

MODELAMIENTO MATEMÁTICO Y SIMULACIÓN NUMÉRICA DE UN REACTOR  
ANAEROBIO EN LECHO FLUIDIZADO PARA TRATAMIENTO DE AGUAS  
RESIDUALES

EDUARDO DEL RÍO AMADOR

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER  
FACULTAD DE INGENIERÍAS FISCOQUÍMICAS  
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA  
BUCARAMANGA

2009

MODELAMIENTO MATEMÁTICO Y SIMULACIÓN NUMÉRICA DE UN REACTOR  
ANAEROBIO EN LECHO FLUIDIZADO PARA TRATAMIENTO DE AGUAS  
RESIDUALES

EDUARDO DEL RÍO AMADOR

Trabajo de Grado para optar el título de Ingeniero Químico

DIRECTOR

PH.D. MARIANNY YAJAIRA COMBARIZA

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER  
FACULTAD DE INGENIERÍAS FISCOQUÍMICAS  
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA  
BUCARAMANGA

2009

## **DEDICATORIA**

A mi madre, quien ha hecho más méritos que yo en la realización de mi profesión.

A mi padre y hermana, por su incondicionalidad, en el momento de mi vida en que más la necesitaba.

## **AGRADECIMIENTOS**

A la doctora Marianny Yajaira Combariza, directora del CEIAM, por su importante cooperación.

A Marisol Vergara, Ingeniera Química, por apoyo y buena voluntad.

A todo el personal del CEIAM, por haber valorado siempre mi trabajo.

**TÍTULO:** MODELAMIENTO MATEMÁTICO Y SIMULACIÓN NUMÉRICA DE UN REACTOR ANAEROBIO EN LECHO FLUIDIZADO PARA TRATAMIENTO DE AGUAS RESIDUALES\*

**AUTOR:** EDUARDO DEL RIO AMADOR\*\*

**PALABRAS CLAVE:** Reactor Anaerobio, Lecho Fluidizado, Modelamiento Matemático, Simulación, FLUENT.

En el presente trabajo se propuso escoger entre los modelos estequiométricos y cinéticos más completos disponibles en la literatura, y acoplarlos con técnicas de dinámica computacional de fluidos para simular un reactor anaerobio en lecho fluidizado. El objetivo del trabajo es describir la variación espacial de los compuestos presentes y los patrones de flujo dentro del reactor.

Se simularon tres casos de estudio. El caso 1 es un agua residual doméstica, el caso 2 un agua residual rica en proteínas, y el caso 3 un agua residual con alto contenido de lípidos. Cada caso de estudio fue evaluado utilizando 3 tiempos de retención hidráulica. El modelo predice eficiencias de remoción entre 80% y 90% para el caso 1; entre 76% y 90% para el caso 2, y entre 55% y 65% para el caso 3. En todos los casos la disminución en el tiempo de retención hidráulica tuvo un efecto de disminución sobre la eficiencia de remoción.

Contrastando los datos entregados por el modelo matemático para el caso 3 con valores experimentales encontrados en el trabajo de Borja y Banks sobre un reactor anaerobio en lecho fluidizado para tratar efluentes de industrias de extracción de aceites vegetales, puede verse que el modelo predice el potencial de biogás dentro de órdenes de magnitud aceptables: entre 15 y 20,4 L / día para el modelo y entre 18 y 24 L / día para el trabajo experimental. Sin embargo, las concentraciones de metano predichas por el modelo están sobreestimadas: entre 68 y 70 % para el modelo y 50 y 64 % para el trabajo experimental. También las concentraciones de ácidos grasos volátiles están subestimadas: entre 100 y 400 mg / L en el modelo y entre 300 y 1200 mg / L en el trabajo experimental.

---

\* Proyecto de Grado

\*\* Facultad de Ingenierías Físicoquímicas. Escuela de Ingeniería Química.

Directora: Ph.D Marianny Yajaira Combariza.

**TÍTULO:** MATHEMATICAL MODELING AND NUMERICAL SIMULATION OF AN ANAEROBIC FLUIDIZED BED REACTOR FOR WASTEWATER TREATMENT\*

**AUTHOR:** EDUARDO DEL RIO AMADOR\*\*

**KEY WORDS:** Anaerobic reactor, fluidized bed, mathematical modeling, simulation, FLUENT.

The present work was developed in order to choose among the most complete stoichiometric and kinetic models available in the literature, and coupled them with techniques of computational fluid dynamics to simulate an anaerobic fluidized bed reactor. The purpose was to describe the spatial variation of present components and flow patterns inside the reactor.

Three case studies were made. Case 1 a domestic wastewater, Case 2 a high protein containing wastewater, and Case 3 a high lipid containing wastewater. Each case was evaluated at three different hydraulic retention times. The model predicts removal efficiencies between 80%-90% for case 1, 76%-90% for case 2, and 55%-65% for case 3. In all cases decreasing hydraulic retention time decreased removal efficiencies.

Comparing data obtained from the simulations for case 3 with experimental values from Borja and Banks, an anaerobic fluidized bed treating palm oil mill effluents, it can be seen that the model predicts biogas fluxes with reasonable acceptance: 15-20.4 L/day for the simulations, and 18-24 L/day in the experimental work. Nevertheless, methane concentrations predicted by the model are overestimated: 68%-70% for the simulations, and 50-64% for the experimental work. Also, volatile fatty acid concentrations are underestimated: 100-400 mg / L for the simulations and 300-1200 mg / L for the experimental work.

---

\* Proyecto de Grado

\*\* Facultad de Ingenierías Físicoquímicas. Escuela de Ingeniería Química.

Directora: Ph.D Marianny Yajaira Combariza.

## TABLA DE CONTENIDO

	<b>pág</b>
1. INTRODUCCIÓN	1
2. CONCEPTOS TEÓRICOS	2
2.1. MODELAMIENTO MATEMÁTICO DE REACTORES ANAEROBIOS	2
2.1.1. ECUACIONES DE CONSERVACIÓN _____	2
2.1.2. CONDICIONES DE FRONTERA _____	3
2.1.3. PROCESO DE DIGESTION ANEROBIA _____	4
2.1.4. CINETICA DE LA DIGESTION ANAEROBIA _____	5
2.2. MODELAMIENTO DEL FENOMENO DE FLUIDIZACION MEDIANTE LA TEORIA CINETICA DEL FLUJO GRANULAR _____	6
3. DESARROLLO	9
3.1. METODOLOGIA DE MODELAMIENTO	9
3.1.1. FENOMENOLOGIA DEL PROCESO _____	9
3.1.2. DESARROLLO DEL MODELO GENERICO _____	10
3.1.2.1. ESTEQUIOMETRIA _____	10

3.1.2.2.	ECUACIONES DE CONSERVACION DE MASA _____	10
3.1.2.3.	ECUACIONES DE CONSERVACION DE MOMENTO LINEAL _____	11
3.1.3.	DESARROLLO DE MODELOS AUXILIARES _____	11
3.1.3.1.	TRANSFERENCIA DE MASA GAS LÍQUIDO _____	11
3.1.3.2.	ECUACIONES CINETICAS _____	12
3.1.3.3.	VELOCIDADES DE REACCION _____	12
3.1.3.4.	INTERCAMBIO DE MOMENTO LINEAL ENTRE FASES _____	13
3.1.4.	SUPOSICIONES Y SIMPLIFICACIONES _____	13
3.1.5.	SISTEMA DE CONTROL Y CONDICIONES DE FRONTERA _____	14
3.2.	SOLUCION NUMERICA	15
3.2.1.	IMPLEMENTACION EN EL SOFTWARE FLUENT 6.3.26 _____	15
3.2.2.	SIMULACION DE TRES CASOS DE ESTUDIO _____	15
4.	RESULTADOS Y ANALISIS	16
5.	CONCLUSIONES	26
6.	BIBLIOGRAFIA	27
	ANEXOS	28

## LISTA DE TABLAS

	pág
Tabla 1. Parámetros utilizados en las distintas ecuaciones cinéticas	38
Tabla 2. Matriz de velocidades de reacción	39
Tabla 3. Propiedades relevantes de las fases líquida y sólida	45
Tabla 4. Condiciones de frontera	45
Tabla 5. Condiciones iniciales de concentración y fracción másica para los tres casos de estudio.	46
Tabla 6. Concentración inicial de los distintos grupos tróficos	46

## LISTA DE FIGURAS

	pág
Figura 1. Perfiles de fracción másica para monómeros y ácido oleico en caso de estudio 1	17
Figura 2. Perfiles de concentración en la dinámica de formación de biogás para caso de estudio 1	18
Figura 3. Perfiles de fracción másica para monómeros y ácido oleico en caso de estudio 2	19
Figura 4. Perfiles de concentración en la dinámica de formación de biogás para caso de estudio 2	20
Figura 5. Perfiles de fracción másica para monómeros y ácido oleico en caso de estudio 3	21
Figura 6. Perfiles de concentración en la dinámica de formación de biogás para caso de estudio 3	22
Figura 7. Eficiencia de remoción de carbono total para los 3 casos de estudio evaluados en 3 tiempos de retención hidráulica	23
Figura 8. Potencial de generación de biogás predicho por el modelo matemático para los 3 casos de estudio, evaluados en 3 tiempos de retención hidráulica	24
Figura 9. Diagrama de la configuración física del sistema	24

## LISTA DE ANEXOS

	pág
Anexo A Modelo Estequiométrico	29
Anexo B Ecuaciones de conservación de masa para especies presentes en el sistema	32
Anexo C Ecuaciones Cinéticas y parámetros correspondientes	36
Anexo D Matriz de Velocidades de reacción	39
Anexo E Ecuaciones de conservación de momento lineal	41
Anexo F Sistema de control, condiciones iniciales y de frontera	44
Anexo G Algoritmo de solución y código de programación	47

## NOMENCLATURA

### Letras latinas

$A$	Área específica de transferencia de masa [ $\text{m}^2$ ]
$a_i$	Coefficiente en el centroide $i$ en las ecuaciones discretas
$b$	Término independiente en las ecuaciones discretas
$C_D$	Coefficiente de arrastre en la ecuación de Ergun [adimensional]
$D_i$	Difusividad del componente $i$ [ $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$ ]
$d_s$	Diámetro medio Sauter de la fase sólida [m]
$e_{ss}$	Coefficiente de restitución [adimensional]
$F_j$	Flujo másico de la corriente $j$ [ $\text{kg s}^{-1}$ ]
$F_k$	Intercambio de momento entre la fase $k$ y el resto de fases [ $\text{kg m}^{-2} \text{s}^{-2}$ ]
$F_g$	Fuentes adicionales de momento [ $\text{kg m}^{-2} \text{s}^{-2}$ ]
$g$	Aceleración gravitacional [ $\text{m s}^{-2}$ ]
$g_{O,ss}$	Función de distribución radial [adimensional]
$I$	Concentración de componente inhibidor [ $\text{kg m}^{-3}$ ]
$\bar{I}$	Tensor identidad
$K_i$	Constante de saturación componente $i$ [ $\text{kg m}^{-3}$ ]
$K_H$	Constante de Henry [ $\text{kg m}^{-3} \text{Pa}^{-1}$ ]
$K_{kq}$	Coefficiente de intercambio de momento entre la fase $k$ y las demás fases $q$ [ $\text{kg m}^{-3} \text{s}^{-1}$ ]
$k_L$	Coefficiente de transferencia de masa gas-líquido [ $\text{m s}^{-1}$ ]
$k_{\Theta s}$	Conductividad de temperatura granular [ $\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$ ]
$M_i$	Peso molecular del componente $i$ [ $\text{kg kmol}^{-1}$ ]
$P_s$	Presión ejercida por la fase sólida [Pa]

$P_{CO_2}$	Presión parcial de CO <sub>2</sub> [Pa]
$p$	Presión total [Pa]
$Re_k$	Número de Reynolds de la fase $k$ [adimensional]
$r_S$	Velocidad de consumo de sustrato S [kg m <sup>-3</sup> s <sup>-1</sup> ]
$r_X$	Velocidad de crecimiento de biomasa X [kg m <sup>-3</sup> s <sup>-1</sup> ]
$S$	Concentración de sustrato S [kg m <sup>-3</sup> ]
$S_\phi$	Término fuente de la cantidad $\phi$ [kg m <sup>-3</sup> s <sup>-1</sup> ]
$v_i$	Velocidad lineal del componente $i$ [m s <sup>-1</sup> ]
$X$	Concentración de biomasa X [kg m <sup>-3</sup> ]
$Y_{X/S}$	Coefficiente de rendimiento biomasa-sustrato [kg kg <sup>-1</sup> ]

### Letras griegas

$\alpha_k$	Fracción de volumen de la fase $k$ [m <sup>3</sup> m <sup>-3</sup> ]
$\alpha_{s,max}$	Fracción de volumen máxima de la fase $k$ [m <sup>3</sup> m <sup>-3</sup> ]
$\Phi_{ls}$	Intercambio de energía entre las fases fluido-sólido [kg m <sup>-1</sup> s <sup>-3</sup> ]
$\phi$	Cantidad variable
$\Gamma$	Coefficiente de transporte molecular (viscosidad o difusividad)
$\gamma_{\Theta_s}$	Disipación de energía por colisiones [kg m <sup>-1</sup> s <sup>-3</sup> ]
$\lambda_s$	Viscosidad aglomerada de la fase sólida [kg m <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> ]
$\mu_{max}$	Velocidad específica de crecimiento de microorganismos [s <sup>-1</sup> ]
$\mu_k$	Viscosidad de la fase $k$ [kg m <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> ]
$\Pi_k$	Tensor de esfuerzos de la fase $k$ [Pa m <sup>-1</sup> ]
$\Theta_s$	Temperatura granular de las partículas sólidas [m <sup>2</sup> s <sup>-2</sup> ]
$\rho_k$	Densidad de la fase $k$ [kg m <sup>-3</sup> ]
$\omega_i$	Fracción másica del componente $i$ [m <sup>3</sup> m <sup>-3</sup> ]

$\psi_{CO_2}$  Velocidad de transferencia de masa de  $CO_2$  [ $kg\ m^{-3}\ s^{-1}$ ]

## Subíndices

AB	Acetógenos sobre Ácido Butírico
AL	Acetógenos a partir de LCFA (Oleato)
AM	Aminoácidos
AP	Acetógenos sobre Ácido Propiónico
AV	Acetógenos sobre Ácido Valérico
CH <sub>4</sub>	Metano
CO <sub>2</sub>	Dióxido de Carbono
FA	Fermentadores acidógenos a partir de Aminoácidos
FG	Fermentadores acidógenos a partir de Glucosa
G	Glucosa
<i>g</i>	Relativo a la fase gaseosa
HAA	Acido Acético
HAB	Acido Butírico
HAP	Acido Propiónico
HAV	Acido Valérico
HL	Hidrolizadores de Lípidos
H <sub>2</sub> O	Agua
H <sub>2</sub> S	Acido Sulfhídrico
L	Lípidos (Gliceroltrioleato)
<i>l</i>	Relativo a la fase líquida
MA	Metanógenos sobre Ácido Acético
NH <sub>3</sub>	Nitrógeno Amoniacal
OL	Oleato (LCFA)
<i>s</i>	Relativo a la fase sólida

## 1. INTRODUCCIÓN

Los procesos anaerobios se han popularizado en las últimas décadas como alternativas para el tratamiento de efluentes industriales debido a las ventajas económicas que presentan y a su potencial de generación de biogás como recurso energético. Varios estudios experimentales (véase referencias 3 y 6) prueban que los reactores anaerobios en lecho fluidizado presentan las mejores oportunidades para cumplir con tales propósitos, debido a sus cortos tiempos de retención y su elevado potencial de generación de biogás. El modelamiento matemático de procesos en ingeniería química es una metodología que permite evaluar el comportamiento de sistemas, ahorrando imponderablemente recursos y tiempo. No obstante los reactores anaerobios son sistemas de elevada complejidad y altamente susceptibles a fallas operativas. Hasta la fecha se han desarrollado numerosos modelos matemáticos para describir el funcionamiento de procesos anaerobios, cada uno con variables niveles de sofisticación, según los parámetros utilizados para monitorear el proceso (véase referencia 7).

En el presente trabajo se propuso escoger entre los modelos estequiométricos y cinéticos más completos disponibles en la literatura, y acoplarlos con técnicas de dinámica computacional de fluidos para simular un reactor anaerobio en lecho fluidizado. El objetivo del trabajo es describir la variación espacial de los compuestos presentes y los patrones de flujo dentro del reactor, con el mayor nivel de complejidad que permitan los recursos computacionales disponibles dentro del alcance de un trabajo de pregrado.

En resumen, el modelo desarrollado predice la variación de especies y su sensibilidad a la presencia de compuestos inhibidores. El potencial de generación de biogás entregado es acorde con datos experimentales encontrados en la literatura (véase referencia 3). El modelo sobreestima las concentraciones de metano, y subestima las concentraciones de ácidos grasos volátiles.

## 2. CONCEPTOS TEÓRICOS

### 2.1 MODELAMIENTO MATEMÁTICO DE REACTORES ANAEROBIOS

El presente trabajo realiza el modelamiento del reactor anaerobio mediante ecuaciones de conservación de masa, momento lineal y ecuaciones auxiliares. Se plantean balances de masa para describir la variación de las especies presentes. Los patrones de flujo dentro del reactor son descritos por la ecuación de conservación de momento lineal. Adicionalmente se utiliza un modelo cinético y un modelo estequiométrico para definir las velocidades de reacción de las distintas especies y expresar las relaciones de conversión de unas especies en otras, respectivamente.

#### 2.1.1 ECUACIONES DE CONSERVACIÓN

En general, las ecuaciones de conservación de masa y energía pueden expresarse mediante la ecuación de transporte escalar, conocida comúnmente como ecuación de Navier-Stokes:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \nabla \cdot (\rho\mathbf{v}_i\phi) = \nabla \cdot (\Gamma \cdot \nabla\phi) + S_\phi \quad (1)$$

donde  $\rho\phi$  es la cantidad conservativa,  $\Gamma$  es el coeficiente de transporte del proceso considerado, y  $S_\phi$  es un termino fuente de la cantidad conservativa. Cuando la cantidad conservativa es la masa, y el flujo es multicomponente, la ecuación (1) se expresa:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\omega_i) + \nabla \cdot (\rho\omega_i\vec{v}) = \nabla \cdot (\rho D_i \nabla\omega_i) + \sum_{i=1}^n S_i \quad (2)$$

donde  $\omega_i$  es la fracción másica de la especie  $i$ ,  $D_i$  es el coeficiente de difusión (difusividad) de la especie  $i$ , y  $S_i$  es el término fuente de la especie  $i$ .

Para cualquier tipo de reactor, los patrones de flujo los determina el campo de velocidades, el cual se obtiene resolviendo la ecuación de conservación de momento lineal:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi \cdot \vec{v}_i) + \nabla \cdot (\rho\phi \cdot \vec{v}_i \vec{v}_i) = -\nabla p - \nabla \cdot \Pi + \rho g \quad (3)$$

donde  $\Pi$  es el tensor de esfuerzos, que representa la velocidad de ganancia de momento lineal.

### 2.1.2 CONDICIONES DE FRONTERA

Las condiciones de frontera representan la influencia de los alrededores sobre el sistema de control. En el presente trabajo se utilizaron los siguientes tipos de condiciones de frontera:

- Condiciones en la entrada: Donde se asume conocido el valor de la velocidad (o la presión), temperatura y composición de la corriente de fluido entrante.
- Condiciones a la salida: Donde los gradientes normales a tal frontera son cero para todas las variables excepto la presión.
- Condiciones en las paredes: En paredes impermeables, aisladas térmicamente, o inertes químicamente, los gradientes se fijan a cero (condición de cero flujo).

### 2.1.3 PROCESO DE DIGESTIÓN ANAEROBIA

Consiste en la oxidación progresiva de materia orgánica mediante la acción de consorcios de microorganismos que metabolizan los compuestos orgánicos, hasta la formación de ácidos orgánicos volátiles (AGVs), metano y dióxido de carbono<sup>3</sup>. El proceso ocurre a través de distintas etapas que se describen a continuación.

**Hidrólisis de biopolímeros:** Implica tanto la solubilización de la materia insoluble como la degradación biológica de polímeros orgánicos a sus monómeros constituyentes. Esta hidrólisis es realizada por enzimas extracelulares, también por reacciones químicas.

**Acidogénesis:** Durante la fase de acidogénesis la materia orgánica disuelta es degradada principalmente a ácidos grasos de cadena larga, de cadena corta y a alcoholes por efecto de una población microbiana heterogénea.

**Acetogénesis:** La fase de acetogénesis, se refiere a la oxidación de ácidos grasos de cadenas larga (LCFA) y algunos de cadena corta (valérico, butírico y propiónico) hasta ácido acético.

**Metanogénesis:** Consiste en la conversión de una fuente de carbono (principalmente ácido acético) hasta metano mediante la acción de bacterias metanogénicas.

---

<sup>3</sup> Gavala, Hariklia et al. Kinetics and modeling of anaerobic digestion process. En: Advances in Biochemical Engineering. Vol. 81, 2003; pp. 57-93.

## 2.1.4 CINÉTICA DE LA DIGESTIÓN ANAEROBIA

El crecimiento de microorganismos es descrito la mayoría de las veces por expresiones matemáticas del tipo de la ecuación (4), sugerida por Monod<sup>4</sup> para la velocidad de crecimiento microbiano,

$$r_X = \frac{\mu_{\max} \cdot S}{S + K_S} \cdot X \quad (4)$$

donde S es la concentración de sustrato, K<sub>s</sub> es la constante de saturación, X es la concentración de microorganismos, y μ<sub>max</sub> es la velocidad de crecimiento específico de los microorganismos. A partir de esta ecuación puede expresarse la velocidad de consumo de sustrato:

$$r_S = \frac{1}{Y_{X/S}} \frac{\mu_{\max} \cdot S}{S + K_S} \cdot X \quad (5)$$

donde Y<sub>X/S</sub> es el coeficiente de rendimiento biomasa-sustrato, que indica la cantidad de biomasa sintetizada por unidad de sustrato consumido.

En la digestión anaerobia muchos factores pueden inhibir el proceso, especialmente la etapa de metanogénesis. Las expresiones matemáticas más utilizadas que consideran cinética de inhibición son las ecuaciones (6) y (7), la primera es una ecuación de Haldane, introducida por Andrews<sup>5</sup>, la segunda es una ecuación de inhibición no competitiva, introducida por Ierusalimsky<sup>6</sup>,

---

<sup>4</sup> Monod, Jacques. Ann Rev Microbiol, 1949; 3:371

<sup>5</sup> Andrews J.F.J Sanit Engng Div Am Soc Civ Engrs, 1969; SA1:95

<sup>6</sup> Ierusalimsky N.D. Bottle-necks in metabolism as growth rate controlling factors. In: Powell EO, Evans CGT, Strange RE, Tempest DW (eds), Microbial Physiology and Continuous Culture, 3rd International Symposium. Her Majesty's Stationery Office, London, 1967

$$\mu = \mu_{\max} \cdot \frac{1}{\frac{K_S}{S} + \frac{I}{K_I} + 1} \quad (6)$$

$$\mu = \mu_{\max} \frac{S}{S + K_S} \cdot \frac{K_I}{K_I + 1} \quad (7)$$

donde  $K_I$  es la constante de inhibición, e  $I$  representa la concentración del inhibidor. La ecuación de Haldane describe mejor la inhibición por sustrato, mientras que la ecuación de inhibición no competitiva describe mejor la inhibición por producto.

## 2.2 MODELAMIENTO DEL FENÓMENO DE FLUIDIZACIÓN MEDIANTE LA TEORÍA CINÉTICA DEL FLUJO GRANULAR

La teoría cinética del flujo granular es el enfoque más riguroso para modelar flujos sólido-fluido. Está basado en las similitudes entre el flujo de materiales granulares (población de partículas) y el movimiento de las moléculas de un gas cuando se consideran esferas rígidas. Este tratamiento utiliza los resultados clásicos de la teoría cinética de los gases para predecir la forma de las ecuaciones de transporte para el flujo de un material granular<sup>7</sup>.

Se inicia considerando una fracción de volumen de una fase  $k$ ,  $\alpha_k$ , en cualquier volumen de control y en cualquier instante de tiempo. De manera que para  $n$  fases,

$$\sum_{k=1}^n \alpha_k = 1.0 \quad (8)$$

La ecuación de continuidad para la fase  $k$  es,

---

<sup>7</sup> Ranade, Vivek. Computational flow modeling for chemical reactor engineering. 1 ed. New York: Academic Press, 2002. pp. 85-122

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_k \rho_k) + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k \vec{v}_k) = \sum_{p=1; p \neq k}^n S_{pk} \quad (9)$$

donde  $S_{pk}$  es la velocidad de transferencia de masa desde la fase  $p$  a la fase  $k$ . La ecuación de movimiento para la fase  $k$  es,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_k \rho_k \vec{v}_k) + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k \vec{v}_k \vec{v}_k) = -\alpha_k \nabla p - \nabla \cdot \Pi_k + \alpha_k \rho_k \mathbf{g} + F_k + F_g \quad (10)$$

donde  $F_k$  es el intercambio de momento entre la fase  $k$  y el resto de fases;  $F_g$  representa fuentes adicionales de momento. El término  $\Pi_k$  es el tensor de esfuerzos de la fase  $k$ , representa los esfuerzos de corte originados por la fase  $k$ .

Para la fase sólida

$$\Pi_s = -P_s \bar{\bar{I}} + \alpha_s \mu_s (\nabla \cdot \vec{v}_s + \nabla \cdot \vec{v}_s^T) + \alpha_s \left( \lambda_s - \frac{2}{3} \mu_s \right) \nabla \cdot \vec{v}_s \bar{\bar{I}} \quad (11)$$

Para la fase fluido

$$\Pi_l = \alpha_l \mu_l (\nabla \cdot \vec{v}_l + \nabla \cdot \vec{v}_l^T) - \alpha_l \left( \frac{2}{3} \mu_l \right) \nabla \cdot \vec{v}_l \bar{\bar{I}} \quad (12)$$

donde  $P_s$  es la presión ejercida por los sólidos,  $\mu_s$  es la viscosidad de corte de los sólidos, y  $\lambda_s$  es la viscosidad aglomerada de los sólidos.

$$F_k = \sum_{q=1; q \neq k}^n K_{kq} (\vec{v}_q - \vec{v}_k) \quad (13)$$

$K_{kq}$  es el coeficiente de intercambio de momento entre la fase  $k$  y las demás fases  $q$  (*fluid-solid drag coefficient*, para fluidización).

$$P_s = f(\alpha_s, \rho_s, \Theta_s) \quad (14)$$

en esta ecuación,  $\Theta_s$  representa la temperatura granular, que es una medida de la energía cinética contenida en la velocidad fluctuante de las partículas. En la teoría cinética del flujo granular también se plantea una ecuación de conservación de temperatura granular,

$$\frac{3}{2} \left[ \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_s \rho_s \Theta_s) + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \vec{v}_s \Theta_s) \right] = \Pi_s : \nabla \cdot \vec{v}_s + \nabla \cdot (k_{\Theta_s} \nabla \cdot \Theta_s) - \gamma_{\Theta_s} + \Phi_{ls} \quad (15)$$

al lado derecho de la ecuación, el primer término representa la contribución de energía por el tensor de esfuerzos de los sólidos,  $\Pi_k$ ; el segundo término representa la difusión de energía ( $k_{\Theta_s}$  es la conductividad de temperatura granular); el tercer término,  $\gamma_{\Theta_s}$ , representa la disipación de energía por colisiones; y el último término,  $\Phi_{ls}$ , representa el intercambio de energía entre las fases fluido-sólido.

Para flujos multicomponentes la ecuación de conservación de masa (continuidad) queda,

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_k \rho_k \omega_{i,k}) + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k \omega_{i,k} \vec{v}_k) = \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k D_{i,k} \nabla \omega_{i,k}) + \sum_{p=1, p \neq k}^n S_{pk} \quad (16)$$

donde  $\omega_{i,k}$  es la fracción másica de la especie  $i$  en la fase  $k$ ,  $D_{i,k}$  es el coeficiente de difusión (difusividad) de la especie  $i$  en la fase  $k$ . Para una discusión más detallada de la teoría cinética del flujo granular consúltese la referencia 12.

### **3. DESARROLLO**

El presente capítulo muestra la metodología utilizada para modelar el reactor anaerobio en lecho fluidizado. Está constituido por dos partes: en la primera parte se desarrollan las ecuaciones del modelo matemático. En la segunda parte se hace una descripción sumaria de la estrategia utilizada para resolver los casos de estudio y realizar las simulaciones.

#### **3.1 METODOLOGÍA DE MODELAMIENTO**

##### **3.1.1 FENOMENOLOGÍA DEL PROCESO**

Los fenómenos relevantes que se consideraron para describir el comportamiento de reactores anaerobios en lecho fluidizado son los siguientes:

- **Estequiometría:** Se establece un sistema de reacciones que permita la caracterización de especies en un sistema multicomponente como las aguas residuales.
- **Ecuaciones de conservación (masa y momento lineal):** Describen la evolución de las especies químicas dentro del sistema, y los patrones de flujo, respectivamente.
- **Cinética de consumo y generación de especies:** Establecen las relaciones de conversión de unas especies en otras, asegurando la conservación de la masa. Una descripción realista debe incluir efectos inhibitorios.
- **Equilibrio entre fases (gas-líquido):** Algunas especies son generadas en estado gaseoso por las reacciones, pero son consumidas estando disueltas en la fase líquida. Es necesario establecer el transporte de masa entre fases para los compuestos de interés.
- **Comportamiento hidrodinámico:** El grado de mezclado provisto por la fluidización y la concentración de microorganismos adherida al material de

soporte son responsables del grado de efectividad del sistema de tratamiento bajo estudio. Es necesario un modelo que describa de cerca las particularidades propias de la fluidización.

### **3.1.2 DESARROLLO DEL MODELO GENÉRICO**

El modelo genérico del presente trabajo se fundamenta en la teoría cinética del flujo granular<sup>8</sup>, donde se formulan las ecuaciones de conservación para tres fases distintas (sólida, líquida y gaseosa), y la interacción entre dichas fases es descrita por un conjunto de correlaciones (o relaciones constitutivas). Se parte del establecimiento de un sistema estequiométrico, siguiendo la formulación de las ecuaciones de conservación para las especies químicas presentes.

#### **3.1.2.1 ESTEQUIOMETRÍA**

En el presente trabajo de modelamiento el sistema estequiométrico está basado en el trabajo experimental previamente desarrollado por Angelidaki<sup>9</sup>, donde se determinó un conjunto de reacciones químicas empíricas representativas de las distintas etapas de la digestión anaerobia, y sus correspondientes coeficientes estequiométricos. El conjunto completo de reacciones del modelo estequiométrico se muestran en el anexo A.

#### **3.1.2.2 ECUACIONES DE CONSERVACIÓN DE MASA**

---

<sup>8</sup> Ranade, Vivek. Computational flow modeling for chemical reactor engineering. 1 ed. New York: Academic Press, 2002. pp. 85-122.

<sup>9</sup> Angelidaki, Irini et al. A comprehensive model of anaerobic bioconversion of complex substrates to biogas. En: Biotechnology and Bioengineering. Vol. 63, No. 3, Mayo 5, 1999; pp. 363-372.

Las ecuaciones formuladas para la conservación de la masa en sistemas multicomponentes siguen la forma general de la ecuación (20),

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_k \rho_k \omega_{i,k}) + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k \omega_{i,k} \vec{v}_k) = \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k D_{i,k} \nabla \omega_i) + \sum_{p=1, p \neq k}^n S_{pk} \quad (20)$$

Esta ecuación se plantea para cada una de las especies presentes. En el anexo B se presenta el conjunto de ecuaciones formuladas para todas las especies.

### 3.1.2.3 ECUACIONES DE CONSERVACIÓN DE MOMENTO LINEAL

Las ecuaciones de conservación de momento lineal se plantean para cada una de las tres fases presentes en el sistema (sólida, líquida y gaseosa), siguiendo la forma general de las ecuaciones 10, 11 y 12. La ecuación de conservación de temperatura granular se plantea solamente para la fase sólida utilizando la ecuación 15. En el anexo E se muestran las ecuaciones formuladas para las tres fases, además del conjunto de correlaciones necesarias para resolver los parámetros adicionales encontrados en éstas.

### 3.1.3 DESARROLLO DE MODELOS AUXILIARES

#### 3.1.3.1 TRANSFERENCIA DE MASA GAS-LÍQUIDO

La transferencia de masa entre fases se determinó utilizando la diferencia de concentraciones y un coeficiente volumétrico de transferencia,

$$\psi_{CO_2} = k_L A (\alpha_g K_H P_{CO_2} - \alpha_l \rho_l \omega_{CO_2, sol}) \quad (21)$$

El coeficiente de transferencia se calcula de acuerdo con la teoría de penetración de Higbie<sup>10</sup>,

$$k_L = 2\sqrt{\frac{D_{CO_2}}{\pi \cdot \Delta t}} \quad (22)$$

donde  $\psi_{CO_2}$  es la velocidad de transferencia de masa de CO<sub>2</sub> de la fase gaseosa a la fase líquida,  $k_L$  es el coeficiente de transferencia de masa gas-líquido,  $K_H$  es la constante de Henry,  $P_{CO_2}$  es la presión parcial de CO<sub>2</sub>,  $D_{CO_2}$  es la difusividad del CO<sub>2</sub> en la mezcla líquida, y  $\Delta t$  es el tiempo de contacto.

### 3.1.3.2 ECUACIONES CINÉTICAS

Las ecuaciones cinéticas se expresan como velocidades de crecimiento para cada uno de los distintos grupos tróficos identificados, y de acuerdo con las etapas del proceso en las que participan. Por limitaciones de espacio las ecuaciones se muestran en el anexo C junto con los parámetros cinéticos correspondientes.

### 3.1.3.3 VELOCIDADES DE REACCIÓN

Los coeficientes de rendimiento sustrato-biomasa ( $1/Y_{X/S}$ ), están dados por Angelidaki. La velocidad de reacción para cada compuesto está determinada por

---

<sup>10</sup> Maier, Ulrike et al. Advances in understanding and modeling the gas-liquid mass transfer in shake flasks. En: Biochemical Engineering Journal. Vol. 17, Junio, 2004; pp. 155-167.

$$r_A = \sum_i \frac{1}{Y_{(X/S),i}} \mu_i \quad (25)$$

donde el subíndice  $i$  representa todas las reacciones donde el compuesto A participa. En el anexo D se muestra la matriz de velocidades de reacción para todos los compuestos.

### 3.1.3.4 INTERCAMBIO DE MOMENTO ENTRE FASES

En el anexo E se muestra el grupo de correlaciones necesarias para calcular los parámetros adicionales presentes en las ecuaciones de conservación de momento lineal.

### 3.1.4 SUPOSICIONES Y SIMPLIFICACIONES

- Solución de ecuaciones en estado estacionario.
- Condiciones isotérmicas (no se resuelve ecuación de energía).
- Régimen de flujo laminar.
- No se consideran términos de difusión molecular.
- De los componentes de la fase gaseosa, sólo se considera solubilidad de  $\text{CO}_2$  en la fase líquida.
- Para los parámetros de transferencia de masa  $\text{CO}_2$  – fase líquida (difusividad, constante de Henry) se toman aquellos de  $\text{CO}_2$  – agua pura, dada la alta concentración de esta última en la fase líquida.
- No se toman en cuenta efectos de pH, pues se considera que la inhibición por concentración de ácidos orgánicos es representativa de este fenómeno.
- Para el lecho sólido se considera un solo diámetro de partícula. No se considera heterogeneidad.

- Se ignora la variación en diámetro de partícula provista por el crecimiento de biomasa.
- No se considera intercambio de momento lineal entre la fase gaseosa y las demás fases.

### 3.1.5 SISTEMA DE CONTROL Y CONDICIONES DE FRONTERA

En la figura 10, en el anexo F, se muestra un diagrama representando el reactor anaerobio en lecho fluidizado, y las corrientes asociadas a éste, a partir de los cuales se estableció el sistema de control para las simulaciones. Está constituido por una columna cilíndrica, empacada con un lecho de partículas sólidas con determinadas propiedades (véase la tabla 3 del anexo F). La única corriente de entrada es F3, y la información a la salida se deduce de las condiciones en el tope de la columna. Las corrientes de salida de agua (F4 y F2) y la corriente de alimento (F1) se relacionan para proveer las condiciones en la entrada de la columna mediante los siguientes balances,

En M1,

$$\omega_{i,3} = \frac{F_1\omega_{i,1} + F_2\omega_{i,2}}{F_1 + F_2} \quad (26)$$

En S1,

$$F_2 + F_5 = F_4 \quad (27)$$

En el anexo F se muestran las propiedades físicas relevantes de las fases líquida y sólida, junto con las condiciones iniciales y de frontera para los 3 casos de estudio.

## **3.2 SOLUCIÓN NUMÉRICA**

### **3.2.1 IMPLEMENTACION EN EL SOFTWARE FLUENT 6.3.26**

Las simulaciones se realizaron implementando el modelo matemático en el paquete de software FLUENT 6.3.26. Se construyó una malla bidimensional de 1m x 0,1016m, con celdas cuadrilaterales de 2,032mm utilizando el software GAMBIT 2.3.16. En el proceso de solución fue necesario programar las ecuaciones cinéticas y velocidades de reacción en lenguaje C para anexarlas al solver, ya que éste no posee reacciones tipo Monod dentro de las opciones disponibles. En el anexo G se muestra el código de programación respectivo junto con el algoritmo de solución.

### **3.2.2 SIMULACIÓN DE TRES CASOS DE ESTUDIO**

Se simularon tres casos de estudio. El caso 1 es un agua residual doméstica, el caso 2 un agua residual rica en proteínas (como las encontradas en los efluentes de industrias pecuarias), y el caso 3 un agua residual con alto contenido de lípidos (como las aguas de la industria de extracción de aceites vegetales). La caracterización de dichos efluentes está provista en [2]. Cada caso de estudio fue evaluado utilizando 3 tiempos de retención hidráulica. Las condiciones iniciales de fracciones másicas para los casos de estudio se encuentran en el anexo F.

En el presente capítulo se esquematizó la metodología utilizada para modelar el reactor anaerobio en lecho fluidizado. Se partió del desarrollo de las ecuaciones fundamentales del modelo matemático, añadiendo progresivamente las ecuaciones auxiliares para modelar los procesos secundarios. Se establecieron las suposiciones y simplificaciones hechas en el modelo y se describió el sistema de control. En la segunda parte se hizo una descripción sumaria de la estrategia utilizada para resolver los casos de estudio y realizar las simulaciones.

## 4. RESULTADOS Y ANÁLISIS

En el presente capítulo se muestran los resultados y su correspondiente discusión. Cada caso de estudio fue evaluado con 3 tiempos de retención hidráulica. Los resultados están agrupados en perfiles de concentración, y en gráficos que muestran tanto la eficiencia de remoción (expresada como porcentaje de carbono total removido) como el flujo de biogás predicho por la simulación. Por limitaciones de espacio se muestran los perfiles de concentración para los tres casos de estudio pero sólo para el tiempo de retención hidráulica más alto (3h). Los resultados de eficiencia de remoción, y el flujo de gas producido se muestran para los 3 casos y los 3 tiempos de retención hidráulica.

En la figura 2 se muestra el primer grupo de resultados. Corresponde a los perfiles de fracción másica de glucosa, aminoácidos, lípidos, y ácido oleico, para el primer caso de estudio y TRH de 3h. Este agrupamiento se realiza para contrastar la presencia del compuesto inhibidor (ácido oleico) en la degradación de los monómeros orgánicos. Tal como se aprecia en la figura, existe una variación en la dirección del flujo para todos los compuestos, como sería de esperar en un reactor tubular. También puede verse la formación de regiones con distinta concentración, en el espacio con presencia de microorganismos; posteriormente se aprecia una concentración homogénea. Sin embargo, la variación no es estrictamente de mayor a menor concentración, como se esperaría de un reactivo consumido en un reactor tubular. Estos dos fenómenos mencionados pueden explicarse bajo las siguientes consideraciones:

- Las zonas con mayor concentración de inhibidor coinciden con las zonas de mayor concentración de glucosa.
- La apariencia general de los perfiles de Gliceroltrioleato (GTO) y ácido oleico es similar. Existen zonas de concentración moderada de GTO que corresponden con zonas de concentración moderada de inhibidor. De igual

manera, se aprecian zonas de concentración elevada de GTO corresponden con zonas de concentración moderada de inhibidor. Ambos efectos se explican, uno, porque la formación de ácido oleico depende del consumo de GTO, y dos, que el consumo de GTO es inhibido por la presencia de ácido oleico.

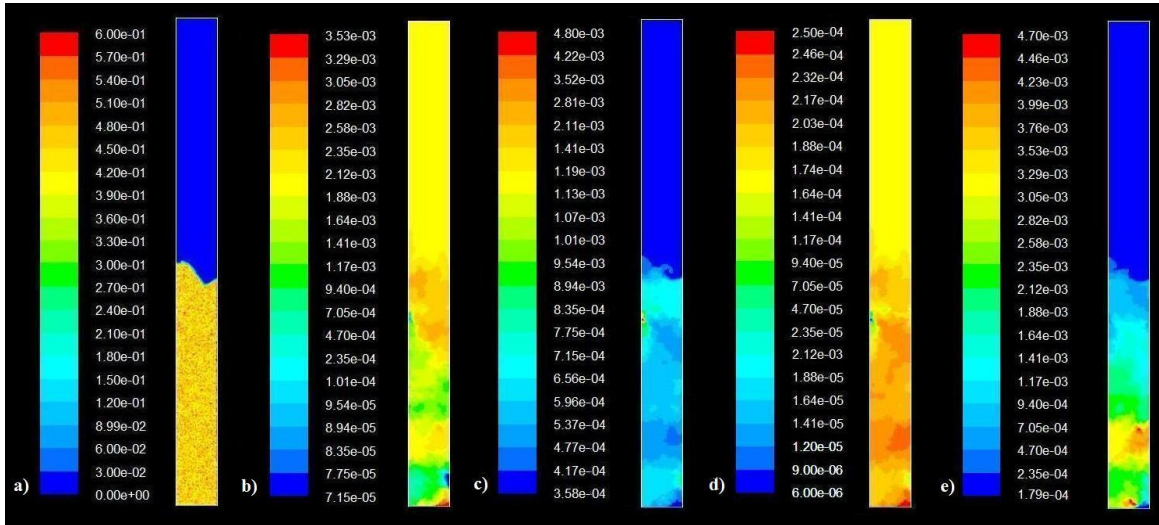


Figura 2. Perfiles de fracción másica para monómeros y ácido oleico en caso de estudio 1. (a) Fracción de volumen de sólidos dispersos. (b) Fracción másica de glucosa. (c) Fracción másica de aminoácidos. (d) Fracción másica de GTO. (e) Fracción másica de ácido oleico.

En la figura 3 se muestra el perfil de fracción másica para la suma de ácidos grasos de cadena corta (AGVs) y los perfiles de fracción de volumen para los componentes del biogás en el caso de estudio 1. En estos puede verse la correspondencia tanto de la presencia del inhibidor (ácido oleico) en la formación de biogás, como de la concentración de AGVs en la formación de biogás. Las regiones de menor concentración de biogás corresponden con las de mayor concentración de ácido oleico. También las regiones con mayor concentración de AGVs corresponden con las de menor concentración de biogás, dado que el último se genera a partir de los primeros. En términos generales, la concentración de

AGVs aumenta a partir de la entrada al reactor (causado por la actividad progresiva de las reacciones) para luego disminuir a medida que se forma el biogás. En la zona de reacción el biogás se genera con concentraciones más elevadas que aquella a la cual abandona el reactor.

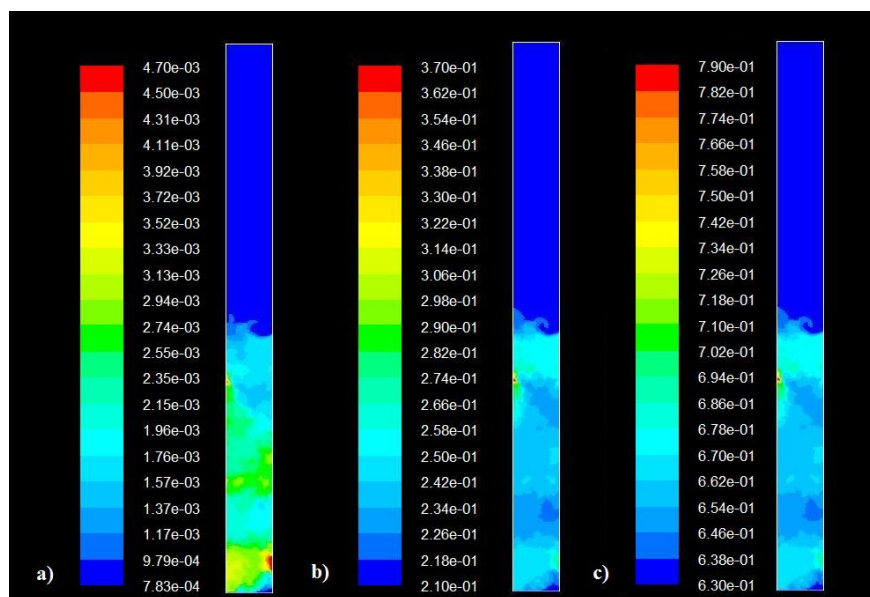


Figura 3. Perfiles de concentración en la dinámica de formación de biogás para caso 1. (a) Fracción másica de AGVs totales. (b) Fracción de volumen de CO2. (c) Fracción de volumen de CH4.

En la figura 4 se muestran los perfiles de fracción másica de glucosa, aminoácidos, lípidos, y ácido oleico, para el segundo caso de estudio y TRH de 3h. El análisis hecho para el primer caso aplica por igual al segundo. Sin embargo, en este caso la formación de regiones de concentración es mucho más pronunciada, al tratarse de un efluente con mayor carga orgánica. Es apreciable la incidencia de la concentración de ácido oleico en la degradación de glucosa. También puede verse que en este caso es más directa la relación entre el consumo de GTO y la formación de ácido oleico. No obstante, se aprecia una particularidad en el perfil de aminoácidos: pareciera que también se forma una región de inhibición al consumo. De cualquier manera, esto no es posible pues la

cinética de los aminoácidos no incluye efectos de inhibición. Esto sea tal vez explicable como un efecto indirecto de la variación de las otras especies, más que como un efecto directo en el consumo de aminoácidos.

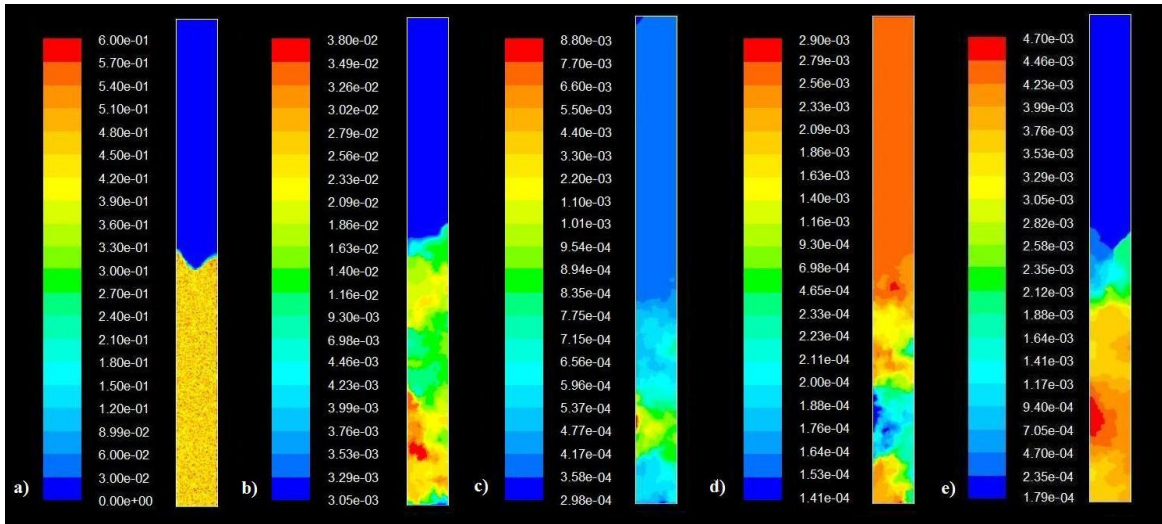


Figura 4. Perfiles de fracción másica para monómeros y ácido oleico en caso de estudio 2. (a) Fracción de volumen de sólidos dispersos. (b) Fracción másica de glucosa. (c) Fracción másica de aminoácidos. (d) Fracción másica de GTO. (e) Fracción másica de ácido oleico.

En la figura 5 se muestra el perfil de fracción másica para la suma de ácidos grasos de cadena corta (AGVs) y los perfiles de fracción de volumen para los componentes del biogás en el caso de estudio 2. En este caso, y como ya se vio en el análisis de la evolución de los monómeros, la presencia del compuesto inhibidor tiene un efecto más evidente en la formación de biogás. A diferencia del caso de estudio 1, en éste caso ocurre la formación de regiones con ausencia generación de biogás, hecho que se hace patente si se atiende a la mayor concentración inicial de GTO alimentada al reactor en el segundo caso. También puede verse que en comparación al caso de estudio 1, el presente caso produce un biogás con concentraciones de metano más reducidas.

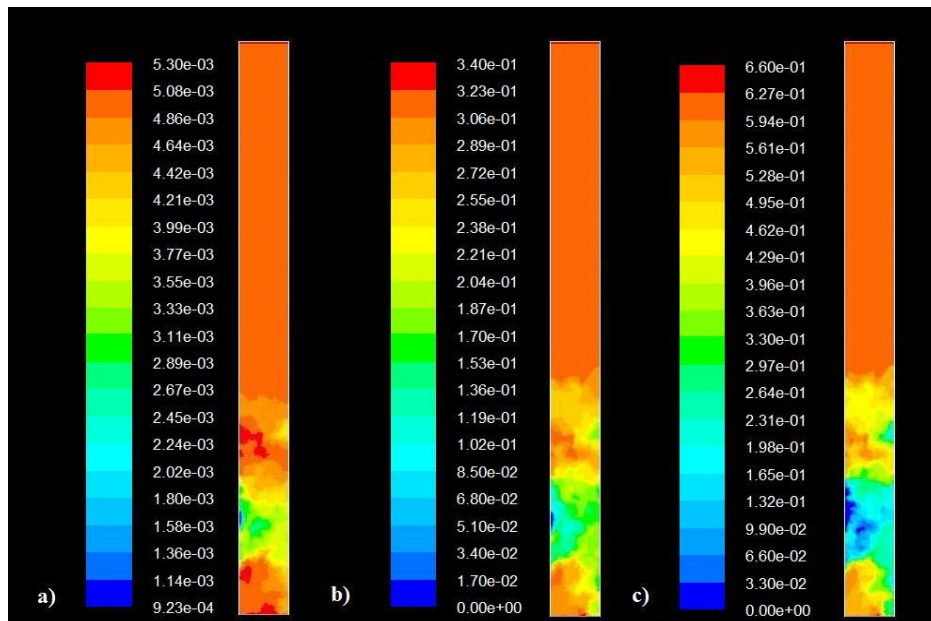


Figura 5. Perfiles de concentración en la dinámica de formación de biogás para caso 2. (a) Fracción másica de AGVs totales. (b) Fracción de volumen de CO<sub>2</sub>. (c) Fracción de volumen de CH<sub>4</sub>.

En la figura 6 se muestran los perfiles de fracción másica de glucosa, aminoácidos, lípidos, y ácido oleico, para el tercer caso de estudio y TRH de 3h. En dicho caso se trata de un efluente con carga orgánica mucho mayor, incluso por órdenes de magnitud. Es de esperarse, como se aprecia en la figura, que los perfiles sean tanto más intensos en coloración como más escuetos en distribución. Nuevamente, la degradación de glucosa se muestra muy sensible a la presencia de ácido oleico. Para el perfil de GTO puede verse que, al tratarse de un efluente con elevadísima concentración en lípidos, el perfil de variación parezca más bien como si no se consumiera en gran medida, como en efecto se mostrará más adelante. La presencia de extensas regiones en rojo indica que gran parte del GTO alimentado no está reaccionando a lo largo del reactor.

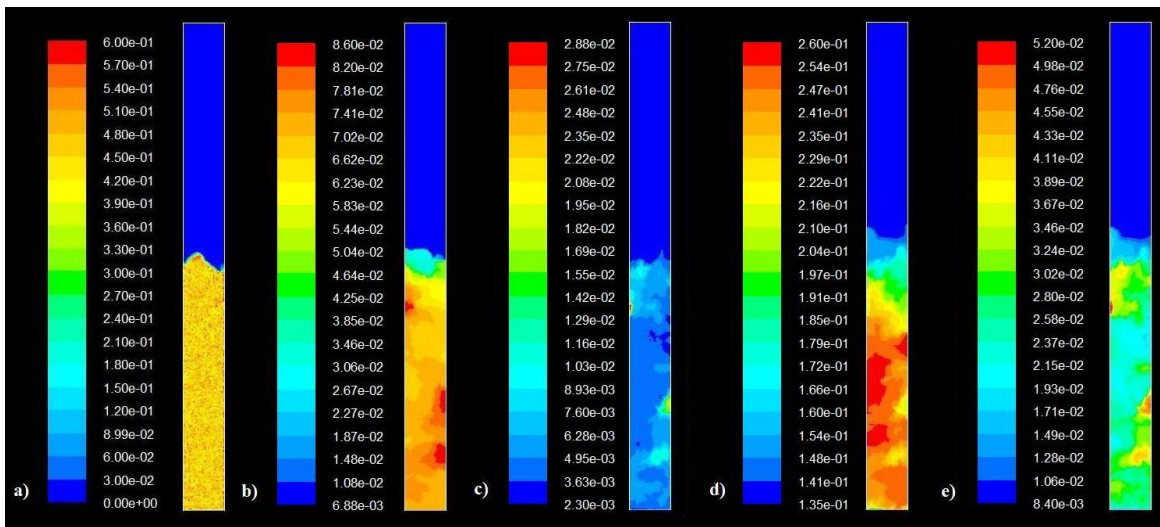


Figura 6. Perfiles de fracción másica para monómeros y ácido oleico en caso de estudio 3. (a) Fracción de volumen de sólidos dispersos. (b) Fracción másica de glucosa. (c) Fracción másica de aminoácidos. (d) Fracción másica de GTO. (e) Fracción másica de ácido oleico.

En la figura 7 se muestra el perfil de fracción másica para la suma de ácidos grasos de cadena corta (AGVs) y los perfiles de fracción de volumen para los componentes del biogás en el caso de estudio 3. Al examinar el perfil de AGVs puede apreciarse que no existe formación de regiones de concentración demasiado heterogéneas, en cambio, se observa una distribución uniforme de concentración a lo largo de la zona de reacción. Esto puede explicarse considerando que es de esperarse una elevada generación de AGVs en un efluente con alta carga orgánica y que la tasa de consumo de éstos y su conversión en biogás (dada una también elevada presencia efectos de inhibición) no compense la tasa de generación de los mismos. No obstante, la concentración de metano a la salida del reactor es la más alta entre los tres casos de estudio. Esto es posible gracias a una gran disponibilidad de fuentes de carbono en un efluente de elevada carga orgánica.

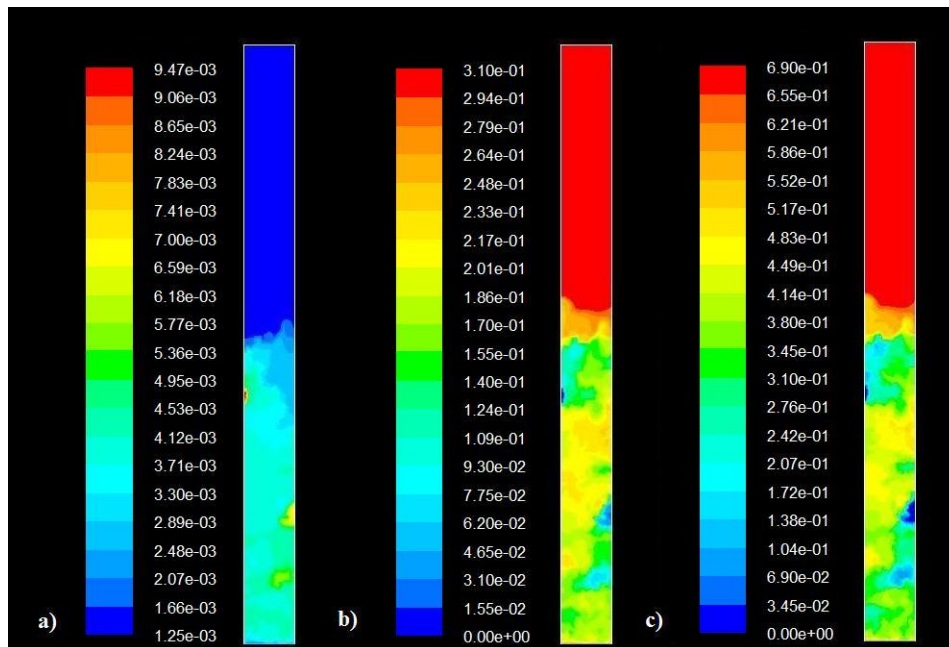


Figura 7. Perfiles de concentración en la dinámica de formación de biogás para caso 3. (a) Fracción másica de AGVs totales. (b) Fracción de volumen de CO<sub>2</sub>. (c) Fracción de volumen de CH<sub>4</sub>.

En la figura 8 se muestran los resultados de eficiencia de remoción (expresado como porcentaje de carbono orgánico total removido) para los 3 casos de estudio y los 3 tiempos de residencia aplicados. Con mucho el caso de estudio 1 presenta las mayores eficiencias de remoción en comparación a los otros dos casos. Este hecho es apenas lógico, si se atiende a que se trata de un efluente de carga orgánica moderada y cuya concentración en lípidos (potencial generador de compuestos inhibitorios como el ácido oleico) es la menor entre los monómeros presentes en la corriente de alimento al reactor. El modelo predice eficiencias de remoción entre 80% y 90% para el caso 1; entre 76% y 90% para el caso 2, y entre 55% y 65% para el caso 3. En todos los casos la disminución en el tiempo de retención hidráulica tuvo un efecto de disminución sobre la eficiencia de remoción.

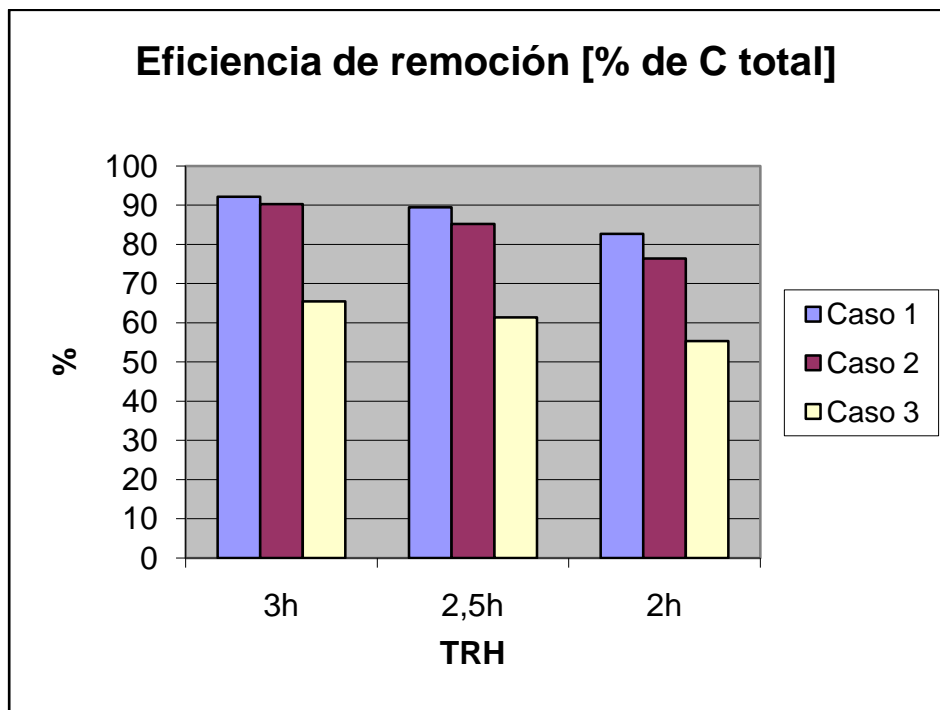


Figura 8. Eficiencia de remoción de carbono total para los 3 casos de estudio, evaluados en 3 tiempos de retención hidráulica.

En la figura 9 se muestra el potencial de generación de biogás para cada caso de estudio y evaluados en 3 tiempos de retención hidráulica diferentes. Comparativamente el caso 3 posee el mayor potencial de generación de biogás, entre 15 y 20,4 L / día. Supera con mucho a los casos 1 y 2, que presentaron entre 3 y 4 L / día, y 3,8 y 5 L / día, respectivamente. Contrastando los datos entregados por el modelo matemático para el caso 3 con valores experimentales encontrados en el trabajo de Borja y Banks sobre un reactor anaerobio en lecho fluidizado para tratar efluentes de industrias de extracción de aceites vegetales, puede verse que el modelo predice el potencial de biogás dentro de órdenes de magnitud aceptables: entre 15 y 20,4 L / día para el modelo y entre 18 y 24 L / día para el trabajo experimental. Sin embargo, las concentraciones de metano predichas por el modelo están sobreestimadas: entre 68 y 70 % para el modelo y 50 y 64 % para el trabajo experimental. También las concentraciones de ácidos grasos

volátiles están subestimadas: entre 100 y 400 mg / L en el modelo y entre 300 y 1200 mg / L en el trabajo experimental.

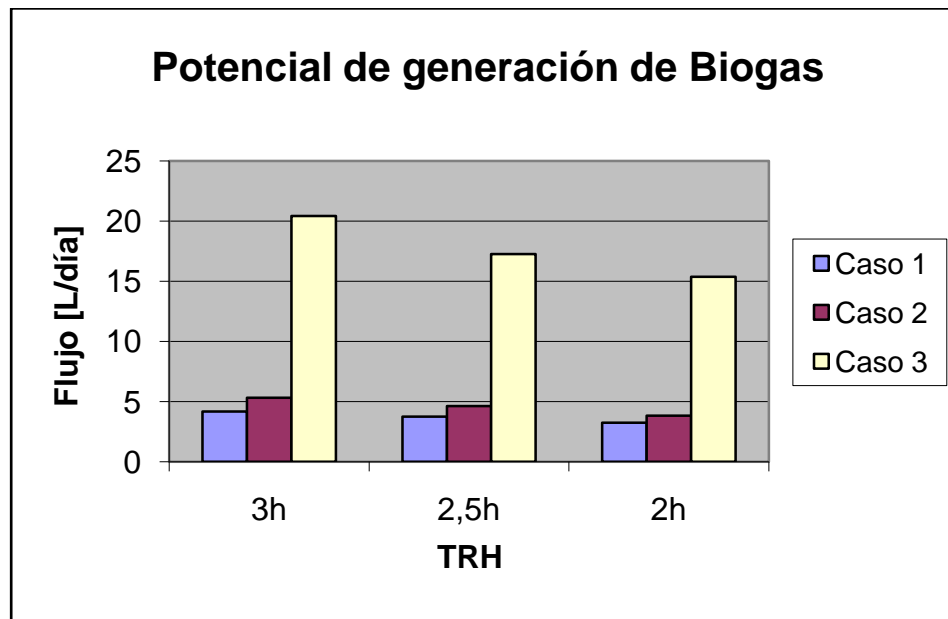


Figura 9. Potencial de generación de biogás predicho por el modelo matemático para los 3 casos de estudio, evaluados en 3 tiempos de retención hidráulica.

En el presente capítulo se presentaron los resultados de las simulaciones realizadas. Se presentaron los perfiles de fracción másica para glucosa, aminoácidos y gliceroltrioleato, contrastados con el perfil del principal compuesto inhibidor (ácido oleico). Se presentaron los perfiles de fracción másica de ácidos grasos volátiles totales y se contrastaron con los perfiles de fracción volumétrica de metano y dióxido de carbono en la fase gaseosa. Se mostró la eficiencia de remoción de carbono total para los tres casos de estudio y evaluados en 3 tiempos de retención hidráulica. Finalmente, se presentó el potencial de generación de biogás para los casos de estudio y los tiempos de retención.

## 5. CONCLUSIONES

De los resultados obtenidos mediante las diversas simulaciones y su correspondiente análisis pudo concluirse que:

- Los reactores en lecho fluidizado exhiben el comportamiento propio de reactores tubulares, pues se generan perfiles de concentración en dirección axial. Dichos los perfiles no van estrictamente de mayor a menor concentración sino que presentan variaciones locales, producidas probablemente por la dinámica de las reacciones metabólicas.
- Los compuestos inhibitorios poseen una influencia directa y discernible en la dinámica de consumo de sustratos y de generación de biogás.
- Los aumentos en la carga orgánica producen perfiles de concentración más pronunciados y menos graduales. Cuando la carga orgánica es muy elevada los perfiles tienden a ser más homogéneos y es más patente el efecto del transporte de masa convectivo. También se hacen más patentes los efectos de inhibición.
- Efluentes con mayor carga orgánica tienen un mayor potencial de generación de biogás, pero el sistema se hace más susceptible de fallar debido a la acumulación de compuestos inhibidores.
- La disminución del tiempo de residencia hidráulica tiene efectos inversamente proporcionales en la eficiencia de tratamiento, aunque puede verse que para un reactor anaerobio en lecho fluidizado cambios en el orden de horas no alteran de manera drástica la eficiencia de tratamiento.
- El modelo predice el potencial de biogás dentro de órdenes de magnitud aceptables, aunque puede afirmarse que las concentraciones de metano predichas están sobreestimadas, mientras que las concentraciones de ácidos grasos volátiles están subestimadas.

## 6. BIBLIOGRAFIA

1. Andrews J.F.J Sanit Engng Div Am Soc Civ Engrs, 1969; SA1:95
2. Angelidaki, Irini et al. A comprehensive model of anaerobic bioconversion of complex substrates to biogas. En: *Biotechnology and Bioengineering*. Vol. 63, No. 3, Mayo 5, 1999; pp. 363-372.
3. Borja, R. & Banks, C.J. Comparison of an anaerobic filter and an anaerobic fluidized bed reactor treating palm oil mill effluent. En: *Process Biochemistry*. Vol. 30, No.6, Julio 19, 1995; pp. 511-521.
4. Chun-Sheng Wu, Ju-Sheng Huang & Hsin-Hsien Chou. Influence of internal biogas production on hydrodynamic behavior of anaerobic fluidized-bed reactors. En: *Water Research*. Vol. 40, 2006; pp. 126-136.
5. Cornelissen, J. et al. CFD modelling of a liquid–solid fluidized bed. En: *Chemical Engineering Science*. Vol. 62, 2007; pp. 6334 – 6348
6. Diez, V., García, P.A. & Fernandez-Polanco, F. Evaluation of methanogenic kinetics in an anaerobic fluidized bed reactor. En. *Process Biochemistry*. Vol. 34, 1999; pp. 213-219.
7. Gavala, Hariklia et al. Kinetics and modeling of anaerobic digestion process. En: *Advances in Biochemical Engineering*. Vol. 81, 2003; pp. 57-93.
8. Ierusalimsky N.D. Bottle-necks in metabolism as growth rate controlling factors. In: Powell EO, Evans CGT, Strange RE, Tempest DW (eds), *Microbial Physiology and Continuous Culture*, 3rd International Symposium. Her Majesty's Stationery Office, London, 1967.

9. Maier, Ulrike et al. Advances in understanding and modeling the gas-liquid mass transfer in shake flasks. En: Biochemical Engineering Journal. Vol. 17, Junio, 2004; pp. 155-167.
10. Monod, Jacques. Ann Rev Microbiol, 1949; 3:371
11. Murthy, Jayathi. Numerical methods in heat, mass and momentum transfer. 1 ed. New York: Spring, 2002.
12. Ranade, Vivek. Computational flow modeling for chemical reactor engineering. 1 ed. New York: Academic Press, 2002. pp. 85-122.
13. Saravanan, V. & Sreekrishnan, T.R. Modeling anaerobic biofilm reactors - A review. En: Journal of environmental management. Vol. 81, 2006; pp. 1-18.

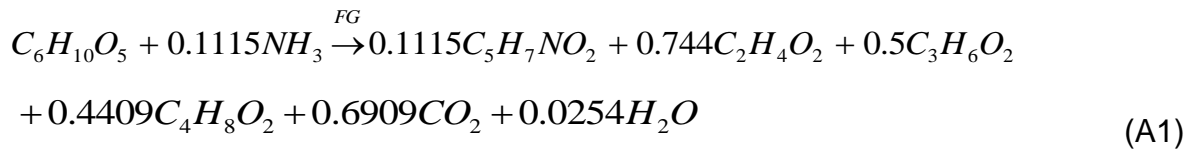
## **ANEXOS**

## ANEXO A

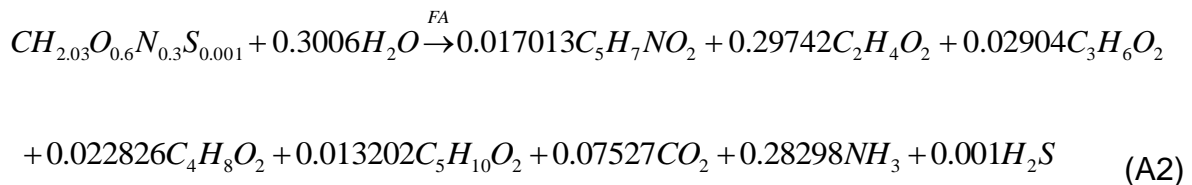
En el presente anexo se muestra el conjunto completo de reacciones químicas que permitieron establecer la estequiometría del proceso, además de las relaciones de conversión entre especies.

### a) Hidrólisis y acidogénesis a partir de macromoléculas y monómeros

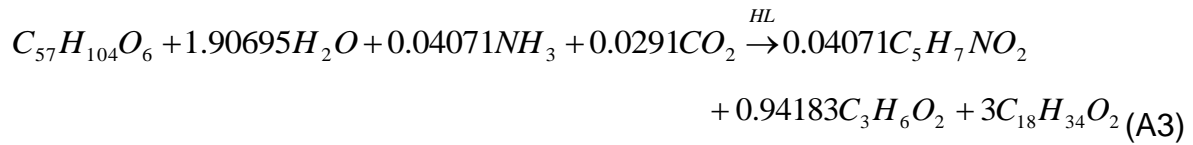
Carbohidratos: Se representan como carbohidrato soluble  $C_6H_{10}O_5$  que son degradados a AGV por la siguiente reacción



Proteínas: La gelatina  $CH_{2.03}O_{0.6}N_{0.3}S_{0.001}$  es usada como modelo de proteína. Se considera que la gelatina está compuesta únicamente de aminoácidos. Al no considerarse etapa de hidrólisis, la concentración de gelatina representa la concentración de aminoácidos. Estos son degradados a AGV, con formación de ácidos acético, propiónico, butírico y valérico



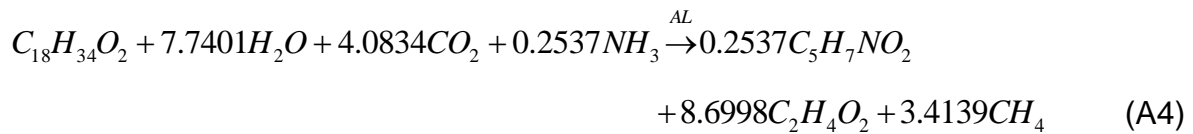
Lípidos: El glicerol trioleato  $C_{57}H_{104}O_6$  (GTO) es usado como un modelo de lípido. La reacción del GTO es obtenida combinando la lipólisis del GTO a oleato y glicerol, y la degradación del glicerol a biomasa y ácido propiónico:



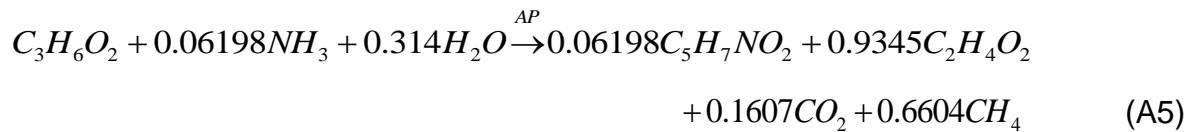
#### b) Acetogénesis a partir de ácidos grasos

De acuerdo con Angelidaki et al. [32], la utilización de hidrógeno es comparativamente más rápida respecto a la oxidación del ácido propiónico, ácido butírico y ácido valérico, por esta razón se combina la etapa acetogénica propiónica, butírica y valérica con la metanogénesis a partir de hidrógeno.

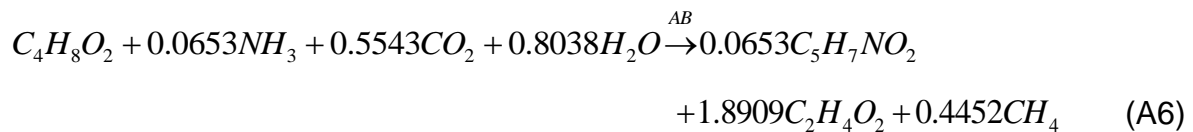
Acetogénesis a partir de ácidos grasos de cadena larga (LCFA)



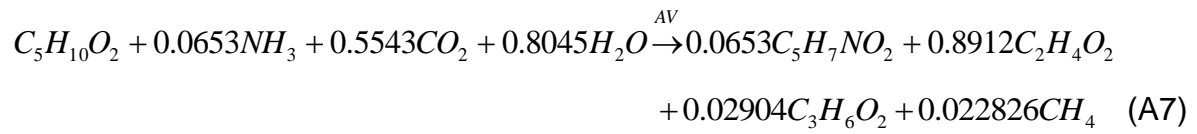
Acetogénesis propiónica



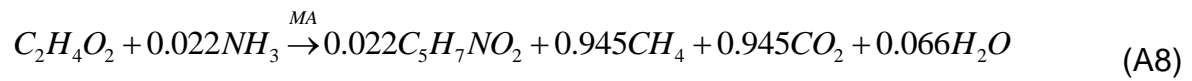
Acetogénesis butírica



## Acetogénesis valérica



b) Metanogénesis: El ácido acético es degradado a metano y dióxido de carbono por las bacterias acetoclásticas.



## ANEXO B

En el presente anexo se enlistan las ecuaciones de conservación de masa para todas las especies presentes en el modelo matemático.

- Fase de sólidos dispersos (partículas inertes y biomasa)

### PARTÍCULAS SÓLIDAS INERTES

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_s \rho_s \omega_p) + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \omega_p \bar{v}_s) = 0 \quad (\text{B1})$$

### HIDROLIZADORES DE LÍPIDOS

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_s \rho_s \omega_{X,HL}) + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \omega_{X,HL} \bar{v}_s) = R_{X,HL} - k_{dec,HL} \alpha_s \rho_s \omega_{X,HL} \quad (\text{B2})$$

### FERMENTADORES ACIDÓGENOS A PARTIR DE GLUCOSA

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_s \rho_s \omega_{X,FG}) + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \omega_{X,FG} \bar{v}_s) = R_{X,FG} - k_{dec,FG} \alpha_s \rho_s \omega_{X,FG} \quad (\text{B3})$$

### FERMENTADORES ACIDÓGENOS A PARTIR DE AMINOÁCIDOS

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_s \rho_s \omega_{X,FA}) + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \omega_{X,FA} \bar{v}_s) = R_{X,FA} - k_{dec,FA} \alpha_s \rho_s \omega_{X,FA} \quad (\text{B4})$$

### ACETÓGENOS A PARTIR DE LCFA

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_s \rho_s \omega_{X,AL}) + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \omega_{X,AL} \bar{v}_s) = R_{X,AL} - k_{dec,AL} \alpha_s \rho_s \omega_{X,AL} \quad (\text{B5})$$

### ACETÓGENOS A PARTIR DE ÁCIDO VALÉRICO

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_s \rho_s \omega_{X,AV}) + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \omega_{X,AV} \bar{v}_s) = R_{X,AV} - k_{dec,AV} \alpha_s \rho_s \omega_{X,AV} \quad (B6)$$

### ACETÓGENOS A PARTIR DE ÁCIDO BUTÍRICO

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_s \rho_s \omega_{X,AB}) + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \omega_{X,AB} \bar{v}_s) = R_{X,AB} - k_{dec,AB} \alpha_s \rho_s \omega_{X,AB} \quad (B7)$$

### ACETÓGENOS A PARTIR DE ÁCIDO PROPIÓNICO

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_s \rho_s \omega_{X,AP}) + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \omega_{X,AP} \bar{v}_s) = R_{X,AP} - k_{dec,AP} \alpha_s \rho_s \omega_{X,AP} \quad (B8)$$

### METANÓGENOS A PARTIR DE ÁCIDO ACÉTICO

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_s \rho_s \omega_{X,MA}) + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \omega_{X,MA} \bar{v}_s) = R_{X,MA} - k_{dec,MA} \alpha_s \rho_s \omega_{X,MA} \quad (B9)$$

$$k_{dec,i} = 0.05 \mu_{max,i} \quad (B10)$$

- Fase líquida (agua residual)

### LÍPIDOS (GLICEROLTRIOLEATO **GTO**)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_l \rho_l \omega_{LP}) + \nabla \cdot (\alpha_l \rho_l \omega_{LP} \bar{v}_l) = R_{LP} \quad (B11)$$

## GLUCOSA

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_l \rho_l \omega_G) + \nabla \cdot (\alpha_l \rho_l \omega_G \vec{v}_l) = R_G \quad (\text{B12})$$

## AMINOÁCIDOS

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_l \rho_l \omega_{AM}) + \nabla \cdot (\alpha_l \rho_l \omega_{AM} \vec{v}_l) = R_{AM} \quad (\text{B13})$$

## OLEATO (LCFA)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_l \rho_l \omega_{OL}) + \nabla \cdot (\alpha_l \rho_l \omega_{OL} \vec{v}_l) = R_{OL} \quad (\text{B14})$$

## ÁCIDO VALÉRICO

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_l \rho_l \omega_{HAV}) + \nabla \cdot (\alpha_l \rho_l \omega_{HAV} \vec{v}_l) = R_{HAV} \quad (\text{B15})$$

## ÁCIDO BUTÍRICO

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_l \rho_l \omega_{HAB}) + \nabla \cdot (\alpha_l \rho_l \omega_{HAB} \vec{v}_l) = R_{HAB} \quad (\text{B16})$$

## ÁCIDO PROPIÓNICO

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_l \rho_l \omega_{HAP}) + \nabla \cdot (\alpha_l \rho_l \omega_{HAP} \vec{v}_l) = R_{HAP} \quad (\text{B17})$$

## ÁCIDO ACÉTICO

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_l \rho_l \omega_{HAA}) + \nabla \cdot (\alpha_l \rho_l \omega_{HAA} \vec{v}_l) = R_{HAA} \quad (B18)$$

DIÓXIDO DE CARBONO (fracción soluble, consumido en reacciones)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_l \rho_l \omega_{CO_2, sol}) + \nabla \cdot (\alpha_l \rho_l \omega_{CO_2, sol} \vec{v}_l) = R_{CO_2, sol} + \psi_{CO_2} \quad (B19)$$

## NITRÓGENO AMONIAICAL

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_l \rho_l \omega_{NH_3}) + \nabla \cdot (\alpha_l \rho_l \omega_{NH_3} \vec{v}_l) = R_{NH_3} \quad (B20)$$

## AGUA

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_l \rho_l \omega_{H_2O}) + \nabla \cdot (\alpha_l \rho_l \omega_{H_2O} \vec{v}_l) = R_{H_2O} \quad (B21)$$

- Fase gaseosa (biogás)

## METANO

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g \rho_g \omega_{CH_4}) + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \omega_{CH_4} \vec{v}_g) = R_{CH_4} \quad (B22)$$

DIÓXIDO DE CARBONO (generado en rxns qcas, luego fracción no soluble)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g \rho_g \omega_{CO_2, g}) + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \omega_{CO_2, g} \vec{v}_g) = R_{CO_2, g} - \psi_{CO_2} \quad (B23)$$

## ANEXO C

En el presente anexo se enlistan las diferentes expresiones cinéticas utilizadas en el modelo matemático para cada uno de los distintos grupos tróficos según la etapa del proceso en la que participan. También se tabulan los parámetros de las distintas ecuaciones cinéticas.

### ETAPA DE HIDRÓLISIS LIPOLÍTICA

$$\mu_{HL} = \mu_{\max,HL} \frac{1}{1 + \frac{K_{S,LP}}{[\alpha_1 \rho_1 \omega_{LP}]}} \frac{1}{1 + \frac{K_{S,NH_3}}{[\alpha_1 \rho_1 \omega_{NH_3}]}} \frac{1}{1 + \frac{[\alpha_1 \rho_1 \omega_{OL}]}{K_{i,LCFA}}} \quad (C1)$$

### ETAPA ACIDOGÉNICA A PARTIR DE GLUCOSA

$$\mu_{FG} = \mu_{\max,FG} \frac{1}{1 + \frac{K_{S,G}}{[\alpha_1 \rho_1 \omega_G]}} \frac{1}{1 + \frac{K_{S,NH_3}}{[\alpha_1 \rho_1 \omega_{NH_3}]}} \frac{1}{1 + \frac{[\alpha_1 \rho_1 \omega_{OL}]}{K_{i,LCFA}}} \quad (C2)$$

### ETAPA ACIDOGÉNICA A PARTIR DE AMINOÁCIDOS

$$\mu_{FA} = \mu_{\max,FA} \frac{1}{1 + \frac{K_{S,AM}}{[\alpha_1 \rho_1 \omega_{AM}]}} \quad (C3)$$

### ETAPA ACETOGÉNICA A PARTIR DE LCFA

$$\mu_{AL} = \mu_{\max,AL} \frac{1}{1 + \frac{K_{S,LCFA}}{[\alpha_1 \rho_l \omega_{OL}]} + \frac{[\alpha_1 \rho_l \omega_{OL}]}{K_{i,LCFA}}} \frac{1}{1 + \frac{K_{S,NH_3}}{[\alpha_1 \rho_l \omega_{NH_3}]}} \quad (C4)$$

### ETAPA ACETOGÉNICA A PARTIR DE AGVS

$$\mu_{A,AGV} = \mu_{\max,AGV} \frac{1}{1 + \frac{K_{S,AGV}}{[S_{AGV}]}} \frac{1}{1 + \frac{K_{S,NH_3}}{[\alpha_1 \rho_l \omega_{NH_3}]}} \frac{1}{1 + \frac{[\alpha_1 \rho_l \omega_{HAA}]}{K_{i,HAA}}} \frac{1}{1 + \frac{[\alpha_1 \rho_l \omega_{OL}]}{K_{i,LCFA}}} \quad (C5)$$

### ETAPA METANOGÉNICA ACETOCLÁSTICA

$$\mu = \mu_{\max,MA} \frac{1}{1 + \frac{K_{S,HAA}}{[\alpha_1 \rho_l \omega_{HAA}]}} \frac{1}{1 + \frac{K_{S,NH_3}}{[\alpha_1 \rho_l \omega_{NH_3}]}} \frac{1}{1 + \frac{[\alpha_1 \rho_l \omega_{NH_3}]}{K_{i,NH_3}}} \frac{1}{1 + \frac{[\alpha_1 \rho_l \omega_{OL}]}{K_{i,LCFA}}} \quad (C6)$$

Grupo Trófico	$\mu_{max}$ [d <sup>-1</sup> ]	Ks [g/L]	$K_{S,NH_3}^e$ [g/L]	Ki [g/L]	$K_i^b$ [g/L]
Hidrolizadores de lípidos	0,53	0,010(GTO)	0,05	--	5.0 <sup>c</sup>
Ferment acidógenos a partir de glucosa	5,10	0,500(GLC)	0,05	--	5.0 <sup>c</sup>
Ferment acidógenos a partir de aminoácidos	6,38	0,010(GEL)	--	--	--
Acetógenos a partir de LCFA	0,55	0,020(OLE)	0,05	--	5.0 <sup>d</sup>
Acetógenos a partir de ácido valérico	0,69	0,175(VAL)	0,05	0,40(Hac)	5.0 <sup>c</sup>
Acetógenos a partir de ácido butírico	0,67	0,176(HBt)	0,05	0,72(Hac)	5.0 <sup>c</sup>
Acetógenos a partir de ácido propiónico	0,49	0,259(HPr)	0,05	0,96(Hac)	5.0 <sup>c</sup>
Metanógenos a partir de ácido acético	0,60	0,120(HAc)	0,05	0,26(NH3)	5.0 <sup>c</sup>

<sup>a</sup> VFA como ácido acético

<sup>b</sup> Constante de inhibición por LCFA estimada por Angelidaki et al. [32]

<sup>c</sup> Inhibición no competitiva

<sup>d</sup> Inhibición tipo Haldane

<sup>e</sup> Estimada a partir de datos publicados por Hashimoto et al., 1981; Hashimoto, 1983; Angelidaki y Ahring, 1993; Angelidaki y Ahring, 1994.

Tabla 1. Parámetros utilizados en las distintas ecuaciones cinéticas

## ANEXO D

En el presente anexo se muestra la matriz con las correspondientes velocidades de reacción para todos los compuestos considerados en el modelo matemático.

$R_{X,HL}$	1	$\mu_{HL}\alpha_s\rho_s\omega_{X,HL}$		$\mu_{FG}\alpha_s\rho_s\omega_{X,FG}$		$\mu_{FA}\alpha_s\rho_s\omega_{X,FA}$		$\mu_{AL}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AL}$
$R_{X,FG}$		$\mu_{HL}\alpha_s\rho_s\omega_{X,HL}$	1	$\mu_{FG}\alpha_s\rho_s\omega_{X,FG}$		$\mu_{FA}\alpha_s\rho_s\omega_{X,FA}$		$\mu_{AL}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AL}$
$R_{X,FA}$		$\mu_{HL}\alpha_s\rho_s\omega_{X,HL}$		$\mu_{FG}\alpha_s\rho_s\omega_{X,FG}$	1	$\mu_{FA}\alpha_s\rho_s\omega_{X,FA}$		$\mu_{AL}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AL}$
$R_{X,AL}$		$\mu_{HL}\alpha_s\rho_s\omega_{X,HL}$		$\mu_{FG}\alpha_s\rho_s\omega_{X,FG}$		$\mu_{FA}\alpha_s\rho_s\omega_{X,FA}$	1	$\mu_{AL}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AL}$
$R_{X,AV}$		$\mu_{HL}\alpha_s\rho_s\omega_{X,HL}$		$\mu_{FG}\alpha_s\rho_s\omega_{X,FG}$		$\mu_{FA}\alpha_s\rho_s\omega_{X,FA}$		$\mu_{AL}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AL}$
$R_{X,AB}$		$\mu_{HL}\alpha_s\rho_s\omega_{X,HL}$		$\mu_{FG}\alpha_s\rho_s\omega_{X,FG}$		$\mu_{FA}\alpha_s\rho_s\omega_{X,FA}$		$\mu_{AL}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AL}$
$R_{X,AP}$		$\mu_{HL}\alpha_s\rho_s\omega_{X,HL}$		$\mu_{FG}\alpha_s\rho_s\omega_{X,FG}$		$\mu_{FA}\alpha_s\rho_s\omega_{X,FA}$		$\mu_{AL}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AL}$
$R_{X,MA}$		$\mu_{HL}\alpha_s\rho_s\omega_{X,HL}$		$\mu_{FG}\alpha_s\rho_s\omega_{X,FG}$		$\mu_{FA}\alpha_s\rho_s\omega_{X,FA}$		$\mu_{AL}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AL}$
$R_{LP}$	-192,160	$\mu_{HL}\alpha_s\rho_s\omega_{X,HL}$		$\mu_{FG}\alpha_s\rho_s\omega_{X,FG}$		$\mu_{FA}\alpha_s\rho_s\omega_{X,FA}$		$\mu_{AL}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AL}$
$R_G$		$\mu_{HL}\alpha_s\rho_s\omega_{X,HL}$	-12,860	$\mu_{FG}\alpha_s\rho_s\omega_{X,FG}$		$\mu_{FA}\alpha_s\rho_s\omega_{X,FA}$		$\mu_{AL}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AL}$
$R_{AM}$		$\mu_{HL}\alpha_s\rho_s\omega_{X,HL}$		$\mu_{FG}\alpha_s\rho_s\omega_{X,FG}$	-14,493	$\mu_{FA}\alpha_s\rho_s\omega_{X,FA}$		$\mu_{AL}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AL}$
$R_{OL}$	183,900	$\mu_{HL}\alpha_s\rho_s\omega_{X,HL}$		$\mu_{FG}\alpha_s\rho_s\omega_{X,FG}$		$\mu_{FA}\alpha_s\rho_s\omega_{X,FA}$	-9,837	$\mu_{AL}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AL}$
$R_{HAV}$		$\mu_{HL}\alpha_s\rho_s\omega_{X,HL}$		$\mu_{FG}\alpha_s\rho_s\omega_{X,FG}$	0,705	$\mu_{FA}\alpha_s\rho_s\omega_{X,FA}$		$\mu_{AL}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AL}$
$R_{HAB}$		$\mu_{HL}\alpha_s\rho_s\omega_{X,HL}$	3,079	$\mu_{FG}\alpha_s\rho_s\omega_{X,FG}$	1,045	$\mu_{FA}\alpha_s\rho_s\omega_{X,FA}$		$\mu_{AL}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AL}$
$R_{HAP}$	15,151	$\mu_{HL}\alpha_s\rho_s\omega_{X,HL}$	2,937	$\mu_{FG}\alpha_s\rho_s\omega_{X,FG}$	1,178	$\mu_{FA}\alpha_s\rho_s\omega_{X,FA}$		$\mu_{AL}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AL}$
$R_{HAA}$		$\mu_{HL}\alpha_s\rho_s\omega_{X,HL}$	3,543	$\mu_{FG}\alpha_s\rho_s\omega_{X,FG}$	9,282	$\mu_{FA}\alpha_s\rho_s\omega_{X,FA}$	18,208	$\mu_{AL}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AL}$
$R_{NH_3}$	-0,124	$\mu_{HL}\alpha_s\rho_s\omega_{X,HL}$	-0,124	$\mu_{FG}\alpha_s\rho_s\omega_{X,FG}$	2,061	$\mu_{FA}\alpha_s\rho_s\omega_{X,FA}$	-0,124	$\mu_{AL}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AL}$
$R_{CO_2,sol}$	-0,278	$\mu_{HL}\alpha_s\rho_s\omega_{X,HL}$		$\mu_{FG}\alpha_s\rho_s\omega_{X,FG}$		$\mu_{FA}\alpha_s\rho_s\omega_{X,FA}$	-6,267	$\mu_{AL}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AL}$
$R_{H_2O}$	-7,46	$\mu_{HL}\alpha_s\rho_s\omega_{X,HL}$	0,036	$\mu_{FG}\alpha_s\rho_s\omega_{X,FG}$	-2,82	$\mu_{FA}\alpha_s\rho_s\omega_{X,FA}$	-4,86	$\mu_{AL}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AL}$
$R_{CO_2,g}$		$\mu_{HL}\alpha_s\rho_s\omega_{X,HL}$	2,413	$\mu_{FG}\alpha_s\rho_s\omega_{X,FG}$	1,723	$\mu_{FA}\alpha_s\rho_s\omega_{X,FA}$		$\mu_{AL}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AL}$
$R_{CH_4,g}$		$\mu_{HL}\alpha_s\rho_s\omega_{X,HL}$		$\mu_{FG}\alpha_s\rho_s\omega_{X,FG}$		$\mu_{FA}\alpha_s\rho_s\omega_{X,FA}$	1,905	$\mu_{AL}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AL}$
$R_{H_2S,g}$		$\mu_{HL}\alpha_s\rho_s\omega_{X,HL}$		$\mu_{FG}\alpha_s\rho_s\omega_{X,FG}$	0,018	$\mu_{FA}\alpha_s\rho_s\omega_{X,FA}$		$\mu_{AL}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AL}$

Tabla 2. Matriz de velocidades de reacción

Continúa en la página siguiente...

$R_{X,HL}$		$\mu_{AV}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AV}$		$\mu_{AB}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AB}$		$\mu_{AP}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AP}$		$\mu_{MA}\alpha_s\rho_s\omega_{X,MA}$
$R_{X,FG}$		$\mu_{AV}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AV}$		$\mu_{AB}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AB}$		$\mu_{AP}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AP}$		$\mu_{MA}\alpha_s\rho_s\omega_{X,MA}$
$R_{X,FA}$		$\mu_{AV}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AV}$		$\mu_{AB}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AB}$		$\mu_{AP}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AP}$		$\mu_{MA}\alpha_s\rho_s\omega_{X,MA}$
$R_{X,AL}$		$\mu_{AV}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AV}$		$\mu_{AB}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AB}$		$\mu_{AP}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AP}$		$\mu_{MA}\alpha_s\rho_s\omega_{X,MA}$
$R_{X,AV}$	1	$\mu_{AV}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AV}$		$\mu_{AB}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AB}$		$\mu_{AP}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AP}$		$\mu_{MA}\alpha_s\rho_s\omega_{X,MA}$
$R_{X,AB}$		$\mu_{AV}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AV}$	1	$\mu_{AB}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AB}$		$\mu_{AP}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AP}$		$\mu_{MA}\alpha_s\rho_s\omega_{X,MA}$
$R_{X,AP}$		$\mu_{AV}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AV}$		$\mu_{AB}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AB}$	1	$\mu_{AP}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AP}$		$\mu_{MA}\alpha_s\rho_s\omega_{X,MA}$
$R_{X,MA}$		$\mu_{AV}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AV}$		$\mu_{AB}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AB}$		$\mu_{AP}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AP}$	1	$\mu_{MA}\alpha_s\rho_s\omega_{X,MA}$
$R_{LP}$		$\mu_{AV}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AV}$		$\mu_{AB}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AB}$		$\mu_{AP}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AP}$		$\mu_{MA}\alpha_s\rho_s\omega_{X,MA}$
$R_G$		$\mu_{AV}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AV}$		$\mu_{AB}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AB}$		$\mu_{AP}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AP}$		$\mu_{MA}\alpha_s\rho_s\omega_{X,MA}$
$R_{AM}$		$\mu_{AV}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AV}$		$\mu_{AB}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AB}$		$\mu_{AP}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AP}$		$\mu_{MA}\alpha_s\rho_s\omega_{X,MA}$
$R_{OL}$		$\mu_{AV}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AV}$		$\mu_{AB}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AB}$		$\mu_{AP}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AP}$		$\mu_{MA}\alpha_s\rho_s\omega_{X,MA}$
$R_{HAV}$	-13,820	$\mu_{AV}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AV}$		$\mu_{AB}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AB}$		$\mu_{AP}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AP}$		$\mu_{MA}\alpha_s\rho_s\omega_{X,MA}$
$R_{HAB}$		$\mu_{AV}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AV}$	-11,920	$\mu_{AB}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AB}$		$\mu_{AP}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AP}$		$\mu_{MA}\alpha_s\rho_s\omega_{X,MA}$
$R_{HAP}$	10,029	$\mu_{AV}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AV}$		$\mu_{AB}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AB}$	-10,570	$\mu_{AP}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AP}$		$\mu_{MA}\alpha_s\rho_s\omega_{X,MA}$
$R_{HAA}$	7,247	$\mu_{AV}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AV}$	15,366	$\mu_{AB}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AB}$	8,006	$\mu_{AP}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AP}$	-24,135	$\mu_{MA}\alpha_s\rho_s\omega_{X,MA}$
$R_{NH3}$	-0,124	$\mu_{AV}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AV}$	-0,124	$\mu_{AB}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AB}$	-0,124	$\mu_{AP}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AP}$	-0,124	$\mu_{MA}\alpha_s\rho_s\omega_{X,MA}$
$R_{CO2,sol}$	-3,305	$\mu_{AV}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AV}$	-3,303	$\mu_{AB}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AB}$		$\mu_{AP}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AP}$		$\mu_{MA}\alpha_s\rho_s\omega_{X,MA}$
$R_{H2O}$	-1,96	$\mu_{AV}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AV}$	-1,96	$\mu_{AB}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AB}$	-0,81	$\mu_{AP}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AP}$		$\mu_{MA}\alpha_s\rho_s\omega_{X,MA}$
$R_{CO2,g}$		$\mu_{AV}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AV}$		$\mu_{AB}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AB}$	1,010	$\mu_{AP}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AP}$	16,726	$\mu_{MA}\alpha_s\rho_s\omega_{X,MA}$
$R_{CH4,g}$	0,966	$\mu_{AV}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AV}$	0,965	$\mu_{AB}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AB}$	1,509	$\mu_{AP}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AP}$	6,082	$\mu_{MA}\alpha_s\rho_s\omega_{X,MA}$
$R_{H2S,g}$		$\mu_{AV}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AV}$		$\mu_{AB}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AB}$		$\mu_{AP}\alpha_s\rho_s\omega_{X,AP}$		$\mu_{MA}\alpha_s\rho_s\omega_{X,MA}$

Tabla 2. Matriz de velocidades de reacción (continuación).

## ANEXO E

En el presente anexo se enlistan las ecuaciones de conservación de momento lineal y conservación de temperatura granular y las correlaciones necesarias para resolver los diferentes parámetros adicionales encontrados en ellas.

### ECUACIÓN DE MOVIMIENTO (FASE LÍQUIDA)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_l \rho_l \bar{v}_l) + \nabla \cdot (\alpha_l \rho_l \bar{v}_l^2) = -\alpha_l \nabla p + \nabla \cdot \Pi_l + \alpha_l \rho_l \bar{g} + K_{sl}(\bar{v}_s - \bar{v}_l) \quad (\text{E1})$$

$$\Pi_l = \alpha_l \mu_l (\nabla \cdot \bar{v}_l + \nabla \cdot \bar{v}_l^T) - \alpha_l \left( \frac{2}{3} \mu_l \right) \nabla \cdot \bar{v}_l \bar{I} \quad (\text{E2})$$

### ECUACIÓN DE MOVIMIENTO (FASE DE SÓLIDOS DISPERSOS)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_s \rho_s \bar{v}_s) + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \bar{v}_s^2) = -\alpha_s \nabla p + \nabla \cdot \Pi_s + \alpha_s \rho_s \bar{g} + K_{ls}(\bar{v}_l - \bar{v}_s) \quad (\text{E3})$$

$$\Pi_s = -P_s \bar{I} + \alpha_s \mu_s (\nabla \cdot \bar{v}_s + \nabla \cdot \bar{v}_s^T) + \alpha_s \left( \lambda_s - \frac{2}{3} \mu_s \right) \nabla \cdot \bar{v}_s \bar{I} \quad (\text{E4})$$

### ECUACIÓN DE MOVIMIENTO (FASE GASEOSA)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g \rho_g \bar{v}_g) + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \bar{v}_g^2) = -\alpha_g \nabla p + \alpha_g \rho_g \bar{g} \quad (\text{E5})$$

## ECUACIÓN DE CONSERVACIÓN DE TEMPERATURA GRANULAR

$$\frac{3}{2} \left[ \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_s \rho_s \Theta_s) + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \vec{v}_s \Theta_s) \right] = \Pi_s : \nabla \cdot \vec{v}_s + \nabla \cdot (k_{\Theta_s} \nabla \cdot \Theta_s) - \gamma_{\Theta_s} + \Phi_{ls} \quad (\text{E6})$$

## LIQUID – SOLID DRAG

$$K_{ls} = K_{sl} = \frac{3}{4} C_D \frac{\alpha_s \alpha_l \rho_l |\vec{v}_s - \vec{v}_l|}{d_s} \alpha_l^{-2.65} \quad \text{para } \alpha_l > 0.8 \quad (\text{E7})$$

$$K_{ls} = K_{sl} = 150 \frac{\alpha_s (1 - \alpha_l) \mu_l}{\alpha_l d_s^2} + 1.75 \frac{\alpha_s \rho_l |\vec{v}_s - \vec{v}_l|}{d_s} \quad \text{para } \alpha_l \leq 0.8 \quad (\text{E8})$$

$$C_D = \frac{24}{\alpha_l \text{Re}_s} \left[ 1 + 0.15 (\alpha_l \text{Re}_s)^{0.687} \right] \quad (\text{E9})$$

$$\text{Re}_s = \frac{\rho_l d_s |\vec{v}_s - \vec{v}_l|}{\mu_l} \quad (\text{E10})$$

## PRESIÓN DE LA FASE SÓLIDA

$$P_s = \alpha_s \rho_s \Theta_s + 2 \rho_s (1 + e_{ss}) \alpha_s^2 g_{O,ss} \Theta_s \quad (\text{E11})$$

## FUNCIÓN DE DISTRIBUCIÓN RADIAL

$$g_{O,ss} = \left[ 1 - \left( \frac{\alpha_s}{\alpha_{s,\max}} \right)^{1/3} \right]^{-1} \quad (\text{E12})$$

## VISCOSIDAD AGLOMERADA DE LA FASE SÓLIDA

$$\lambda_s = \frac{4}{5} \alpha_s \rho_s d_s g_{o,ss} (1 + e_{ss}) \sqrt{\frac{\Theta_s}{\pi}} \quad (\text{E13})$$

## VISCOSIDAD DE CORTE DE LA FASE SÓLIDA

$$\mu_s = \mu_{s,col} + \mu_{s,kin} \quad (\text{E14})$$

$$\mu_{s,col} = \frac{4}{5} \alpha_s \rho_s d_s g_{o,ss} (1 + e_{ss}) \sqrt{\frac{\Theta_s}{\pi}} \quad (\text{E15})$$

$$\mu_{s,kin} = \frac{10 \rho_s d_s \sqrt{\Theta_s \pi}}{96(1 + e_{ss}) g_{o,ss}} \left[ 1 + \frac{4}{5} \alpha_s g_{o,ss} (1 + e_{ss}) \right]^2 \quad (\text{E16})$$

## CONDUCTIVIDAD DE TEMPERATURA GRANULAR

$$k_{\Theta_s} = \frac{75 \rho_s d_s \sqrt{\Theta_s \pi}}{192(1 + e_{ss}) g_{o,ss}} \left[ 1 + \frac{6}{5} \alpha_s g_{o,ss} (1 + e_{ss}) \right]^2 + 2 \alpha_s^2 \rho_s d_s g_{o,ss} (1 + e_{ss}) \sqrt{\frac{\Theta_s}{\pi}} \quad (\text{E17})$$

## DISIPACIÓN DE ENERGÍA POR COLISIONES

$$\gamma_{\Theta_s} = 3(1 - e_{ss}^2) \alpha_s^2 \rho_s g_{o,ss} \Theta_s \left[ \frac{4}{d_s} \sqrt{\frac{\Theta_s}{\pi}} - \nabla \cdot \vec{v}_s \right] \quad (\text{E18})$$

## INTERCAMBIO DE ENERGIA ENTRE FASES

$$\Phi_{ls} = -3K_{ls} \Theta_s \quad (\text{E19})$$

## ANEXO F

En el presente anexo se muestra un diagrama de la configuración física del sistema. Se agrupa en tablas las propiedades físicas relevantes en el modelo matemático. También se muestran las condiciones de frontera adoptadas para la solución numérica y las condiciones iniciales de los 3 casos de estudio.

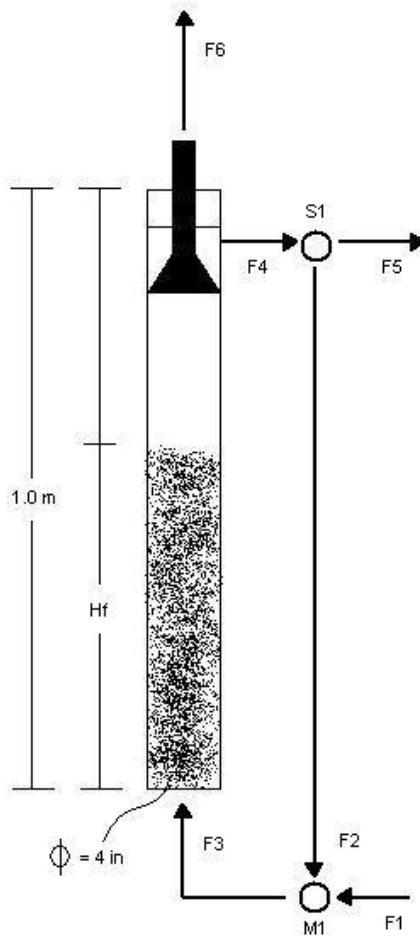


Figura 9. Diagrama de la configuración física del sistema

Propiedad	Valor	Unidades
<b>Líquido (a 35°C)</b>		
viscosidad	7,44E-04	Pa-s
densidad	994,6	kg/m <sup>3</sup>
<b>Sólidos</b>		
diámetro medio sauter	1,13E-03	m
densidad absoluta	2540	kg/m <sup>3</sup>
Fracción de vacíos del lecho estático	0,6	--
Masa de sólidos	3,946	kg

Tabla 3. Propiedades relevantes de las fases líquida y sólida

Diámetro del reactor	0,127 m
Altura del reactor	1 m
Altura inicial del lecho	0,12 m
Fracc. Vol. inicial del lecho	0,60
Presión de operación	101325 Pa
Condición de frontera en la salida	Presión atm
Condición de frontera en las paredes	No deslizamiento
Condición de frontera en la entrada	Flujo tapón
Velocidad superficial de líq entrante	0,014 m/s

Tabla 4. Condiciones de frontera

componente	concentración/fracción másica					
	caso 1	wi,1	caso 2	wi,2	caso 3	wi,3
	kg/m3		kg/m3		kg/m3	
glucosa	33,8	0,03313336	38,8	0,03787372	90	0,08668984
gelatina	4,9	0,00480336	9	0,00878514	30	0,02889661
gliceroltrioleato	2,5	0,00245069	3	0,00292838	270	0,26006951
				0		0
oleato (acido oleico)	0	0	0	0	0	0
acido valerico	0	0	0	0	0	0
acido butirico	0,1	9,8028E-05	0,1	9,7613E-05	0	0
acido propionico	1,6	0,00156844	1,6	0,0015618	0	0
acido acetico	3,1	0,00303886	3,1	0,00302599	1,5	0,00144483
				0		0
metano	0	0	0	0	0	0
dioxido de carbono	0	0	0	0	0	0
acido sulfhidrico	0	0	0	0	0	0
				0		0
nitrogeno amoniacal	2,5	0,00245069	2,5	0,00244032	0,5	0,00048161
agua	971,62	0,95245657	966,357	0,94328703	646,184	0,62241761
	1020,12	1	1024,457	1	1038,184	1

Tabla 5. Condiciones iniciales de concentración y fracción másica para los tres casos de estudio. (Fuente: Angelidaki et al. 1999)

Grupo Trófico		Concentración	
		Valor	Unidades
Hidrolizadores de carbohidratos	$\alpha_s \rho_s \omega_{X,HC}$	0,058	kg/m3
Hidrolizadores de Proteínas	$\alpha_s \rho_s \omega_{X,HP}$	0,011	kg/m3
Hidrolizadores de Lípidos	$\alpha_s \rho_s \omega_{X,HL}$	0,008	kg/m3
Acidógenos a partir de Glucosa	$\alpha_s \rho_s \omega_{X,FG}$	0,058	kg/m3
Acidógenos a partir de Aminoácidos	$\alpha_s \rho_s \omega_{X,FA}$	0,011	kg/m3
Acetógenos a partir de LCFA	$\alpha_s \rho_s \omega_{X,AL}$	0,008	kg/m3
Acetógenos sobre A. Valérico	$\alpha_s \rho_s \omega_{X,AV}$	0,015	kg/m3
Acetógenos sobre A. Butírico	$\alpha_s \rho_s \omega_{X,AB}$	0,017	kg/m3
Acetógenos sobre A. Propiónico	$\alpha_s \rho_s \omega_{X,AP}$	0,01	kg/m3
Metanógenos sobre A. Acético	$\alpha_s \rho_s \omega_{X,MA}$	0,025	kg/m3

Tabla 6. Concentración inicial de los distintos grupos tróficos. (Fuente: Saravanan & Sreekrishnan, 2006)

## ANEXO G

En el presente anexo se muestra el algoritmo general de solución utilizado en las simulaciones. También se incluye el código de programación en lenguaje C que se implementó para añadir las distintas ecuaciones cinéticas y velocidades de reacción al solver FLUENT 6.3.26.

El algoritmo utilizado para los tres casos de estudio fue el siguiente,

1. Resolver las ecuaciones de flujo y especies del agua residual a través del reactor sin considerar la presencia del lecho sólido.
2. Para el campo de velocidad calculado, fijar un lecho sólido estático de 12cm de altura, y fracción de volumen 0.6.
3. Resolver el campo de flujo para las fases líquida y sólida, sin resolver la ecuación de fracción de volumen.
4. Resolver el campo de flujo y la ecuación de fracción de volumen, hasta obtener convergencia. El resultado es un lecho fluidizado homogéneo.
5. Fijar la composición de biomasa del lecho fluidizado (según los datos de la tabla 6 del anexo F).
6. Cargar las velocidades de reacción al solver, y resolver la ecuación de especies para todas las fases, sin resolver el campo de flujo ni la ecuación de fracción de volumen.
7. Resolver la ecuación de especies para todas las fases junto a la ecuación de flujo, sin resolver la ecuación de fracción de volumen.

El código de programación implementado fue el siguiente:

```
#include "udf.h"

#define MUMAXHL 0.00000613
#define MUMAXFG 0.000059
#define MUMAXFA 0.0000738
#define MUMAXAL 0.00000636
#define MUMAXAV 0.00000798
#define MUMAXAB 0.00000775
#define MUMAXAP 0.00000567
#define MUMAXMA 0.00000694
#define KSN 0.05
#define KSGTO 0.01
#define KSGLC 0.5
#define KSGEL 0.01
#define KSOLE 0.02
#define KSHAV 0.175
#define KSHAB 0.176
#define KSHAP 0.259
#define KSHAA 0.12
#define KIHAV 0.4
#define KIHAB 0.72
#define KIHAP 0.96
#define KIHAA 0.26
#define KILCFA 5.0
#define KLA 41.82
#define KH 1.496

DEFINE_SOURCE(ec_1,c,t,dS,eqn)
{
    Thread *mixture_thread = THREAD_SUPER_THREAD(t);

    real source, S_0, S_1, S_2, S_3;
    int phase_domain_index_1 = 0;
    int phase_domain_index_2 = 1;
```

```

Thread *phase_1 = THREAD_SUB_THREAD(mixture_thread,phase_domain_index_1);
Thread *phase_2 = THREAD_SUB_THREAD(mixture_thread,phase_domain_index_2);

S_0 = C_VOF(c,phase_2)*C_R(c,phase_2)*C_YI(c,phase_2,3);
S_1 = KSGTO/(C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,3));
S_2 = KSN/(C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,9));
S_3 = (C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,4))/KILCFA;

source = (((MUMAXHL*S_0)/(1.+S_1))/(1.+S_2))/(1.+S_3);

dS[eqn] = 0.;

return source;
}
DEFINE_SOURCE(ec_2,c,t,dS,eqn)
{
Thread *mixture_thread = THREAD_SUPER_THREAD(t);

real source, S_0, S_1, S_2, S_3;
int phase_domain_index_1 = 0;
int phase_domain_index_2 = 1;

Thread *phase_1 = THREAD_SUB_THREAD(mixture_thread,phase_domain_index_1);
Thread *phase_2 = THREAD_SUB_THREAD(mixture_thread,phase_domain_index_2);

S_0 = C_VOF(c,phase_2)*C_R(c,phase_2)*C_YI(c,phase_2,1);
S_1 = KSGLC/(C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,1));
S_2 = KSN/(C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,9));
S_3 = (C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,4))/KILCFA;

source = (((MUMAXFG*S_0)/(1.+S_1))/(1.+S_2))/(1.+S_3);

dS[eqn] = 0.;

return source;
}

```

```

}
DEFINE_SOURCE(ec_3,c,t,dS,eqn)
{
  Thread *mixture_thread = THREAD_SUPER_THREAD(t);

  real source, S_0, S_1;
  int phase_domain_index_1 = 0;
  int phase_domain_index_2 = 1;

  Thread *phase_1 = THREAD_SUB_THREAD(mixture_thread,phase_domain_index_1);
  Thread *phase_2 = THREAD_SUB_THREAD(mixture_thread,phase_domain_index_2);

  S_0 = C_VOF(c,phase_2)*C_R(c,phase_2)*C_YI(c,phase_2,2);
  S_1 = KSGEL/(C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,2));

  source = (MUMAXFA*S_0)/(1.+S_1);

  dS[eqn] = 0.;

  return source;
}
DEFINE_SOURCE(ec_4,c,t,dS,eqn)
{
  Thread *mixture_thread = THREAD_SUPER_THREAD(t);

  real source, S_0, S_1, S_2, S_3;
  int phase_domain_index_1 = 0;
  int phase_domain_index_2 = 1;

  Thread *phase_1 = THREAD_SUB_THREAD(mixture_thread,phase_domain_index_1);
  Thread *phase_2 = THREAD_SUB_THREAD(mixture_thread,phase_domain_index_2);

  S_0 = C_VOF(c,phase_2)*C_R(c,phase_2)*C_YI(c,phase_2,4);
  S_1 = KSOLE/(C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,4));
  S_2 = KSN/(C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,9));
  S_3 = (C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,4))/KILCFA;

```

```

source = ((MUMAXAL*S_0)/(1.+S_1+S_3))/(1.+S_2);

dS[eqn] = 0.;

return source;
}
DEFINE_SOURCE(ec_5,c,t,dS,eqn)
{
Thread *mixture_thread = THREAD_SUPER_THREAD(t);

real source, S_0, S_1, S_2, S_3, S_4;
int phase_domain_index_1 = 0;
int phase_domain_index_2 = 1;

Thread *phase_1 = THREAD_SUB_THREAD(mixture_thread,phase_domain_index_1);
Thread *phase_2 = THREAD_SUB_THREAD(mixture_thread,phase_domain_index_2);

S_0 = C_VOF(c,phase_2)*C_R(c,phase_2)*C_YI(c,phase_2,5);
S_1 = KSHAV/(C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,5));
S_2 = KSN/(C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,9));
S_3 = (C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,8))/KIHAV;
S_4 = (C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,4))/KILCFA;

source = (((MUMAXAV*S_0)/(1.+S_1))/(1.+S_2))/(1.+S_3)/(1.+S_4);

dS[eqn] = 0.;

return source;
}
DEFINE_SOURCE(ec_6,c,t,dS,eqn)
{
Thread *mixture_thread = THREAD_SUPER_THREAD(t);

real source, S_0, S_1, S_2, S_3, S_4;
int phase_domain_index_1 = 0;

```

```

int phase_domain_index_2 = 1;

Thread *phase_1 = THREAD_SUB_THREAD(mixture_thread,phase_domain_index_1);
Thread *phase_2 = THREAD_SUB_THREAD(mixture_thread,phase_domain_index_2);

S_0 = C_VOF(c,phase_2)*C_R(c,phase_2)*C_YI(c,phase_2,6);
S_1 = KSHAB/(C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,6));
S_2 = KSN/(C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,9));
S_3 = (C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,8))/KIHAB;
S_4 = (C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,4))/KILCFA;

source = (((MUMAXAB*S_0)/(1.+S_1))/(1.+S_2))/(1.+S_3)/(1.+S_4);

dS[eqn] = 0.;

return source;
}
DEFINE_SOURCE(ec_7,c,t,dS,eqn)
{
Thread *mixture_thread = THREAD_SUPER_THREAD(t);

real source, S_0, S_1, S_2, S_3, S_4;
int phase_domain_index_1 = 0;
int phase_domain_index_2 = 1;

Thread *phase_1 = THREAD_SUB_THREAD(mixture_thread,phase_domain_index_1);
Thread *phase_2 = THREAD_SUB_THREAD(mixture_thread,phase_domain_index_2);

S_0 = C_VOF(c,phase_2)*C_R(c,phase_2)*C_YI(c,phase_2,7);
S_1 = KSHAP/(C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,7));
S_2 = KSN/(C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,9));
S_3 = (C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,8))/KIHAP;
S_4 = (C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,4))/KILCFA;

source = (((MUMAXAP*S_0)/(1.+S_1))/(1.+S_2))/(1.+S_3)/(1.+S_4);

```

```

dS[eqn] = 0.;

return source;
}
DEFINE_SOURCE(ec_8,c,t,dS,eqn)
{
Thread *mixture_thread = THREAD_SUPER_THREAD(t);

real source, S_0, S_1, S_2, S_3, S_4;
int phase_domain_index_1 = 0;
int phase_domain_index_2 = 1;

Thread *phase_1 = THREAD_SUB_THREAD(mixture_thread,phase_domain_index_1);
Thread *phase_2 = THREAD_SUB_THREAD(mixture_thread,phase_domain_index_2);

S_0 = C_VOF(c,phase_2)*C_R(c,phase_2)*C_YI(c,phase_2,8);
S_1 = KSHAA/(C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,8));
S_2 = KSN/(C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,9));
S_3 = (C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,9))/KIHAA;
S_4 = (C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,4))/KILCFA;

source = (((MUMAXMA*S_0)/(1.+S_1))/(1.+S_2))/(1.+S_3)/(1.+S_4);

dS[eqn] = 0.;

return source;
}
DEFINE_SOURCE(ec_9,c,t,dS,eqn)
{
Thread *mixture_thread = THREAD_SUPER_THREAD(t);

real source, S_0, S_1, S_2, S_3;
int phase_domain_index_1 = 0;
int phase_domain_index_2 = 1;

Thread *phase_1 = THREAD_SUB_THREAD(mixture_thread,phase_domain_index_1);

```

```

Thread *phase_2 = THREAD_SUB_THREAD(mixture_thread,phase_domain_index_2);

S_0 = C_VOF(c,phase_2)*C_R(c,phase_2)*C_YI(c,phase_2,3);
S_1 = KSGTO/(C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,3));
S_2 = KSN/(C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,9));
S_3 = (C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,4))/KILCFA;

source = -192.16*(((MUMAXHL*S_0)/(1.+S_1))/(1.+S_2))/(1.+S_3);

dS[eqn] = 0.;

return source;
}
DEFINE_SOURCE(ec_10,c,t,dS,eqn)
{
Thread *mixture_thread = THREAD_SUPER_THREAD(t);

real source, S_0, S_1, S_2, S_3;
int phase_domain_index_1 = 0;
int phase_domain_index_2 = 1;

Thread *phase_1 = THREAD_SUB_THREAD(mixture_thread,phase_domain_index_1);
Thread *phase_2 = THREAD_SUB_THREAD(mixture_thread,phase_domain_index_2);

S_0 = C_VOF(c,phase_2)*C_R(c,phase_2)*C_YI(c,phase_2,1);
S_1 = KSGLC/(C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,1));
S_2 = KSN/(C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,9));
S_3 = (C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,4))/KILCFA;

source = -12.884*(((MUMAXFG*S_0)/(1.+S_1))/(1.+S_2))/(1.+S_3);

dS[eqn] = 0.;

return source;
}
DEFINE_SOURCE(ec_11,c,t,dS,eqn)

```

```

{
  Thread *mixture_thread = THREAD_SUPER_THREAD(t);

  real source, S_0, S_1;
  int phase_domain_index_1 = 0;
  int phase_domain_index_2 = 1;

  Thread *phase_1 = THREAD_SUB_THREAD(mixture_thread,phase_domain_index_1);
  Thread *phase_2 = THREAD_SUB_THREAD(mixture_thread,phase_domain_index_2);

  S_0 = C_VOF(c,phase_2)*C_R(c,phase_2)*C_YI(c,phase_2,2);
  S_1 = KSGEL/(C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,2));

  source = -14.493*((MUMAXFA*S_0)/(1.+S_1));

  dS[eqn] = 0.;

  return source;
}
DEFINE_SOURCE(ec_12,c,t,dS,eqn)
{
  Thread *mixture_thread = THREAD_SUPER_THREAD(t);

  real source, S_0, S_1, S_2, S_3;
  real V_0, V_1, V_2, V_3;
  int phase_domain_index_1 = 0;
  int phase_domain_index_2 = 1;

  Thread *phase_1 = THREAD_SUB_THREAD(mixture_thread,phase_domain_index_1);
  Thread *phase_2 = THREAD_SUB_THREAD(mixture_thread,phase_domain_index_2);

  S_0 = C_VOF(c,phase_2)*C_R(c,phase_2)*C_YI(c,phase_2,3);
  S_1 = KSGTO/(C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,3));
  S_2 = KSN/(C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,9));
  S_3 = (C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,4))/KILCFA;

```

```

V_0 = C_VOF(c,phase_2)*C_R(c,phase_2)*C_YI(c,phase_2,4);
V_1 = KSOLE/(C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,4));
V_2 = KSN/(C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,9));
V_3 = (C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,4))/KILCFA;

source = 183.871*(((MUMAXHL*S_0)/(1.+S_1))/(1.+S_2))/(1.+S_3) -
9.837*(((MUMAXAL*V_0)/(1.+V_1+V_3))/(1.+V_2));

dS[eqn] = 0.;

return source;
}
DEFINE_SOURCE(ec_13,c,t,dS,eqn)
{
Thread *mixture_thread = THREAD_SUPER_THREAD(t);

real source, S_0, S_1;
real V_0, V_1, V_2, V_3, V_4;
int phase_domain_index_1 = 0;
int phase_domain_index_2 = 1;

Thread *phase_1 = THREAD_SUB_THREAD(mixture_thread,phase_domain_index_1);
Thread *phase_2 = THREAD_SUB_THREAD(mixture_thread,phase_domain_index_2);

S_0 = C_VOF(c,phase_2)*C_R(c,phase_2)*C_YI(c,phase_2,2);
S_1 = KSGEL/(C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,2));

V_0 = C_VOF(c,phase_2)*C_R(c,phase_2)*C_YI(c,phase_2,5);
V_1 = KSHAV/(C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,5));
V_2 = KSN/(C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,9));
V_3 = (C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,8))/KIHAV;
V_4 = (C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,4))/KILCFA;

source = 0.705*((MUMAXFA*S_0)/(1.+S_1)) -
13.853*(((MUMAXAV*V_0)/(1.+V_1))/(1.+V_2))/(1.+V_3))/(1.+V_4));

```

```

dS[eqn] = 0.;

return source;
}
DEFINE_SOURCE(ec_14,c,t,dS,eqn)
{
Thread *mixture_thread = THREAD_SUPER_THREAD(t);

real source, S_0, S_1, S_2, S_3;
real V_0, V_1;
real U_0, U_1, U_2, U_3, U_4;
int phase_domain_index_1 = 0;
int phase_domain_index_2 = 1;

Thread *phase_1 = THREAD_SUB_THREAD(mixture_thread,phase_domain_index_1);
Thread *phase_2 = THREAD_SUB_THREAD(mixture_thread,phase_domain_index_2);

S_0 = C_VOF(c,phase_2)*C_R(c,phase_2)*C_YI(c,phase_2,1);
S_1 = KSGLC/(C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,1));
S_2 = KSN/(C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,9));
S_3 = (C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,4))/KILCFA;

V_0 = C_VOF(c,phase_2)*C_R(c,phase_2)*C_YI(c,phase_2,2);
V_1 = KSGEL/(C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,2));

U_0 = C_VOF(c,phase_2)*C_R(c,phase_2)*C_YI(c,phase_2,6);
U_1 = KSHAB/(C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,6));
U_2 = KSN/(C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,9));
U_3 = (C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,8))/KIHAB;
U_4 = (C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,4))/KILCFA;

source = 3.079*(((MUMAXFG*S_0)/(1.+S_1))/(1.+S_2))/(1.+S_3)) +
1.045*((MUMAXFA*V_0)/(1.+V_1)) -
11.944*(((MUMAXAB*U_0)/(1.+U_1))/(1.+U_2))/(1.+U_3))/(1.+U_4);

dS[eqn] = 0.;

```

```

return source;
}
DEFINE_SOURCE(ec_15,c,t,dS,eqn)
{
Thread *mixture_thread = THREAD_SUPER_THREAD(t);

real source, S_0, S_1, S_2, S_3;
real V_0, V_1, V_2, V_3;
real U_0, U_1;
real R_0, R_1, R_2, R_3, R_4;
real T_0, T_1, T_2, T_3, T_4;
real O_1, O_2;
int phase_domain_index_1 = 0;
int phase_domain_index_2 = 1;

Thread *phase_1 = THREAD_SUB_THREAD(mixture_thread,phase_domain_index_1);
Thread *phase_2 = THREAD_SUB_THREAD(mixture_thread,phase_domain_index_2);

S_0 = C_VOF(c,phase_2)*C_R(c,phase_2)*C_YI(c,phase_2,3);
S_1 = KSGTO/(C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,3));
S_2 = KSN/(C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,9));
S_3 = (C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,4))/KILCFA;

V_0 = C_VOF(c,phase_2)*C_R(c,phase_2)*C_YI(c,phase_2,1);
V_1 = KSGLC/(C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,1));
V_2 = KSN/(C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,9));
V_3 = (C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,4))/KILCFA;

U_0 = C_VOF(c,phase_2)*C_R(c,phase_2)*C_YI(c,phase_2,2);
U_1 = KSGEL/(C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,2));

R_0 = C_VOF(c,phase_2)*C_R(c,phase_2)*C_YI(c,phase_2,5);
R_1 = KSHAV/(C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,5));
R_2 = KSN/(C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,9));
R_3 = (C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,8))/KIHAV;

```

```

R_4 = (C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,4))/KILCFA;

T_0 = C_VOF(c,phase_2)*C_R(c,phase_2)*C_YI(c,phase_2,7);
T_1 = KSHAP/(C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,7));
T_2 = KSN/(C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,9));
T_3 = (C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,8))/KIHAP;
T_4 = (C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,4))/KILCFA;

O_1 = 15.151*(((MUMAXHL*S_0)/(1.+S_1))/(1.+S_2))/(1.+S_3) +
2.937*(((MUMAXFG*V_0)/(1.+V_1))/(1.+V_2))/(1.+V_3) + 1.178*((MUMAXFA*U_0)/(1.+U_1));
O_2 = 10.029*(((MUMAXAV*R_0)/(1.+R_1))/(1.+R_2))/(1.+R_3)/(1.+R_4) -
10.591*(((MUMAXAP*T_0)/(1.+T_1))/(1.+T_2))/(1.+T_3)/(1.+T_4);

source = O_1 + O_2;

dS[eqn] = 0.;

return source;
}
DEFINE_SOURCE(ec_16,c,t,dS,eqn)
{
Thread *mixture_thread = THREAD_SUPER_THREAD(t);

real source, S_0, S_1, S_2, S_3;
real V_0, V_1;
real U_0, U_1, U_2, U_3;
real R_0, R_1, R_2, R_3, R_4;
real T_0, T_1, T_2, T_3, T_4;
real Q_0, Q_1, Q_2, Q_3, Q_4;
real M_0, M_1, M_2, M_3, M_4;
real O_1, O_2, O_3;
int phase_domain_index_1 = 0;
int phase_domain_index_2 = 1;

Thread *phase_1 = THREAD_SUB_THREAD(mixture_thread,phase_domain_index_1);
Thread *phase_2 = THREAD_SUB_THREAD(mixture_thread,phase_domain_index_2);

```

$S_0 = C\_VOF(c,phase\_2)*C\_R(c,phase\_2)*C\_YI(c,phase\_2,1);$   
 $S_1 = KSGLC/(C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,1));$   
 $S_2 = KSN/(C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,9));$   
 $S_3 = (C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,4))/KILCFA;$

$V_0 = C\_VOF(c,phase\_2)*C\_R(c,phase\_2)*C\_YI(c,phase\_2,2);$   
 $V_1 = KSGEL/(C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,2));$

$U_0 = C\_VOF(c,phase\_2)*C\_R(c,phase\_2)*C\_YI(c,phase\_2,4);$   
 $U_1 = KSOLE/(C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,4));$   
 $U_2 = KSN/(C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,9));$   
 $U_3 = (C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,4))/KILCFA;$

$R_0 = C\_VOF(c,phase\_2)*C\_R(c,phase\_2)*C\_YI(c,phase\_2,5);$   
 $R_1 = KSHAV/(C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,5));$   
 $R_2 = KSN/(C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,9));$   
 $R_3 = (C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,8))/KIHAV;$   
 $R_4 = (C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,4))/KILCFA;$

$T_0 = C\_VOF(c,phase\_2)*C\_R(c,phase\_2)*C\_YI(c,phase\_2,6);$   
 $T_1 = KSHAB/(C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,6));$   
 $T_2 = KSN/(C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,9));$   
 $T_3 = (C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,8))/KIHAB;$   
 $T_4 = (C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,4))/KILCFA;$

$Q_0 = C\_VOF(c,phase\_2)*C\_R(c,phase\_2)*C\_YI(c,phase\_2,7);$   
 $Q_1 = KSHAP/(C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,7));$   
 $Q_2 = KSN/(C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,9));$   
 $Q_3 = (C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,8))/KIHAP;$   
 $Q_4 = (C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,4))/KILCFA;$

$M_0 = C\_VOF(c,phase\_2)*C\_R(c,phase\_2)*C\_YI(c,phase\_2,8);$   
 $M_1 = KSHAA/(C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,8));$   
 $M_2 = KSN/(C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,9));$   
 $M_3 = (C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,9))/KIHAA;$

```

M_4 = (C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,4))/KILCFA;

O_1 = 3.543*(((MUMAXFG*S_0)/(1.+S_1))/(1.+S_2))/(1.+S_3) +
9.583*((MUMAXFA*V_0)/(1.+V_1)) + 18.183*(((MUMAXAL*U_0)/(1.+U_1+U_3))/(1.+U_2));
O_2 = 7.247*(((MUMAXAV*R_0)/(1.+R_1))/(1.+R_2))/(1.+R_3))/(1.+R_4) +
15.366*(((MUMAXAB*T_0)/(1.+T_1))/(1.+T_2))/(1.+T_3))/(1.+T_4);
O_3 = 8.006*(((MUMAXAP*Q_0)/(1.+Q_1))/(1.+Q_2))/(1.+Q_3))/(1.+Q_4) -
24.135*(((MUMAXMA*M_0)/(1.+M_1))/(1.+M_2))/(1.+M_3))/(1.+M_4);

source = O_1 + O_2 + O_3;

dS[eqn] = 0.;

return source;
}
DEFINE_SOURCE(ec_17,c,t,dS,eqn)
{
Thread *mixture_thread = THREAD_SUPER_THREAD(t);

real source, N_0, N_1, N_2, N_3;
real S_0, S_1, S_2, S_3;
real V_0, V_1;
real U_0, U_1, U_2, U_3;
real R_0, R_1, R_2, R_3, R_4;
real T_0, T_1, T_2, T_3, T_4;
real Q_0, Q_1, Q_2, Q_3, Q_4;
real M_0, M_1, M_2, M_3, M_4;
real O_1, O_2, O_3;
int phase_domain_index_1 = 0;
int phase_domain_index_2 = 1;

Thread *phase_1 = THREAD_SUB_THREAD(mixture_thread,phase_domain_index_1);
Thread *phase_2 = THREAD_SUB_THREAD(mixture_thread,phase_domain_index_2);

N_0 = C_VOF(c,phase_2)*C_R(c,phase_2)*C_YI(c,phase_2,3);
N_1 = KSGTO/(C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,3));

```

$N_2 = KSN/(C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,9));$   
 $N_3 = (C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,4))/KILCFA;$

$S_0 = C\_VOF(c,phase\_2)*C\_R(c,phase\_2)*C\_YI(c,phase\_2,1);$   
 $S_1 = KSGLC/(C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,1));$   
 $S_2 = KSN/(C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,9));$   
 $S_3 = (C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,4))/KILCFA;$

$V_0 = C\_VOF(c,phase\_2)*C\_R(c,phase\_2)*C\_YI(c,phase\_2,2);$   
 $V_1 = KSGEL/(C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,2));$

$U_0 = C\_VOF(c,phase\_2)*C\_R(c,phase\_2)*C\_YI(c,phase\_2,4);$   
 $U_1 = KSOLE/(C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,4));$   
 $U_2 = KSN/(C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,9));$   
 $U_3 = (C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,4))/KILCFA;$

$R_0 = C\_VOF(c,phase\_2)*C\_R(c,phase\_2)*C\_YI(c,phase\_2,5);$   
 $R_1 = KSHAV/(C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,5));$   
 $R_2 = KSN/(C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,9));$   
 $R_3 = (C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,8))/KIHAV;$   
 $R_4 = (C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,4))/KILCFA;$

$T_0 = C\_VOF(c,phase\_2)*C\_R(c,phase\_2)*C\_YI(c,phase\_2,6);$   
 $T_1 = KSHAB/(C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,6));$   
 $T_2 = KSN/(C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,9));$   
 $T_3 = (C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,8))/KIHAB;$   
 $T_4 = (C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,4))/KILCFA;$

$Q_0 = C\_VOF(c,phase\_2)*C\_R(c,phase\_2)*C\_YI(c,phase\_2,7);$   
 $Q_1 = KSHAP/(C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,7));$   
 $Q_2 = KSN/(C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,9));$   
 $Q_3 = (C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,8))/KIHAP;$   
 $Q_4 = (C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,4))/KILCFA;$

$M_0 = C\_VOF(c,phase\_2)*C\_R(c,phase\_2)*C\_YI(c,phase\_2,8);$   
 $M_1 = KSHAA/(C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,8));$

```

M_2 = KSN/(C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,9));
M_3 = (C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,9))/KIHAA;
M_4 = (C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,4))/KILCFA;

O_1 = -0.124*(((MUMAXHL*N_0)/(1.+N_1))/(1.+N_2))/(1.+N_3) -
0.124*(((MUMAXFG*S_0)/(1.+S_1))/(1.+S_2))/(1.+S_3) + 2.061*((MUMAXFA*V_0)/(1.+V_1))
- 0.124*(((MUMAXAL*U_0)/(1.+U_1+U_3))/(1.+U_2));
O_2 = -0.124*(((MUMAXAV*R_0)/(1.+R_1))/(1.+R_2))/(1.+R_3)/(1.+R_4) -
0.124*(((MUMAXAB*T_0)/(1.+T_1))/(1.+T_2))/(1.+T_3)/(1.+T_4);
O_3 = -0.124*(((MUMAXAP*Q_0)/(1.+Q_1))/(1.+Q_2))/(1.+Q_3)/(1.+Q_4) -
0.124*(((MUMAXMA*M_0)/(1.+M_1))/(1.+M_2))/(1.+M_3)/(1.+M_4);

source = O_1 + O_2 + O_3;

dS[eqn] = 0.;

return source;
}
DEFINE_SOURCE(ec_18,c,t,dS,eqn)
{
Thread *mixture_thread = THREAD_SUPER_THREAD(t);

real source, S_0, S_1, S_2, S_3;
real V_0, V_1, V_2, V_3;
real U_0, U_1, U_2, U_3, U_4;
real R_0, R_1, R_2, R_3, R_4;
real O_1, O_2, W, Z, Y;
int phase_domain_index_1 = 0;
int phase_domain_index_2 = 1;
int phase_domain_index_3 = 2;

Thread *phase_1 = THREAD_SUB_THREAD(mixture_thread,phase_domain_index_1);
Thread *phase_2 = THREAD_SUB_THREAD(mixture_thread,phase_domain_index_2);
Thread *phase_3 = THREAD_SUB_THREAD(mixture_thread,phase_domain_index_3);

S_0 = C_VOF(c,phase_2)*C_R(c,phase_2)*C_YI(c,phase_2,3);

```

$S_1 = KSGTO/(C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,3));$   
 $S_2 = KSN/(C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,9));$   
 $S_3 = (C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,4))/KILCFA;$

$V_0 = C\_VOF(c,phase\_2)*C\_R(c,phase\_2)*C\_YI(c,phase\_2,4);$   
 $V_1 = KSOLE/(C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,4));$   
 $V_2 = KSN/(C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,9));$   
 $V_3 = (C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,4))/KILCFA;$

$U_0 = C\_VOF(c,phase\_2)*C\_R(c,phase\_2)*C\_YI(c,phase\_2,5);$   
 $U_1 = KSHAV/(C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,5));$   
 $U_2 = KSN/(C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,9));$   
 $U_3 = (C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,8))/KIHAV;$   
 $U_4 = (C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,4))/KILCFA;$

$R_0 = C\_VOF(c,phase\_2)*C\_R(c,phase\_2)*C\_YI(c,phase\_2,6);$   
 $R_1 = KSHAB/(C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,6));$   
 $R_2 = KSN/(C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,9));$   
 $R_3 = (C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,8))/KIHAV;$   
 $R_4 = (C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,4))/KILCFA;$

$O_1 = -0.278*(((MUMAXHL*S_0)/(1.+S_1))/(1.+S_2))/(1.+S_3) -$   
 $6.267*(((MUMAXAL*V_0)/(1.+V_1+V_3))/(1.+V_2));$   
 $O_2 = -3.305*(((MUMAXAV*U_0)/(1.+U_1))/(1.+U_2))/(1.+U_3)/(1.+U_4) -$   
 $3.303*(((MUMAXAB*R_0)/(1.+R_1))/(1.+R_2))/(1.+R_3)/(1.+R_4);$   
 $W =$   
 $(C\_YI(c,phase\_3,2)/44)+(C\_YI(c,phase\_3,1)/16)+(C\_YI(c,phase\_3,3)/34)+(C\_YI(c,phase\_3,4)/$   
 $28);$   
 $Z = (C\_YI(c,phase\_3,2)/44)/W;$   
 $Y = KLA*C\_VOF(c,phase\_3)*(C\_VOF(c,phase\_3)*Z*KH -$   
 $C\_VOF(c,phase\_1)*C\_R(c,phase\_1)*C\_YI(c,phase\_1,10));$

source = O\_1 + O\_2 + Y;

dS[eqn] = 0.;

```

return source;
}
DEFINE_SOURCE(ec_20,c,t,dS,eqn)
{
Thread *mixture_thread = THREAD_SUPER_THREAD(t);

real source, S_0, S_1, S_2, S_3;
real V_0, V_1, V_2, V_3, V_4;
real U_0, U_1, U_2, U_3, U_4;
real R_0, R_1, R_2, R_3, R_4;
real T_0, T_1, T_2, T_3, T_4;
real O_1, O_2;
int phase_domain_index_1 = 0;
int phase_domain_index_2 = 1;

Thread *phase_1 = THREAD_SUB_THREAD(mixture_thread,phase_domain_index_1);
Thread *phase_2 = THREAD_SUB_THREAD(mixture_thread,phase_domain_index_2);

S_0 = C_VOF(c,phase_2)*C_R(c,phase_2)*C_YI(c,phase_2,4);
S_1 = KSOLE/(C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,4));
S_2 = KSN/(C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,9));
S_3 = (C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,4))/KILCFA;

V_0 = C_VOF(c,phase_2)*C_R(c,phase_2)*C_YI(c,phase_2,5);
V_1 = KSHAV/(C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,5));
V_2 = KSN/(C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,9));
V_3 = (C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,8))/KIHAV;
V_4 = (C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,4))/KILCFA;

U_0 = C_VOF(c,phase_2)*C_R(c,phase_2)*C_YI(c,phase_2,6);
U_1 = KSHAB/(C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,6));
U_2 = KSN/(C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,9));
U_3 = (C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,8))/KIHAB;
U_4 = (C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,4))/KILCFA;

R_0 = C_VOF(c,phase_2)*C_R(c,phase_2)*C_YI(c,phase_2,7);

```

```

R_1 = KSHAP/(C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,7));
R_2 = KSN/(C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,9));
R_3 = (C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,8))/KIHAP;
R_4 = (C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,4))/KILCFA;

T_0 = C_VOF(c,phase_2)*C_R(c,phase_2)*C_YI(c,phase_2,8);
T_1 = KSHAA/(C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,8));
T_2 = KSN/(C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,9));
T_3 = (C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,9))/KIHAA;
T_4 = (C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,4))/KILCFA;

O_1 = 1.905*(((MUMAXAL*S_0)/(1.+S_1+S_3))/(1.+S_2)) +
0.966*(((MUMAXAV*V_0)/(1.+V_1))/(1.+V_2))/(1.+V_3))/(1.+V_4) +
0.965*(((MUMAXAB*U_0)/(1.+U_1))/(1.+U_2))/(1.+U_3))/(1.+U_4);
O_2 = 1.509*(((MUMAXAP*R_0)/(1.+R_1))/(1.+R_2))/(1.+R_3))/(1.+R_4) +
6.082*(((MUMAXMA*T_0)/(1.+T_1))/(1.+T_2))/(1.+T_3))/(1.+T_4);

source = O_1 + O_2;

dS[eqn] = 0.;

return source;
}
DEFINE_SOURCE(ec_21,c,t,dS,eqn)
{
Thread *mixture_thread = THREAD_SUPER_THREAD(t);

real source, S_0, S_1, S_2, S_3;
real V_0, V_1;
real U_0, U_1, U_2, U_3, U_4;
real R_0, R_1, R_2, R_3, R_4;
real O_1, O_2, W, Z, Y;
int phase_domain_index_1 = 0;
int phase_domain_index_2 = 1;
int phase_domain_index_3 = 2;

```

Thread \*phase\_1 = THREAD\_SUB\_THREAD(mixture\_thread,phase\_domain\_index\_1);  
 Thread \*phase\_2 = THREAD\_SUB\_THREAD(mixture\_thread,phase\_domain\_index\_2);  
 Thread \*phase\_3 = THREAD\_SUB\_THREAD(mixture\_thread,phase\_domain\_index\_3);

S\_0 = C\_VOF(c,phase\_2)\*C\_R(c,phase\_2)\*C\_YI(c,phase\_2,1);  
 S\_1 = KSGLC/(C\_VOF(c,phase\_1)\*C\_R(c,phase\_1)\*C\_YI(c,phase\_1,1));  
 S\_2 = KSN/(C\_VOF(c,phase\_1)\*C\_R(c,phase\_1)\*C\_YI(c,phase\_1,9));  
 S\_3 = (C\_VOF(c,phase\_1)\*C\_R(c,phase\_1)\*C\_YI(c,phase\_1,4))/KILCFA;

V\_0 = C\_VOF(c,phase\_2)\*C\_R(c,phase\_2)\*C\_YI(c,phase\_2,2);  
 V\_1 = KSGEL/(C\_VOF(c,phase\_1)\*C\_R(c,phase\_1)\*C\_YI(c,phase\_1,2));

U\_0 = C\_VOF(c,phase\_2)\*C\_R(c,phase\_2)\*C\_YI(c,phase\_2,7);  
 U\_1 = KSHAP/(C\_VOF(c,phase\_1)\*C\_R(c,phase\_1)\*C\_YI(c,phase\_1,7));  
 U\_2 = KSN/(C\_VOF(c,phase\_1)\*C\_R(c,phase\_1)\*C\_YI(c,phase\_1,9));  
 U\_3 = (C\_VOF(c,phase\_1)\*C\_R(c,phase\_1)\*C\_YI(c,phase\_1,8))/KIHAP;  
 U\_4 = (C\_VOF(c,phase\_1)\*C\_R(c,phase\_1)\*C\_YI(c,phase\_1,4))/KILCFA;

R\_0 = C\_VOF(c,phase\_2)\*C\_R(c,phase\_2)\*C\_YI(c,phase\_2,8);  
 R\_1 = KSHAA/(C\_VOF(c,phase\_1)\*C\_R(c,phase\_1)\*C\_YI(c,phase\_1,8));  
 R\_2 = KSN/(C\_VOF(c,phase\_1)\*C\_R(c,phase\_1)\*C\_YI(c,phase\_1,9));  
 R\_3 = (C\_VOF(c,phase\_1)\*C\_R(c,phase\_1)\*C\_YI(c,phase\_1,9))/KIHAA;  
 R\_4 = (C\_VOF(c,phase\_1)\*C\_R(c,phase\_1)\*C\_YI(c,phase\_1,4))/KILCFA;

O\_1 = 2.413\*(((MUMAXFG\*S\_0)/(1.+S\_1))/(1.+S\_2))/(1.+S\_3) +  
 1.723\*((MUMAXFA\*V\_0)/(1.+V\_1));  
 O\_2 = 1.01\*(((MUMAXAP\*U\_0)/(1.+U\_1))/(1.+U\_2))/(1.+U\_3)/(1.+U\_4) +  
 17.177\*(((MUMAXMA\*R\_0)/(1.+R\_1))/(1.+R\_2))/(1.+R\_3)/(1.+R\_4);

W =  
 (C\_YI(c,phase\_3,2)/44)+(C\_YI(c,phase\_3,1)/16)+(C\_YI(c,phase\_3,3)/34)+(C\_YI(c,phase\_3,4)/  
 28);

Z = (C\_YI(c,phase\_3,2)/44)/W;  
 Y = KLA\*C\_VOF(c,phase\_3)\*(C\_VOF(c,phase\_3)\*Z\*KH -  
 C\_VOF(c,phase\_1)\*C\_R(c,phase\_1)\*C\_YI(c,phase\_1,10));

source = O\_1 + O\_2 - Y;

```

dS[eqn] = 0.;

return source;
}
DEFINE_SOURCE(ec_22,c,t,dS,eqn)
{
Thread *mixture_thread = THREAD_SUPER_THREAD(t);

real source, S_0, S_1;
int phase_domain_index_1 = 0;
int phase_domain_index_2 = 1;

Thread *phase_1 = THREAD_SUB_THREAD(mixture_thread,phase_domain_index_1);
Thread *phase_2 = THREAD_SUB_THREAD(mixture_thread,phase_domain_index_2);

S_0 = C_VOF(c,phase_2)*C_R(c,phase_2)*C_YI(c,phase_2,2);
S_1 = KSGEL/(C_VOF(c,phase_1)*C_R(c,phase_1)*C_YI(c,phase_1,2));

source = 0.018*((MUMAXFA*S_0)/(1.+S_1));

dS[eqn] = 0.;

return source;
}

```