, 1993.
- George, D. B., Gottling, R. J. and Newman, C. J., 1995, "Modernization of Kennecott Utah Copper Smelter." *Copper 95-Cobre 95*, W. J. Chen, Diaz, C., Luraschi, A., Mackey, P.J., ed, 1995, The Metallurgical Society of CIM, pp. 41-52.
- George, D. B., 2002, "Continuous Copper Converting-A perspective and View of the Future." *Sulfide Smelting 2002*, R. L. Stephens and Sohn, H. Y., ed, 2002, Seattle, Washington, U.S.A., The Minerals, Metals & Materials Society, pp. 3-13.
- Jiao, Q., Wu, L. and Themelis, N. J., 1987, "Mathematical Modeling of Flash Converting of Copper Matte." *Mathematical Modeling of Materials Processing Operations*, J. Szekely, ed, 1987, The Minerals, Metals and Materials Society, pp. 835-838.
- Jokilaakso, A. T., Suominen, R. O., Taskinen, P. A. and Lilius, K. R., 1991, "Oxidation of Chalcopyrite in Simulated Suspension Smelting," *Transactions of the Institution of Mining and Metallurgy Section C-Mineral Processing and Extractive Metallurgy*, Vol. 100, pp. C79-C90.

- Jokilaakso, A. T., Taskinen, P. A., Suominen, R. O. and Lilius, K. R., 1994, "Antimony in Flash Smelting Simulation Experiments .2. The Behavior of a Medium Antimony Concentrate," *Scandinavian Journal of Metallurgy*, Vol. 23, No.2, pp. 54-61.
- Jorgensen, F. R., 1980, "Cenosphere Formation During the Combustion of Pyrite," *Proc. Australas. Inst. Min. Metall.*, Vol. No.276, pp. 41-47.
- Kim, Y. H. and Themelis, N. J., 1986, "Effect of phase transformation and particle fragmentation on the flash reaction of complex metal sulfides." *The Reinhardt Schuhmann International Symposium on Innovative Technology and Reactor Design in Extractive Metallurgy*, D. R. Gaskell, Hager, J.P., Hoffman, J.E., Mackey, P.J., ed, Nov. 9-12, 1986, Colorado Springs, CO, TMS, Warrendale, PA, pp. 349-369.
- King, R. P., 1973, "An analytical solution to the batch comminution equation," *Journal of South African Institute of Mining and Metallurgy*, Vol. 73, pp. 127.
- Levenspiel, Octave *Chemical reaction engineering : an introduction to the design of chemical reactors / Octave Levenspiel.*-- New York : Editorial John Wiley & Sons, c1962
- Madrid-Ortega, I., 2004, "Modelo Matemático de la Fragmentación de Partículas de Mata de Cobre en Condiciones de Conversión Instantánea". Tesis de Licenciatura. Universidad de Sonora.
- Perez-Tello, M., Sohn, H. Y. and Lottiger, J., 1999, "Determination of the oxidation characteristics of solid copper matte particles by differential scanning calorimetry and thermogravimetric analysis," *Minerals & Metallurgical Processing*, Vol. 16, No.2, pp. 1-7.

- Perez-Tello, M., Sohn, H. Y., St Marie, K. and Jokilaakso, A., 2001a, "Experimental investigation and three-dimensional computational fluid-dynamics modeling of the flash-converting furnace shaft: Part I. Experimental observation of copper converting reactions in terms of converting rate, converting quality, changes in particle size, morphology, and mineralogy," *Metallurgical and Materials Transactions B-Process Metallurgy and Materials Processing Science*, Vol. 32, No.5, pp. 847-868.
- Perez-Tello, M., Sohn, H. Y. and Smith, P. J., 2001b, "Experimental investigation and three-dimensional computational fluid-dynamics modeling of the flash-converting furnace shaft: Part II. Formulation of three-dimensional computational fluid-dynamics model incorporating the particle-cloud description," *Metallurgical and Materials Transactions B-Process Metallurgy and Materials Processing Science*, Vol. 32, No.5, pp. 869-886.
- Perez-Tello, M., Tirado-Ochoa, J. A., Sohn, H. Y. and Sánchez-Corrales, V. M., 2002, "Size distribution analysis of copper matte particles oxidized under flash converting conditions," *JOM*, Vol. 54, No.10, pp. 27-30.
- Perez-Tello, M., Madrid-Ortega, I. and Sohn, H. Y., 2008, "Model for the fragmentation of copper matte particles during flash converting," *Minerals & Metallurgical Processing*, Vol. 25, No.1, pp. 53-60.
- Riihilahti, K. M., 1997, "Oxidation of Copper Matte Particles Under Simulated Flash Converting Conditions". Licentiate. Helsinki University of Technology.
- Riihilahti, K. M., Sohn, H. Y., Jokilaakso, A. and Perez-Tello, M., 1997, "Oxidation of Copper Matte Particles Under Simulated Flash Converting Conditions." *EPD Congress 1997*, B. Mishra, ed, 1997, The Minerals, Metals and Materials Society, pp. 85-105.
- Riihilahti, K. M., Sohn, H. Y., Perez-Tello, M. and Jokilaakso, A., 1998, "The Oxidation Behavior of 58 and 72% Copper Matte Particles in a Simulated Flash Converting

- Conditions." *Sulfide Smelting '98: Current and Future Practices*, J. A. Asteljoki and Stephens, R. L., ed, 1998, San Antonio, Texas, USA., The Minerals, Metals and Materials Society, pp. 261-273.
- Shook, A. A., Richards, G. G. and Brimacombe, J. K., 1995, "Mathematical-Model of Chalcocite Particle Combustion," *Metallurgical and Materials Transactions B-Process Metallurgy and Materials Processing Science*, Vol. 26, No.4, pp. 719-729.
- Suominen, R. O., Jokilaakso, A. T., Taskinen, P. A. and Lilius, K. R., 1991, "Behavior of Copper Mattes in Simulated Flash Converting Conditions," *Scandinavian Journal of Metallurgy*, Vol. 20, No.4, pp. 245-250.
- Suominen, R. O., Jokilaakso, A. T., Taskinen, P. A. and Lilius, K. R., 1994, "Morphology and Mineralogy of Copper Matte Particles Reacted in Simulated Flash Converting Conditions," *Scandinavian Journal of Metallurgy*, Vol. 23, No.1, pp. 30-36.