

## مدل سازی تحلیلی از فرآیند بیولیچینگ توده‌ای (فروشویی زیستی)

مهدی یعقوبی مقدم<sup>۱</sup>؛ سید ضیاءالدین شفائی تنکابنی<sup>۲\*</sup>؛ محمد نوع پرست<sup>۲</sup>؛ فرامرز دولتی ارده‌جانی<sup>۲</sup>

۱- دکترای مهندسی معدن، پردیس دانشکده‌های فنی، دانشگاه تهران، تهران، ایران: M\_yaghobi@ut.ac.ir

۲- استاد دانشکده مهندسی معدن، پردیس دانشکده‌های فنی، دانشگاه تهران، تهران، ایران: zshafaie@ut.ac.ir

(دریافت ۱۷ خرداد ۱۳۹۴، پذیرش ۱۵ دی ۱۳۹۵)

### چکیده

در این مقاله، شبیه‌سازی فرآیند لیچینگ باکتریایی توده‌ای و ارزیابی تحلیلی فرآیندهای درگیر در شرایط ناپایا از طریق مدل‌های تحلیلی برای کانسنگ کم‌عیار مس بسط و گسترش داده شده است. المان انتگرالی تعریف شده عبارت است از واحد حجم توده که شامل فاز جامد (با توزیع اندازه ذرات کانسنگ)، فاز مایع (محلول شسته شده ساکن و جاری حاوی مواد حل‌شده و باکتری‌های چسبیده و معلق) و فاز گاز (جریان هوا و حباب‌های هوای موجود در منافذ) است. فرآیندهای نفوذ و واکنش در مدل پیشنهادی شامل توزیع اندازه ذرات کانسنگ، چسبیدن و عدم چسبیدن باکتری‌ها و فرآیندهای اکسایش و انتقال اجزاء شیمیایی و باکتریایی به داخل و خارج المان می‌باشد. با برنامه‌نویسی در محیط نرم افزار پایتون از روش سیمپسون برای حل مدل‌های موجود استفاده شد. درستی نتایج به‌وسیله بررسی موازنه جرم در پایان شبیه‌سازی تأیید شد. اعتبارسنجی نتایج با مدل پولز و مدل شبیه‌سازی واکنشی پیریت به کمک نرم‌افزار فینیکس بررسی گردید. ذرات کانسنگ در سه کلاس اندازه به شعاع‌های ۰،۱mm، ۰،۷۵mm و ۱،۵mm با درصد‌های وزنی به ترتیب ۴۵، ۳۵ و ۲۰ درصد طبقه‌بندی شدند. حداکثر خطای نسبی در محاسبات موازنه جرم در تمام شبیه‌سازی‌ها کمتر از ۰،۷ درصد بود. نتایج نشان داد که سینتیک انحلال کالکوسیت از کولیت و کولیت از پیریت بیشتر است. برای حالت باکتریایی، میزان انحلال کالکوسیت در اندازه شعاع ذرات ۰،۱mm، ۰،۷۵mm و ۱،۵mm به ترتیب ۱۰۰٪ (بعد از ۳۸ روز)، ۱۰۰٪ (بعد از ۱۱۰ روز)، و ۸۷٪ (بعد از ۱۶۰ روز) به دست آمد. در مورد کولیت، برای اندازه ذرات مذکور در طی ۱۶۰ روز درصد انحلال به ترتیب ۶۰، ۳۵ و ۱۸ حاصل شد. میزان انحلال پیریت نیز ۳۳، ۲۴ و ۱۴ درصد محاسبه گردید. همچنین، آنالیز حساسیت برای عوامل دما و توزیع اندازه ذرات انجام شد. نتایج شبیه‌سازی روند صحیحی با در نظر گرفتن توزیع اندازه ذرات در بازیابی مس از خود نشان دادند.

### کلمات کلیدی

لیچینگ باکتریایی توده‌ای، شبیه‌سازی از طریق مدل‌سازی ریاضیاتی فرآیند، المان انتگرالی، روش سیمپسون، کانسنگ کم‌عیار مس

## ۱. مقدمه

برخی از این مدل‌ها بر پدیده انتقال در مقیاس توده‌ای<sup>□</sup> تاکید بیشتری نسبت به پدیده‌های در مقیاس میکرو از قبیل رشد باکتریایی و سینتیک اکسایش و انتقال با فرآیند نفوذ در فاز ساکن دارند. تعداد بسیار کمی از این مدل‌ها مشخصات پارامتری قابل انعطافی را دارند که مورد نیاز برای دربرگیری تمام پدیده‌های احتمالی محدودکننده یک هیپ خاص است.

این مقاله، به بررسی یک مدل دقیق توسعه داده شده می‌پردازد که علاوه بر هیدرولوژی هیپ و دیگر فرآیندهای بزرگ مقیاس، دینامیک باکتریایی و انتقال نفوذی را نیز بررسی قرار می‌کند. هدف این مقاله، بسط و توسعه مدل‌های حاکم بر فرآیند لیچینگ باکتریایی توده‌ای می‌باشد که با نگاه و زاویه دید در مقیاس گروه ذرات مدل‌سازی صورت گرفته است. این مقیاس، مقیاسی حد واسط است که علاوه بر داشتن پارامترهای مقیاس توده و همچنین مقیاس ذره؛ معایب این دو مقیاس را ندارد. به عبارت دیگر، مدل موجود کلی‌تر می‌باشد که توان شبیه‌سازی دقیق‌تر از فرآیند لیچینگ باکتریایی توده‌ای را دارد. مبنای مدل‌سازی معادلات دیفرانسیلی با مشتقات جزئی است که در سطح ذره نفوذ و واکنش شیمیایی و باکتریایی را مدل می‌کند. همچنین، در فصل مشترک ذره با سیال در مقیاس بزرگتر حرکت کلی سیال را مدل کرده که در تماس با مواد واکنش داده شده قرار می‌گیرد. به عبارتی بهتر، در شرایط مرزی معادله نفوذ-واکنش یک دستگاه کوپل برای پدیده پهنرفت حاکم می‌شود که مدل‌سازی بسیار پیچیده‌ای را بیان می‌دارد. معادلات حاصله به روش سیمپسون حل شده‌اند. با حل چنین معادلاتی می‌توان تأثیر عوامل مؤثر بر فرآیند را تعیین کرد. این مدل واکنش‌های شیمیایی مربوط به لیچینگ کانسنگ‌های کالکوسیت، کولیت و پیریت را شامل می‌شود که به‌طور ساده با شرایط لیچینگ دیگر کانی‌ها قابل انطباق است.

به‌منظور دستیابی به عملیات سودده و اقتصادی لیچینگ باکتریایی توده‌ای نیاز به طراحی هیپ‌های پربازده (کارا) است. برای این منظور، مطالعه و درک فرآیندهای درگیر در توده ضرورت دارد. مدل‌سازی ریاضیاتی یک گام بسیار مهم در درک ماهیت و سازکار فرآیندهای لیچینگ بیولوژیکی توده‌ای است. لیچینگ باکتریایی توده‌ای یک اندرکنش پیچیده بین فرآیندهای انتقال و واکنش‌های شیمیایی است که در فازهای جامد، مایع و گاز اتفاق می‌افتد. این فرآیندها شامل انتقال پهنرفت و نفوذ در فاز مایع، پهنرفت فاز گاز، تولید و انتقال حرارت، انحلال کانسنگ و واکنش‌های شیمیایی باکتریایی است. تحقیقات علمی دامپ و لیچینگ توده‌ای به سمت توسعه مدل‌های ریاضیاتی سوق داده شده است که برخی از مهم‌ترین آن‌ها در مباحث مدل‌سازی در لیچینگ باکتریایی توده‌ای در جدول ۱ ارائه شده است و رویکردهای مدل‌سازی از بستر کانسنگ مرور می‌شود. همچنین، تحقیقات برخی از آن‌ها تا سال ۲۰۰۳ در مرجع [۱] مرور و مقایسه شده‌اند. عملیات لیچینگ باکتریایی توده‌ای موضوع بسیاری از تحقیقات انجام گرفته در زمینه استحصال فلز در سال‌های اخیر بوده است. در این راستا، محققین بسیاری کوشش کرده‌اند تا به بررسی پدیده‌های مهم این فرآیند پرداخته و با مدل‌سازی ریاضیاتی این عملیات که می‌تواند چشم‌اندازهای جالبی برای اهداف طراحی مهیا سازد را شبیه‌سازی کنند.

با توجه به جدول ۱، مدل‌ها به مرور زمان تکامل یافته‌اند. این تکامل هم در نوع مدل‌سازی و هم در فرآیندهای درگیر در مدل‌سازی، المان مدل و روش حل بوده است. مدل بیان شده در این مقاله در مقیاس مدل‌سازی حد واسط بوده است که نقص‌های مدل‌سازی بزرگ مقیاس و مدل‌سازی کوچک مقیاس را ندارد. در عین حال، مزیت این مقیاس این است که پدیده‌های هر دو مقیاس بزرگ و کوچک را می‌تواند در خود داشته باشد و پدیده‌های هر دو مقیاس را هم توصیف کند.

مؤثر بودن لیچینگ باکتریایی تا حد زیادی به کارایی میکروارگانیزم‌ها و ترکیب شیمیایی و کانی‌شناسی کانسنگ بستگی دارد [۱] و بیشترین کارایی زمانی حاصل می‌شود که شرایط لیچینگ با شرایط بهینه رشد باکتری مطابقت داشته باشد. عوامل مؤثر در اکسایش باکتریایی برای استخراج فلزات در جدول ۲ آورده شده است.

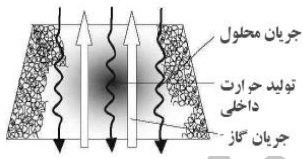


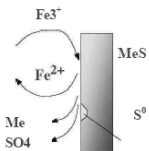
جدول ۱: مدل های لیچینگ (باکتریایی) توده ای موجود

نام محقق و منبع	موضوع مدل سازی	روش حل	کاستی های مدل
کسلس و اپس [۲]	اولین مدل ساده در مقیاس توده از دامپ	-	بسیار ساده
ریچی و همکاران [۳]	توسعه مدل کسلس و اپس	لاپلاس	مدل سازی مقدماتی
بارتلت و همکاران [۷]	توسعه مدل کسلس و اپس	-	قابل تعمیم نبودن
هیندریکس و دیکسون [۸-۱۱]	مدل سازی سینتیکی مرتبه اول و خلق تابع $\phi$ برای کانسنگ های مختلف صرفاً لیچینگ	سیمپسون	ساده سازی واکنشی-حرارتی زیاد
کاساس و همکاران [۱۲؛ ۱۳]	مدل سازی چند مولفه ای هم زمان	تفاضل محدود	عدم در نظر گرفتن تغییرات توده در حین مدل سازی
پترسون و همکاران [۱۴-۱۷]	مدل سازی فرآیند بیولیچینگ روی و کاربرد تابع $\phi$ برای کانسنگ روی	سیمپسون	صرفاً پوشش سینتیک مرتبه اول
شیخ زاده و همکاران [۱۸]	مدل سازی براساس معادله انتقال سیال در محیط اشباع و معادله اساسی دارسی صرفاً لیچینگ	تفاضل محدود به کمک الگوریتم توماس	عدم پوشش جریان ریچاردی
لهی و همکاران [۲۱]	مدل سازی انتقال هوا در توده	دینامیک سیالات محاسباتی	عدم فرض صحیح تغییرات دما
بوفورد و همکاران [۲۲-۲۴]	مدل سازی فرآیند بایوکس و کاربرد تابع $\phi$ برای کانسنگ طلا و کاربرد نرم افزار هیپسیم روی داده های موجود	سیمپسون	عدم مدل سازی ترسیب در حین فرآیند
ویلکاز و همکاران [۲۵]	مدل سازی سینتیکی لیچینگ باکتریایی کالکوپیریت با باکتری های ترموفیلی مشابه کار بوفورد و با نگاه معادله های الکتروشیمی فرآیند	-	عدم بررسی برهم کنش های فرآیندی
مک براید و همکاران [۲۶-۲۹]	مدل سازی انتگرالی حجم محدودی صرفاً لیچینگ	دینامیک سیالات محاسباتی	عدم بررسی تمام واکنش های درگیر
ملادو و همکاران [۳۰-۳۵]	مدل سازی سینتیکی بر مبنای ثابت سینتیک و بازیابی بی نهایت و گسترش آن به صورت تحلیلی صرفاً لیچینگ	ویژال	خروج از مدل سازی دیفرانسیلی و روی آوردن به مدل های آماری
زمبرا، موناژ و همکاران [۳۶]	مدل سه بعدی کوپل شده همرفت و نفوذ برای انتقال جرم و حرارت در اطراف توده	-	عدم کامل بودن مدل واکنشی
یعقوبی مقدم و همکاران [۳۷-۳۹]	مدل سازی تحلیلی توسعه یافته از معادله های نفوذ، پهنرفت، واکنش با مرتبه های متفاوت، مدل سینتیکی و مدل باکتریایی در فرآیند لیچینگ باکتریایی توده ای	تابع نمایشی، شوتینگ، هموتورپی، پرتربیشن، سیمپسون و غیره	عدم بررسی مدل حرارتی طی مدل دیفرانسیلی

جدول ۲: عوامل مؤثر در اکسایش باکتریایی برای استخراج فلزات [۳۷]

عوامل مؤثر در لیچینگ باکتریایی	پارامترها
عوامل فیزیکی و شیمیایی محیط لیچینگ	دما، اسیدیته، پتانسیل اکسایش-کاهش، دیاکسیدکربن، انتقال جرم، مواد مغذی، فشار، کشش سطحی، غلظت یون آهن دوظرفیتی، مواد ممانعت کننده
عوامل زیستی محیط لیچینگ	نوع باکتری، جمعیت و توزیع میکروارگانیسمها، فعالیت باکتری‌ها، قابلیت سازگاری میکروارگانیسمها با محیط، مقاومت در برابر فلزات
ویژگی‌های کانه برای لیچینگ	نوع کانه، ترکیب شیمیایی کانه، اندازه ذرات، سطح کانه، تخلخل، درجه آزادی، واکنش‌های گالوانیکی، ساختار کانه، آبگریزی کانه، تشکیل کانه ثانویه
نوع فرآیند لیچینگ	روش لیچینگ (درجا، توده‌ای، کپهای، مخزنی)، دانسیته پالپ، نرخ هم‌زدن (در مورد مخازن هم‌زدار)، مشخصات هندسی توده (در مورد لیچینگ کپه‌ای)

جدول ۳: نمایش الگوی زیر فرآیندهای موجود در فروشویی باکتریایی توده‌ای [۱۶]

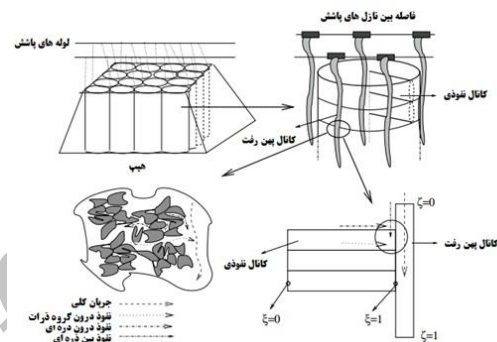
سطح	زیر فرآیندها	مدل مفهومی
مقیاس توده	جریان محلول از طریق بستر فشرده شده همرفتی گاز انتقال بخار آب موازنه حرارت	
مقیاس گروه ذرات	جذب گاز نفوذ ذره چسبیدن باکتری‌ها اکسایش باکتریایی	
مقیاس ذره	تأثیرات توپولوژیکی نفوذ درون ذره‌ای توزیع اندازه دانه و ذره	
مقیاس دانه	احیاء آهن سه به دو ظرفیتی اکسایش کانی اکسایش سولفور فرآیندهای سطحی	

حد واسط بین مقیاس توده و ذره می‌تواند عیوب مدل‌های قدیمی‌تر را برطرف نماید.

ضعف مدل‌های قبلی در عدم جامعیت فرآیند مدل‌سازی بوده است. بدین معنا که اگر مقیاس مدل‌سازی بزرگ باشد، مدل نمی‌تواند پدیده‌های ریز مقیاس را مدل نماید و بر عکس. مدل

## ۲. روش تحقیق

مدل "مقیاس گروه ذرات" در واحد حجم توده توسعه یافته است. رویکرد واحد حجم به لیچینگ باکتریایی توده در مدل‌های اولیه توسط رومن و السن (۱۹۷۴) به کار برده شده بود [۴۱]. در این کار، "مقیاس گروه ذرات" به صورت واحد حجم توده تعریف شده است که شامل فاز جامد (توزیع اندازه ذرات کانسنگ)، فاز مایع (محلول لیچینگ جاری و ساکن، که حاوی مواد حل شونده و حل شده، باکتری‌های چسبیده و پلانکتونی می‌باشد) و فاز گاز (هوای در حال جریان و پاکت‌های هوا) می‌باشند.



شکل ۱ مدل مفهومی از کل فرآیند لیچینگ باکتریایی که در آن فرآیندهای درگیر و المان انتگرالی برای "مقیاس گروه ذرات" بیان شده است را نشان می‌دهد. فرآیندهای مهمی که در این مقیاس اتفاق می‌افتند عبارتند از:

- ✓ واکنش‌های انحلال کانی.
- ✓ فرآیندهای باکتریایی (رشد، اکسایش و انتقال).
- ✓ نفوذ مواد حل شونده حل شده در داخل ذرات کانسنگ و در کل محلول ساکن.
- ✓ تولید حرارت و نفوذ.
- ✓ جریان محلول و گاز در سرتاسر المان انتگرالی.

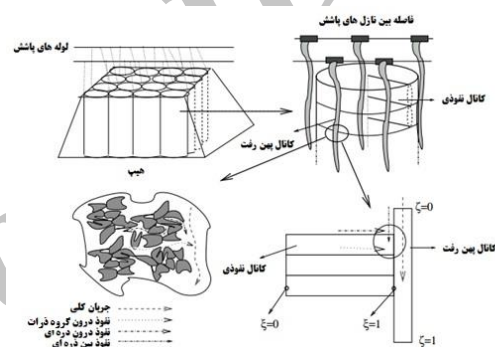
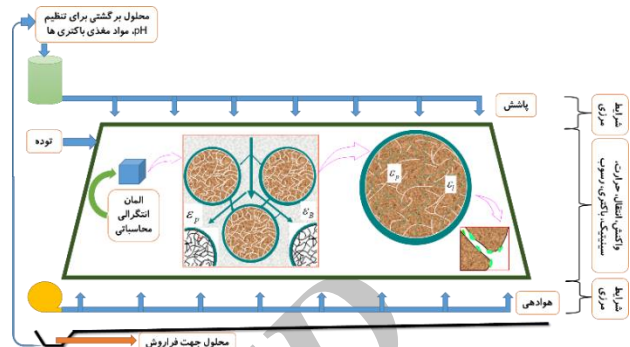
مدل "مقیاس گروه ذرات" را می‌توان برای مدل مقیاس توده به وسیله المان واحد حجم به منظور تشکیل یک واحد ستون در توده تعمیم داد. مدل اثر متقابل بین واحد حجم‌های مجاور در واحد ستون به همراه پدیده جریان در توده را شامل می‌شود. بعد از شکل‌گیری ستون‌های متشکل از المان‌های حجمی، تکثیر ستون‌ها به تعداد زیاد تا ایجاد توده است که این توسعه نیازمند تشریح اثر متقابل بین ستون‌های مجاور در درون این توده می‌باشد. بنابراین، مدل "مقیاس گروه ذرات" برای لیچینگ باکتریایی توده‌ای عبارت است از مدل حد واسط بین مدل مقیاس ذره و مدل مقیاس توده. همین‌طور، مدل آگلومره شامل فرآیندهای مقیاس ذره به طور کامل است و می‌تواند بلوک‌های

مدل مقیاس توده را ایجاد کند. هدف از این کار، مدل‌سازی تک واحد المان انتگرالی "مقیاس گروه ذرات" است.

در این مقاله مدل‌سازی فرآیند لیچینگ باکتریایی توده‌ای برای پدیده‌های حاکم در فرآیند و در نهایت کنار هم قرار دادن معادلات و شبیه‌سازی به صورت مدل دستگاه معادلات دیفرانسیلی با مشتقات جزئی ارائه شده است. روش تحقیق در این مقاله براساس مدل‌سازی در مقیاس حد واسط با استفاده از معادلات دیفرانسیلی با مشتقات جزئی براساس موازنه جرم و قانون بقای جرم انجام شده است. عبارت تولید یا مصرف به صورت واکنش شیمیایی و باکتریایی اضافه می‌شود.

واکنش‌های شیمیایی به صورت تغییرات میزان جزء واکنش داده نسبت به زمان در یک محیط متخلخل با چگالی مشخص است. تغییرات تبدیل کانی نسبت به زمان از حاصل ضرب ثابت نرخ آرنیوس (رابطه دما با انرژی اکتیواسیون) و تابع غلظت (رابطه غلظت یون‌های آهن دو و سه ظرفیتی بر واکنش) و تابع توپولوژیکی کانسنگ برای پارامترهای کانسنگ به دست آمده است. عبارت تولید یا مصرف باکتریایی بر حسب تعداد باکتری، نرخ رشد باکتریایی (محاسبه شده از قانون مونود براساس عوامل محیطی رشد مثل اکسیژن، آهن و اسیدیت) بر حسب راندمان باکتریایی و تابع راتووسکی (رابطه دما با رشد باکتریایی) بیان شده است. روابط تولید یا مصرف شیمیایی و باکتریایی در تک ذره به صورت جمع جبری با رابطه نفوذ براساس قانون فیک اضافه شده است. به عبارت دیگر، رابطه نفوذ-واکنش در فرآیند لیچینگ باکتریایی توده‌ای مدل شده است. در عمل بعد از نفوذ و واکنش، اجزای واکنشی در اثر نفوذ به سطح ذره می‌رسند. در سطح ذره با سیال در حال حرکت اجزای واکنشی با سیال در حال حرکت مواجه می‌شوند. این سطح مشترک سطح ذره با سیال در حال حرکت، شرط مرزی معادله نفوذ-واکنش است. همچنین، نرخ تغییرات باکتری‌های جذب شده و واجذب شده براساس ایزوترم لانگمیور و نرخ تغییرات جمعیت باکتریایی نیز مدل شد. مدل‌ها به صورت همزمان با روش سیمپسون حل شد. مدل‌ها برای کانی‌های کالکوسیت، کوولیت و پیریت و اجزاء شیمیایی مس، یون آهن دو و سه ظرفیتی، اسید و اکسیژن و اجزاء باکتریایی اکسیدکننده آهن حل شد. در هر مرحله حل، موازنه جرمی کنترل شد تا موازنه جرم برقرار باشد. کد نویسی در پایتون در محیط لینوکس انجام شد. کتابخانه‌های جی‌ان‌یو پلات  $\square\square$  و س‌ای پای  $\square\square$  برای رسم نمودارهای حاصله و محاسبات عددی استفاده شد. در شکل ۲ روال شبیه‌سازی نمایش داده

شده است. در نمودار جزئیات برنامه نویسی و نحوه ارتباط کد برای حل مسئله و پایان شبیه سازی توضیح داده شده است.



شکل ۱: مدل مفهومی از لیچینگ باکتریایی توده ای شامل فرآیندهای درگیر، معادله های حاکم و المان انتگرالی "مقیاس گروه ذرات"

### ۳. خلاصه ای از فرض های مدل سازی فرآیند لیچینگ باکتریایی توده ای

تعدادی از فرضیه ها برای توسعه مدل اولیه در نظر گرفته شده اند که در زیر به بیان آن ها پرداخته شده است.

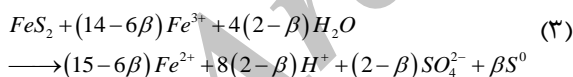
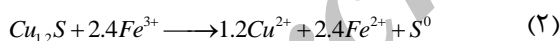
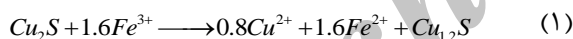
۱. مدل سازی در "مقیاس گروه ذرات" تحت شرایط ایزو ترم بررسی شده است.
۲. غلظت ثابتی از اکسیژن حل شده در فاز مایع ورودی وجود دارد.
۳. محلول لیچینگ (یا همان فاز مایع) در مدل "مقیاس گروه ذرات" به دو فاز ساکن و در حال جریان تقسیم و از هم جدا شده اند. تغییرات گونه های شیمیایی و باکتریایی در این فازها اتفاق می افتد.
۴. فرض شده است که گرادیان غلظت اجزاء شیمیایی و باکتریایی در فاز محلول در حال جریان در درون المان انتگرالی "مقیاس گروه ذرات" کوچک است که به

۵. تبادل به وسیله نفوذ، اجزاء شیمیایی و باکتریایی در کل مرزهای "مقیاس گروه ذرات" وجود ندارد.
۶. واکنش های شیمیایی و باکتریایی در محلول در حال جریان در نظر گرفته نشده؛ بلکه تنها انتقال به وسیله محلول در حال جریان در نظر گرفته شده است.
۷. ذرات کانسنگ به صورت کروی و دارای کانی های یکنواخت توزیع شده در زمان اولیه می باشند.
۸. برای نرخ های رشد باکتری های جذب شده و جذب نشده (برای اجزاء معین) به صورت متفاوت رفتار شده است.
۹. نفوذ مواد حل شونده محلول در داخل ذرات کانسنگ، در مسیر شعاعی پیشروی می کند، از این رو، از نفوذ زاویه ای صرف نظر شده است.

### ۴. توصیف، تشریح و فرمولاسیون مدل ریاضی

#### ۴-۱- واکنش های شیمیایی (مدل واکنش)

مس در کانی های سولفیدی به وسیله واکنش با یون های آهن سه ظرفیتی اکسیده می شود [۳۷]. واکنش های شیمیایی بین کانی های کالکوسیت، کولیت و پیریت موجود در کانسنگ و یون آهن سه ظرفیتی موجود در محلول لیچینگ به صورت زیر است:



لیچینگ کالکوسیت طی مکانیسم دو مرحله ای انجام می شود. در مرحله اول، کالکوسیت با یون های آهن سه ظرفیتی واکنش داده و تشکیل کانی حد واسطی شبیه به کولیت می دهد، و حدود ۴۰٪ از کل مس را آزاد می کند (رابطه ۱). در مرحله دوم، کولیت تشکیل شده در مرحله اول، با یون های آهن سه ظرفیتی واکنش داده ۶۰٪ از کل مس باقی مانده و سولفور (رابطه ۲) را آزاد می کند. نرخ ذاتی مرحله اول در دمای اتاق بالا است و به وسیله نفوذ یون های آهن سه ظرفیتی به محل های واکنش در ذره کانسنگ محدود شده است. این مرحله دارای انرژی فعال سازی نسبتاً پائینی است (مقادیر از ۲۵-۴۰ kJ/mol)

که در آن:  $k_A$  پارامتر انتقال جرمی یون آهن سه ظرفیتی و  $k_B$  پارامتر احیاء یون آهن سه ظرفیتی است. معادله بالا می تواند بسته به مقادیر این دو پارامتر، هر کدام از سه شکل متداول کنترل نرخ الکتروشیمیایی را نشان بدهد. وقتی مقادیر هر دو پارامتر صفر باشد ( $m \approx 0.5$ ) تجزیه کانی به صورت آندی کنترل کننده نرخ واکنش است. وقتی  $k_A = 0$  و  $k_B \gg C_{Fe^{2+}}$  باشد، احیای یون آهن سه ظرفیتی کنترل کننده نرخ است. در نهایت، وقتی  $k_A \gg C_{Fe^{3+}}$  و  $k_B \gg C_{Fe^{2+}}$  باشد، انتقال جرم یون آهن سه ظرفیتی کنترل کننده واکنش است.

$h(X)$  جمله توپولوژی است که برای تغییر در سطح واکنش دهنده به کار می رود. قانون توانی، به وسیله دیکسن و هندریکس (۱۹۹۳) [۱۱] به کار رفته است:

$$h(X) = (1-X)^\phi \quad (11)$$

که در آن:  $\phi$  پارامتر تجربی بوده و اغلب بین ۰/۵ تا ۲ است [۴۳]. نرخ اکسایش باکتریایی با نرخ رشد باکتریایی  $\mu$  (با ضریب استوکیومتری، ضریب بازده  $Y$ )، و نرخ نگهداری سلول،  $k_m$  ارتباط دارد [۴۲]. از این رو، نرخ اکسایش باکتریایی برای جزء  $i$  عبارتست از:

$$S = N_k \left( \frac{\mu_k}{Y} + k_m f(T) \right) \quad (12)$$

که در آن: اندیس  $k$  برای مشخص کردن جمعیت باکتریایی جذب شده،  $N$  چگالی جمعیت باکتریایی و  $f(T)$  میزان وابستگی فعالیت باکتریایی به دما است.

توسعه روابط نرخ برای باکتری‌های اکسیدکننده آهن و سولفور در لیجینگ باکتریایی هیپ، بسیار مهم است. طی سال‌ها، روابط نرخ متعددی به صورت فرمول درآمده است، بعضی‌ها توسط آجومو و همکارانش (۲۰۰۶) مقایسه شده است [۱۴]. لازم به ذکر است که اکثر این روابط نرخ، اصلاح شده شکل مونود می باشند. نرخ رشد باکتریایی ( $\mu$ ) برابر است با نرخ رشد باکتریایی ماکزیم ( $\mu_{max}$ ) ضربدر عوامل محدودکننده. بنابراین عبارت به این صورت قابل بیان است:

$$\mu_i = \mu_{i,max} F(T, C_{O_2}, C_{acid}, N, C_{Fe^{2+}} \text{ or } C_S, \dots) \quad (13)$$

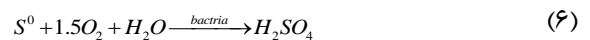
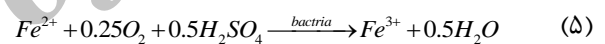
نرخ رشد باکتری‌های اکسیدکننده آهن عبارت است از [۴۲]:

$$\mu_{Fe} = \mu_{Fe,max} \cdot f(T) \cdot \left( 1 - \exp \left[ - \frac{C_{acid}}{C_{acid,lim}} \right] \right) \cdot \left( \frac{C_{Fe^{2+}}}{K_{Fe^{2+}} + C_{Fe^{2+}}} \right) \cdot \left( \frac{C_{O_2}}{K_{O_2} + C_{O_2}} \right) \cdot \left( \frac{K_I}{K_I + N_{Fe}} \right) \quad (14)$$

گزارش شده است). نرخ ذاتی مرحله دوم کمی آهسته تر است و دارای انرژی فعال سازی کمی بیشتر از مرحله اول است (مقادیر  $55-105 \text{ kJ/mol}$  گزارش شده است). از این رو، نرخ لیجینگ به طور قابل توجهی با دما افزایش می یابد. مرحله دوم وابستگی سینتیکی مرتبه نیم را به نسبت آهن سه ظرفیتی به آهن دو ظرفیتی نشان می دهد. از این رو، پیشنهاد می کند کنترل به وسیله انتقال بار در نیم واکنش آندی انجام می شود.

در عمل پیریت به همراه کالکوسیت یافت می شود و به وسیله واکنش با یون های آهن سه ظرفیتی لیج می شود تا یون های آهن دو ظرفیتی، سولفات (بسته به پتانسیل اکسایش - کاهش) و سولفور عنصری آزاد شود.  $\beta$  در رابطه (۳) کسری از پیریت است که به جای سولفات به سولفور عنصری تبدیل می شود. مقدار آن بین ۰ و ۱ است که وابسته به پتانسیل اکسایش - احیاء دارد. در این مطالعه، فرض شده  $\beta = 0$  است. به عبارتی دیگر، سولفور عنصری از پیریت تشکیل نشده است. رابطه (۴)، مصرف اسید به وسیله گانگ را نشان می دهد.

واکنش های اکسایش باکتریایی (اکسایش آهن دو ظرفیتی و سولفور) به وسیله روابط زیر ارائه شده اند:



نرخ واکنش لیجینگ کانی سولفیدی تابع دما، غلظت مواد واکنش دهنده و کسر کانی واکنش نداده است. با نوشتن مجدد رابطه بر حسب عیار کانی  $g$  به صورت  $g_0 X$  می توان نوشت:

$$S = \rho(1-\epsilon) \frac{\partial g}{\partial t} = \rho(1-\epsilon) g_0 \frac{\partial X}{\partial t} \quad (7)$$

که در آن:  $\epsilon$  تخلخل ذره،  $g_0$  عیار اولیه کانی و  $X$  نرخ تبدیل کانی تغییر کرده است. همچنین داریم:

$$\frac{\partial X}{\partial t} = k(T) f(C) h(X) \quad (8)$$

که در آن:  $k(T)$  ثابت نرخ وابسته به دما می باشد و به وسیله قانون آرنیوس ارائه می شود:

$$k(T) = k_{ref} \exp \left[ - \frac{E}{R} \left( \frac{1}{T} - \frac{1}{T_{ref}} \right) \right] \quad (9)$$

که در آن:  $k_{ref}$  ثابت آرنیوس در دمای مرجع  $T_{ref}$ ،  $E$  انرژی فعال سازی و  $R$  ثابت گازها است. تابع غلظت  $f(C)$  نیز به صورت زیر ارائه می شود. این رابطه از فرآیند الکتروشیمیایی لیجینگ به دست می آید [۴۲]:

$$f(C) = \frac{C_{Fe^{3+}}}{(k_A + C_{Fe^{3+}})^{[1-m]} (k_B + C_{Fe^{2+}})^m} \quad (10)$$

$$\left[ \epsilon \frac{\partial C_i}{\partial t} = \epsilon D_i \left( \frac{\partial^2 C_i}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial C_i}{\partial r} \right) + \sum_l v_{il} S_l + \delta (R-r) \sum_m v_{im} S_{surf,m} \right]_j, \left[ \frac{mol}{cm^3 \min} \right] \quad (17)$$

که در آن:  $\epsilon$  تخلخل ذره،  $C_i$  غلظت اجزاء،  $D_i$  ضریب نفوذ اجزاء،  $v_{il}$  استوکیومتری اجزاء  $i$  در واکنش لیچینگ  $l$  (روابط (۱)، (۲)، (۳) و (۴))، و  $S_l$  جمله نرخ برای واکنش لیچینگ کانی  $l$  (رابطه (۷)) است. آخرین جمله سمت راست رابطه (۱۷) برای واکنش‌های اکسایش باکتریایی در سطح ذره لحاظ می‌شود که  $v_{im}$  ضریب استوکیومتری اجزاء  $i$  در واکنش اکسایش باکتریایی  $m$  (روابط (۵) و (۶))، و  $S_{surf}$  عبارت اکسایش باکتریایی در سطح ذره (رابطه (۱۲)) است. شرایط مرزی برای رابطه (۱۷) عبارتند از:

$$\frac{\partial C_i}{\partial r}(0, t) = 0 \quad (18)$$

$$-D_i \left. \frac{\partial C_i}{\partial r} \right|_{r=R} = -k_{bs} (C_{bi} - C_{Ri}) \quad (19)$$

که در آن:  $C_{bi}$  غلظت کل اجزاء و  $k_{bs}$  ضریب انتقال جرم در سطح مشترک سطح ذره/کل (توده) است. در زمان اولیه، غلظت یکسانی از اجزاء  $i$  در کلاس اندازه  $z$  فرض شده است. تغییر در غلظت اجزاء شیمیایی در محلول کل از تبادل در سطح مشترک سطح ذره/کل (توده)، تبادل در سطح مشترک محلول کل (توده) در حال جریان، و نرخ تشکیل (یا مصرف) اجزاء در توده نتیجه می‌شود که به وسیله رابطه موازنه جرم در زیر بیان می‌شود:

$$\epsilon_b \frac{dC_{bi}}{dt} = -3\epsilon \sum_j \frac{\omega_j}{R_j} k_{bs} (C_{bi} - C_{Rj}) + k_{bf}^* (C_{fi} - C_{bi}) + \epsilon_b \sum_m v_{im} S_{bulk,m} \cdot \left[ \frac{mol}{cm^3 \min} \right] \quad (20)$$

اولین جمله در سمت راست رابطه (۲۰) نرخ میانگین تبادل بین تمام ذرات و محلول توده (کل) را ارائه می‌کند، (که اندیس  $z$  مربوط به اندازه کلاس است). جمله دوم نرخ تبادل در سطح مشترک محلول توده / در حال جریان را بیان می‌کند.  $K_{bf}^*$  نرخ انتقال جرم در این سطح مشترک، عبارت است از:

$$k_{bf}^* = k_{bf} \times \frac{\text{ناحیه سطح تبادل}}{\text{حجم المان انتگرالی}} \quad (21)$$

که در آن:  $k_{bf}$  ضریب انتقال جرم در سطح مشترک محلول توده در حال جریان است. جمله سوم تولید یا مصرف اجزاء را در توده در نتیجه واکنش‌های اکسایش باکتریایی بیان می‌کند.  $S_{bulk}$  در رابطه (۱۲) بیان شده است.

نرخ تغییر غلظت اجزاء شیمیایی در فاز در حال جریان به دلیل جابه‌جایی افقی و نرخ تبادل با محلول توده است. این موضوع به وسیله رابطه زیر ارائه شده است:

که در آن:  $K_I$  ثابت بازدارندگی سلول است. رابطه (۱۴) وابستگی نرخ رشد باکتری‌های اکسیدکننده آهن به دما،  $pH$ ، غلظت یون آهن دوظرفیتی، غلظت اکسیژن حل شده، و ازدحام سلولی را نشان می‌دهد. به عبارت دیگر، عوامل بالا سبب محدودیت در نرخ رشد باکتری‌های اکسیدکننده آهن می‌شوند. بیان مشابهی برای نرخ رشد باکتری‌های اکسیدکننده سولفور ارائه شده است. باکتری‌های اکسیدکننده سولفور به وسیله اکسید کردن سولفور عنصری در سطح ذرات کانسنگ رشد می‌کنند. نرخ رشد اکسیدکننده‌های سولفور جذب شده به صورت زیر ارائه می‌شود:

$$\mu_S = \mu_{S,max} \cdot f(T) \cdot \left( \frac{g_S}{K_S + g_S} \right) \cdot \left( \frac{C_{O_2}}{K_{O_2} + C_{O_2}} \right) \cdot \left( \frac{K_I}{K_I + N_S} \right) \quad (15)$$

که در آن:  $g_S$  عیار سولفور است [۴۲].

وابستگی نرخ رشد باکتریایی به دما را می‌توان به وسیله رابطه راتکووسکی تشریح کرد [۴۴]. با تعریف  $f(T) = \frac{F(T)}{F(T_{opt})}$  - عنوان تابع دمای نرمال شده، آنگاه تابع راتکووسکی  $F(T)$  به صورت زیر ارائه می‌شود [۴۵]:

$$F(T) = \sqrt{r} = b(T - T_{min})(1 - \exp(c(T - T_{max}))) \quad (16)$$

که در آن:  $R$  ثابت نرخ رشد،  $T$  دما (کلوین)، و  $b$ ،  $c$  پارامترهای برازش،  $T_{min}$  و  $T_{max}$  برون‌یابی تئوری دماهای حداقل و حداکثر برای رشد باکتریایی و  $T_{opt}$  دمای بهینه نرخ رشد باکتریایی است. رابطه راتکووسکی یک رابطه تجربی است که به منظور برازش داده‌های آزمایشگاهی توسعه یافته بود. زویترینگ و همکارانش (۱۹۹۱) مدل‌های مختلف مفید و مناسب را ارزیابی کردند و رابطه بین رشد باکتریایی و دما را به وسیله آنالیز آماری داده‌های آزمایشگاهی زیادی تشریح کردند [۴۶]. آن‌ها نتیجه گرفتند که شکل اصلاح شده رابطه راتکووسکی مناسب‌ترین رابطه است. فرزنمن و همکارانش (۲۰۰۵) مقادیر پارامترهای رابطه راتکووسکی ( $b$ ،  $T_{opt}$ ،  $T_{max}$ ،  $T_{min}$ ) را برای باکتری‌های عمومی لیچینگ کانی انتخاب شده که با ترکیب‌های یون آهن دوظرفیتی و سولفور رشد می‌کنند، گزارش کردند [۴۵].

#### ۴-۲- موازنه جرم اجزای شیمیایی و باکتریایی (مدل انتقال)

هر کلاس اندازه ذره  $z$ ، به وسیله نماینده (یا میانگین) شعاع ذره  $R_z$  مدل شده است. رابطه موازنه جرم برای هر کدام از اجزاء حل شده  $i$ ، در هر کلاس اندازه  $z$ ، به وسیله رابطه واکنش - نفوذ در زیر ارائه شده است:



جذب نشده ( $mol/L$ )، و  $K_a$  ثابت تعادل جذب است ( $L/mol$ ). از این رو، ایزوترم لانگمویر برای مدل باکتریایی عبارت است از:

$$\frac{N_a}{N_{a,max}} = \frac{K_a N_d}{1 + K_a N_d} \quad (30)$$

## ۵. مباحث حل عددی و پارامترهای مورد استفاده در شبیه‌سازی

مدل ریاضی توسعه داده شده در این مقاله برای کانی‌های کالکوسیت، کولیت و پیریت و اجزای شیمیایی مس، آهن دو-ظرفیتی، آهن سه‌ظرفیتی، اسید و اکسیژن در حضور باکتری‌های اکسیدکننده حل شده است. مقادیر عددی پارامترهای مورد نیاز در مدل در جدول‌های ۴ تا ۷ مربوط به این سه کانی استفاده شده است. معادلات دیفرانسیلی با مشتقات جزئی حاصله با استفاده از روش تفاضل محدود خطی‌سازی شدند. ثبات نتایج شبیه‌سازی و همچنین سازگاری و هماهنگی نتایج با انجام موازنه جرم در پایان هر شبیه‌سازی بررسی شده است. کل مس تشکیل شده، بر اساس تبدیل نهایی کانی‌های مس، با کل مس محلول به‌دست آمده از شبیه‌سازی مقایسه شد. موازنه تعادلی آهن نیز انجام شد: کل آهن ورودی به سیستم (کل آهن سه‌ظرفیتی و آهن دوظرفیتی در جریان ورودی، به علاوه مقدار اولیه آهن سه-ظرفیتی و آهن دوظرفیتی در المان انتگرالی)، با کل آهن خروجی از سیستم (کل آهن سه‌ظرفیتی و آهن دوظرفیتی در جریان خروجی، به علاوه مقدار نهایی آهن سه‌ظرفیتی و آهن دوظرفیتی در پایان شبیه‌سازی) مقایسه شد. دستیابی به یک موازنه جرم در محدوده خطای منطقی، جنبه‌های چالش برانگیز اجرای محاسبات عددی است. با استفاده از این روش، حداکثر خطای نسبی در محاسبات موازنه جرم (برای تمام شبیه‌سازی) کمتر از ۰,۷ درصد بود. به غیر از خطاهای نسبی برای شبیه‌سازی‌های مربوط به نرخ جریان بالا، تمام شبیه‌سازی‌های دیگر خطاهای نسبی کمتر از ۰,۱۵ درصد بود. خطاهای شبیه‌سازی بالا با افزایش نرخ جریان به‌دست آمده که بالاترین آن برای نرخ جریان ۲ سانتی‌متر بر دقیقه، ۰,۶۵ درصد بود. در شکل ۲ نمودار برنامه برای انجام محاسبات عددی و حل مدل به همراه موازنه جرم نشان داده شده است.

از رابطه‌های (۱) تا (۴)، ماتریس استوکیومتری برای واکنش‌های لیجینگ در ذرات کانسنگ به‌صورت زیر تشکیل می‌شود:

$$\varepsilon_f \frac{\partial C_{fj}}{\partial t} = -u \frac{\partial C_{fj}}{\partial z} - k_{bf}^* (C_{fj} - C_{bj}), \quad \left[ \frac{mol}{cm^3 \min} \right] \quad (22)$$

که در آن:  $u$  سرعت ظاهری محلول در حال جریان است.

دانشیته جمعیت کل اجزاء باکتریایی معین  $N_i$  ( $cells/cm^3_{agg}$ ) شامل باکتری‌های جذب شده  $N_{a,i}$  ( $cells/gore$ ) و باکتری‌های جذب نشده  $N_{d,i}$  ( $cells/cm^3_{bulk}$ ) به صورت رابطه زیر به هم مرتبط می‌شوند:

$$N_i = \varepsilon_p \rho (1 - \epsilon) N_{a,i} + \varepsilon_b N_{d,i} \quad (23)$$

نرخ تغییر جمعیت جذب شده برای اجزاء  $i$  و کلاس اندازه  $j$  عبارتست از:

$$\left[ \frac{dN_a}{dt} = N_a (\mu_a - k_{death}) \right]_{ij}, \quad \left[ \frac{cells}{g_{ore} \min} \right] \quad (24)$$

که در آن:  $\mu_a$  نرخ رشد باکتری‌های جذب شده (روابط (۱۴) و (۱۵)) و  $k_{death}$  نرخ مرگ ویژه باکتری‌ها هستند. نرخ تغییر جمعیت باکتریایی جذب شده به‌صورت زیر بیان می‌شود:

$$\varepsilon_b \frac{dN_d}{dt} = \varepsilon_b N_d (\mu_d - k_{death}) + k_{bf}^* (N_f - N_d), \quad \left[ \frac{cells}{cm^3 \min} \right] \quad (25)$$

که در آن:  $\mu_d$  نرخ رشد باکتری‌های جذب نشده، و  $N_f$  دانشیته جمعیت در فاز در حال جریان هستند. نرخ تغییر جمعیت باکتریایی در محلول در حال جریان به‌دلیل جابجایی افقی، و نرخ تبادل با محلول توده است که به‌صورت رابطه زیر ارائه می‌شود:

$$\varepsilon_f \frac{\partial N_f}{\partial t} = -u \frac{\partial N_f}{\partial z} - k_{bf}^* (N_f - N_d), \quad \left[ \frac{cells}{cm^3 \min} \right] \quad (26)$$

جمعیت باکتریایی ورودی ثابت فرض شده است:

$$N_f(0, t) = N_{f,inlet} \quad (27)$$

برای رابطه‌های (۲۴)، (۲۵) و (۲۶)، جمعیت باکتریایی اولیه ثابت فرض شده است. جمعیت‌های باکتریایی جذب شده و جذب نشده بوسیله فرآیند جذب/اجذب جفت شده است. جذب سطحی اجزاء به محل‌های جامد برای جذب را می‌توان به‌سادگی به‌صورت واکنشی که سریعاً پیشروی می‌کند تا به تعادل برسد، بیان کرد:

$$C_{ads} \rightleftharpoons C_{des} \quad (28)$$

سینتیک جذب سطحی را می‌توان بوسیله ایزوترم‌های جذب سطحی تشریح کرد. در این کار، مدل ایزوترم لانگمویر (براساس فرض جذب تک لایه‌ای) به‌کار رفته است. در تعادل، نرخ جذب سطحی اجزاء جذب نشده معادل با نرخ واجذب اجزاء جذب نشده است. ایزوترم لانگمویر به این صورت نوشته می‌شود:

$$\frac{C_{ads}}{C_{ads,max}} = \frac{K_a C_{des}}{1 + K_a C_{des}} \quad (29)$$

که در آن:  $C_{ads}$  غلظت جذب شده ( $mol/g$ )،  $C_{ads,max}$  غلظت مطابق با لایه تک مولکولی کامل است،  $C_{des}$  غلظت

$$C_{f,H_2SO_4}(z,0) = 8\% , \quad (33)$$

$$N_f(z,0) = 10^{10} \text{ cells/g} ,$$

$$C_{p,i}(r,0) = 0 ,$$

$$C_{b,i}(0) = C_{f,i}(z,0) ,$$

$$N_d(0) = N_f(z,0) \text{ cells/g} ,$$

$$N_a(0) = 0 \text{ cells/g} ,$$

(34)

$$v_{il} = \begin{pmatrix} Eq.(1) & Eq.(2) & Eq.(3) & Eq.(4) \\ 0.8 & 6.0 & 0.0 & 0.0 \\ -1.6 & -2.4 & 14-6\beta & 0.0 \\ 1.6 & 2.4 & 15-6\beta & 0.0 \\ 0.0 & 0.0 & 8-4\beta & -1.0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Cu^{2+} \\ Fe^{3+} \\ Fe^{2+} \\ Acid \end{pmatrix}$$

که در رابطه (33) و رابطه (34) یکی از اجزاء حل شده  $[Cu, Fe^{3+}, Fe^{2+}, O_2, H_2SO_4]$  غلظت مس اولیه در سیستم صفر انتخاب شده است. همان طور که در رابطه (34) نشان داده شده، غلظت کل اجزاء شیمیایی برابر با غلظت اولیه در فاز در حال جریان قرار داده شده است. سایر پارامترهای مرجع شبیه-سازی در جدول های 4 تا 7 لیست شده اند.

ردیف های ماتریس  $v_{il}$  (با اندیس  $i$ ) اجزاء حل شده، و ستون ها (اندیس  $l$ ) واکنش های لیچینگ کانی هستند. شرایط اولیه زیر برای حل معادلات دیفرانسیلی با توجه به فیزیک مسئله لیچینگ باکتریای توده ای استفاده شده بود.

$$C_{f,Fe^{2+}}(z,0) = 0.1\% , \quad (32)$$

$$C_{f,Fe^{3+}}(z,0) = 0.1\% ,$$

$$C_{f,O_2}(z,0) = 0.008\% ,$$

جدول 4: پارامترهای بیولوژیکی مورد استفاده در شبیه سازی لیچینگ باکتریایی توده ای

پارامتر	علامت	واحد	اکسایش آهن (مزوفیل)	اکسایش سولفور (مزوفیل)
جمعیت باکتریایی ورودی	$N_{f,inlet}$	سلول بر لیتر	$10^{10}$	$10^9$
جرم مولی	$M$ (جرم مولی)	گرم بر مول	$10^{12}$	$10^{12}$
ضریب بازه باکتری	$Y$	سلول بر مول سوبستر	$2 \times 10^{12}$	$2 \times 10^{11}$
نرخ رشد باکتری	$\mu_{max}$	یک بر دقیقه	$0,0017$	$0,00083$
نرخ مرگ ویژه باکتری	$K_{death}$	یک بر دقیقه	$0,00017$	$0,00001$
نرخ نگهداری سلول	$K_m$	مول سوبستر بر سلول بر دقیقه	$0$	$0$
حداکثر باکتری جذب شده	$N_{a,max}$	سلول بر گرم	$1,5 \times 10^9$	$1,5 \times 10^9$
ثابت تعادل جذب	$K_a$	لیتر بر سلول	$67 \times 10^{-12}$	$17 \times 10^{-12}$
ثابت یون آهن یا گوگرد	$K_{substrate}$	مول بر لیتر ( $K_{Fe}$ ) یا مول بر گرم ( $K_S$ )	$K_{Fe} = 0,0001$	$K_S = 0,00006$
ثابت اسیدیته	$K_{acid}$	مول بر لیتر	$0,01$	$-$
ثابت اکسیژن	$K_{O_2}$	مول بر لیتر	$0,00005$	$0,00005$
ثابت بازدارندگی سلول	$K_I$	سلول بر لیتر	$10^{12}$	$10^{12}$
دمای کمینه	$T_{min}$	درجه سانتی گراد	$9,6$	$-4,2$
دمای بیشینه	$T_{max}$	درجه سانتی گراد	$49,5$	$39,7$
دمای بهینه	$T_{opt}$	درجه سانتی گراد	$38,6$	$32,8$
پارامتر برازش	$b$	(پارامتر برازش داده شده راتوسکی)	$0,01551$	$0,00293$
پارامتر برازش	$c$	(پارامتر برازش داده شده راتوسکی)	$0,22061$	$0,30891$

جدول ۵: پارامترهای اجزاء شیمیایی مورد استفاده در شبیه سازی لیجینگ باکتریایی توده ای

پارامتر	علامت	واحد	مس	یون آهن سه ظرفیتی	یون آهن دو ظرفیتی	اسید	اکسیژن
ضریب نفوذ	$D$	مترمربع بر ثانیه	$10^{-9}$	$10^{-9}$	$10^{-9}$	$3 \times 10^{-9}$	$10^{-9}$
غلظت اولیه ورودی	$C_{f,inlet}$	گرم بر لیتر	۰	۰,۱	۰,۱	۸	۰,۰۰۰۰۸
جرم مولی	$M$	گرم بر مول	۶۳,۵۴	۵۵,۸۵	۵۵,۸۵	۹۸,۰۷	۳۲
ثابت آرنیوس در دمای مرجع	$k_{ref}$	معکوس دقیقه	-	-	۳۱,۱۷	$9,3 \times 10^{-4}$	-
دمای مرجع	$T_{ref}$	درجه سانتی گراد	-	-	۱۰۰	۲۰	-
انرژی فعال سازی	$E$	کیلوژول بر مول	-	-	۶۸,۶	۲۰	-

جدول ۶: پارامترهای کانی های موجود استفاده شده در شبیه سازی لیجینگ باکتریایی توده ای

پارامتر	علامت	واحد	کالکوسیت	کولیت	پیریت
نماد توپولوژیکی	$\varphi$	-	۱,۳	۰,۶	۲,۰
نماد الکتروشیمیایی	$M$	-	۰,۱۲۴	۰,۵	۰,۵
ثابت آرنیوس در دمای مرجع	$k_{ref}$	معکوس دقیقه	۰,۴۴۶	۰,۰۱	۰,۰۰۰۰۵
دمای مرجع	$T_{ref}$	درجه سانتی گراد	۳۵	۷۵	۵۵
انرژی فعال سازی	$E$	کیلوژول بر مول	۲۳,۹	۹۷,۹	۷۴,۳
پارامتر انتقال جرمی یون آهن سه ظرفیتی	$k_A$	مول بر لیتر	۰,۱۵۴	۰,۰۱۴۷	۰,۰۰۰۰۱
پارامتر احیاء یون آهن سه ظرفیتی	$k_B$	مول بر لیتر	۰,۰۰۰۰۱	۰,۰۰۰۰۱	۰,۰۰۰۰۱
عیار کانی	$G$	مول بر کیلوگرم کانسنگ	۰,۰۵۶۶	۰,۰۵۶۶	۰,۳
جرم مولی کانی	$M$	گرم بر مول	۱۵۹,۱۴	۵۴۱,۵۴	۱۱۹,۹۷

$\varphi$  و  $m$  بدون بعد هستند

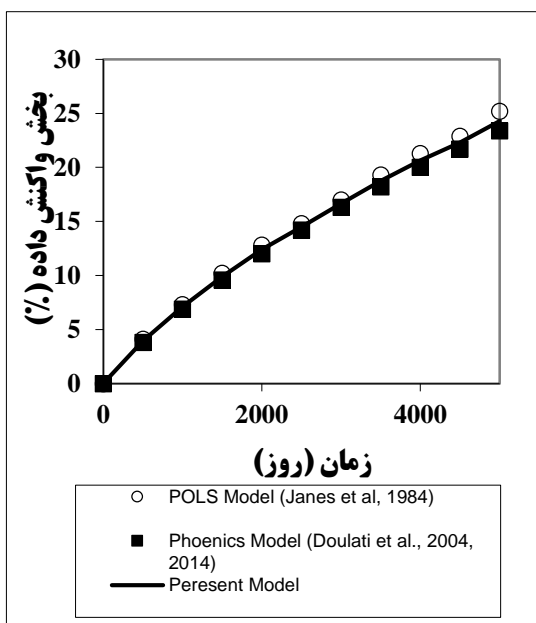
جدول ۷: پارامترهای تعیین شده توسط کاربر شبیه سازی لیجینگ باکتریایی توده ای

پارامتر	علامت	واحد	مقدار
چگالی کانسنگ	$\rho$	گرم بر سانتی متر مکعب	۱,۴۵
تخلخل ذره	$\epsilon$	سانتی متر مکعب بر سانتی متر مکعب	۰,۰۸
کسر حجمی سیال راکد	$\epsilon_b$	سانتی متر مکعب بر سانتی متر مکعب	۰,۳
کسر حجمی سیال در حال جریان	$\epsilon_f$	سانتی متر مکعب بر سانتی متر مکعب	۰,۱
دما	$T$	درجه سانتی گراد	۳۸,۶
طول واحد حجم	$L$	سانتی متر	۲۰
سرعت ظاهری سیال در حال حرکت	$U$	سانتی متر بر دقیقه	۰,۰۵
ضریب انتقال جرم در فصل مشترک سطح ذره با محلول	$k_{sb}$	سانتی متر بر دقیقه	۰,۱
نرخ انتقال جرم سطح مشترک	$k_{bf}^*$	یک بر دقیقه	۰,۱

$L$  طول واحد حجم

## ۶. اعتبارسنجی نتایج شبیه‌سازی

شد. طول کل به ۲۰ قسمت مساوی نیم متری تقسیم شد. تعداد گام زمانی ۱۰۰ لحاظ شد. نتایج اعتبارسنجی حکایت از اختلاف ناچیز بین نتایج خروجی مدل ارائه شده با نتایج مدل پولز و مدل فینیکس داشت. در شکل ۳، این مقایسه بین سه مدل مذکور ارائه شده است. همچنین، سعی شد تا از روش موازنه جرم ورودی منهای خروجی و به علاوه عبارت تولید منهای عبارت مصرف در هر چرخه حل استفاده شود تا خطای حل عددی نتایج دچار چالش نشود. کل خطای ایجاد شده کمتر از ۰/۷ درصد بود که کاملاً قابل اغماض است و نتایج را قابل اعتماد می‌کند.



شکل ۳: مقایسه نتایج خروجی مدل ارائه شده با نتایج مدل پولز [۴۸؛ ۴۷] و مدل پیریت واکنشی با استفاده از فینیکس [۵۱-۴۹]

۱,۵ میلیمتری) بودند. نمودارهای متوسط تبدیل برای کلاس‌های اندازه ۴ (ب)-(د)، با متوسط‌گیری حجمی تبدیل برای کانی  $i$  و کلاس اندازه  $j$  به دست می‌آیند:

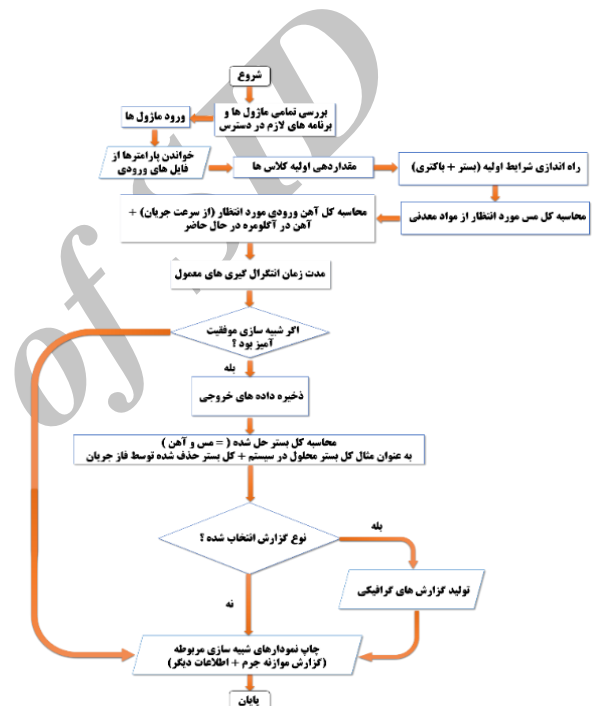
$$\bar{X}_{ij} = \frac{4\pi}{V_j} \int_0^{R_j} X_{ij}(r) r_j^2 dr_j \quad (35)$$

$$= \frac{3}{R_j^3} \int_0^{R_j} X_{ij}(r) r_j^2 dr_j \quad (36)$$

$$V_j = \frac{4}{3} \pi R_j^3 \quad (37)$$

غلظت کل مس در چند روز اول شبیه‌سازی (از روز ۴۰) به کمتر از ۰/۰۵ g/l افت پیدا می‌کند (شکل ۴-الف). این موضوع، به دلیل انحلال سریع مس طی لیچینگ باکتریایی کالکوسیت

به منظور اعتبارسنجی، نتایج مدل ارائه شده در رساله حاضر با نتایج مدل پولز [۴۸؛ ۴۷] و مدل شبیه‌سازی واکنشی پیریت به کمک نرم‌افزار فینیکس [۵۱-۴۹] که به ترتیب با روش‌های عددی تفاوت‌های محدود و حجم‌های محدود، فرآیند گسسته‌سازی معادلات دیفرانسیل حاکم را انجام می‌دهند، مقایسه شد. اعتبارسنجی برای تک‌کانی پیریت و برای شعاع ذرات ۶ میلی‌متر انجام شده است. مقدار پیریت محتوا ۰/۲۵ درصد و مدت زمان شبیه‌سازی طولانی در نظر گرفته شد. طول مدل ۱۰ متر برای انجام اعتبارسنجی در نظر گرفته



شکل ۲: نمودار برنامه برای انجام محاسبات عددی و حل مدل به همراه موازنه جرم

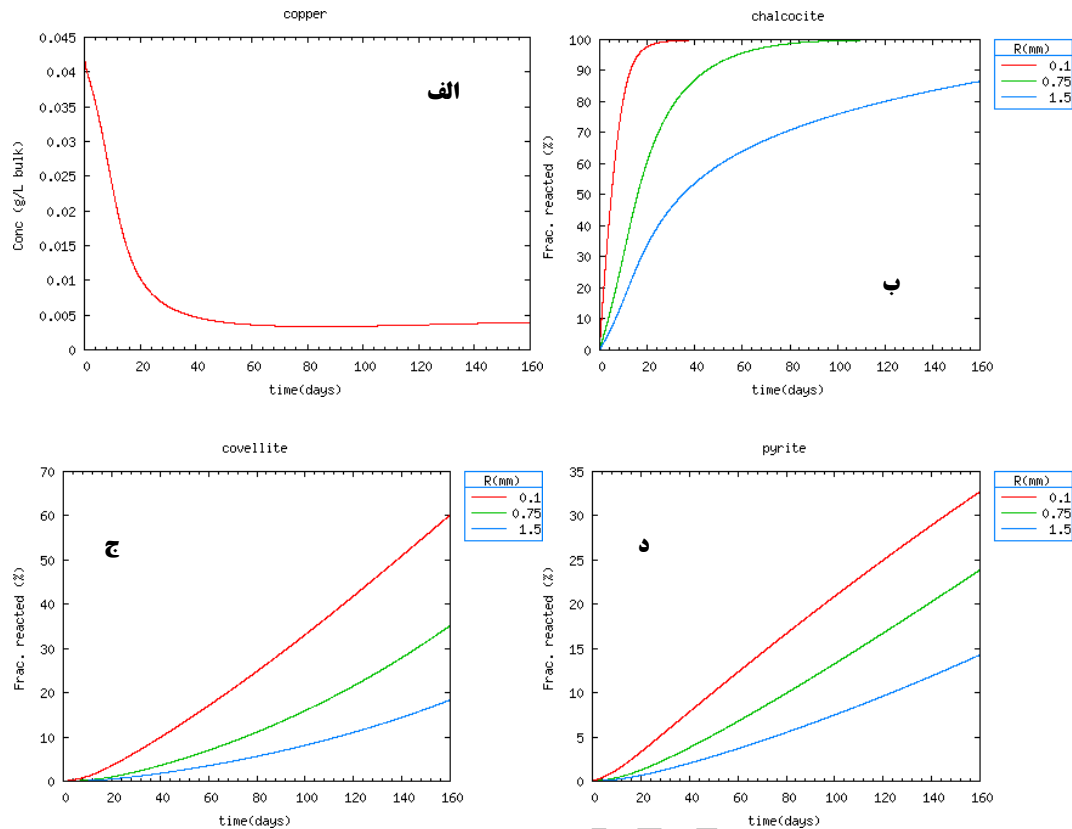
## ۷. ارائه نتایج، و تفسیر مباحث شبیه‌سازی

در این بخش، پاسخ تجمعی استخراج مس از کانسنگ در پارامترهای مختلف مدل بررسی شده است. شبیه‌سازی‌ها در سه کلاس اندازه ذرات مختلف با شعاع‌های ۰,۱ mm، ۰,۷۵ mm و ۱,۵ mm انجام شده‌اند. غلظت کل مس و متوسط تبدیل کالکوسیت، کوولیت و پیریت در هر یک از کلاس‌های اندازه ذره، برای لیچینگ در حضور باکتری‌ها در شکل ۴ نشان داده شده است. وزن کلاس‌های اندازه ذرات به ترتیب ۰/۴۵٪ (برای ذره با شعاع ۰,۱ میلیمتری)، ۰/۳۵٪ (۰,۷۵ میلیمتری) و ۰/۲۰٪

اجرای مدل، فرض شده است که تمام کولیت از کالکوسیت موجود و در دسترس اولیه حاصل می‌شود. از شکل ۵-ب مشخص است که این فرض همان‌گونه که از نتایج کیفی انتظار می‌رود، حاصل شد. به عبارتی، پیشروی تبدیل کولیت فقط در نواحی از ذرات کانسنگ که تبدیل کالکوسیت بطور قابل توجهی پیشرفت داشته است، انجام می‌شود. همان‌طور که در شکل ۵-ج دیده می‌شود، پیریت آهسته‌تر از کانی‌های مس واکنش می‌دهد.

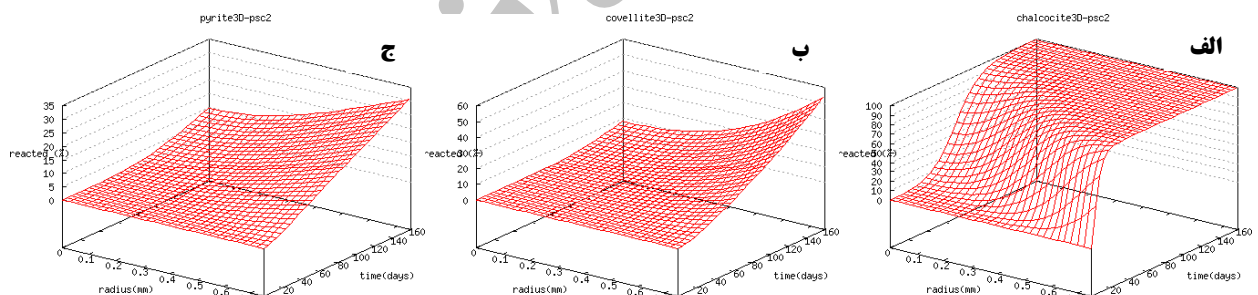
اثر فاصله نفوذ لیچینگ کانی در مقیاس ذره در شکل ۵ نشان داده شده است. در ۴۰ روز اول شبیه‌سازی، کانی‌ها نرخ‌های تبدیل بسیار متفاوتی نشان می‌دهند و نرخ واکنش کالکوسیت در این میان بیشتر واضح است. پس از آن، نرخ‌های تبدیل کانی بسیار شبیه به هم می‌باشند، نرخ تبدیل کالکوسیت به‌طور قابل توجهی در داخل ذرات درشت نسبت به ذرات ریز آهسته است. این رفتار به این دلیل است که وقتی در لیچینگ کالکوسیت یون‌های آهن سه‌ظرفیتی در داخل ذرات درشت پیشروی می‌کند، دیده می‌شود. این یون‌ها در تماس با کولیت و پیریت واکنش نداده قرار گرفته و واکنش می‌دهند قبل از این‌که آن‌ها بتواند به کالکوسیت عمیق‌تر در ذره برسند. بنابراین، اگرچه کالکوسیت نرخ واکنش ذاتی بالاتری دارد، سریع‌تر از پیریت یا کولیت در ذرات کانسنگ درشت لیچ نمی‌شود. در ذرات ریزتر، یون‌های آهن سه‌ظرفیتی دارای فاصله نفوذ کوتاه‌تری برای حرکت دارند. بنابراین، کل کالکوسیت قبل از این‌که لیچینگ رقابتی کانی‌ها ایجاد شود، تبدیل می‌شود. از این رو، نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد که در ذرات درشت‌تر نسبت به ذرات ریزتر تبدیل کالکوسیت به دلیل حضور کولیت و پیریت در ناحیه واکنش نداده، کند می‌شود.

(به خصوص در کلاس اندازه به شعاع  $0.1\text{mm}$ ) است که با سینتیک بسیار بالایی انحلال اتفاق می‌افتد. به هر حال، غلظت مس توده (کل) بعد از روز ۶۰ام به نسبت ثابت می‌شود. مس انحلال یافته توسط فاز در حال جریان از المان انتگرالی که در آن مدل‌سازی انجام شده است، خارج می‌شود. در اولین ده روز شبیه‌سازی، لیچینگ کالکوسیت غالب بود. شکل ۴-ب تا د نشان می‌دهد که تبدیل کالکوسیت (حدود ۹۰٪ تبدیل) در کلاس اندازه به شعاع  $0.1\text{mm}$  در این دوره زمانی سریع است. همچنین، با افزایش شعاع ذرات سینتیک انحلال کاهش می‌یابد. همان‌گونه که از شکل ۴ پیداست، سینتیک انحلال کالکوسیت از کولیت و کولیت از پیریت بیشتر است. این در حالی است که میزان کولیت انحلال یافته بعد از ۱۶۰ روز برای سه کلاس اندازه ذرات با شعاع‌های  $0.1\text{mm}$ ،  $0.75\text{mm}$  و  $1.5\text{mm}$  به ترتیب حدود ۶۰، ۴۵ و ۱۸ درصد می‌باشد. به عبارت دیگر، در ابعاد بزرگتر محدودیت نفوذ سبب کاهش انحلال می‌شود. مدارک آزمایشگاهی نشان داده که لیچینگ مرحله اول کالکوسیت به وسیله دسترسی مواد واکنش‌دهنده محدود شده است (کنترل‌کننده نفوذ)، در حالی که مرحله دوم لیچینگ کالکوسیت بوسیله سینتیک‌های انحلال کانی (کنترل‌کننده واکنش) محدود شده است [۱۴؛ ۱۵؛ ۱۶؛ ۱۷]. شکل ۵ پیشرفت لیچینگ باکتریایی کانی‌های کالکوسیت، کولیت و پیریت در کلاس اندازه  $0.75\text{mm}$  با جزئیات بیشتر برای تغییرات شعاع و زمان را نشان می‌دهد. عدد صفر در مورد شعاع ذره معرف مرکز ذره و عدد  $0.75$  سطح ذره می‌باشد. سطوح تبدیل دارای شیب، نمونه‌ای از سینتیک‌های شیمیایی سریع است که مربوط به نرخ نفوذ مواد واکنش‌دهنده در داخل ذرات مربوط می‌شود. این حالت زمانی که کولیت به طور هم‌وزن‌تر واکنش می‌دهد برای کالکوسیت قابل مشاهده است. همچنین، طبیعت متوالی بودن مراحل اول و دوم لیچینگ کالکوسیت از شکل ۵-الف و ب آشکار می‌شود. تبدیل کولیت فقط در نواحی که تبدیل کالکوسیت در حال کامل شدن است، اتفاق می‌افتد. لازم به ذکر است که در



شکل ۴: الف) غلظت کل مس انحلال یافته و متوسط تبدیل کانی برای ب) کالکوسیت ج) کوولیت د) پیریت در طول زمان لیچینگ باکتریایی

#### توده‌ای



شکل ۵: سطوح تبدیل کانی‌های کالکوسیت، کوولیت و پیریت در کلاس اندازه به شعاع ۰.۷۵ mm بعد از ۱۶۰ روز لیچینگ باکتریایی توده‌ای بر حسب تغییرات زمان و در مقیاس شعاعی

شکل ۶ میزان انحلال مس بر حسب زمان را برای شبیه‌سازی-های انجام شده در  $15^{\circ}C$ ،  $25^{\circ}C$ ،  $38/6^{\circ}C$  و  $45^{\circ}C$  نشان می‌دهد. شایان ذکر است که سایر پارامترهای مرجع در حین شبیه‌سازی دارای مقدار ثابتی می‌باشند. دمای مرجع  $38/6^{\circ}C$  به دلیل دمای بهینه *L.ferriphilum* اجزاء باکتریایی اکسیدکننده آهن است. لیچینگ توده‌ای کانی‌های سولفیدی مس اغلب در محدوده  $15-25^{\circ}C$  انجام می‌شود؛ همچنین، بیشینه دمای تحمل باکتری *L.ferriphilum*  $45^{\circ}C$  است. از این رو، دماهای  $15^{\circ}C$  تا  $45^{\circ}C$  به‌عنوان دماهای شبیه‌سازی انتخاب شدند.

#### ۸. حساسیت نتایج شبیه‌سازی

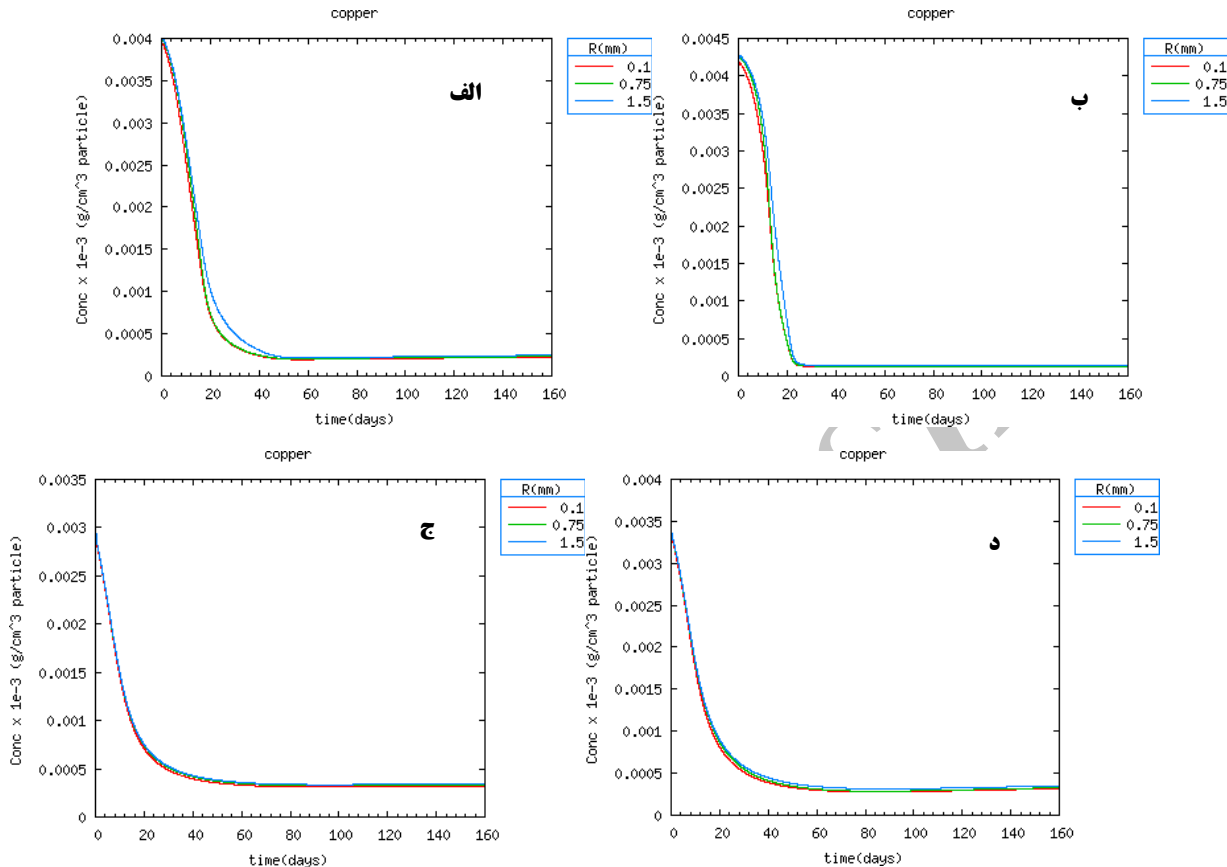
در این بخش، اثر پارامترهای شبیه‌سازی انتخاب شده در بازیابی تجمعی مس بررسی شده است. پارامترهای بررسی شده عبارتند از: دما، توزیع اندازه ذره. تغییرات پارامترهای ورودی به توده روی پاسخ بررسی شد.

#### ۸-۱. اثر دما

ز اندیس کلاس اندازه، و  $S_{Fe^{2+}}$  نرخ اکسایش باکتریایی آهن دوظرفیتی هستند.

متوسط نرخ اکسایش باکتریایی آهن دوظرفیتی در شبیه‌سازی از معادله زیر محاسبه شده است:

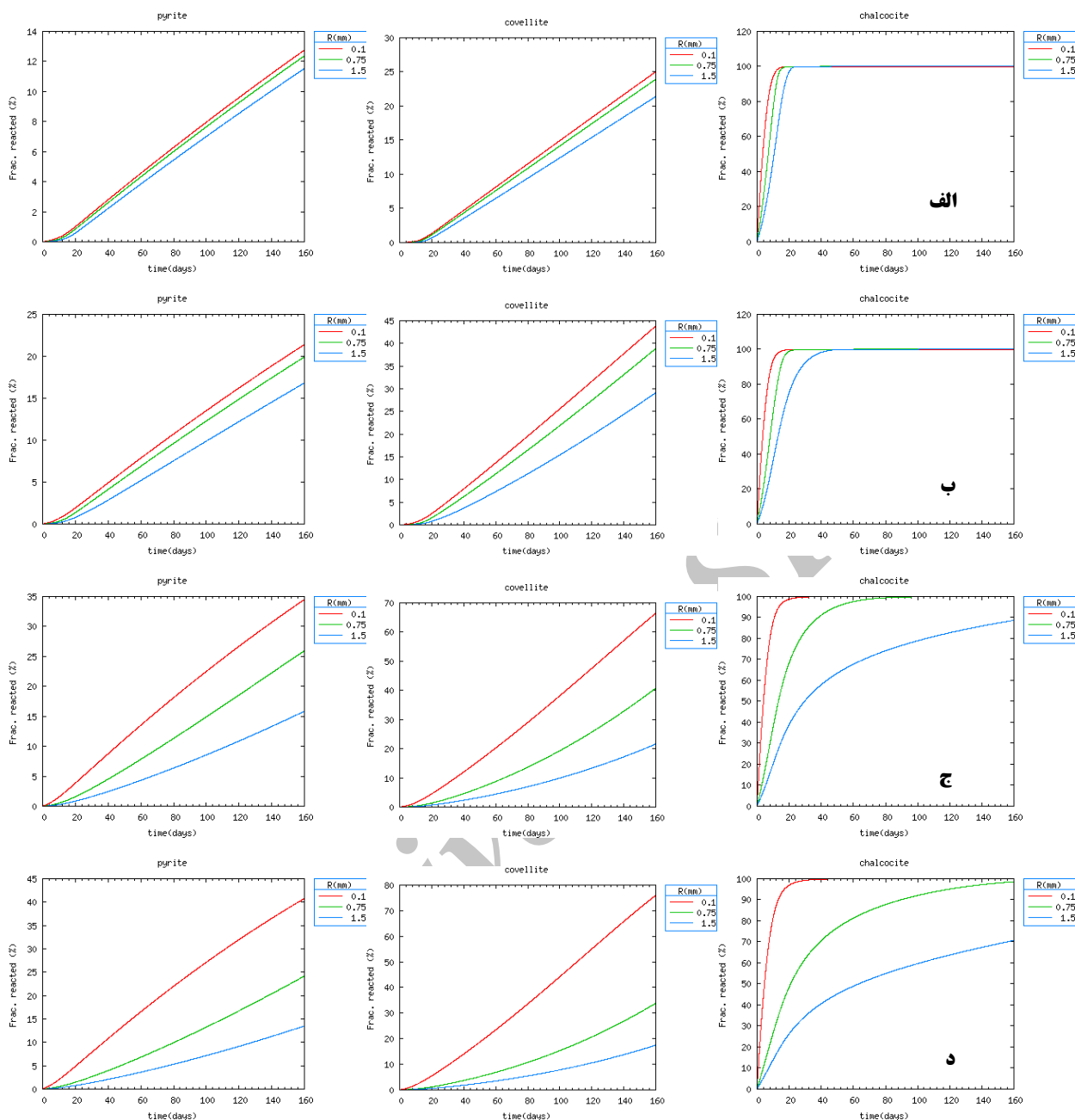
$$\bar{S}_{Fe^{2+}} = \varepsilon_p \sum_j \omega_j S_{Fe^{2+},j} + \varepsilon_b S_{Fe^{2+},bulk} \quad (38)$$



شکل ۶: اثر دما بر میزان انحلال مس بر حسب زمان برای شبیه‌سازی‌های انجام شده در الف)  $15^{\circ}C$ ، ب)  $25^{\circ}C$ ، ج)  $38/6^{\circ}C$  و د)  $45^{\circ}C$

اثر دما در نرخ واکنش کانی‌ها در شکل ۷ نشان داده شده است. همان‌طور که در بخش قبلی مقاله بیان شد، انرژی فعال‌سازی اولین مرحله واکنش لیچینگ کالکوسیت پائین‌تر از مرحله دوم واکنش لیچینگ (کولیت) است ( $E_{Cu_2S} = 23/9 \text{ kJ/mol}$ ) و  $E_{Cu_1.2S} = 97/9 \text{ kJ/mol}$ . از این رو، نرخ لیچینگ کولیت در مقایسه با کالکوسیت به‌طور قابل توجهی با دما افزایش می‌یابد. انرژی فعال‌سازی پیریت همچنین بیشتر از کالکوسیت است ( $E_{FeS_2} = 74/3 \text{ kJ/mol}$ )، از این رو لیچینگ پیریت نسبت به دما حساس‌تر از کالکوسیت است. این موضوع به‌صورت آشکار در شکل ۷ قابل مشاهده است، که پروفایل‌های متوسط تبدیل کالکوسیت، کولیت و پیریت را در کلاس‌های اندازه مختلف با توزیع ابعادی یکسان در  $15^{\circ}C$ ،  $25^{\circ}C$ ،  $38/6^{\circ}C$  و  $45^{\circ}C$  را نشان می‌دهد.

همان‌طور که در شکل ۶ دیده می‌شود، با افزایش دما میزان انحلال مس در طول زمان افزایش می‌یابد. این در حالی‌ست که در دماهای پایین‌تر در ابتدای فرآیند لیچینگ میزان انحلال اولیه بیشتر می‌باشد. با گذشت زمان در دماهای پایین‌تر میزان مس انحلال یافته به شدت کاهش می‌یابد و در نتیجه بازیابی یا استخراج نهایی مس را کاهش می‌دهد. دلیل این امر اینست که فرآیند لیچینگ یک فرآیند حد واسط بوده؛ بدین معنا که در ابتدای فرآیند نفوذ کنترل‌کننده فرآیند لیچینگ می‌باشد (مراحل ۱ و ۵) و با گذشت زمان و نفوذ محلول لیچ در کانستگ انحلال شیمیایی کنترل‌کننده فرآیند می‌باشد (مرحله ۳). زمانی‌که انحلال شیمیایی کنترل‌کننده فرآیند است دما مهم‌ترین عامل در سرعت بخشیدن به سینتیک انحلال (سینتیک مرحله ۳) است. نتایج شبیه‌سازی تصدیق‌کننده مدل‌سازی دما در مراحل قبل بوده و بر منطق فرآیند لیچینگ منطبق است.



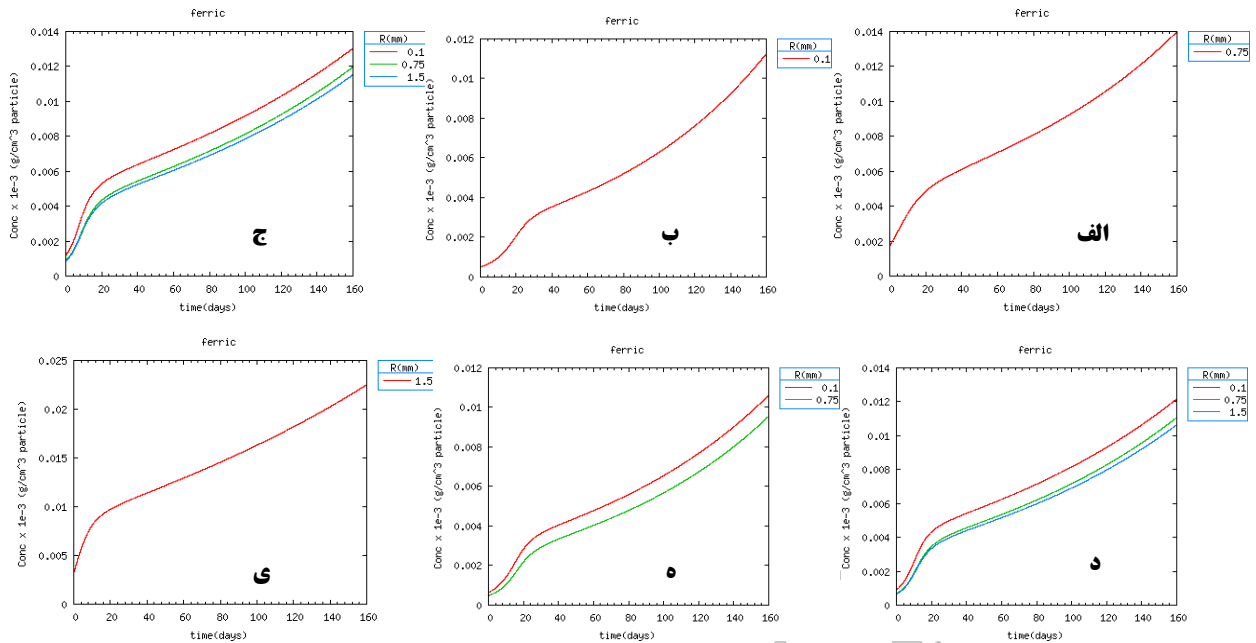
شکل ۷: اثر دما بر میزان متوسط انحلال کانی‌های کانسنگ بر حسب زمان برای شبیه‌سازی‌های انجام شده در الف)  $15^{\circ}\text{C}$ ، ب)  $25^{\circ}\text{C}$ ، ج)  $38/6^{\circ}\text{C}$  و د)  $45^{\circ}\text{C}$

علیرغم پائین بودن دما، را نتیجه می‌دهد. این مطلب بطور واضح از شکل ۷ مشخص می‌شود. عملیات در دمای کمی پائین‌تر (برای مثال  $15^{\circ}\text{C}$ )، نرخ لیچینگ کوولیت را کاهش می‌دهد، بطوریکه اگرچه یون‌های آهن سه‌ظرفیتی توانایی نفوذ در عمق ذره را دارند، کل کوولیت لیچ شده با مقدار لیچ آن در  $38/6^{\circ}\text{C}$  قابل مقایسه نیست. از این رو، بازیابی کل مس در  $15^{\circ}\text{C}$  کمتر است (شکل ۷).

نرخ‌های واکنش کوولیت و پیریت در  $25^{\circ}\text{C}$  در مقایسه با  $38/6^{\circ}\text{C}$  پائین‌تر است. این امر، در اثر کاهش میزان دسترسی یون‌های آهن سه‌ظرفیتی بیشتر برای لیچینگ کوولیت و پیریت در این دمای پائین‌تر می‌باشد. بنابراین، لیچینگ کالکوسیت در دمای  $25^{\circ}\text{C}$  در مقایسه با  $38/6^{\circ}\text{C}$  زودتر کامل می‌شود. از طرف دیگر، کامل شدن زودتر لیچینگ کالکوسیت دلالت بر این دارد که یون‌های آهن سه‌ظرفیتی توانایی نفوذ در عمق ذره را دارند (فرآیند کنترل‌کننده نفوذ) که انحلال بخشی از کوولیت،







شکل ۹: اثر توزیع کلاس اندازه در غلظت یون‌های آهن سه‌ظرفیتی در سطح ذره بصورت نسبت جرمی (الف) یکسان، (ب) ۱:۰:۰، (ج) ۱:۰:۰، (د) ۰:۱:۰، (ه) ۰:۰:۱ و (و) ۰:۰:۲۵، ۰:۰:۲۵، ۰:۱:۵ در دمای بهینه  $38/6^{\circ}\text{C}$

نتایج حساسیت سنجی موید صحت و دقت شبیه‌سازی فرآیند می‌باشند. شایان ذکر است که حساسیت‌سنجی برای پارامترهای نرخ جریان محلول، غلظت سوبسترای ورودی، پارامترهای انتقال جرم، ثابت نرخ آرنیوس، جمعیت باکتریایی ورودی، ماکزیمم نرخ رشد باکتریایی، و حضور اکسیدکننده‌های سولفور نیز انجام شد که نتایج مؤید صحت مدل می‌باشند. به عبارت دیگر حساسیت‌سنجی عوامل مورد مطالعه به نوعی اعتبار سنجی نتایج است.

چارچوبی برای یکپارچگی سیستماتیک فرآیندهای مقیاس ذره در داخل مدل‌های مقیاس توده را پیشنهاد می‌کند. مدل معرف واحد حجم توده، شامل کسر حجمی جامد (ذرات کانسنگ)، و کسر حجمی مایع (فازهای مایع در حال جریان و ساکن) توسعه یافته است. سینتیک مقیاس ذره به‌وسیله گروه‌بندی به کلاس‌های با اندازه‌های مختلف مدل شده است و رابطه واکنش - نفوذ برای هر کلاس اندازه محاسبه شده است. یک فرض منطقی برای فاز ساکن برای مقایسه مقیاس حد واسط با مقیاس توده در نظر گرفته شد. حل مدل‌های موجود با برنامه‌نویسی به روش سیمپسون انجام شد. صحت نتایج به کمک موازنه جرم در پایان شبیه‌سازی بررسی شد. معادلات دیفرانسیلی با مشتقات جزئی حاصله با استفاده از روش تفاضل محدود خطی‌سازی شدند.

شکل ۹ نشان می‌دهد که کمترین غلظت آهن سه‌ظرفیتی در سطح ذرات مربوط به زمانی است که ذرات ریز بالاترین نسبت وزنی (۱۰۰ درصد ذرات با ۰٫۱ میلی‌متر شعاع) را داشته باشند. در این حالت بیشترین غلظت آهن سه‌ظرفیتی در سطح ذرات مربوط به حالتی است که ۱۰۰ درصد ذرات با ۱٫۵ میلی‌متر شعاع (درشت‌ترین ابعاد) باشند. مقدار کمینه و بیشینه غلظت آهن سه‌ظرفیتی در سطح ذرات به ترتیب حدود ۰٫۰۱۵ و ۰٫۰۲۲ گرم بر متر مکعب حجمی سطح ذره بعد از ۱۶۰ روز از شبیه‌سازی می‌باشد.

## ۹. نتیجه‌گیری

هدف این مقاله شبیه‌سازی از طریق توسعه مدل ریاضی برای لیچینگ باکتریایی توده‌ای با توسعه مدل ترکیبی از مقیاس ذره تا توده است. این مدل شامل انتقال، فرآیندهای شیمیایی و باکتریایی در سطح توده‌ای ذرات (خوشه‌ای) کانسنگ با اندازه مختلف می‌باشد. شبیه‌سازی‌های ریاضی به‌منظور بررسی انحلال مس بر روی کانسنگ حاوی کالکوسیت، کوولیت و پیریت در حضور و عدم حضور باکتری‌های اکسیدکننده در طی ۱۶۰ روز عملیاتی انجام شد. ذرات کانسنگ به سه کلاس اندازه به شعاع ۰٫۱mm، ۰٫۷۵mm و ۱٫۵mm با درصد‌های وزنی به ترتیب ۴۵، ۳۵ و ۲۰ درصد طبقه‌بندی شدند. مدل المانی فرض شده

- [8] Dixon, D., Hendrix, J.; 1993; "A general model for leaching of one or more solid reactants from porous ore particles". Metallurgical Transactions B Vol. 24: p. 157-169.
- [9] Dixon, D.G.; 1996; "The multiple convolution integral: a new method for modeling multistage continuous leaching reactors". Chemical engineering science Vol. 51: p. 4759-4767.
- [10] Dixon, D.G., Hendrix, J.L.; 1993; "A mathematical model for heap leaching of one or more solid reactants from porous ore pellets". Metallurgical Transactions B Vol. 24: p. 1087-1102.
- [11] Dixon, D.G., Hendrix, J.L.; 1993; "Theoretical basis for variable order assumption in the kinetics of leaching of discrete grains". AIChE journal Vol. 39: p. 904-907.
- [12] Casas, J.M., Vargas, T., Martínez, J., Moreno, L.; 1998; "Bioleaching model of a copper-sulfide ore bed in heap and dump configurations". Metallurgical and Materials Transactions B Vol. 29: p. 899-909.
- [13] Sidborn, M., Casas, J., Martinez, J., Moreno, L.; 2003; "Two-dimensional dynamic model of a copper sulphide ore bed". Hydrometallurgy Vol. 71: p. 67-74.
- [14] Ojumu, T., Petersen, J., Searby, G., Hansford, G.; 2006; "A review of rate equations proposed for microbial ferrous-iron oxidation with a view to application to heap bioleaching". Hydrometallurgy Vol. 83: p. 21-28.
- [15] Petersen, J.; 2010; "Modelling of bioleach processes: connection between science and engineering". Hydrometallurgy Vol. 104: p. 404-409.
- [16] Petersen, J., Dixon, D.; 2007; "Modelling zinc heap bioleaching". Hydrometallurgy Vol. 85: p. 127-143.
- [17] Petersen, J., Dixon, D.G.; 2007; "Modeling and optimization of heap bioleach processes", Biomining, Springer, pp. 153-176.
- [18] Sheikhzadeh, G., Mehrabian, M., Mansouri, S., Sarrafi, A.; 2005; "Computational modelling of unsaturated flow of liquid in heap leaching—using حداکثر خطای نسبی در محاسبات موازنه جرم (برای تمام شبیه سازی) کمتر از ۰,۷ درصد بود. نتایج نشان داد که سینتیک انحلال کالکوسیت از کوولیت و کوولیت از پیریت بیشتر است. برای حالت باکتریایی میزان انحلال کالکوسیت در اندازه شعاع ذرات ۰,۱mm، ۰,۷۵mm و ۱,۵mm به ترتیب ۱۰۰٪ (بعد از ۳۸ روز)، ۱۰۰٪ (بعد از ۱۱۰ روز)، و ۸۷٪ (بعد از ۱۶۰ روز) به دست آمد. در مورد کوولیت برای این اندازه ذرات در طی ۱۶۰ روز به ترتیب ۳۵، ۶۰ و ۱۸ درصد انحلال حاصل شد. میزان انحلال پیریت نیز ۳۳، ۲۴ و ۱۴ درصد به طور تقریبی ناشی از نتایج شبیه سازی محاسبه شد. حساسیت سنجی عواملی مانند دما و توزیع اندازه ذرات نیز بر روی پاسخ بررسی شد. نتایج شبیه سازی روند صحیحی با در نظر گرفتن توزیع اندازه ذره در بازیابی مس از خود نشان دادند. اساساً کار انجام گرفته زمینه ای برای تحقیقات آینده است.
- ### مراجع
- [1] Dixon, D.G.; 2003; "Heap leach modeling- the current state of the art", Hydrometallurgy 2003: 5 th International Symposium Honoring Professor Ian M. Ritchie, pp. 289-314.
- [2] Cathles, L., Apps, J.; 1975; "A model of the dump leaching process that incorporates oxygen balance, heat balance, and air convection". Metallurgical Transactions B Vol. 6: p. 617-624.
- [3] Davis, G., Ritchie, A.; 1986; "A model of oxidation in pyritic mine wastes: part 1 equations and approximate solution". Applied Mathematical Modelling Vol. 10: p. 314-322.
- [4] Davis, G., Ritchie, A.; 1987; "A model of oxidation in pyritic mine wastes: part 3: import of particle size distribution". Applied mathematical modelling Vol. 11: p. 417-422.
- [5] Pantelis, G., Ritchie, A.; 1991; "Macroscopic transport mechanisms as a rate-limiting factor in dump leaching of pyritic ores". Applied mathematical modelling Vol. 15: p. 136-143.
- [6] Pantelis, G., Ritchie, A.; 1992; "Rate-limiting factors in dump leaching of pyritic ores". Applied Mathematical Modelling Vol. 16: p. 553-560.
- [7] Bartlett, R.W.; 1992; "Simulation of ore heap leaching using deterministic models". Hydrometallurgy Vol. 29: p. 231-260.

- [28] McBride, D., Cross, M., Gebhardt, J.; 2012; "Heap leach modeling employing CFD technology: A 'process' heap model". Minerals Engineering Vol. 33: p. 72-79.
- [29] McBride, D., Gebhardt, J., Cross, M.; 2012; "A comprehensive gold oxide heap leach model: Development and validation". Hydrometallurgy Vol. 113: p. 98-108.
- [30] Gálvez, E.D., Moreno, L., Mellado, M.E., Ordóñez, J.I., Cisternas, L.A.; 2012; "Heap leaching of caliche minerals: Phenomenological and analytical models—Some comparisons". Minerals Engineering Vol. 33: p. 46-53.
- [31] Mellado, M.E., Casanova, M.P., Cisternas, L.A., Gálvez, E.D.; 2011; "On scalable analytical models for heap leaching". Computers & chemical engineering Vol. 35: p. 220-225.
- [32] Mellado, M.E., Cisternas, L.A.; 2008; "An analytical–numerical method for solving a heap leaching problem of one or more solid reactants from porous pellets". Computers & Chemical Engineering Vol. 32: p. 2395-2402.
- [33] Mellado, M.E., Cisternas, L.A., Gálvez, E.D.; 2009; "An analytical model approach to heap leaching". Hydrometallurgy Vol. 95: p. 33-38.
- [34] Mellado, M.E., Gálvez, E.D., Cisternas, L.A.; 2011; "On the optimization of flow rates on copper heap leaching operations". International Journal of Mineral Processing Vol. 101: p. 75-80.
- [35] Mellado, M.E., Gálvez, E.D., Cisternas, L.A.; 2012; "Stochastic analysis of heap leaching process via analytical models". Minerals Engineering Vol. 33: p. 93-98.
- [36] Zambra, C., Muñoz, J., Moraga, N.; 2015; "A 3D coupled model of turbulent forced convection and diffusion for heat and mass transfer in a bioleaching process". International Journal of Heat and Mass Transfer Vol. 85: p. 390-400.
- [37] Yaghobi Moghaddam, M.; 2010; "Optimization of the operational parameters for a copper bioleaching from heap 3 ore at Sarcheshmeh", Shahid Bahonar University of Kerman, Kerman, Iran.
- the results of column tests to calibrate the model". International Journal of Heat and Mass Transfer Vol. 48: p. 279-292.*
- [19] Leahy, M., Davidson, M., Schwarz, M.; 2007; "A model for heap bioleaching of chalcocite with heat balance: mesophiles and moderate thermophiles". Hydrometallurgy Vol. 85: p. 24-41.
- [20] Leahy, M.J., Davidson, M.R., Schwarz, M.P.; 2005; "A model for heap bioleaching of chalcocite with heat balance: Bacterial temperature dependence". Minerals Engineering Vol. 18: p. 1239-1252.
- [21] Leahy, M.J., Schwarz, M.P., Davidson, M.R.; 2006; "An air sparging CFD model for heap bioleaching of chalcocite". Applied mathematical modelling Vol. 30: p. 1428-1444.
- [22] Bouffard, S.C.; 2008; "Application of the HeapSim model to the heap bioleaching of the Pueblo Viejo ore deposit". Hydrometallurgy Vol. 93: p. 116-123.
- [23] Bouffard, S.C., Dixon, D.G.; 2009; "Modeling pyrite bioleaching in isothermal test columns with the HeapSim model". Hydrometallurgy Vol. 95: p. 215-226.
- [24] Bouffard, S.C., Dixon, D.G.; 2009; "Modeling the performance of pyritic biooxidation heaps under various design and operating conditions". Hydrometallurgy Vol. 95: p. 227-238.
- [25] Vilcáez, J., Inoue, C.; 2009; "Mathematical modeling of thermophilic bioleaching of chalcopyrite". Minerals Engineering Vol. 22: p. 951-960.
- [26] Bennett, C., McBride, D., Cross, M., Gebhardt, J.; 2012; "A comprehensive model for copper sulphide heap leaching: Part 1 basic formulation and validation through column test simulation". Hydrometallurgy Vol. 127: p. 150-161.
- [27] Cross, M., Bennett, C., Croft, T., McBride, D., Gebhardt, J.; 2006; "Computational modeling of reactive multi-phase flows in porous media: Applications to metals extraction and environmental recovery processes". Minerals Engineering Vol. 19: p. 1098-1108.

- temperature on the rates of iron and sulfur oxidation by selected bioleaching Bacteria and Archaea: application of the Ratkowsky equation". Minerals Engineering Vol. 18: p. 1304-1314.
- [46] Zwietering, M., De Koos, J., Hasenack, B., De Witt, J., Van't Riet, K.; 1991; "Modeling of bacterial growth as a function of temperature". Applied and Environmental Microbiology Vol. 57: p. 1094-1101.
- [47] Jaynes, D., Pionke, H., Rogowski, A.; 1984; "Acid mine drainage from reclaimed coal strip mines 2. Simulation results of model". Water Resources Research Vol. 20: p. 243-250.
- [48] Jaynes, D., Rogowski, A., Pionke, H.; 1984; "Acid mine drainage from reclaimed coal strip mines 1. Model description". Water Resources Research Vol. 20: p. 233-242.
- [49] Doulati Ardejani, F., Malakooti, S.J., Shafaei, S.Z., Shahhosseini, M.; 2014; "A numerical multi-component reactive model for pyrite oxidation and pollutant transportation in a pyritic, carbonate-rich coal waste pile in northern Iran". Mine Water and the Environment Vol. 33: p. 121-132.
- [50] Doulati Ardejani, F., Singh, R., Baafi, E.; 2004; "Numerical modelling of ion-exchanging solute transport in groundwater systems". The PHOENICS Journal: Computational Fluid Dynamics & Its Applications Vol. 16: p. 18.
- [51] Doulati Ardejani, F., Singh, R., Baafi, E.; 2004; "Use of PHOENICS for solving one dimensional mine pollution problems". The PHOENICS Journal of Computational Fluid Dynamics and its Applications Vol. 16: p. 1-23.
- [38] Yaghobi Moghaddam, M., Asgari, A., Yazdani, H.; 2009; "Exact travelling wave solutions for the generalized nonlinear Schrödinger (GNLS) equation with a source by extended tanh-coth, sine-cosine and Exp-function methods". Applied Mathematics and Computation Vol. 210: p. 422-435.
- [39] Yaghobi Moghaddam, M., Ranjbar, M., Manafi, Z., Schaffie, M., Jahani, M.; 2012; "Modeling and optimizing bacterial leaching process parameters to increase copper extraction from a low-grade ore". Minerals Engineering Vol. 32: p. 5-7.
- [40] Dixon, D., Petersen, J.; 2004; "Modeling the dynamics of heap bioleaching for process improvement and innovation", Proceeding of the International Colloquium Hydrometallurgical on Processing of Copper Sulfides, pp. 13-45.
- [41] Roman, R.J., Olsen, C.; 1974; "Theoretical scale-up of heap leaching", Solution Mining Symposium, AIME, pp. 211-229.
- [42] Dixon, D., Petersen, J.; 2003; "Comprehensive modelling study of chalcocite column and heap bioleaching", Copper, pp. 493-516.
- [43] Petersen, J., Dixon, D.; 2002; "Systematic modelling of heap leach processes for optimisation and design", EPD Congress 2002 and Fundamentals of Advanced Materials for Energy Conversion as held at the 2002 TMS Annual Meeting, pp. 757-771.
- [44] Ratkowsky, D., Lowry, R., McMeekin, T., Stokes, A., Chandler, R.; 1983; "Model for bacterial culture growth rate throughout the entire biokinetic temperature range". Journal of bacteriology Vol. 154: p. 1222-1226.
- [45] Franzmann, P., Haddad, C., Hawkes, R., Robertson, W., Plumb, J.; 2005; "Effects of

---

<sup>i</sup> Bulk Scale

<sup>ii</sup> GNU Plot

<sup>iii</sup> Scipy