



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO**

**FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES
ZARAGOZA**

**DISEÑO Y MODELAMIENTO DE UNA BATERÍA DE
FLUJO REDOX**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

INGENIERO QUÍMICO

P R E S E N T A:

**CASTELLANOS VILLA MOISÉS
NOVA DURÁN EDITH SARAI.**



**DIRECTOR DE TESIS:
Dr. FRANCISCO VIDAL CABALLERO DOMÍNGUEZ
COORDIRECTOR DE TESIS:
M. en I.Q. FRANCISCO JAVIER ALMAZAN RUIZ**



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Índice.

| | |
|---|----------|
| LISTA DE FIGURAS..... | V |
| LISTA DE TABLAS | VI |
| NOMENCLATURA..... | VII |
| RESUMEN..... | IX |
| MARCO TEÓRICO. | XI |
| <i>Criterios de diseño</i> | XIV |
| JUSTIFICACIÓN..... | XVI |
| OBJETIVOS..... | XVII |
| <i>Objetivo general:</i> | XVII |
| <i>Objetivos Particulares:</i> | XVII |
| CAPÍTULO I ESTUDIO HIDRODINÁMICO DEL PATRÓN DE FLUJO DE MEZCLADO DE LA FASE LIQUIDA EN EL REACTOR ELECTROQUÍMICO TIPO FM-01-LC | 1 |
| 1.1 <i>Resumen</i> | 2 |
| 1.2 <i>Introducción</i> | 2 |
| 1.2.1 <i>Estudio hidrodinámico a partir de las curvas de distribución de tiempos de residencia.</i> .. | 2 |
| 1.2.1.a <i>Alimentación por pulso</i> | 2 |
| 1.2.1.b <i>Alimentación por escalón</i> | 3 |
| 1.2.2 <i>Momentos en la distribución de tiempos de residencia.</i> | 3 |
| 1.2.3 <i>Modelo por etapas</i> | 4 |
| 1.2.4 <i>Modelos diferenciales.</i> | 5 |
| 1.2.4a <i>Modelo de Dispersión Axial (MDA).</i> | 5 |
| 1.2.4b <i>Modelo de intercambio de masa entre zona dinámica y estancada (PDE).</i> | 7 |
| 1.3 <i>Estrategia experimental y en CFD en COMSOL Multiphysics (5.3) para el Canal inter-electrónico FM-01-LC</i> | 8 |
| 1.3.1 <i>Estrategia experimental escala laboratorio de Canal inter-electrónico convencional FM-01-LC</i> | 8 |
| 1.3.2 <i>Estrategia en CFD con COMSOL Multiphysics (5.3).</i> | 10 |

| | | |
|------------|---|-----------|
| 1.4 | Resultados de la estrategia experimental y en CFD para el canal inter-electródico FM-01-LC | 10 |
| 1.4.1 | Resultados de estrategia experimental..... | 10 |
| 1.4.2 | Resultados de la estrategia en CFD del Canal inter-electródico FM-01-LC..... | 12 |
| 1.5 | Conclusiones parciales..... | 15 |

CAPÍTULO II DISEÑO DEL NUEVO DISTRIBUIDOR DEL REACTOR ELECTROQUÍMICO FM-01-LC UTILIZANDO DINÁMICA COMPUTACIONAL DE FLUIDOS. 16

| | | |
|------------|---|-----------|
| 2.1 | Resumen | 17 |
| 2.2 | Introducción | 17 |
| 2.2.1 | PFR (Reactor de flujo Pistón)..... | 17 |
| 2.2.2 | Reactor de flujo laminar (RFL)..... | 19 |
| 2.2.3 | Reactor electroquímico Tipo filtro prensa..... | 19 |
| 2.2.4 | Fenómenos de transporte en el reactor | 20 |
| 2.3 | Estrategia teórica en el diseño del canal inter-electródico de la BFR..... | 22 |
| 2.3.1 | Modelo hidrodinámico | 22 |
| 2.3.2 | Modelo de Transporte de Masa | 22 |
| 2.3.3 | Condiciones a la Frontera utilizadas en modelado y simulación..... | 23 |
| 2.4 | Estrategia computacional para la simulación del proceso..... | 24 |
| 2.5 | Resultados..... | 25 |
| 2.6 | Conclusiones parciales..... | 28 |

CAPÍTULO III EFECTO DE LAS MALLAS EN EL PATRÓN DE FLUJO DE MEZCLADO DE LA FASE LÍQUIDA EN EL COMPARTIMIENTO DEL REACTOR ELECTROQUÍMICO FM-01-LC-C..... 29

| | | |
|------------|--|-----------|
| 3.1 | Resumen | 30 |
| 3.2 | Introducción | 30 |
| 3.2.1 | Mallas inertes..... | 30 |
| 3.2.2 | Mallas activas..... | 31 |
| 3.3 | Estrategia teórica de diseño del canal-inter-electródico FM-01-LC-C con mallas..... | 34 |
| 3.3.1 | Modelamiento Hidrodinámico | 34 |
| 3.3.2 | Flujo Laminar..... | 34 |
| 3.3.3 | Hidrodinámica..... | 34 |
| 3.3.4 | Modelo de Transporte de masa..... | 34 |
| 3.3.5 | Condiciones a la Frontera utilizadas en modelado y simulación..... | 35 |
| 3.3.5.1 | Para transporté de momentum o hidrodinámica..... | 35 |
| 3.3.5.2 | Para transferencia de masa..... | 36 |

| | | |
|---------------------|--|-----------|
| 3.4 | <i>Estrategia computacional para la simulación con inyección de trazador al canal FM-01-LC-C.</i> | 36 |
| 3.4.1 | <i>Modelado del trazador.</i> | 36 |
| 3.5 | <i>Resultados de la estrategia en CFD para el canal inter-electrónico FM-01-LC-C.</i> | 38 |
| 3.5.1 | <i>Distribución de tiempos de residencia.</i> | 48 |
| 3.6 | Conclusiones parciales | 51 |
| CONCLUSIONES | | 52 |
| ANEXO I | | 54 |
| | <i>Transformación de la curva de DTR a edades adimensionales.</i> | 55 |
| BIBLIOGRAFÍA | | 71 |

Lista de Figuras

| | |
|--|-----|
| Fig. 1 Esquema simplificado de los componentes de una batería de flujo | XII |
| Fig. 2 Tipos de batería de Flujo | XII |
| Fig. 1- 1 Representación de la dispersión (Modelo de flujo pistón con dispersión) | 6 |
| Fig. 1- 2 Momentos de DTR en recipientes cerrados con diversos grados de retomezclado, según las predicciones del modelo de dispersión [14] | 6 |
| Fig. 1- 3 Modelo de flujo pistón con dispersión axial e intercambio de masa con zonas estancadas | 7 |
| Fig. 1- 4 (a) Reactor FM-01-LC escala laboratorio, (b) Promotor de turbulencia o mallas (c) mallas estructuradas y (d) Canal inter-electrónico convencional | 9 |
| Fig. 1- 5 Sistema experimental con entrada de pulso para una batería de Flujo REDOX | 9 |
| Fig. 1- 6 Curva de DTR adimensionales a diferentes flujos respectivamente () experimental, () Modelo de intercambio de masa entre zonas dinámicas y estancadas PDE y () Modelos de dispersión axial (MDA). El eje X, tiempo adimensional ϑ , el eje Y, edades adimensionales $E(\vartheta)$ | 11 |
| Fig. 1- 7 Canal inter-electrónico convencional (forma de abanico) FM-01-LC, simulación del cambio de la concentración (mol/m ³) y con 3 promotores de turbulencia o mallas | 13 |
| Fig. 1- 8 Canal inter-electrónico convencional (forma de abanico) FM-01-LC, simulación del campo de velocidad (m/s) y con 3 promotores de turbulencia o mallas | 13 |
| Fig. 1- 9 Curva de DTR adimensional a 2 L/min y a 3 mallas del Canal inter-electrónico. () Experimental, () CFD con COMSOL Multiphysics 5.3 y () Flujo ideal o un flujo pistón | 14 |
| Fig 2- 1 PFR | 18 |
| Fig 2- 2 Diagrama esquemático de los elementos de un fluido en un reactor de flujo laminar | 19 |
| Fig 2- 3 Condiciones iniciales y condiciones de frontera utilizadas en la simulación de la hidrodinámica y el transporte de masa en el FM-01-LC | 23 |
| Fig 2- 4 Canales de distribución a vacío a) FM-01 -LC-A b) FM-01 -LC-B c) FM-01-LC-C | 25 |
| Fig 2- 5 Magnitud y Campo de Velocidad (m/s) con canales de distribución en la Simulación FM-01-A-B-C-LC | 26 |
| Fig 2- 6 Simulación de la hidrodinámica de una celda de distribución FM-01- A-B-C-LC, utilizando COMSOL Multiphysics® 5.3 | 27 |
| Fig. 3- 1 Diferentes tipos de promotores de turbulencia inertes, clasificados con las letras A-F (mostradas en la figura), que son utilizados para aumentar el transporte de masa en la celda FM-01-LC [[Brown et. al., 1992].] | 31 |
| Fig. 3- 2 Mallas de acero Inoxidable T-316-L en CFD y experimental | 32 |
| Fig. 3- 3 Condiciones a la frontera utilizadas en el canal inter-electrónico FM-01-C-LC con mallas | 35 |
| Fig. 3- 4 Esquema para señalar la ubicación de los ejes en el canal FM-01-C-LC | 37 |
| Fig. 3- 5 Canal inter-electrónico FM-01-LC-C, simulación del campo de velocidad, a) 3 mallas (0.0102 m/s), b) 5 mallas (0.0115 m/s) y c) 7 mallas (0.0132 m/s) a un flujo de (0.4 L/min) y un tiempo 160 (ϑ) | 38 |
| Fig. 3- 6 Canal inter-electrónico FM-01-LC-C, simulación del cambio de la concentración (mol/m ³) a) 3 mallas, b) 5 mallas y c) 7 mallas a un flujo de (0.4 L/min) y un tiempo 160 (ϑ) | 39 |
| Fig. 3- 7 Canal inter-electrónico FM-01-LC-C, simulación del campo de velocidad, a) 3 mallas (0.0153 m/s), b) 5 mallas (0.0172 m/s) y c) 7 mallas (0.0198 m/s) a un flujo de (0.6 L/min) y un tiempo 160 (ϑ) | 40 |
| Fig. 3- 8 Canal inter-electrónico FM-01-LC-C, simulación del cambio de la concentración (mol/m ³) a) 3 mallas, b) 5 mallas y c) 7 mallas a un flujo de (0.6 L/min) y un tiempo 160 (ϑ) | 41 |
| Fig. 3- 9 Canal inter-electrónico FM-01-LC-C, simulación del campo de velocidad, a) 3 mallas (0.0204 m/s), b) 5 mallas (0.0230 m/s) y c) 7 mallas (0.0264 m/s) a un flujo de (0.8L/min) y un tiempo 130 (ϑ) | 42 |
| Fig. 3- 10 Canal inter-electrónico FM-01-LC-C, simulación del cambio de la concentración (mol/m ³) a) 3 mallas, b) 5 mallas y c) 7 mallas a un flujo de (0.8 L/min) y un tiempo 130 (ϑ) | 43 |
| Fig. 3- 11 Canal inter-electrónico FM-01-LC-C, simulación del campo de velocidad, a) 3 mallas (0.0255 m/s), b) 5 mallas (0.0288 m/s) y c) 7 mallas (0.0330 m/s) a un flujo de (1.0L/min) y un tiempo 110 (ϑ) | 44 |
| Fig. 3- 12 Canal inter-electrónico FM-01-LC-C, simulación del cambio de la concentración (mol/m ³) a) 3 mallas, b) 5 mallas y c) 7 mallas a un flujo de (1.0 L/min) y un tiempo 110 (ϑ) | 45 |

| | |
|--|----|
| Fig. 3- 13 Canal inter-electrónico FM-01-LC-C, simulación del campo de velocidad, a) 3 mallas (0.0511 m/s), b) 5 mallas (0.0576 m/s) y c) 7 mallas (0.0660 m/s) a un flujo de (2.0 L/min) y un tiempo 80 (θ) | 46 |
| Fig. 3- 14 Canal inter-electrónico FM-01-LC-C, simulación del cambio de la concentración (mol/m ³) a) 3 mallas, b) 5 mallas y c) 7 mallas a un flujo de (2.0 L/min) y un tiempo 80 (θ) | 47 |
| Fig. 3- 15 DTR representadas a diferentes flujos a) 0.4 LPM b) 0.6LPM c) 0.8LPM d) 1.0 LPM y e) 2.0 LPM; realizando una comparación en la diferentes mallas. | 49 |

Lista de Tablas

| | |
|--|----|
| Tabla 1- 1 Parámetros calculados a diferentes flujos ya establecidos y con 3 mallas dentro del canal con los modelos de (a) Modelo de intercambio de masa entre zonas dinámicas y estancadas PDE y (b) Modelos de dispersión axial (MDA). | 15 |
| Tabla 2- 1 Propiedades físicas del fluido | 24 |
| Tabla 3- 1 Dispersión axial de simulación en COMSOL con 3 mallas | 50 |
| Tabla 3- 2 Dispersión axial de simulación en COMSOL con 5 mallas | 50 |
| Tabla 3- 3 Dispersión axial de simulación en COMSOL con 7 mallas | 50 |
| Tabla a- 1 Datos obtenidos en COMSOL para adimensionalizar las edades, a un flujo de 0.4 L/min con 3 mallas | 56 |
| Tabla a- 2 Datos obtenidos en COMSOL para adimensionalizar las edades, a un flujo de 0.6 L/min con 3 mallas | 57 |
| Tabla a- 3 Datos obtenidos en COMSOL para adimensionalizar las edades, a un flujo de 0.8 L/min con 3 mallas | 58 |
| Tabla a- 4 Datos obtenidos en COMSOL para adimensionalizar las edades, a un flujo de 1.0 L/min con 3 mallas | 59 |
| Tabla a- 5 Datos obtenidos en COMSOL para adimensionalizar las edades, a un flujo de 2.0 L/min con 3 mallas | 60 |
| Tabla a- 6 Datos obtenidos en COMSOL para adimensionalizar las edades, a un flujo de 0.4 L/min con 5 mallas | 61 |
| Tabla a- 7 Datos obtenidos en COMSOL para adimensionalizar las edades, a un flujo de 0.6 L/min con 5 mallas | 62 |
| Tabla a- 8 Datos obtenidos en COMSOL para adimensionalizar las edades, a un flujo de 0.8 L/min con 5 mallas | 63 |
| Tabla a- 9 Datos obtenidos en COMSOL para adimensionalizar las edades, a un flujo de 1.0 L/min con 5 mallas | 64 |
| Tabla a- 10 Datos obtenidos en COMSOL para adimensionalizar las edades, a un flujo de 2.0 L/min con 5 mallas ... | 65 |
| Tabla a- 11 Datos obtenidos en COMSOL para adimensionalizar las edades, a un flujo de 0.4 L/min con 7 mallas ... | 66 |
| Tabla a- 12 Datos obtenidos en COMSOL para adimensionalizar las edades, a un flujo de 0.6 L/min con 7 mallas ... | 67 |
| Tabla a- 13 Datos obtenidos en COMSOL para adimensionalizar las edades, a un flujo de 0.8 L/min con 7 mallas ... | 68 |
| Tabla a- 14 Datos obtenidos en COMSOL para adimensionalizar las edades, a un flujo de 1.0 L/min con 7 mallas ... | 69 |
| Tabla a- 15 Datos obtenidos en COMSOL para adimensionalizar las edades, a un flujo de 2.0 L/min con 7 mallas ... | 70 |

Nomenclatura

- \bar{t} Es el tiempo de residencia promedio que el trazador permanece en el reactor.
- σ^2 Es la varianza que tan amplia es la distribución
- s^3 Es el grado de asimetría en la distribución
- n El número de tanques en serie.
- σ^2_{θ} La varianza adimensional.
- X Conversión.
- τ Es el tiempo de residencia en uno de los reactores.
- K Constante de equilibrio.
- V_0 Volumen
- C Representa la concentración de trazador a diferentes tiempos.
- C_0 Representa la concentración del trazador inicial.
- L_z Representa la longitud del reactor.
- Z Representa la posición.
- U_{ef} Es la velocidad efectiva.
- D_{ax} Es el coeficiente de dispersión axial.
- Pe Es el número de Peclet.
- C_d Es la concentración del trazador en la zona dinámica.
- C_e Es la concentración del trazador en la zona estática.
- C_0 Es la concentración del trazador inicial.
- u_{ef} Es la velocidad dinámica efectiva.
- h_d y h_s Representan los volúmenes de retención dinámico y estático, respectivamente.
- N Es el número de transporte de masa.
- K Es el coeficiente de transferencia de masa volumétrico efectivo entre la zona dinámica y estancadas.
- $E(\theta)$ Edad adimensional
- Θ Tiempo adimensional
- D/UL Inverso al número de Peclet
- MDA Modelo de dispersión axial
- PDE Modelo de intercambio de masa entre zona dinámica y estancada

CFD Dinámica de fluidos computacional.

S.H.E Electrodo de Hidrógeno Estándar

N_i Es el flux de masa de la especie **i**

D_i Es el coeficiente de difusión

∇C_i El gradiente de concentración

∇V Gradiente de potencial

Z_i Es el valor de la carga del ion de la especie

u Es el vector de velocidad de disolución

R Es la constante universal de los gases

T Es la temperatura

F Es la constante de Faraday

ρ Es la densidad de fluido

μ La viscosidad

P La presión

F Las fuerzas externas

Re Reynolds

$y(t)$ Es adimensional

σ Es la desviación estándar

t Es el tiempo

τ Es el tiempo de residencia promedio dado por la relación entre la longitud del canal

L Es la longitud del canal

U_0 La velocidad de entrada.

Resumen.

En este trabajo se llevó a cabo el estudio hidrodinámico y de transporte de masa sin reacción de un nuevo canal-inter-electródico, para su uso en una batería de flujo Redox. Se partió de la evaluación del canal inter-electródico FM-01-LC (reactor comercial) con 3 mallas y se llevó a cabo la experimentación para obtener la distribución de edades adimensionales, con la finalidad de estudiar las desviaciones del patrón de flujo de mezclado de la fase líquida utilizando dos modelos: (a) el modelo de dispersión axial (MDA) y (b) el Modelo de intercambio de masa entre zona dinámica y estancada (PDE) con el software *FLEX PDE versión 5.0*.

Debido a que los modelos MDA y PDE describen las desviaciones de la idealidad de manera global, se llevó a cabo el modelado y simulación en *COMSOL Multiphysics 5.3b* (Lic.1038192) resolviendo las ecuaciones de *Navier-Stokes* en régimen laminar para la hidrodinámica y la ecuación de convección-difusión para el transporte de masa. Esto para describir visualmente en donde existen desviaciones y corregirlas utilizando el software anteriormente mencionado.

Seguido de esto se propusieron tres nuevos diseños de canal inter-electródico con la finalidad de obtener una mejor distribución de la fase líquida en el canal inter-electródico, para así tener un mejor contacto electrodo-electrolito y así mismo, obtener menores desviación a la idealidad en los tiempos de distribución de residencia llevado a cabo en un reactor de tipo filtro-prensa, modificando los promotores de flujo a la entrada del canal (FM-01-LC-C) en *COMSOL Multiphysics 5.3b*.

El nuevo canal fue evaluado con electrodos tridimensionales, con 3, 5 y 7 mallas a diferentes flujos de entrada (0.4, 0.6, 0.8, 1.0 y 2.0 L/min), visualizando así flujo y distribución de tiempos de residencia con simulaciones en *COMSOL Multiphysics 5.3b* mediante la técnica de estímulo-respuesta con un pulso gaussiano; logrando así describir adecuadamente un modelo teórico propuesto, el cual fue comparado con el canal inter-electródico FM-01-LC.

El modelo generado nace a partir del balance de masa; se comparó con datos experimentales para así ser validado, fue utilizado para el diseño de nuevos canales interelectrónicos sin necesidad de realizar experimentos, ni de construir distribuidores y con una mejor eficiencia ahorrando tiempo, recursos y dinero.

Marco Teórico.

Existen muchas formas de clasificar las baterías, por ejemplo, según su diseño, su funcionamiento, su campo de aplicación, etc. Inicialmente se pueden comenzar clasificando las baterías en función de la posibilidad que tienen de ser recargadas una vez que han sido descargadas. Así pues, se pueden definir en dos grupos

Baterías primarias: Estas no pueden ser recargadas una vez que han sido descargadas, por tanto, cuando se agote su energía debe ser sustituida por otra batería.

Baterías secundarias: Estas pueden ser recargadas una vez que han sido descargadas; de ahí la denominación “baterías recargables o acumuladores”. Generalmente, estas baterías están preparadas para funcionar con razones de descargas altas y en un margen amplio de temperaturas. [1]

Existen diferentes tipos de baterías entre ellos están las BRF (*REDOX flow batteries* o *Baterías de Flujo REDOX*) que son dispositivos que convierten y almacenan la energía eléctrica en energía química, promoviendo una reacción de reducción y oxidación de especies entre dos sustancias activas para almacenar y liberar energía.

El principio de funcionamiento de una RFB (Fig. 1) consiste en dos compartimentos donde se ubican los electrodos, separados mediante una membrana selectiva o separador, que impide la mezcla de ambos electrolitos. La reacción se lleva a cabo en la superficie electrónica y la membrana debe ser permeable a ciertos iones para neutralizar el balance de cargas a ambos lados de la misma; los electrolitos, que contienen pares REDOX en altas concentraciones, son recirculados desde los tanques de almacenamiento al interior del reactor electroquímico mediante bombas y allí son transformados en una especie u otra según si el ciclo es de carga o de descarga, es decir, si se quiere almacenar o liberar energía. Por tanto, la energía es almacenada en el propio electrolito, que, al transformarse en una especie u otra, aceptará o liberará electrones debido a las reacciones de transferencia que tienen sobre los electrodos.

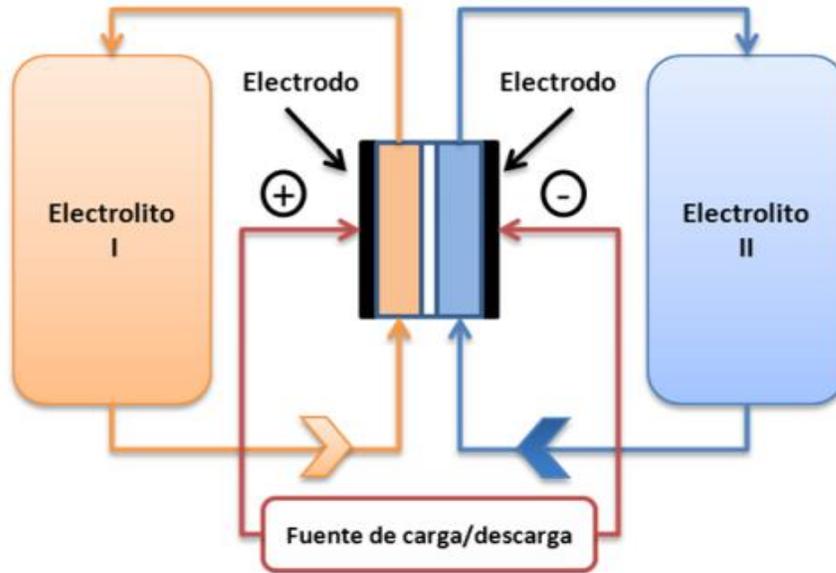


Fig. 3 Esquema simplificado de los componentes de una batería de flujo.

Las RFBs no requieren mantenimiento durante su vida útil, debido a que los electrolitos se regeneran en cada ciclo y los electrodos son un mero soporte donde tiene lugar la reacción electroquímica, por tanto, no sufren deterioro ni cambios en su estructura. Además, pueden trabajar en condiciones de carga/descarga profunda a diferencia de otras baterías, que se degradan rápidamente si se someten frecuentemente a descargas profundas.

Las baterías de flujo existen en una gran variedad de formas y diseños. Una primera clasificación divide a este tipo de baterías entre sistemas de flujo puro y sistemas de flujo híbrido, como se muestra en la Fig. 2.

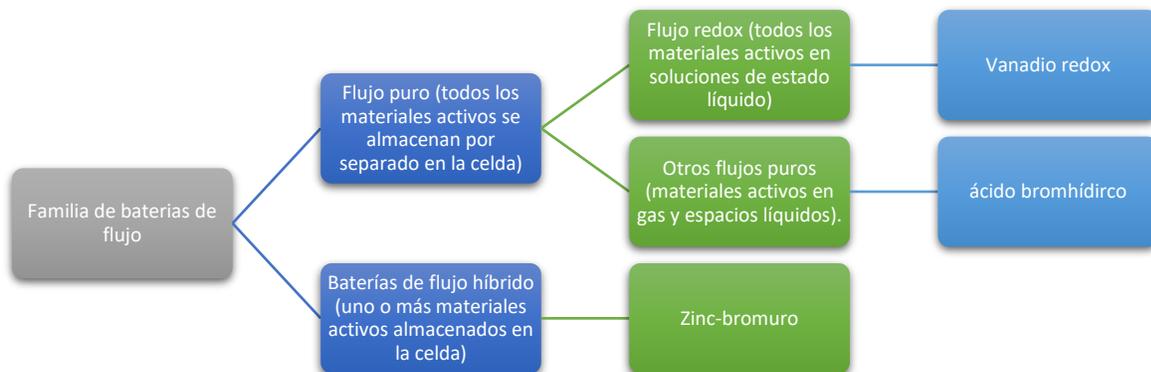


Fig. 4 Tipos de batería de Flujo [2].

Dadas las características de las baterías de flujo, se indica su empleo en aplicaciones que requieran varias horas de almacenamiento, entre las cuales encontramos:

- *Almacenamiento de energía acoplado a generadores o plantas de generación eléctrica de origen renovable.* El excedente de producción en horas de baja demanda puede almacenarse para ser utilizado en horas de baja producción si es necesario, asegurando un suministro continuo a pesar de la naturaleza intermitente de las fuentes renovables.
- *Suministro continuo en estaciones de telecomunicaciones y áreas remotas.* Dada su fiabilidad y ciclo de vida, pueden ser utilizadas durante años de manera aislada
- *Niveladores de carga y amortiguadores de picos en centrales de generación eléctrica.* La utilización de sistemas de almacenamiento permite aplanar la curva de demanda de electricidad, de manera que durante las horas valle se almacene parte de la energía para poder ser utilizada con posterioridad en horas punta. Esta estrategia evita la necesidad de sobredimensionar la potencia instalada en una red, disminuyendo los costes en infraestructuras.
- *Construcción de estaciones o puntos de recarga para vehículos eléctricos:* se podrían concebir como equivalentes a las gasolineras para vehículos de combustión. La estrategia a seguir sería instalar RFBs que almacenen los excedentes de producción eléctrica provenientes de fuentes renovables en horas de valle, cuando la electricidad es más barata, para recargar vehículos durante el resto del día a mayor precio. De esta forma, el incremento extra de la demanda eléctrica durante el día debido a las recargas de los coches eléctricos podría suplirse con la energía que almacenen las baterías de flujo durante la noche, sin necesidad de generar más energía durante el día destinada a este fin.

Por esto las ventajas que ofrecen este tipo de tecnologías son:

- Tecnología estable y modulable gracias a la independencia de las características de energía y potencia.
- Vida útil elevada: superior a 10 000 ciclos completos
- Elevadas tasas de descarga

- Se recargan rápidamente sustituyendo el electrolito o revirtiendo la reacción Redox
- Bajo mantenimiento
- Su funcionamiento se puede detener con solo apagar las bombas
- Tiempos de respuesta rápidos, del orden de milisegundos

En cuanto a los inconvenientes destacan:

- La principal desventaja de las baterías de flujo es la baja densidad de energía en comparación a otros sistemas.
- Requisitos de sistema más complicados de bombas, sensores, gestión de flujo y potencia y recipientes de contención secundarios.
- Elevado tamaño del conjunto, sobre todo el volumen que puede llegar a alcanzar los tanques de almacenamiento del electrolito.
- Baja madurez de la tecnología.
- Toxicidad de algunos electrolitos empleados. [3]

Criterios de diseño

Para comenzar el diseño del reactor electroquímico primeramente se realiza un análisis de 4 elementos los cuales son:

- Geometría del canal inter-electródico
- Hidrodinámica
- Transporte de masa.
- Distribución de corriente y potencial.

En este trabajo inicialmente se propone diseñar la geometría de la entrada del canal inter-electródico con la finalidad de evitar desviaciones del patrón de flujo de mezclado de la fase líquida en el reactor y que afectan la velocidad de transferencia de masa y de carga (la conversión y selectividad de la reacción), que a menudo conduce a procesos costosos e ineficientes.

En los últimos 10 años, se han utilizado diferentes métodos para caracterizar el patrón de flujo de líquido como:

- a) Visualización de flujo dentro del canal de flujo por inyección de un trazador (DTR, Distribución de tiempos de residencia).

- b) Estudio del patrón de flujo y visualización de transferencia de masa por electrodeposición en electrodo de placa plana.
- c) Fluorescencia inducida por láser.
- d) Utilizando un análisis de momento simple o solución de modelos matemáticos de la distribución del tiempo de residencia (DTR).
- e) Simulación numérica de la DTR por dinámica computacional de fluidos, en donde se resuelven las ecuaciones de *Navier-Stokes* y la ecuación Difusión-convección en regímenes laminar y de turbulencia.

Una manera de disminuir el número de experimentos es desarrollar un modelado matemático, debidamente validado con datos experimentales, que describa el proceso a diferentes condiciones de operación, con el fin de realizar simulaciones que permitan encontrar las condiciones óptimas del proceso y es por eso que se utilizó el último método mencionado en la lista. Para la parte de la hidrodinámica se utilizó la ecuación de *Navier-Stokes* (régimen laminar) y para el transporte de masa la ecuación de Difusión-convección (régimen laminar).

Justificación.

La demanda de energía a nivel global ha generado que los países desarrollados y emergentes estén interesados en mejorar el uso y el acceso a la energía, así como incrementar la eficiencia energética e incrementar la contribución de energía renovable convencional y no convencional en la matriz energética mundial.

Una ventaja importante de las RFBs es que se puede incrementar independientemente tanto la energía como la potencia que proporcionan, dotándolas de una gran versatilidad en cuanto al diseño y a las aplicaciones de estos dispositivos. En caso de necesitar mayor capacidad de almacenamiento, se puede aumentar el volumen de los tanques o la concentración del electrolito, y si se necesita mayor potencia bastaría con construir celdas de mayor tamaño o añadir un mayor número de celdas en el interior del reactor.

Una de las necesidades es el almacenamiento de energía a gran escala de fuentes renovables, solar o eólica. Estos dispositivos permiten aprovechar eficientemente y maximizar el uso de las energías renovables. *Escalante-García (2015)* describió que una batería de flujo es un sistema que almacena energía eléctrica en un compuesto químico disuelto en una solución, llamado electrolito.

En México dicha área de investigación está iniciando y solo se identifican dos grupos de trabajo, uno de la Universidad de Guanajuato y el otro del Instituto de Energías Renovables de la Universidad Nacional Autónoma México (UNAM) en conjunto con la Universidad Autónoma Metropolitana (UAM-I).

Por consiguiente, para el diseño del RFB es necesario desarrollar una estrategia que permita determinar parámetros característicos del sistema haciendo uso de la dinámica computacional de fluidos (*CFD, por sus siglas en inglés*) con la finalidad predecir comportamientos y desviaciones de la idealidad en diversas condiciones de operación.

Objetivos.

Objetivo general:

“Diseño, modelado y simulación de un canal inter-electrónico para una batería de Flujo REDOX”.

Objetivos Particulares:

- Simulación y experimentación de DTR en canal inter-electrónico FM-01-LC.
- Establecer los criterios de diseño para una batería de flujo REDOX.
- Establecer el diseño geométrico del canal para su simulación en *COMSOL Multiphysics 5.3b*.
- Acoplar el transporte de masa sin reacción electroquímica.
- Comparación y validación del nuevo canal inter-electrónico con el canal FM-01-LC.

Capítulo I

Estudio hidrodinámico del patrón de flujo de mezclado de la fase líquida en el reactor electroquímico tipo FM-01-LC

1.1 Resumen

En este capítulo se presenta el estudio teórico - experimental de la hidrodinámica y el transporte de masa en un canal inter-electródico de un reactor electroquímico tipo filtro prensa escala laboratorio (FM-01-LC) con la finalidad de observar las desviaciones del patrón de flujo de mezclado de la fase líquida y cómo afecta la transferencia de masa y a la distribución de corriente y potencial (la conversión y selectividad de la reacción), que a menudo conduce a procesos costosos e ineficientes.

1.2 Introducción

1.2.1 Estudio hidrodinámico a partir de las curvas de distribución de tiempos de residencia

La distribución de tiempos de residencia se define como el tiempo que tarda una mol de cantidad de sustancia de entrada a salida en un reactor. Esta técnica puede ser utilizada en la caracterización del patrón de flujo de mezclado y permite evaluar las posibles desviaciones de los elementos de fluido en el reactor y como estas afectan a la tasa de conversión y eficiencia de transformación en el reactor.

La DTR se determina experimentalmente inyectando una sustancia, molécula o átomo inerte, llamado trazador, al reactor en cierto tiempo ($t=0$), y después midiendo la concentración del trazador (C), en la corriente del efluente en función del tiempo.

Además de ser una especie no reactiva que se detecte con facilidad, el trazador debe tener propiedades físicas similares a las de la mezcla de reacción y ser completamente solubles en esa mezcla. Existen dos distintos métodos para alimentar el trazador y visualizar el comportamiento del fluido: (a) alimentación por pulso y (b) alimentación por escalón.

1.2.1.a Alimentación por pulso

Se inyecta una cantidad de trazador (N_0) de manera repentina como carga a la corriente de alimentación que entra al reactor en un tiempo tan breve como sea posible. Después se mide la concentración a la salida en función del tiempo. Surgen problemas cuando la curva de concentración contra el tiempo tiene una cola larga, porque el análisis puede dar lugar a grandes inexactitudes. [14]

1.2.1.b Alimentación por escalón

El escalón positivo suele ser más fácil de efectuar experimentalmente que la prueba de pulso, aquí no es necesario conocer la cantidad total del trazador en la alimentación durante el periodo de prueba como en la prueba de pulso.

Un gran problema es que se debe usar una gran cantidad de trazador y estos regularmente son muy costosos. [14]

1.2.2 Momentos en la distribución de tiempos de residencia.

“Es muy común para comparar una DTR emplear momentos, en lugar de intentar emplear toda la distribución” (Wen y Fan). A continuación, se presentan 3 momentos que normalmente son empleados:

El primero es el tiempo de residencia

$$\bar{t} = \frac{\int_0^{\infty} tE(t)dt}{\int_0^{\infty} E(t)dt} = \int_0^{\infty} tE(t)dt \quad (1-1)$$

En donde:

\bar{t} = Es el tiempo de residencia promedio que el trazador permanece en el reactor.

“Este es el primer momento que proporciona el tiempo promedio que las moléculas del efluente pasan dentro del reactor”. [14]

El segundo es la varianza, que es una indicación de la distribución; a medida que el valor de este momento es mayor la dispersión también lo es.

$$\sigma^2 = \int_0^{\infty} (t - t_m)^2 E(t)dt \quad (1-2)$$

En donde:

σ^2 = Es la varianza que tan amplia es la distribución

“La magnitud de este momento es una indicación de la “dispersión” de la distribución; a medida que el valor de este momento es mayor, la dispersión de la distribución también lo es”. [14]

El tercero es la asimetría de distribución que también se toma en la medida y se relaciona con la asimetría de la distribución.

$$s^3 = \frac{1}{\sigma^{3/2}} \int_0^{\infty} (t - t_m)^3 E(t)dt \quad (1-3)$$

En donde:

s^3 = Es el grado de asimetría en la distribución

“Este momento mide el grado de asimetría de una distribución, en una dirección o en la otra, en referencia a la media”. [14]

La hidrodinámica de las fases fluidas en reactores comúnmente se describe por varios modelos aproximados cuyos parámetros pueden ser evaluados de la distribución de tiempos de residencia. Esta formulación es conveniente debido a que la curva de DTR puede obtenerse experimentalmente adicionando un trazador inerte en forma de pulso o escalón a la corriente de entrada al reactor y midiendo la concentración del trazador en la corriente de salida del reactor. [14]

Las características de mezclado para cada fase pueden cuantificarse ajustando los modelos de flujo a estos datos. El mezclado de las fases líquida de un reactor se ha representado usando 2 categorías de modelos de flujo: a) modelo diferencial y b) modelo por etapas.

1.2.3 Modelo por etapas

1.2.3.a Modelo de n tanques en serie (TES).

El modelo TES es de un solo parámetro. Se analizará la DTR para determinar el número de tanques ideales, n , colocados en serie que darán aproximadamente la misma DTR que el reactor no ideal. Este modelo representa el mezclado axial por una serie de etapas interconectadas y por el retromezclado en la dirección opuesta al flujo. El número de etapas o tanques y la cantidad de retroflujo o circulación inter etapas, caracteriza el grado de retromezclado. En el caso límite de un número infinito de tanque en serie, prevalece flujo pistón.

La DTR se analizará a partir de un pulso del trazador inyectado en el primero de tres CSTR de igual tamaño colocados en serie. La fracción de material que sale del sistema de tres reactores en el tiempo $t + \Delta t$ es: $E(t) = \frac{C_3(t)}{\int_0^{\infty} C_3(t) dt}$ En donde: $C_3(t)$ es la concentración del trazador en el efluente del tercer reactor.

Integrando se obtiene la expresión para la concentración del trazador en el efluente del primer reactor. Para flujo volumétrico constante $v = v_0$, volúmenes de los reactores

idénticos $V_1 = V_2 = V_i$, tiempos espaciales de los reactores individuales idénticos $T_1 = T_2 = T_i$.

El número de tanques en serie se puede determinar, calculando la varianza adimensional σ_θ , mediante un experimento con trazador. [13]

$$n = \frac{1}{\sigma_\theta^2} = \frac{\tau^2}{\sigma^2} \quad (1-4)$$

En Donde:

n = El número de tanques en serie.

σ_θ^2 = La varianza adimensional.

La expresión anterior incorpora el número de tanques necesarios para representar un reactor real como si fueran n tanques ideales en serie. Si n es demasiado grande, entonces se puede utilizar un reactor PFR. Cuando la reacción es de primer orden, podemos usar:

$$X = 1 - \frac{1}{(1 + \tau_i k)^n} \quad \tau_i = \frac{V}{v_0 n} \quad (1-5)$$

En Donde:

X = Conversión.

τ = Es el tiempo de residencia en uno de los reactores.

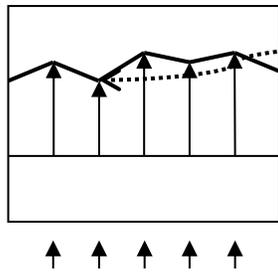
K = Constante de equilibrio.

V_0 = Volumen.

1.2.4 Modelos diferenciales.

1.2.4a Modelo de Dispersión Axial (MDA).

Es fundamentalmente un modelo diferencial desarrollado para caracterizar el mezclado axial. En este modelo existe una dispersión axial del material, que se rige por una metodología de la ley de la difusión de Fick supuestamente al flujo pistón. Así pues, además del transporte del flujo volumétrico, $uA_c c$, cada componente de la mezcla se transporta a través de cualquier sección transversal del reactor a una velocidad igual a $\left[-D_a A_c \left(\frac{dc}{dz}\right)\right]$ que es resultado de la difusión molecular y por convección. [12]



Fluctuaciones debido al campo de velocidad y a la difusión molecular y turbulenta.

Fig. 1- 1 Representación de la dispersión (Modelo de flujo pistón con dispersión).

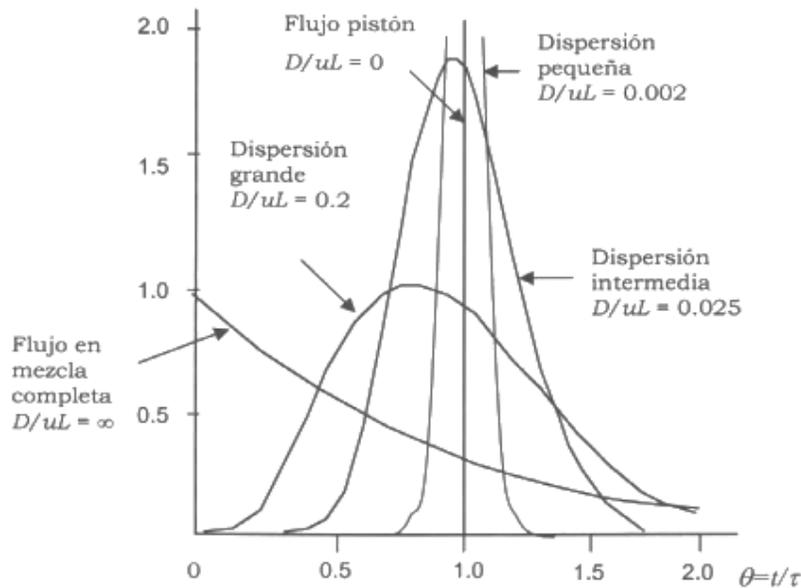


Fig. 1- 2 Momentos de DTR en recipientes cerrados con diversos grados de retromezclado, según las predicciones del modelo de dispersión [14]

La Curva obtenida a partir de un experimento de pulso-respuesta, se puede aproximar por medio de la ecuación adimensional que representa el balance de modelos del trazador.

$$\frac{\partial C}{\partial \theta} = \frac{1}{Pe} \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} - \frac{\partial c}{\partial z} \quad (1-6)$$

Considerando un sistema cerrado, las condiciones de frontera son:

$$z = 0; c = \frac{1}{Pe} \frac{\partial c(0^+, \theta)}{\partial z}; z = 1; \frac{\partial c(0^-, \theta)}{\partial z} = 0 \quad (1-7)$$

La condición inicial antes de que el trazador es inyectado al reactor son:

$$\theta = 0; c(z, \theta) = 0 \quad (1-8)$$

En las expresiones anteriores las variables adimensionales quedan definidas como:

$$c = \frac{C}{C_0}; z = \frac{Z}{L_z}; \theta = \frac{tu_{ef}}{L_z}, Pe = \frac{u_{ef}L_z}{D_{ax}} \quad (1-9)$$

En Donde:

C = Representa la concentración de trazador a diferentes tiempos.

C₀ = Representa la concentración del trazador inicial.

L_z = Representa la longitud del reactor.

Z = Representa la posición.

U_{ef} = Es la velocidad efectiva.

D_{ax} = Es el coeficiente de dispersión axial.

1.2.4b Modelo de intercambio de masa entre zona dinámica y estancada (PDE).

En este modelo se considera una zona de fluido dinámico con dispersión axial que intercambia materia con una zona estática. [12]

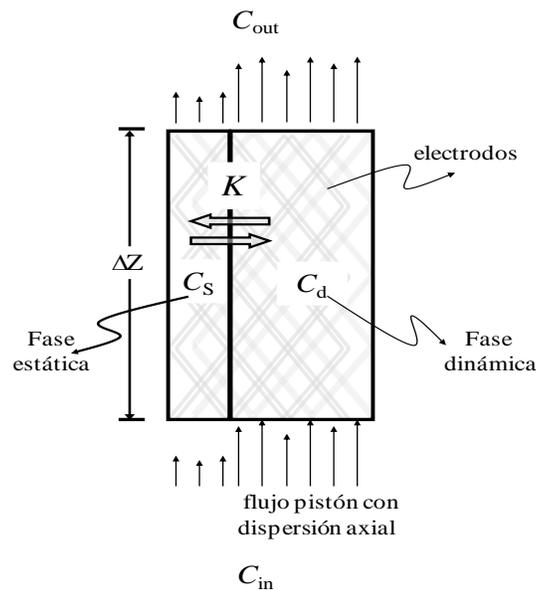


Fig. 1-3 Modelo de flujo pistón con dispersión axial e intercambio de masa con zonas estancadas

Las ecuaciones adimensionales que se derivan del balance de masa del trazador, son las siguientes:

La ecuación que describe la zona dinámica.

$$\varphi \frac{\partial C_d}{\partial \theta} = \frac{1}{Pe_d} \frac{\partial^2 C_d}{\partial z^2} - \frac{\partial C_d}{\partial z} - N(C_d - C_e) \quad (1-10)$$

La ecuación que describe la zona estática es:

$$\frac{\partial C_e}{\partial \theta} = \frac{N}{1-\varphi} (C_d - C_e) \quad (1-11)$$

Las condiciones de frontera y condiciones iniciales respectivamente, son:

$$Z = 0; C_d = \frac{1}{Pe_d} \frac{\partial C_d(0^+, \theta)}{\partial Z}; Z = 1; \frac{\partial C_d(0^-, \theta)}{\partial Z} = 0 \quad (1-12)$$

$$\theta = 0; C_d(Z, \theta) = C_e(Z, \theta) = 0 \quad (1-13)$$

En donde los parámetros representan:

$$C_d = \frac{C_d}{C_0}; C_e = \frac{C_e}{C_0}; Z = \frac{Z}{L_Z}; \theta = \frac{tu_{d,ef}}{L_Z} \quad (1-14)$$

$$Pe_d = \frac{u_{d,ef} L_Z}{D_{ax}}; N = \frac{ka_{ef} L_Z}{u_{d,ef}}; \varphi = \frac{h_d}{h_d + h_s} \quad (1-15)$$

En Donde:

Pe = Es el número de Peclet.

C_d = Es la concentración del trazador en la zona dinámica.

C_e = Es la concentración del trazador en la zona estática.

C₀ = Es la concentración del trazador inicial.

u_{ef} = Es la velocidad dinámica efectiva.

h_d y h_s = Representan los volúmenes de retención dinámico y estático, respectivamente.

N = Es el número de transporte de masa.

K = Es el coeficiente de transferencia de masa volumétrico efectivo entre la zona dinámica y estancadas.

1.3 Estrategia experimental y en CFD en COMSOL Multiphysics (5.3) para el Canal inter-electrónico FM-01-LC

1.3.1 Estrategia experimental escala laboratorio de Canal inter-electrónico convencional FM-01-LC

Se acondiciono el reactor FM-01-LC con el Canal inter-electrónico convencional (forma de abanico) con 3 mallas de acero inoxidable y con las siguientes dimensiones.

- Longitud total: 0.25 m
- Longitud efectiva: 0.16 m
- Ancho: 0.4 m.
- Espesor: 0.019 m.

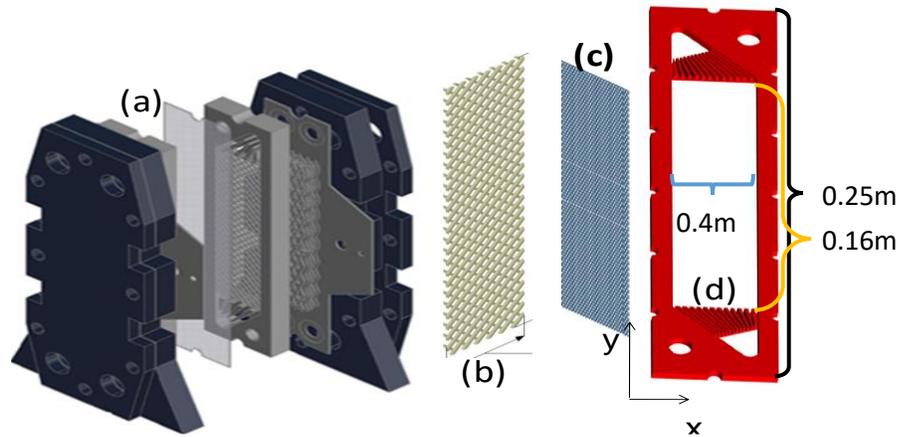


Fig. 1- 4 (a) Reactor FM-01-LC escala laboratorio, (b) Promotor de turbulencia o mallas (c) mallas estructuradas y (d) Canal inter-electródico convencional.

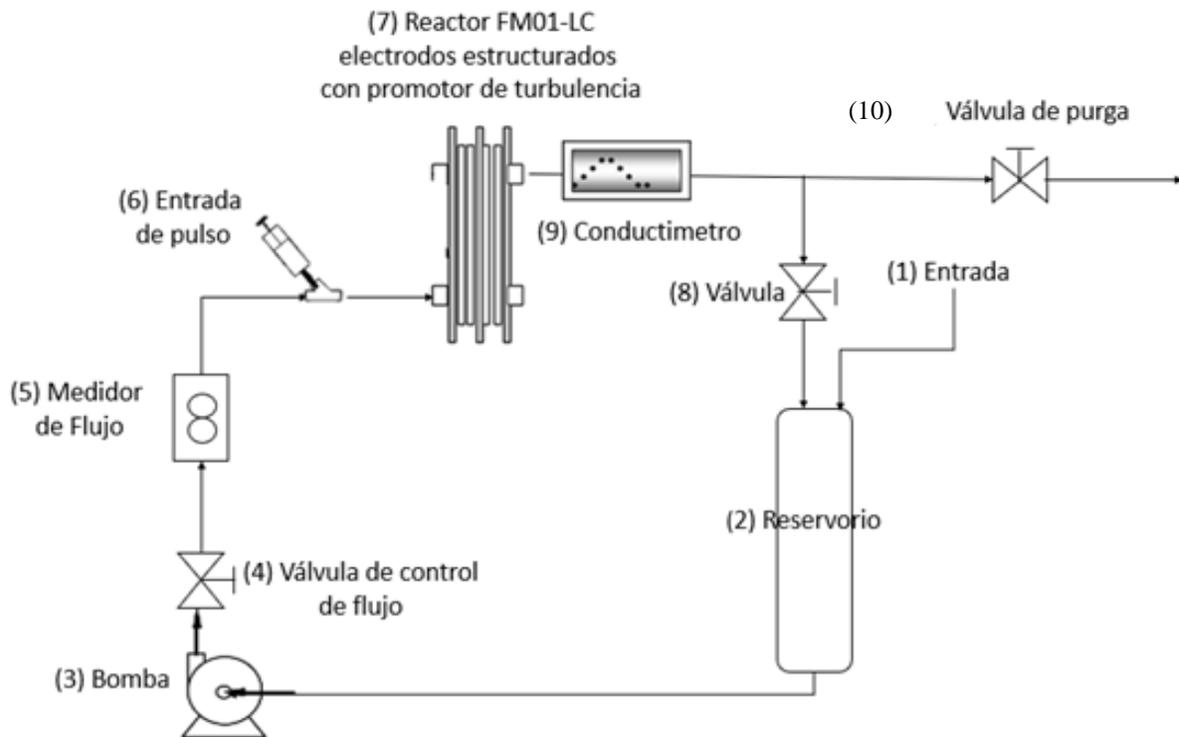


Fig. 1- 5 Sistema experimental con entrada de pulso para una batería de Flujo REDOX.

Como se observa en la *fig. 1-5* la entrada de agua es mediante un reservorio (2) que es transportada mediante una bomba (3), la cual pasa por la primer válvula (4) que es quien controla el flujo y posteriormente a un medidor de flujo (5), a la entrada del reactor se le acondiciono una forma de inyectar el trazador (perturbación por pulso) y la salida se colocó un sensor de conductividad (9) que mide en continuo y es quien censara el cambio

de conductividad debido a la perturbación, una vez que el líquido es censado la válvula (8) es cerrada y se abre la válvula (10) abierta esto para que no genere una recirculación; Por ultimo esto se llevó a cabo en diferentes flujos 0.4, 0.6, 0.8, 1.0, 2.0L/min para un mejor estudio.

1.3.2 Estrategia en CFD con COMSOL Multiphysics (5.3).

Una manera de disminuir el número de experimentos es desarrollar un modelado matemático, debidamente validado con datos experimentales, que describa el proceso a diferentes condiciones de operación, con el fin de realizar simulaciones que permitan encontrar las condiciones óptimas del proceso y es por eso que se utilizó la simulación en CFD. Para la parte de la hidrodinámica se utilizó la ecuación de *Navier–Stokes* (régimen laminar) y para el transporte de masa la ecuación de Difusión-convección (régimen laminar).

Se llevó a cabo un estudio en CFD con el software, *COMSOL Multiphysics 5.3* y se construyó un modelo en 3D del Canal inter-electrónico en el cual se aplicó una perturbación en la entrada para estudiar la hidrodinámica.

1.4 Resultados de la estrategia experimental y en CFD para el canal inter-electrónico FM-01-LC

1.4.1 Resultados de estrategia experimental.

A continuación, se presentan los resultados experimentales de las curvas DTR de las edades adimensionales versus tiempo adimensional, obtenidos a partir de los datos de concentración versus tiempo real para cada flujo establecido.

La secuencia de cálculo que se utilizó para la transformación de datos de concentración versus tiempo a la forma adimensional, se presentan con detalle en el *anexo (I)*. La transformación de datos a la forma dimensional se requiere para tratar de aproximar los datos experimentales por medio de algunos de los modelos diferenciales.

En la *fig. 1-6* se muestran las curvas de DTR experimentales y a diferentes flujos además se muestran la comparación de los dos diferentes modelos antes mencionados que son *Modelo de Dispersión axial* y *Modelo de intercambio de masa entre zonas estáticas y dinámicas*, los cuales fueron diseñados en el *software FLEX PDE versión 5.0*

y cada uno se distingue por un diferente símbolo y color. El eje de las Y representa la distribución de edades adimensionales, mientras que el eje de las X representa el tiempo adimensional.

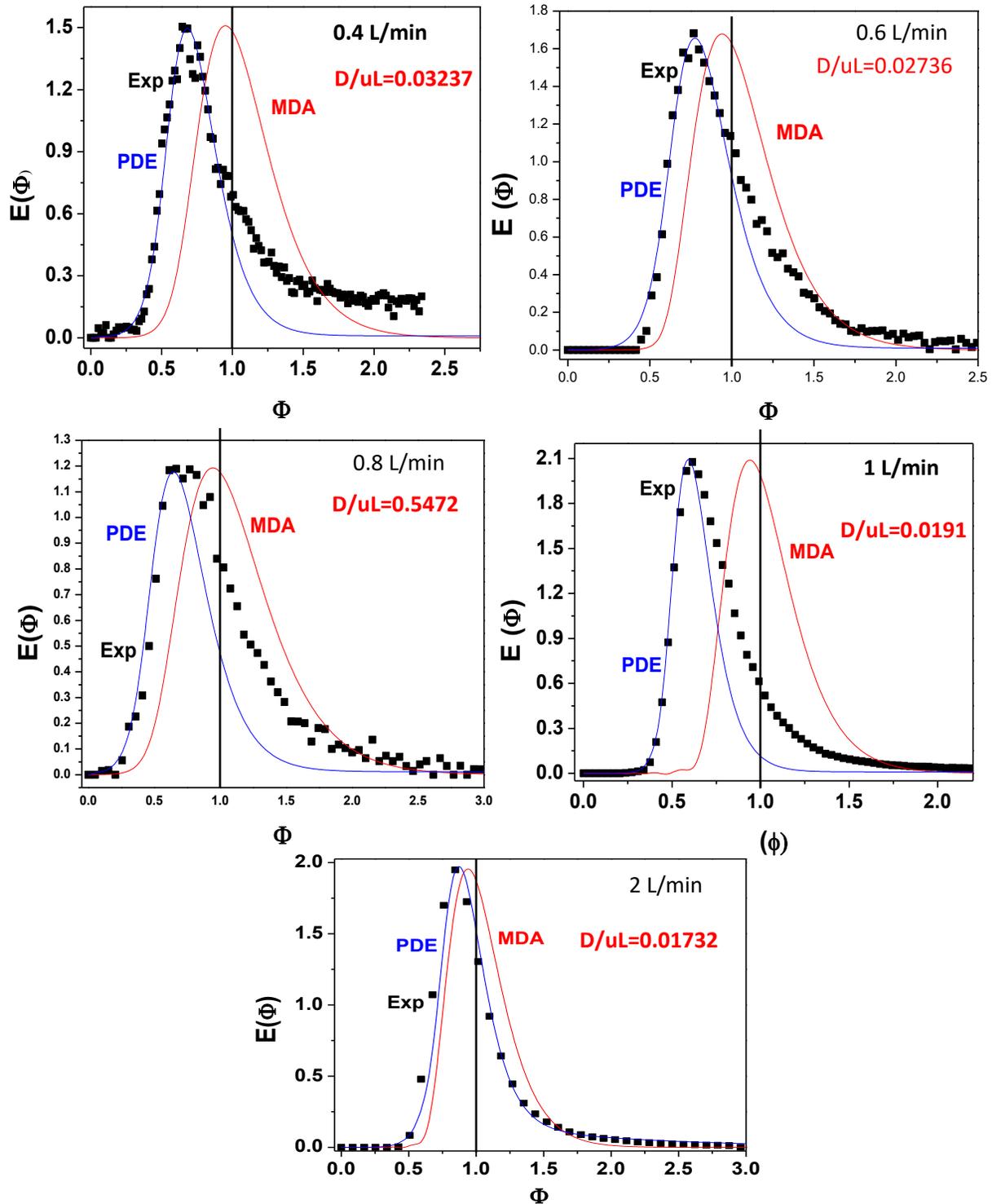


Fig. 1- 6 Curva de DTR adimensionales a diferentes flujos respectivamente (■) experimental, (—) Modelo de intercambio de masa entre zonas dinámicas y estancadas PDE y (—) Modelos de dispersión axial (MDA). El eje X, tiempo adimensional ϑ , el eje Y, edades adimensionales $E(\vartheta)$

Como se observa en las gráficas de la *fig. 1-6* el modelo que mejor describe los datos experimentales es el Modelo de intercambio de masa entre zonas dinámicas y estancadas, por otro lado, en todas existe un desplazamiento hacia la izquierda esto quiere decir que existe canalamientos o zonas de baja velocidad dentro del Canal inter-electrónico con dispersiones medianas y pequeñas a excepción de 0.8 L/m en donde se encuentra con una dispersión grande $D/UL= 0.5472$ comparado con el que se muestra en la *fig. 1-2* en el cual se indica que para una dispersión grande es desde $D/UL= 0.2$.

Los fenómenos antes mencionados se muestran a continuación en las siguientes figuras, en los cuales se aprecia mejor los fenómenos que existen dentro del canal inter-electrónico.

1.4.2 **Resultados de la estrategia en CFD del Canal inter-electrónico FM-01-LC**

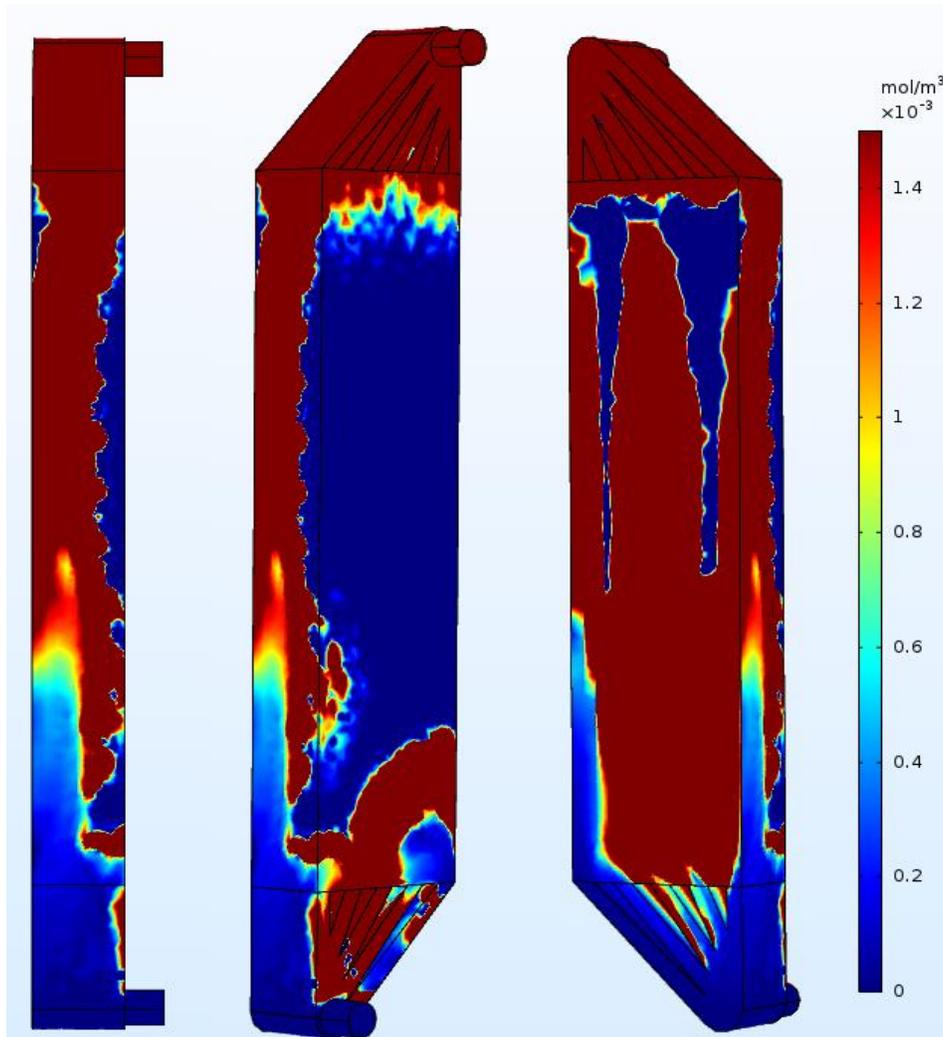


Fig. 1- 7 Canal inter-electrónico convencional (forma de abanico) FM-01-LC, simulación del cambio de la concentración (mol/m³) y con 3 promotores de turbulencia o mallas

Como se puede observar en la Fig. 1-7 (simulación del cambio de la concentración) existen los fenómenos como son zonas estancadas entre las 3 mallas colocadas, un flujo preferencial en las paredes del canal inter-electrónico y zonas muertas dentro del canal.

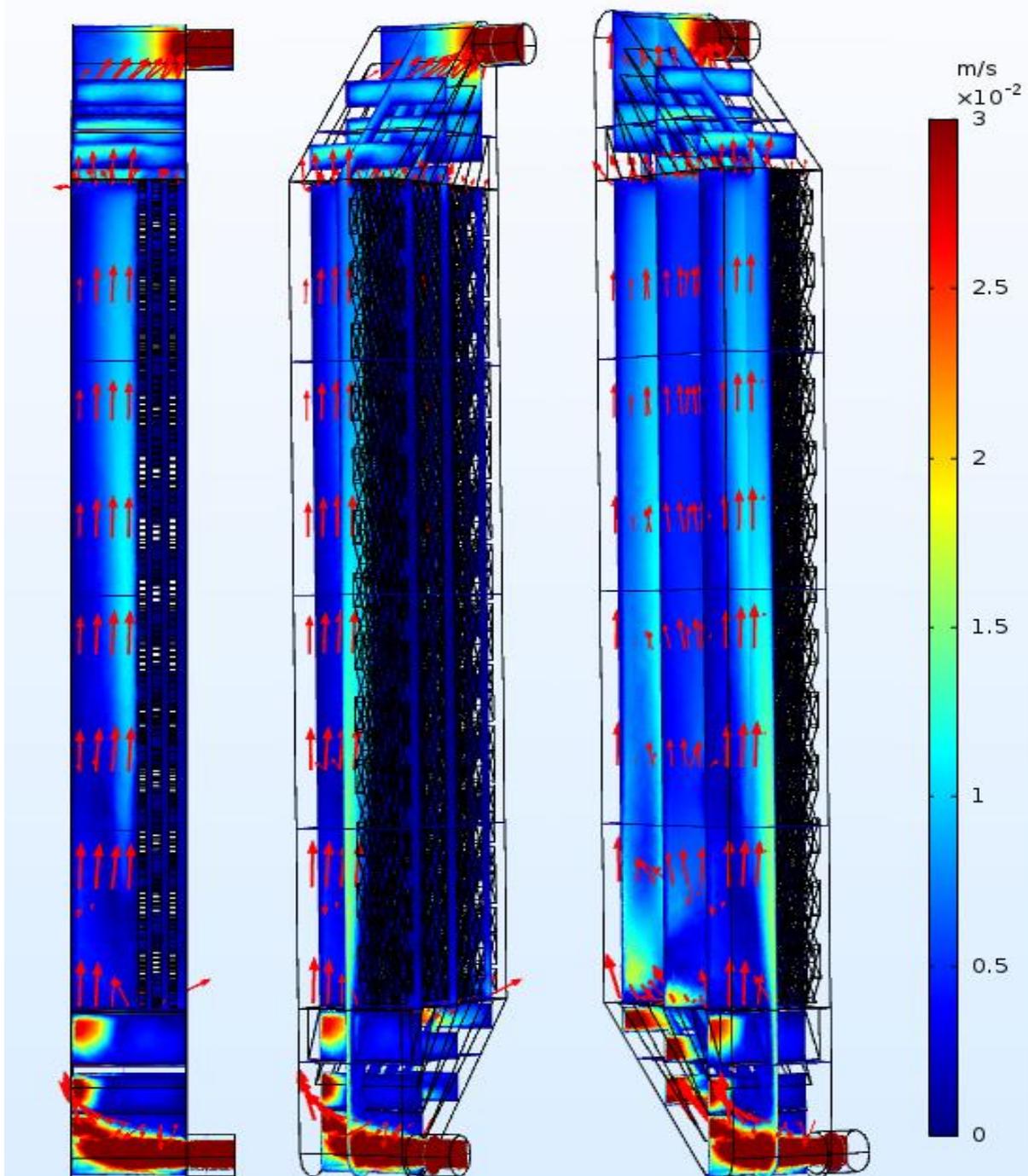


Fig. 1- 8 Canal inter-electrónico convencional (forma de abanico) FM-01-LC, simulación del campo de velocidad (m/s) y con 3 promotores de turbulencia o mallas

En la *fig.1-8* (simulación del campo de velocidad) se observan zonas de alta velocidad en las paredes del Canal inter-electrónico, así como zonas de baja velocidad o canalamientos, por último, se puede observar un retromezclado a la entrada del canal debido a los distribuidores de flujo.

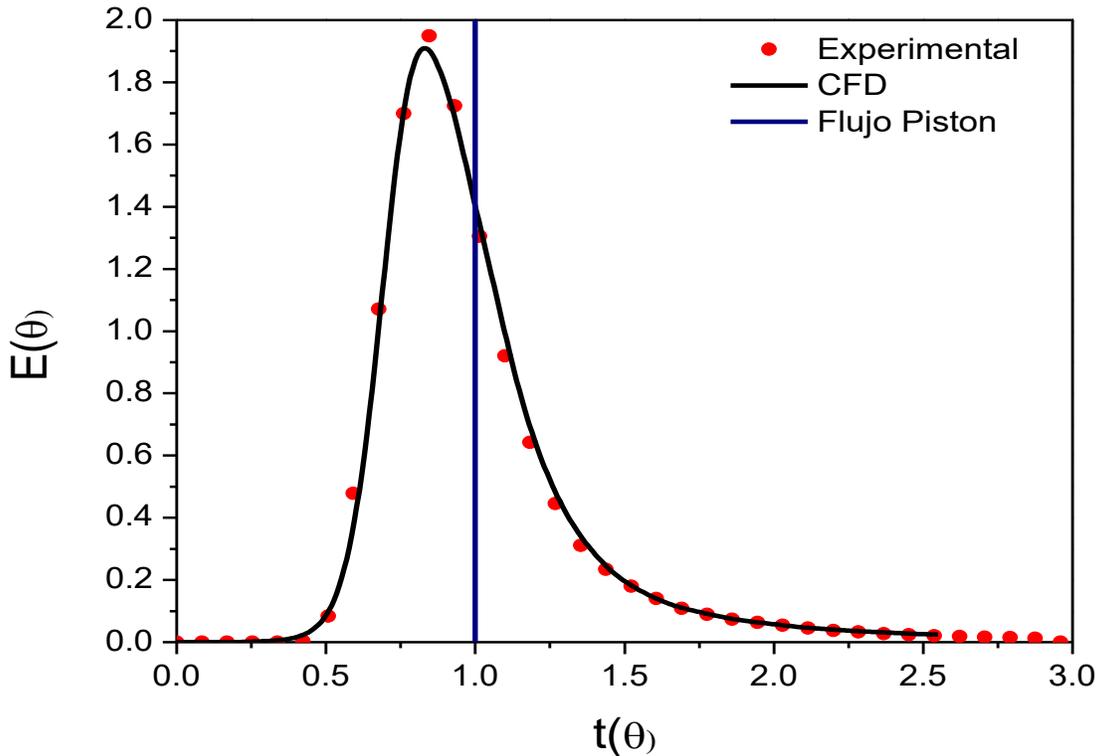


Fig. 1-9 Curva de DTR adimensional a 2 L/min y a 3 mallas del Canal inter-electrónico. (●) Experimental, (—) CFD con COMSOL Multiphysics 5.3 y (—) Flujo ideal o un flujo pistón.

En la *fig. 1-9* se muestran las curvas experimentales y teóricas de la distribución de tiempos de residencia en el reactor electroquímico FM-01-LC operando a 2 LPM. En estos patrones se observan desviaciones de la idealidad en un reactor tipo flujo pistón (línea negra), las desviaciones mostradas en los datos experimentales son: (a) un canalamiento o zona de alta velocidad, denotado en el desplazamiento del pico máximo a valores menores de uno en la distribución de datos y (b) un estancamiento o zona de baja velocidad el cual se visualiza en el coleo de la curva.

Tabla 1- 1 Parámetros calculados a diferentes flujos ya establecidos y con 3 mallas dentro del canal con los modelos de (a) Modelo de intercambio de masa entre zonas dinámicas y estancadas PDE y (b) Modelos de dispersión axial (MDA).

| Flujo (LPM) | Re | EXP | | MDA | | PDE | |
|-------------|------------|----------|-----------|----------|-----------|----------|-----------|
| | | D_{ax} | Pe | D_{ax} | Pe | D_{ax} | Pe |
| 0.4 | 109.820718 | 0.000135 | 16.247515 | 0.000080 | 27.412281 | 0.000071 | 30.887077 |
| 0.6 | 164.731077 | 0.000113 | 29.230947 | 0.000104 | 31.629555 | 0.000090 | 36.549708 |
| 0.8 | 219.641435 | 0.000278 | 15.764450 | 0.000260 | 16.869096 | 0.002400 | 1.827485 |
| 1.0 | 274.551794 | 0.001327 | 4.132884 | 0.000115 | 47.673532 | 0.000105 | 52.213868 |
| 2.0 | 549.103588 | 0.000331 | 33.098453 | 0.000260 | 42.172740 | 0.000190 | 57.710065 |

En la *tabla 1-1* la primera columna corresponde al coeficiente de dispersión axial $(D_{ax})_{exp}$ y al Peclet $(Pe)_{exp}$, experimentales, que fueron calculados a través de las curvas de DTR experimentales a partir del método de los momentos descrita en el libro Levenspiel, 3^{ra} edición. Mientras que las siguientes cuatro columnas corresponden al coeficiente de dispersión axial teórico $(D_{ax})_{teo}$ y al Peclet teórico $(Pe)_{teo}$, respectivamente, los cuales fueron calculados a través del ajuste de las curvas de DTR experimentales utilizando el *modelo de dispersión axial* y *Modelo de intercambio de masa entre zona dinámica y estancada* implementando el *software FLEX PDE versión 5.0*.

1.5 Conclusiones parciales.

Con la finalidad de validar el modelo utilizado en la simulación de la curva de distribución de tiempos de residencia, en la *Fig. 1-9* se muestra el comparativo de los patrones obtenidos contra los datos experimentales, el cual describe las desviaciones en el reactor electroquímico con una desviación menor al 5%, es decir este modelo es adecuado para describir los patrones de flujo de mezclado de la fase líquida dentro del reactor electroquímico. Finalmente se propone diseñar un nuevo canal inter-electródico para mejorar las desviaciones de patrón de flujo de mezclado de la fase líquida dentro del reactor electroquímico y así mejorar el contacto electrodo-especie electroactiva, y mejorar el rendimiento del reactor electroquímico utilizado como batería de flujo REDOX.

Capítulo II

Diseño del nuevo distribuidor del reactor electroquímico FM-01-LC utilizando dinámica computacional de fluidos.

2.1 Resumen

Una vez validados los modelos de dinámica computacional de fluidos en este capítulo se presenta el diseño utilizando simplemente una estrategia teórica para el canal inter-electrónico de una (VRFB) *utilizando COMSOL Multiphysics 5.3*, de acuerdo a los objetivos del trabajo se abordan tres rubros: (a) Geometría del canal inter-electrónico, (b) la Hidrodinámica después de seleccionar la geometría del canal y (c) el transporte de masa sin reacción.

2.2 Introducción

Un reactor es un equipo determinado cuya función es la de generar una reacción química específica sobre una materia. Esta operación consiste en la separación, multiplicación o reestructuración de las moléculas o átomos de la materia tratada para formular un nuevo producto como resultado. El reactor, a través de sus mecanismos, afecta factores de la materia como temperatura, presión, características termodinámicas y cinéticas, consistencia física, estados presentes durante la reacción (líquido, sólido, gaseoso).

Existen diferentes tipos de reactores en este capítulo se hará énfasis al PFR el cual dará pauta para analizar un reactor electroquímico tipo filtro prensa

2.2.1 PFR (Reactor de flujo Pistón)

Un reactor de flujo pistón se caracteriza por que le flujo del fluido a través del reactor es regular, es decir, ningún elemento del mismo sobrepasa o se mezcla con cualquier otro elemento situado antes o después de aquel. La condición necesaria y suficiente para que exista un flujo pistón es que el tiempo de residencia de todos los elementos del fluido sea el mismo. [13]

El modelo del PFR considera que el fluido se desplaza como tapón, es decir, sin gradientes radiales de concentración, temperatura o velocidad de reacción. A medida que los materiales que reaccionan entran y fluyen axialmente por el reactor son consumidos y la conversión aumenta en toda longitud del mismo. Para desarrollar la ecuación de diseño del PFR primero multiplicamos ambos lados de la ecuación de diseño de este reactor por -1.

$$-\frac{dF_A}{dV} = -r_A \quad (2-1)$$

Para un sistema de flujo, F_A se ha dado previamente en términos de la velocidad de flujo molar alimentada por F_{A0} y la conversión X

$$F_A = F_{A0} - F_{A0}X \quad (2-2)$$

Derivando

$$dF_A = -F_{A0}dX \quad (2-3)$$

Y combinando en ecuación (2-1), se obtiene la forma diferencial de la ecuación del diseño para una PFR:

$$F_{A0} \frac{dX}{dV} = -r_A \quad (2-4)$$

A continuación, separando las variables e integrándolas con la frontera $V = 0$ cuando $X=0$ obtenemos el volumen del PFR necesario para alcanzar una conversión específica X :

$$V = F_{A0} \int_0^X \frac{dX}{-r_A} \quad (2-5)$$

Para realizar las integraciones en las ecuaciones de diseño del reactor intermitente y PFR, así como para evaluar la ecuación de diseño CSTR, es necesario saber cómo varía la velocidad de reacción $-r_A$ con la concentración (y por tanto la conversión) de la especie que reacciona.

Las reacciones en fase gaseosa se realizan principalmente en PFR, en los cuales el flujo suele ser turbulento. Asumiendo que no haya dispersión ni gradientes radiales de temperatura, velocidad o concentración, podemos generar un modelo del flujo en este tipo de reactor considerándolo como flujo tapón

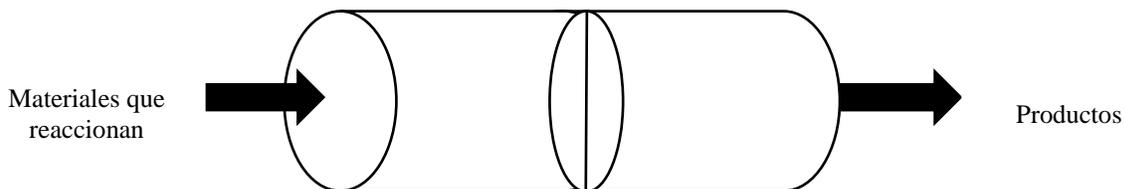


Fig 2- 1 PFR

La forma diferencial de la ecuación (2-4) de diseño para el PFR debe emplearse cuando hay caída de presión en el reactor o intercambio de calor entre el PFR y los

alrededores. En ausencia de caída de presión o intercambio de calor, se usa la forma integral de la ecuación de diseño del flujo tapón, ecuación (2-5).

2.2.2 Reactor de flujo laminar (RFL)

Antes de proceder a demostrar cómo emplear la distribución de tiempos de residencia para estimar la conversión en un reactor, deduciremos $E(t)$ para un RFL. Para flujo laminar en un reactor tubular, el perfil de velocidades es parabólico y el fluido en el centro del tubo pasa un tiempo más breve en el reactor. En la fig. (2-2) se observa un esquema del desplazamiento del fluido en un tiempo t . La figura de la izquierda muestra a qué distancia a lo largo del reactor ha viajado cada elemento concéntrico del fluido transcurrido en el tiempo t .

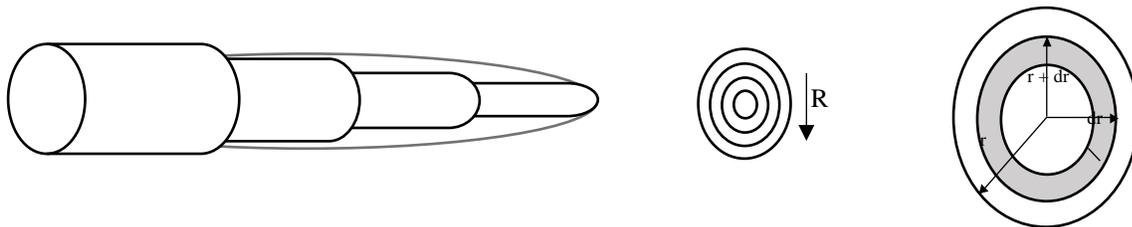


Fig 2- 2 Diagrama esquemático de los elementos de un fluido en un reactor de flujo laminar

En algunos reactores con tanque de agitación, hay una zona de alta agitación en la vecindad del impulsor, que puede representarse como un CSTR perfectamente mezclado. Dependiendo de la ubicación de la tubería de entrada y salida, la mezcla de reacción puede seguir una trayectoria bastante tortuosa, ya sea antes de entrar, después de salir de la zona mezclado perfecto o en ambos casos. Dicha trayectoria tortuosa llega a representarse como un PFR. Así, este tipo de tanque reactor es posible representarlo como un CSTR en serie con un reactor de flujo tapón. en tanto que el PFR puede preceder o seguir al CSTR.

2.2.3 Reactor electroquímico Tipo filtro prensa

El reactor electroquímico tipo filtro prensa utilizado en este trabajo de investigación puede considerarse como un recipiente cerrado. En el reactor electroquímico de compartimentos separados tipo filtro prensa, pueden verse implicados fenómenos de reagrupamiento o redistribución de materia por deslizamiento o formación de remolinos, que puede repetirse un número considerable de veces durante el flujo del fluido a través

del recipiente, pudiendo considerar que estas perturbaciones son de naturaleza estadística, o se pueden encontrar regiones estancadas (zonas muertas), en donde hay poco o ningún intercambio de materia con las regiones bien mezcladas, y por tanto la reacción electroquímica tiene lugar en menor medida.

Los reactores electroquímicos del tipo filtro-prensa suelen ser los más utilizados. La razón de este uso se debe a diversos factores como pueden ser la alta disponibilidad de recambios, su alta versatilidad o su fácil escalado. Este escalado resulta sencillo siempre y cuando el reactor se encuentre trabajando en unas condiciones de flujo hidrodinámico totalmente desarrolladas. Sin embargo, dependiendo del tamaño de las células y de su geometría es posible que los reactores se encuentren trabajando en unas condiciones de flujo hidrodinámico especiales caracterizadas por un flujo mucho más turbulento del que correspondería al caudal circulante.

2.2.4 Fenómenos de transporte en el reactor

El desempeño de un proceso electroquímico no sólo está determinado por la transferencia de carga y la cinética electroquímica, existe un número adicional de fenómenos que determina la cinética electroquímica, y son la transferencia de masa y de calor los más señalados. Entre estos factores las condiciones de dinámica del fluido, bajo las que un electrolito entra a un reactor, es el parámetro del proceso más poderoso que domina la transferencia de masa y calor

El manejo adecuado de las características determinantes de un proceso, la dinámica de fluidos, el transporte de masa y la transferencia de calor es, junto con el adecuado manejo de la transferencia de carga iónica los principales fenómenos en ingeniería de procesos electroquímicos. Aunque en casos prácticos la transferencia de calor puede ser descartada suponiendo un sistema isotérmico (que se cumple de forma adecuada para la mayoría de los casos). Entonces la relación entre la dinámica de fluidos, el transporte de masa y la transferencia de carga iónica puede ser representada por la ecuación de Nernst-Planck.

$$N_i = -D_i \nabla c_i - \frac{Z_i}{RT} F c_i \nabla V + c_i \mathbf{u} \quad (2-6)$$

Donde N_i es el flux de masa de la especie i ($\text{mol s}^{-1} \text{cm}^{-2}$), D_i es el coeficiente de difusión (cm^2/s), ∇C_i el gradiente de concentración (mol cm^{-3}), ∇V gradiente de potencial, Z_i es el valor de la carga del ion de la especie, \mathbf{u} es el vector de velocidad de disolución (m/s), R es la constante universal de los gases ($8.314 \text{ J mol}^{-1}\text{K}^{-1}$), T es la temperatura(K), F es la constante de Faraday (96485 C/mol). Los términos que se encuentran en la parte derecha de la ecuación 2-6 corresponden a las contribuciones de difusión, migración y convección, respectivamente.

Comúnmente en procesos electroquímicos se intenta descartar los efectos de la contribución de la migración de iones con la ayuda de un electrolito soporte que sea el encargado del transporte de la carga dentro de la disolución. Pero en algunos casos la misma disolución se encarga del transporte, ya que la actividad de los iones en disolución aumenta con el incremento de la concentración, podemos descartar la contribución de la migración, y representar al flux de masa con la siguiente ecuación

$$N_i = -D_i \nabla c_i + c_i \mathbf{u} \quad (2-7)$$

El primer término de la ecuación 2-7 corresponde a difusión y este representa la ley de Fick, la cual describe el flux de una sustancia y su concentración en función del tiempo y su posición. La difusión de una especie siempre sucede cuando existe un gradiente de concentración entre dos puntos, las especies viajan del punto con una mayor concentración al punto de una menor concentración; esto significa en el caso de los retores electroquímicos, que el gradiente de concentración siempre existirá entre la superficie del electrodo, donde ocurre la reacción (menor concentración), y el seno de la disolución donde se encuentra la mayor concentración de especies.

El segundo término de la ecuación 2-7 representa la convección de la disolución en dónde se encuentran las especies. La convección representa al flux de una sustancia en función de la concentración y su velocidad.

Para poder determinar la velocidad del segundo término de la ecuación 2-7 es necesario calcularla con base en algún fenómeno que describa la cantidad de movimiento que tiene el fluido en el volumen del reactor. Lamentablemente existen diversos fenómenos que describen el movimiento de un fluido, dependiendo generalmente de la viscosidad, densidad y la velocidad del mismo. Los más conocidos y usados son los flujos llamados flujo laminar y flujo turbulento; existe otro modelo de flujo poco conocido, pero

se presenta frecuentemente en reactores de lecho empacado, con empaques de malla o promotores de turbulencia y es llamado flujo laminar en medio poroso. [7]

2.3 Estrategia teórica en el diseño del canal inter-electrónico de la BFR.

2.3.1 Modelo hidrodinámico.

Conociendo la geometría del reactor se modela 3D la hidrodinámica en régimen laminar dentro de la BFR, se utilizó la ecuación de Navier–Stokes (Ec.1) en estado estacionario acoplada a la ecuación de continuidad (2), con la finalidad de describir el comportamiento de los elementos de fluido y visualizar las desviaciones en el patrón de flujo de mezclado de la fase líquida.

$$(\rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}) = -\nabla P - \mu(\nabla^2 \mathbf{u}) + \mathbf{F} \quad (2- 8)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (2- 9)$$

Donde; ρ es la densidad de fluido, \mathbf{u} es el vector velocidad promedio, μ la viscosidad, P la presión y \mathbf{F} las fuerzas externas. Este modelo es aplicable a bajos números de Reynolds ($Re < 2100$).

2.3.2 Modelo de Transporte de Masa

En sistemas electroquímicos en régimen laminar con reacción química en el seno de la solución, el balance de masa de las especies cargadas i está dada por *Nernst-Planck* (3).

$$V \frac{dC_i}{dt} = -D_i \nabla C_i - \frac{z_i F}{RT} C_i \nabla \Phi + C_i \mathbf{u} \quad (2- 10)$$

Donde; D_i es el coeficiente de difusión, ∇C_i es el gradiente de concentración, $\nabla \Phi$ es el gradiente de potencial, z_i es el valor de carga del ion de la especie, \mathbf{u} es el vector de velocidad de la disolución, R es la constante universal de los gases, T es la temperatura y F es el valor de la constante de Faraday (96485 C/mol).

Los terminos que se encuentran en la parte derecha de la ecuación corresponden a las contribuciones de difusión, migración y convección, respectivamente.

Comunmente en procesos electroquímicos se intenta descartar los efectos de la contribución de la migración de iones con la ayuda de un electrolitos soporte que sea el

encargado del transporte de la carga dentro de la disolución y el transporte de masa queda descrito por la ecuación convección-difusión.

$$V \frac{dC_i}{dt} = -D_i \nabla C_i + C_i \mathbf{u} \quad (2- 11)$$

2.3.3 Condiciones a la Frontera utilizadas en modelado y simulación.

Hay dos casos que necesitamos considerar: CF para recipientes cerrados y para recipientes abiertos. En el caso de los recipientes cerrado-cerrado, suponemos que no hay dispersión o variación radial en la concentración tanto corriente arriba (cerrado) como corriente abajo (cerrado) de la sección de reacción, así que tenemos un recipiente cerrado-cerrado.

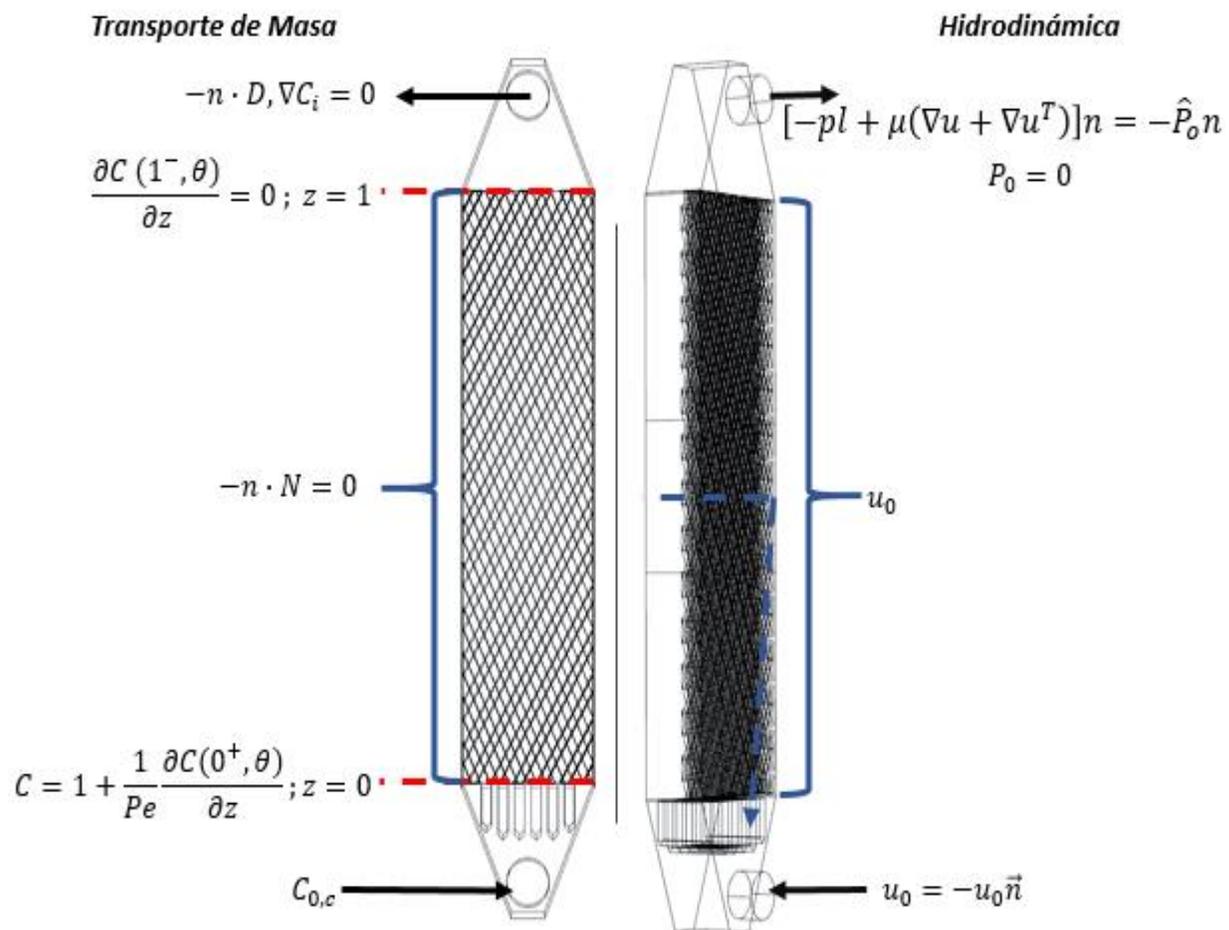


Fig 2- 3 Condiciones iniciales y condiciones de frontera utilizadas en la simulación de la hidrodinámica y el transporte de masa en el FM-01-LC

2.4 Estrategia computacional para la simulación del proceso

Algo importante de mencionar es, en los últimos años, la dinámica de fluidos computacional (CFD, por sus siglas en inglés) ha probado ser una herramienta útil, adecuada para simular el comportamiento hidrodinámico de diferentes sistemas electroquímicos, incluyendo reactores de tipo filtro prensa, los cuales son de valiosa ayuda para la simulación del comportamiento de un nuevo reactor.

El transporte descrito por las ecuaciones de *Navier–Stokes* para la hidrodinámica y la ecuación convección-difusión que posteriormente se convertirá en la ecuación de *Nernst-Planck* para el transporte de masa en régimen laminar, se resolvieron numéricamente con el método de elementos finitos utilizando el software *COMSOL Multiphysics 5.3 en 3D*. La hidrodinámica se resolvió en estado estacionario, los resultados fueron almacenados y alimentados al modelo que describe el transporte de masa (Convección-Difusión) en estado transitorio (*Rivero et al., 2010*), utilizando un tamaño de paso de 1s, los valores de las propiedades físicas de la solución se muestran en la siguiente tabla.

Tabla 2- 1 Propiedades físicas del fluido

| Propiedades | Valor | Unidades |
|--|----------------------|-------------------|
| Viscosidad dinámica | 0.001 | Pa*s |
| Densidad | 1000 | Kg/m ³ |
| Coefficiente de dilatación adiabática. | 1.0 | |
| Conductividad eléctrica | 5.5×10 ⁻⁶ | S/m |
| Capacidad térmica a presión cte. | 4186 | J/Kg * K |
| Conductividad térmica. | 2.18 | W/m*K |
| Velocidad de del sonido. | 1500 | m/s |

El nuevo diseño de la geometría de distribuidores de entrada en la celda se estableció a través de simulación CFD (*COMSOL Multiphysics 5.3b*). Las dimensiones características de los canales inter-electródicos fueron los siguientes:

- Longitud total: 0.25 m
- Longitud efectiva: 0.16 m
- Ancho: 0.4 m.
- Espesor: 0.019 m.

2.5 Resultados

Se realizaron 3 simulaciones en las cuales se cambió la geometría del canal interelectrónico (fig. 2-4), con la finalidad de observar donde habría un mejor rendimiento en cuanto al patrón de flujo de la fase de líquida (fig. 2-5) y la concentración (fig. 2-6).

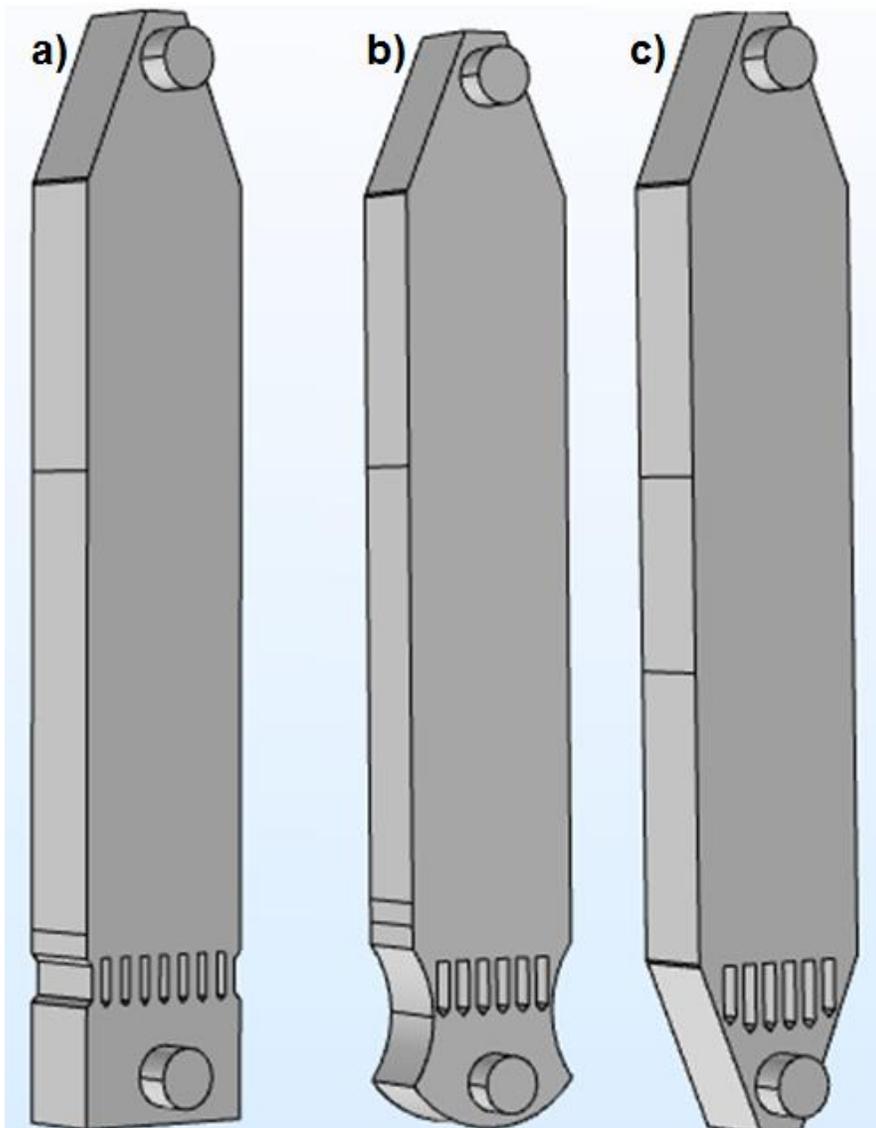


Fig 2- 4 Canales de distribución a vacío a) FM-01 -LC-A b) FM-01 -LC-B c) FM-01-LC-C

Al tener las nuevas geometrías se les hicieron pruebas de velocidad y concentración esto con la finalidad de tener la nueva celda electrolítica.

En la fig. 2-5 se observa que los canales de distribución ayudan a que la velocidad sea más homogénea. Sin embargo, comparando las 3 geometrías se observa que la Fig

2-5c tiene una mejor homogeneidad, ya que en la Fig 2-5a y Fig 2-5b se observar que los vectores de velocidad se arremolinan a la entrada de la celda.

En cuanto al diseño del reactor electroquímico es muy importante la homogeneidad de los elementos de fluido dentro del canal inter-electródico, esto para asegurar un contacto íntimo entre el electrolito y el electrodo en donde ocurrirá el cambio químico, aprovechando también que en las reacciones no ocurre un cambio de estado de sólido a líquido.

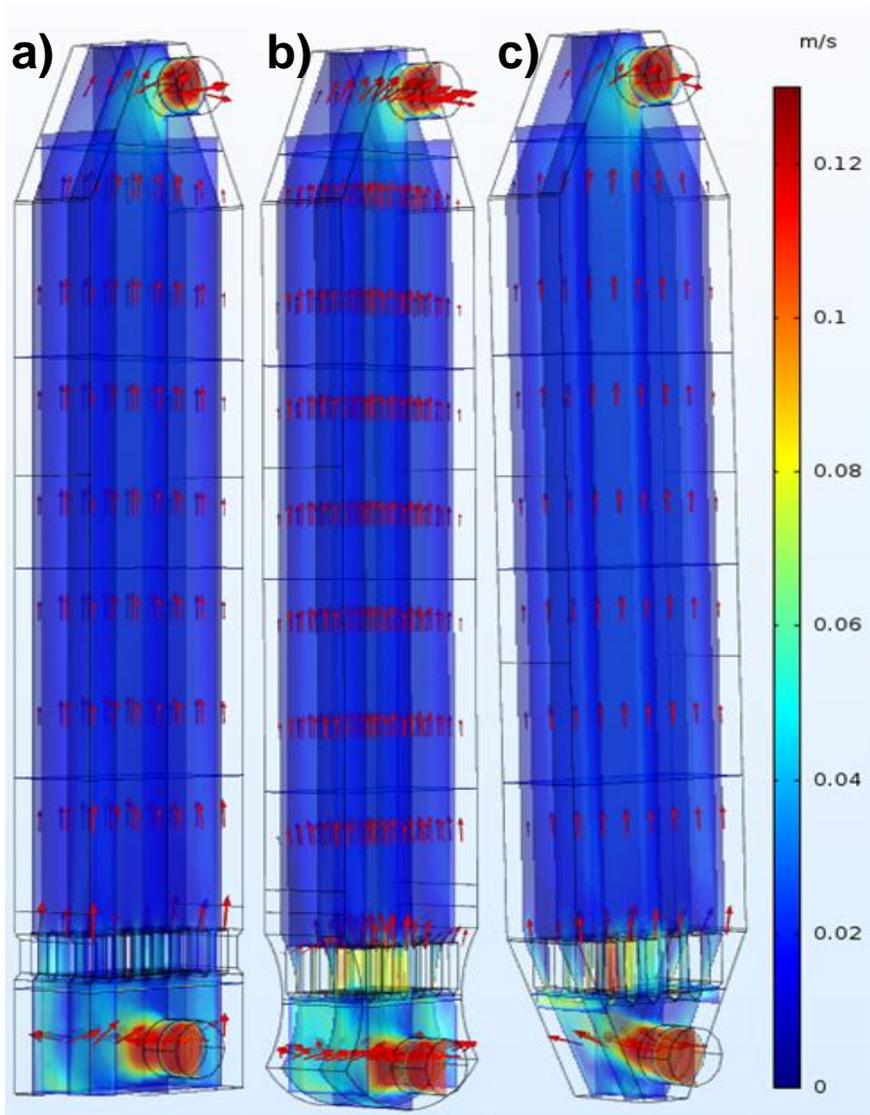


Fig 2- 5 Magnitud y Campo de Velocidad (m/s) con canales de distribución en la Simulación FM-01-A-B-C-LC

Acoplado la transferencia de masa y utilizando la ecuación de convección difusión sin reacción, en la Fig 2-6c se observa que es la más homogénea y las zonas muertas

son menores, ya que en la Fig 2-6a y Fig 2-6b, las zonas muertas empiezan desde más abajo y hay canalamientos por la parte de en medio. Se observa que el efecto borde no varía y que existe una mayor homogeneidad.

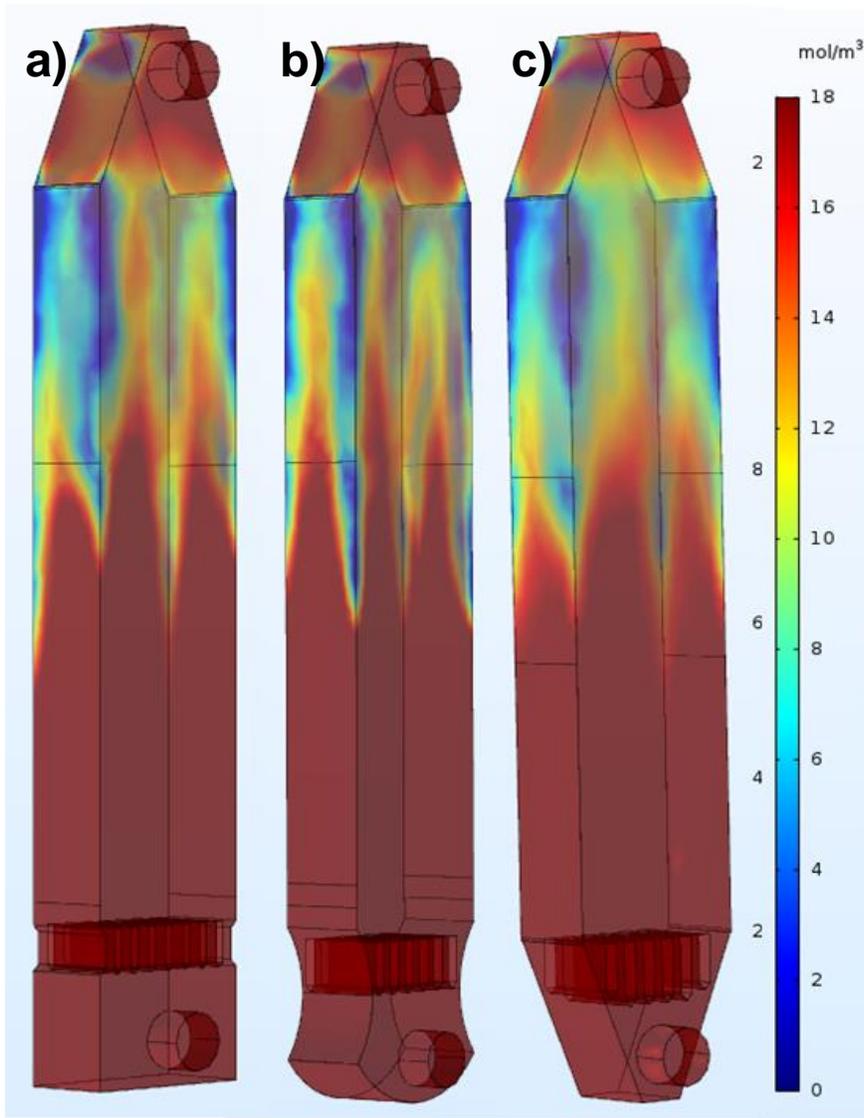


Fig 2- 6 Simulación de la hidrodinámica de una celda de distribución FM-01- A-B-C-LC , utilizando COMSOL Multiphysics® 5.3

2.6 Conclusiones parciales

La hidrodinámica afecta el rendimiento de cualquier reactor electroquímico, por lo que es importante conocer cómo se desplazan los fluidos dentro del campo de flujo, con esto podemos corregir y diseñar nuevos reactores para obtener la mayor eficiencia posible. Como se vio en este capítulo se partió de un reactor convencional, se realizaron 3 prototipos diferentes y se eligió el más eficiente.

De las tres geometrías que se propusieron se llegó a la conclusión de que la celda FM-01-LC-C, es la mejor ya que la magnitud de velocidad es más homogénea, se aprovecha toda el área activa asegurando un contacto electrodo electrolito, hay menores desviaciones de la idealidad, tendría un mejor rendimiento en el reactor y es menor el costo de construcción.

Basándonos en este nuevo prototipo y tomando las propiedades del reactor FM-01 se pretende que el nuevo canal tenga mejor capacidad que el convencional.

Capítulo III

Efecto de las mallas en el patrón de flujo de mezclado de la fase líquida en el compartimiento del reactor electroquímico FM-01-LC-C.

3.1 Resumen

En el presente capítulo se lleva a cabo el estudio de los efectos de promotores de turbulencia o mallas en la hidrodinámica del patrón de flujo en la fase líquida dentro del canal inter-electródico seleccionado en el capítulo anterior.

3.2 Introducción

Es común el uso de redes o mallas de material cercanas a la superficie del electrodo para actuar como promotores de turbulencia. La misma forma del electrodo (electrodos tridimensionales o mallas) puede actuar como promotor de turbulencia modificando la distribución del patrón de flujo de mezclado de la fase líquida en los reactores electroquímicos, favoreciendo o incrementando el transporte de materia de las especies reactivas hacia el electrodo.

Es necesario distinguir entre: Mallas inertes y activas.

3.2.1 Mallas inertes.

Solamente promueven la turbulencia del electrolito. Existen reportes de estudios de la hidrodinámica y el transporte de masa con diferentes promotores de turbulencia o mallas con reactores electroquímicos tipo filtro-prensa (*FM-01-LC*), como lo es el estudio de *Brown et. al., en 1993 (Fig.3-1)*, considerando factores tales como, la orientación, el tamaño de la malla o promotor de turbulencia y la velocidad del fluido en fase líquida, por otra parte, estos autores reportan que la orientación, geométrica y la fracción vacía, juegan un papel importante e influyen en el régimen hidrodinámico y en la transferencia de masa, a continuación, se muestran los promotores de turbulencia reportados: [9]

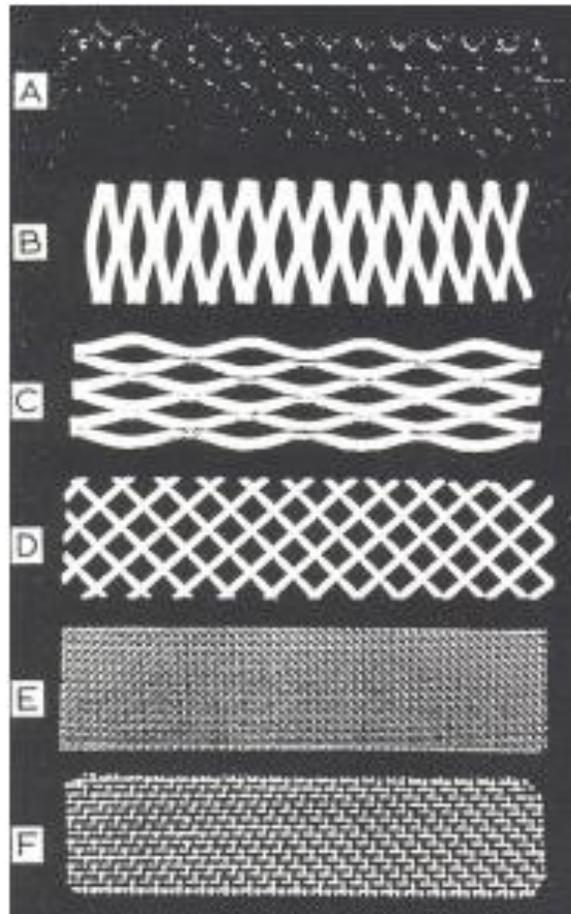


Fig. 3-1 Diferentes tipos de promotores de turbulencia inertes, clasificados con las letras A-F (mostradas en la figura), que son utilizados para aumentar el transporte de masa en la celda FM-01-LC [[Brown et. al., 1992].].

En los casos A-D, la fracción vacía es mayor que la de los promotores E-F, por lo que tiene mayor porcentaje de área abierta. Estos mismos autores reportaron que los promotores con una fracción vacía mayor a 0.80 (A-D), presentan una transferencia de masa más eficiente que los promotores de turbulencia E y F. [9]

3.2.2 **Mallas activas.**

Estos desempeñan simultáneamente el papel de electrodo y el promotor de turbulencia.

Por consiguiente, en esta investigación se realizó el estudio de la hidrodinámica y del transporte de masa con diferente número de mallas (3, 5 y 7 mallas) activas de rejillas en CFD, a continuación, se muestra la estructura de una sola malla en la siguiente figura 3-2.

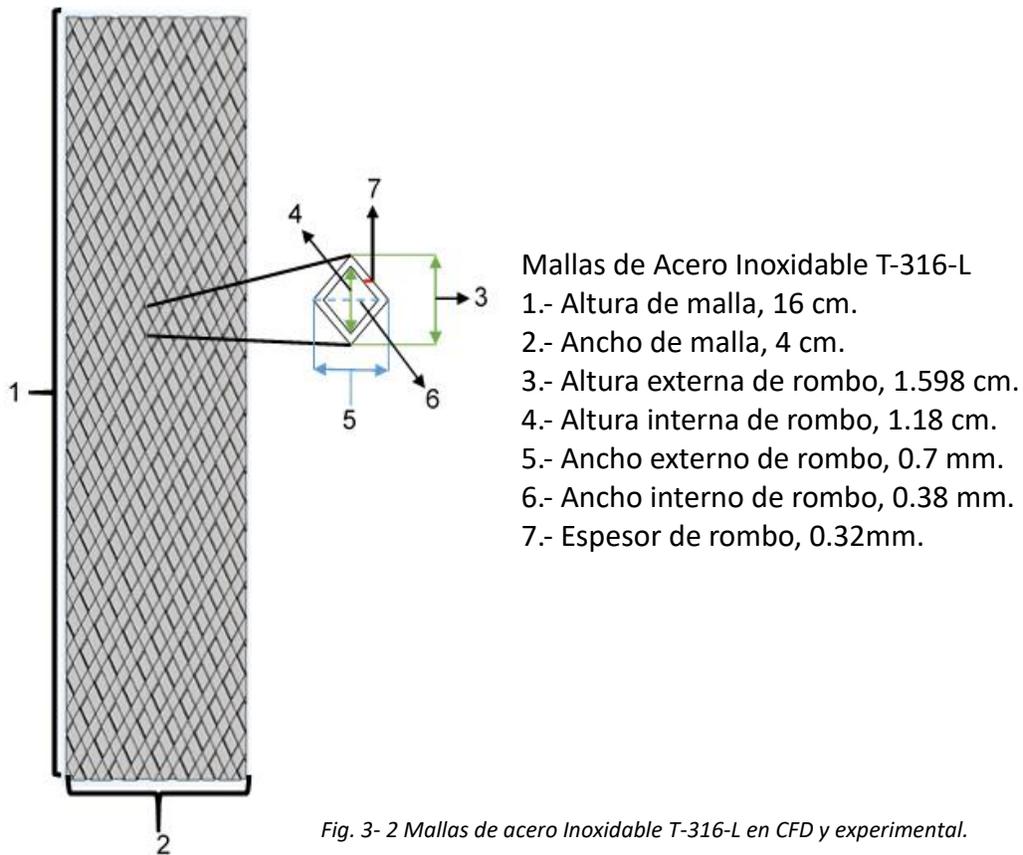


Fig. 3- 2 Mallas de acero Inoxidable T-316-L en CFD y experimental.

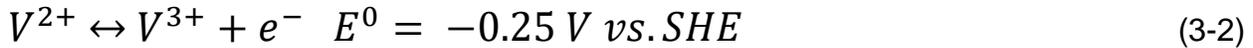
Básicamente, el reactor electroquímico se puede considerar como un par de elementos sólidos conductores llamados electrodos, sumergidos en una disolución electrolítica. En base a esto, los elementos llegarán a uno de los electrodos donde se debe producir su tránsito hacia la disolución, pasando de una fase sólida a una fase líquida. Para ello, alguna de las especies presentes en el sistema tendrán que actuar como captadores de estos electrones, produciéndose la reacción de reducción y caracterizando al elemento como el cátodo. La corriente eléctrica es transportada a través de la disolución mediante la migración de los iones presentes en ella y los electrones serán cedidos al otro electrodo por otra especie susceptible de ello, produciéndose la oxidación y caracterizando a dicho electrodo como ánodo. Es decir, como consecuencia de estas transferencias electrónicas entre los electrodos y especies presentes en el sistema, se están produciendo las reacciones electroquímicas. Estas reacciones electroquímicas están localizadas en la superficie de los electrodos y esto va a determinar en gran medida el diseño y comportamiento de los reactores. [6]

La reacción que ocurre en cada lado de la BFR durante la carga y la descarga puede ser expresada con la siguiente ecuación:

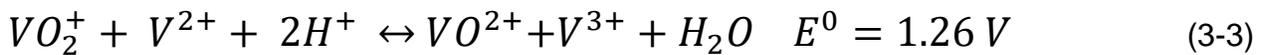
Cátodo:



Ánodo:



En general:



El número de mallas cambia en el ánodo y en el cátodo (cada lado de la BFR) por el requerimiento de potencial de cada uno, en la ec. 3-1 requiere 1.01 V para la reducción del vanadio y para la oxidación (ec. 3-2) de este mismo requiere 0.25 V, esto quiere decir que en el cátodo es requerido un mayor número de mallas que en el ánodo, debido a que la intensidad de corriente que se requiere es mayor.

Una ventaja al utilizar el mismo elemento, vanadio, como especies activas tanto en electrolitos negativos como positivos, es el cruce de especies activas no ensucia el electrolito, y resulta solo en una disminución de la eficiencia. La capacidad de almacenamiento se puede recuperar a través del equilibrio de electrolitos. También tiene un amplio rango de temperatura de funcionamiento de -5°C a 50°C y una respuesta rápida (alrededor de $350 \mu\text{s}$) para el inicio y el cambio entre los procesos de carga y descarga, utilizando una mezcla de ácido sulfúrico y clorhídrico. Para lograr una alta densidad de potencia, las celdas deben operar a una alta densidad de corriente con menores pérdidas de polarización (activación, óhmica y concentración).

Aún con mallas y promotores de turbulencia es necesario evitar que se produzca zonas estancadas dentro del reactor, o que se produzcan recirculaciones internas, que podrían contribuir a una mala distribución de corriente, lo que podría ocasionar fenómenos no deseados. Con la finalidad de estudiar el efecto de un electrodo tridimensional en el comportamiento de los elementos de fluido se determinarán las

curvas de distribución de tiempos de residencia (DTR), empacando el canal inter-electródico con tres, cinco y siete mallas utilizando CFD y el modelo validado en la sección anterior.

3.3 Estrategia teórica de diseño del canal-inter-electródico FM-01-LC-C con mallas.

3.3.1 Modelamiento Hidrodinámico

Las simulaciones en 3-D de flujo turbulento y un trazador en el interior del reactor se llevaron a cabo en el dominio de simulación. Las propiedades del fluido y las características del canal-inter-electródico se encuentran en el capítulo anterior.

Las velocidades lineales de flujo estudiadas están comprendidas entre 0.01 y 0.06 esto depende del número de mallas utilizadas dentro del canal inter-electródico obteniéndose números de Reynolds entre 128 y 826, característicos de un flujo laminar. Estas condiciones hidrodinámicas fueron las mismas para 3, 5 y 7 mallas.

3.3.2 Flujo Laminar

3.3.3 Hidrodinámica

Bajo las condiciones de flujo laminar, las ecuaciones del modelo para flujo incompresibles pueden enunciarse como sigue. Las ecuaciones de Navier-Stokes son:

$$(\rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}) = -\nabla P - \mu(\nabla^2 \mathbf{u}) + F \quad (3-4)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (3-5)$$

Estas ecuaciones describen el movimiento de un fluido newtoniano e incompresible, donde μ denota la viscosidad dinámica del fluido, \mathbf{u} es el vector de velocidad, p es la presión, ρ es la densidad del fluido.

3.3.4 Modelo de Transporte de masa.

El comportamiento dependiente del tiempo de un trazador dentro del reactor podría ser descrito por la forma general de la ecuación de difusión-convección (Fogler, 2005):

$$\frac{dC_i}{dt} = D\nabla^2 C - \mathbf{u}\nabla C_i \quad (3-6)$$

Donde c es la concentración del trazador, t es el tiempo, D es el coeficiente de difusión, y \mathbf{u} es el vector velocidad obtenido por la solución de la Ec. 3-4, para el flujo laminar.

Para resolver las ecuaciones anteriores, las condiciones de frontera para la hidrodinámica y el transporte de masa se muestran a continuación:

3.3.5 Condiciones a la Frontera utilizadas en modelado y simulación

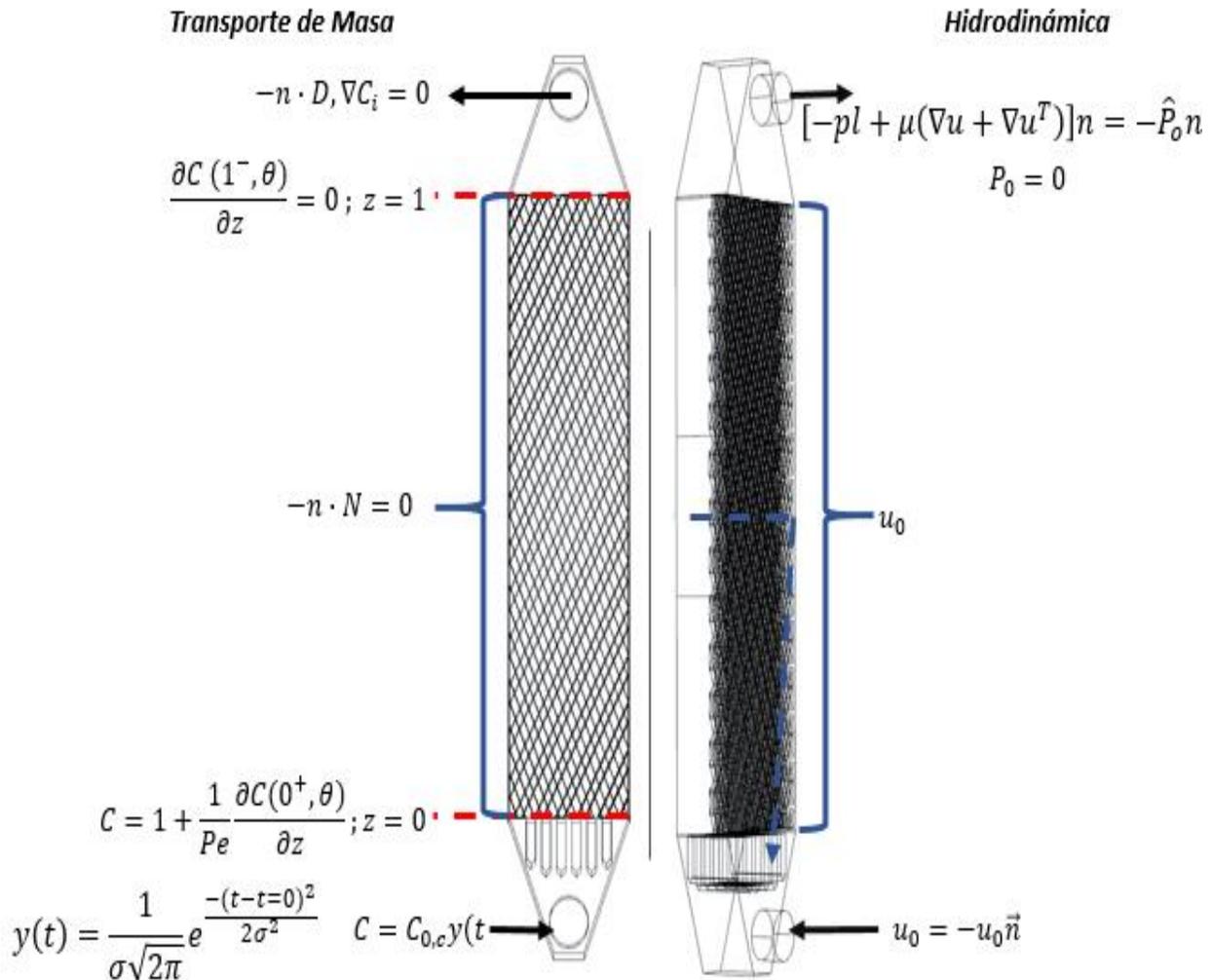


Fig. 3-3 Condiciones a la frontera utilizadas en el canal inter-electrónico FM-01-C-LC con mallas

3.3.5.1 Para transporté de momentum o hidrodinámica.

- 1) A la entrada, fue utilizada: $u_0 = -U_0 n$, la cual especifica un valor de velocidad de entrada. Esta condición fija la velocidad igual a un vector de velocidad dado.
- 2) Un valor de presión constante a la salida, $[-pl + \mu(\nabla u + \nabla u^T)]n = -\hat{P}_0 n$

- 3) En las paredes, una condición de no deslizamiento fue establecida: $u=0$, esta condición se utiliza para paredes sólidas en estado estacionario y prescribe que en ambos lados de la frontera la velocidad es cero, es decir, que el fluido en la pared no se mueve.

3.3.5.2 Para transferencia de masa

- 1) A la entrada, $c = c_0$
- 2) En el área activa se utilizó las condiciones tipo Danckwerts, “Proporciona una deducción rigurosa de las mismas, resolviendo las ecuaciones diferenciales que rigen la dispersión del componente A en las secciones de entrada y de salida, así como tomando el límite cuando D_a tiende a cero en las secciones de entrada y de salida” (Fogler, 2005).
- 3) En las paredes y en la salida se utilizó $-n \cdot N = 0$ que describe que el flux es cero tanto en paredes como en salida.

3.4 Estrategia computacional para la simulación con inyección de trazador al canal FM-01-LC-C.

Como se describió en el capítulo anterior se resolvió la ecuación de Navier-Stokes (3-4) en régimen laminar para la hidrodinámica y posteriormente se resolvió la ecuación de convección-difusión (3-6) para el transporte de masa, se resolvieron numéricamente con el método de elementos finitos utilizando el software *COMSOL Multiphysics 5.3b en 3D a diferentes velocidades de flujo y con 3, 5 y 7 mallas dentro del canal.*

La hidrodinámica se resolvió en estado estacionario, los resultados fueron almacenados y alimentados al modelo que describe el transporte de masa (Convección-Difusión) en estado transitorio (Rivero et al., 2010), por lo tanto, se necesita un intervalo de tiempo para ser resuelto, el cual fue establecido desde $t=0$ hasta $t=400$ tamaños de paso de 0.001s y simulando la inyección del trazador al reactor.

3.4.1 Modelado del trazador.

Para simular la inyección de trazador en un instante de tiempo una función de pulso Gaussiano fue empleado con la siguiente ecuación:

$$c_0 = y(t) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(t-t=0)^2}{2\sigma^2}} \quad (3-7)$$

Donde, $y(t)$ es adimensional, σ es la desviación estándar y t es el tiempo.

Considerando condiciones de mezclado completo antes de la entrada y después de la salida del reactor, los límites y condiciones iniciales establecidos para laminar y turbulento son como siguen:

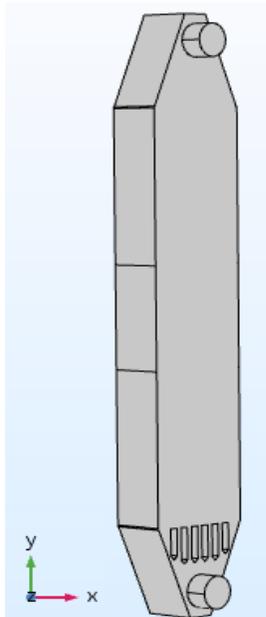
- Antes de la inyección del trazador dentro del reactor a $t = 0$, $c = 0$
- Una concentración inicial a la entrada, $c = c_0$ $y(t)/y(t=0)$
- Cero flux a la salida y en las paredes, $D\nabla c=0$

Donde:

c_0 = Es la concentración inicial del trazador.

Es importante mencionar que los autores prefieren el uso de un pulso Gaussiano en lugar de una función derivada acumulativa (F-trazador) porque la concentración y el volumen de inyección experimental de un trazador aseguran que el pulso Gaussiano describa la situación experimental con precisión. [9]

Los modelos se resolvieron para obtener las curvas de distribución de tiempo de residencia (DTR) al igual que las animaciones computacionales, con el fin del estudio del comportamiento del patrón de flujo de la fase líquida con 3, 5 y 7 mallas y a diferentes velocidades, también se compararon el distribuidor convencional FM-01-LC y el nuevo distribuidor FM-01-LC-C, como se observan en los siguientes resultados:



La Fig. 3-4 muestra los ejes considerados en el reactor FM-01-LC, esto para facilitar la orientación de las caras del reactor.

Fig. 3- 4 Esquema para señalar la ubicación de los ejes en el canal FM-01-C-LC

3.5 Resultados de la estrategia en CFD para el canal inter-electrónico FM-01-LC-C

Una vez resueltas las ecuaciones de la hidrodinámica (ec. 3-1) y del transporte de masa (ec. 3-6); se obtuvieron los siguientes resultados.

En la Fig. 3-5 se muestran los campos de velocidad con diferente número de mallas a un flujo de 0.4 L/min y a un tiempo adimensional 0.4θ ; en la Fig. 3-5a con 3 mallas se observa un retromezclado en la entrada del canal debido a los distribuidores de flujo y zonas de alta y baja velocidad, a medida que va aumentando el número de mallas (Fig. 3-5b con 5 mallas y Fig. 3-5c con 7 mallas) estos fenómenos son menos visibles ya que no hay estancamiento entre mallas

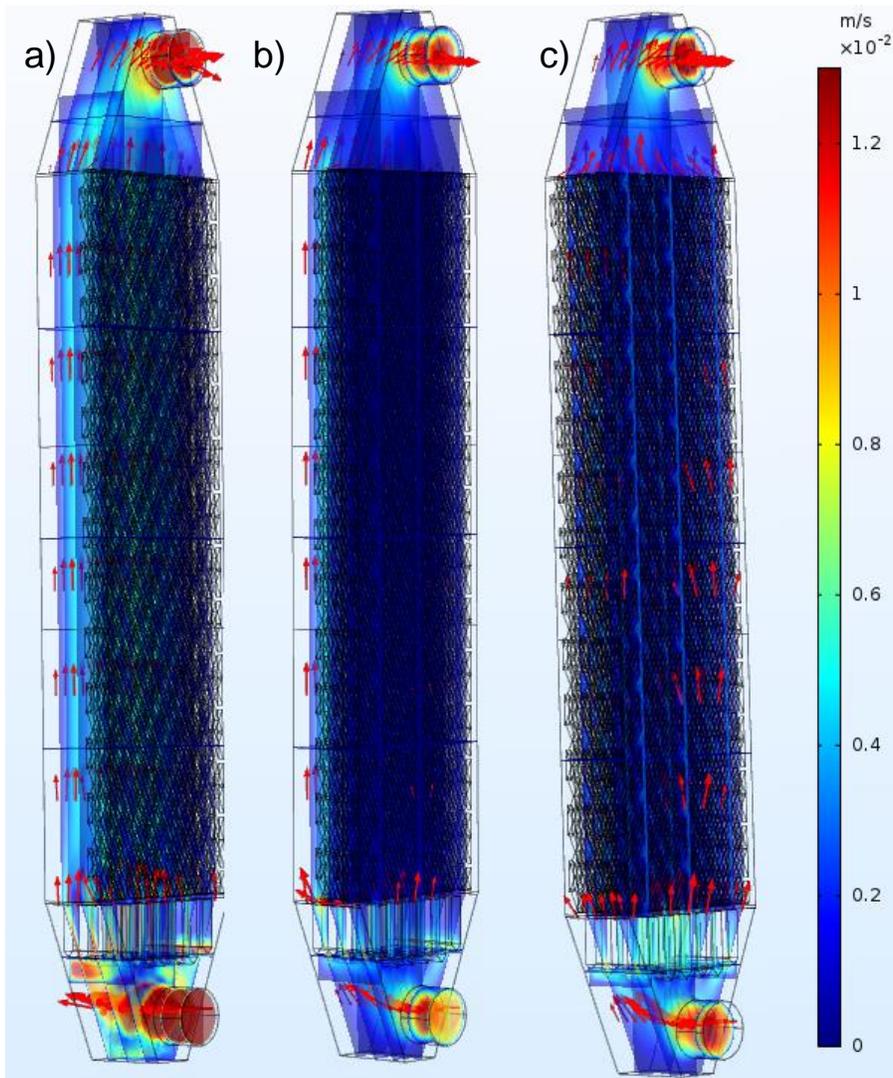


Fig. 3- 5 Canal inter-electrónico FM-01-LC-C, simulación del campo de velocidad, a) 3 mallas (0.0102 m/s), b) 5 mallas (0.0115 m/s) y c) 7 mallas (0.0132 m/s) a un flujo de (0.4 L/min) y un tiempo 160 (θ)

La figura 3-6 muestra el cambio de la concentración dentro del canal a un flujo de 0.4 L/min en un tiempo de 0.4 θ ; se observa en la Fig. 3-6a con 3 mallas y Fig. 3-6b con 5 mallas existe una gran cantidad de líquido estancado entre las mallas y debido a estos estancamientos gran parte del fluido pasa por debajo de las mallas. Por otro lado, en la Fig 3-6c existen zonas de baja velocidad a las paredes laterales del canal y no entre ellas, también existen zonas muertas. De estas 3 comparaciones se observa que el canal con mayor cantidad de mallas tiene una mejor homogenización.

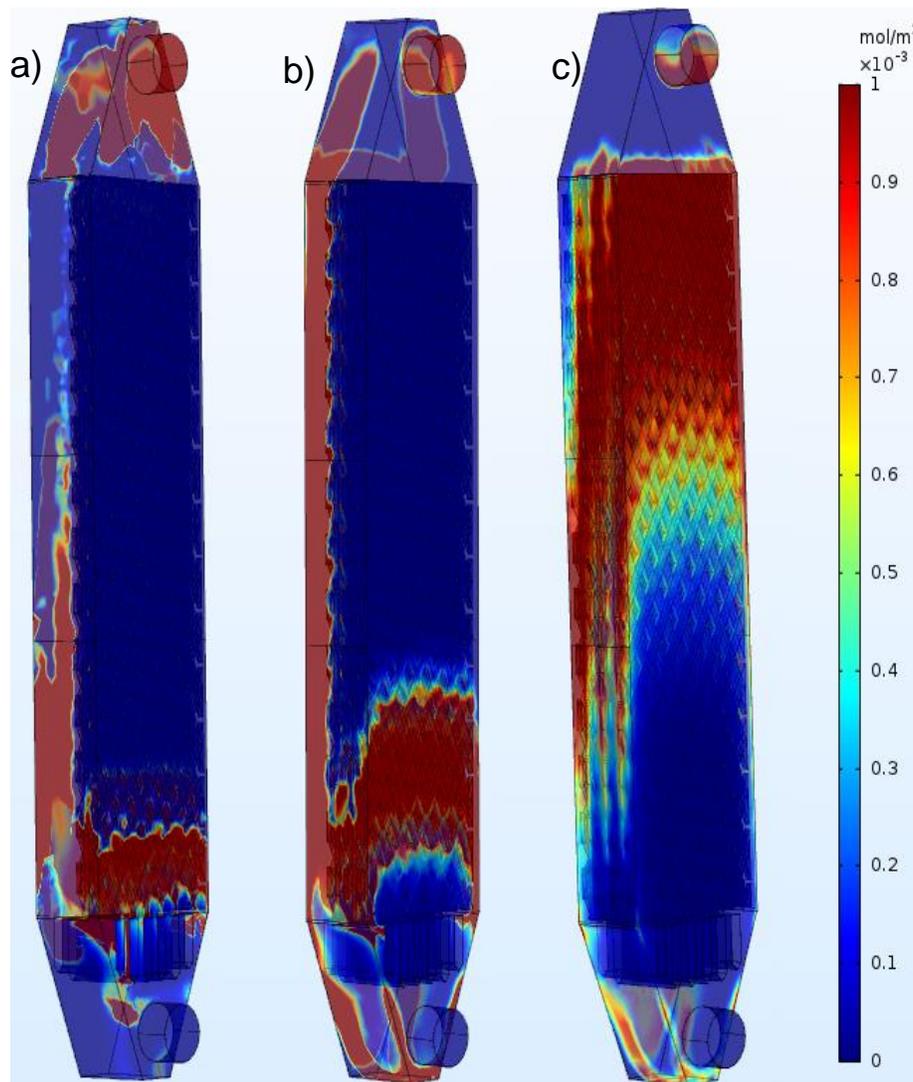


Fig. 3-6 Canal inter-electrónico FM-01-LC-C, simulación del cambio de la concentración (mol/m³) a) 3 mallas, b) 5 mallas y c) 7 mallas a un flujo de (0.4 L/min) y un tiempo 160 (θ)

En la Fig. 3-7 existe un flujo preferencial por debajo de las mallas, a un flujo de 0.6 L/min y con un tiempo adimensional de 0.4θ , se observa que en la Fig. 3-7a con 3 mallas hay un retomezclado en la entrada mientras que en la Fig. 3-7b y la Fig. 3-7c (con 5 y 7 mallas respectivamente) no lo hay, es importante resaltar que en la Fig. 3-7c los vectores de velocidad tienen mayor contacto con las mallas.

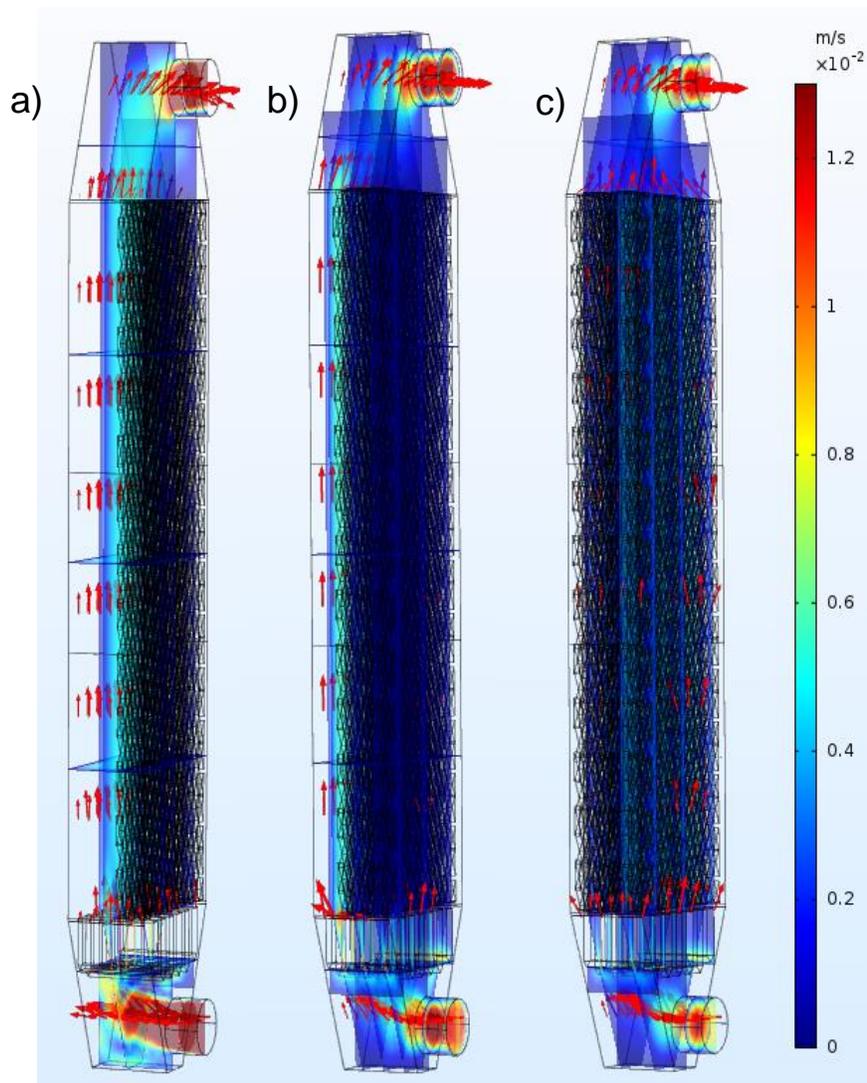


Fig. 3- 7 Canal inter-electrónico FM-01-LC-C, simulación del campo de velocidad, a) 3 mallas (0.0153 m/s), b) 5 mallas (0.0172 m/s) y c) 7 mallas (0.0198 m/s) a un flujo de (0.6 L/min) y un tiempo 160 (ϑ)

La figura 3-8 muestra el cambio de la concentración dentro del canal a un flujo de 0.6 L/min en un tiempo adimensional de 0.4θ ; se observa que en la Fig. 3-8a con 3 mallas y Fig. 3-8b con 5 mallas, existe una gran cantidad de líquido estancado entre las mallas y que gran parte del fluido está pasando por debajo de las mallas y no entre ellas, en la Fig. 3-8c existen zonas de baja velocidad en las paredes laterales al canal y por ultimo existen zonas muertas dentro del canal Fig. 3-8a y 3-8b.

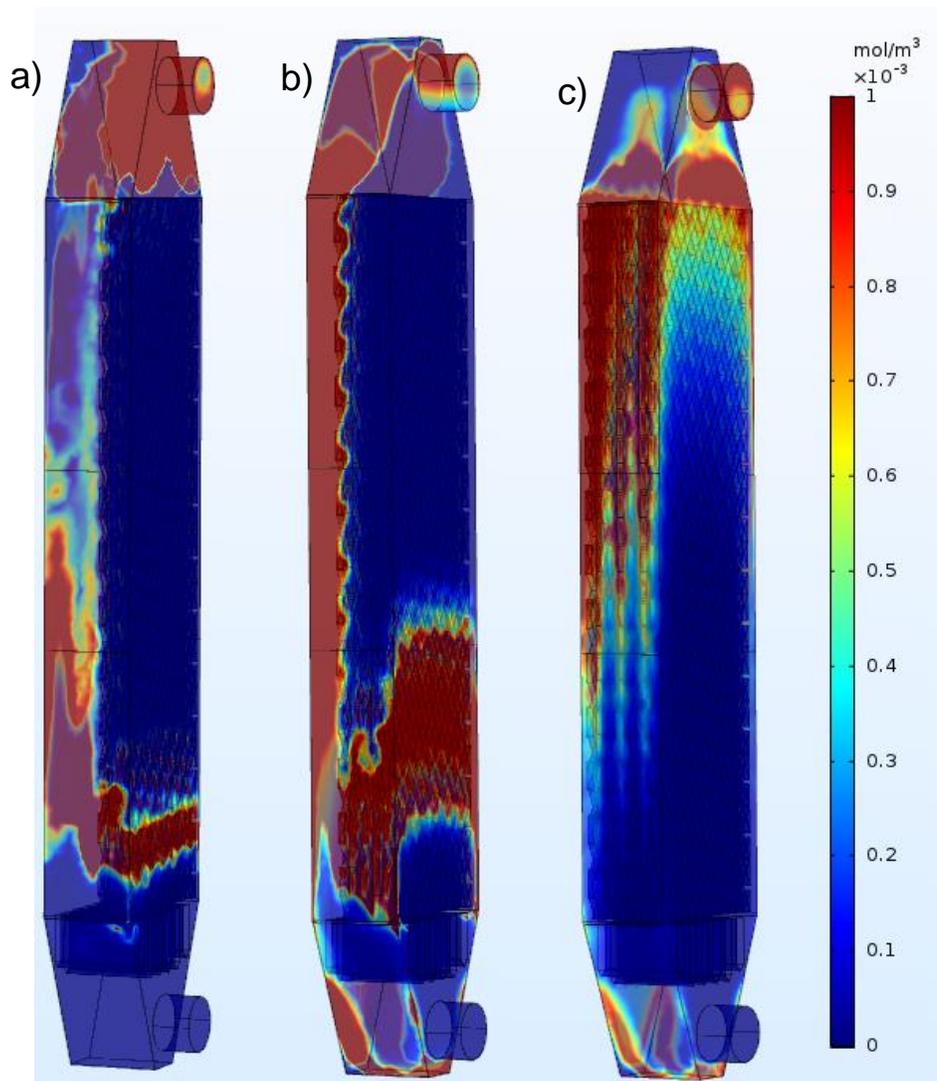


Fig. 3- 8 Canal inter-electrónico FM-01-LC-C, simulación del cambio de la concentración (mol/m^3) a) 3 mallas, b) 5 mallas y c) 7 mallas a un flujo de (0.6 L/min) y un tiempo 160 (θ)

De la siguiente figura (Fig. 3-9a) se observa claramente una zona de alta velocidad por debajo de las mallas o también conocido como “jet flow” al igual que en la figura 3-9 b. En cuanto a la figura 3-9c se observa que hay contacto con las mallas por lo que existe una mejor distribución del flujo a lo largo del canal.

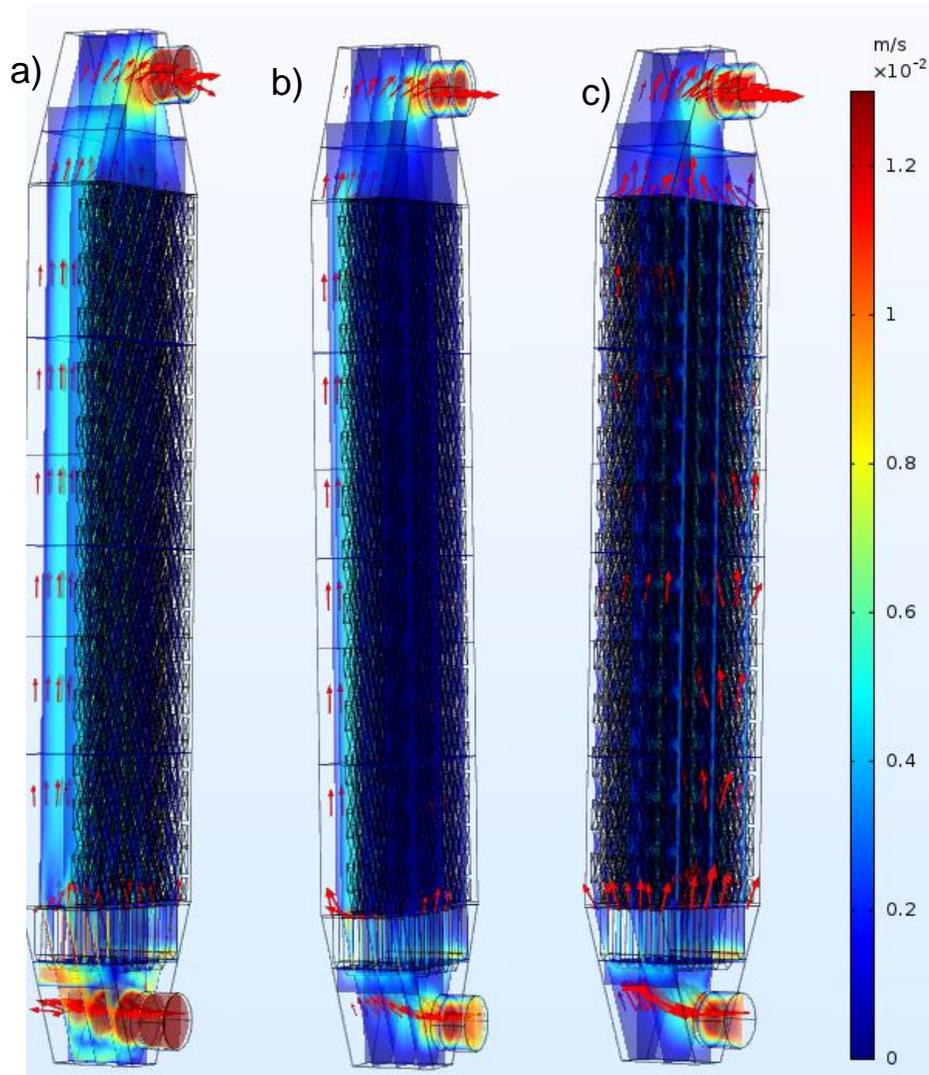


Fig. 3- 9 Canal inter-electrónico FM-01-LC-C, simulación del campo de velocidad, a) 3 mallas (0.0204 m/s), b) 5 mallas (0.0230 m/s) y c) 7 mallas (0.0264 m/s) a un flujo de (0.8L/min) y un tiempo 130 (θ)

Guiándonos por las Fig. 3-6 y Fig. 3-8 se observa que al incrementar el flujo que en este caso es 0.8 L/min disminuye el tiempo de residencia del fluido que pasa por todo el canal por ejemplo las simulaciones pasadas necesitaban tiempos adimensionales de 0.4 θ , en esta simulación ya se aprecian los fenómenos desde el tiempo adimensional de 0.325 θ . Se observa que la mayor parte del fluido en las Fig. 3-10a y Fig. 3-10b existe zonas de baja velocidad y zonas muertas, mientras que en la Fig. 3-10c tiene zonas de estancamiento en las paredes laterales se aprecia como el fluido pasa por las mallas y es más homogéneo.

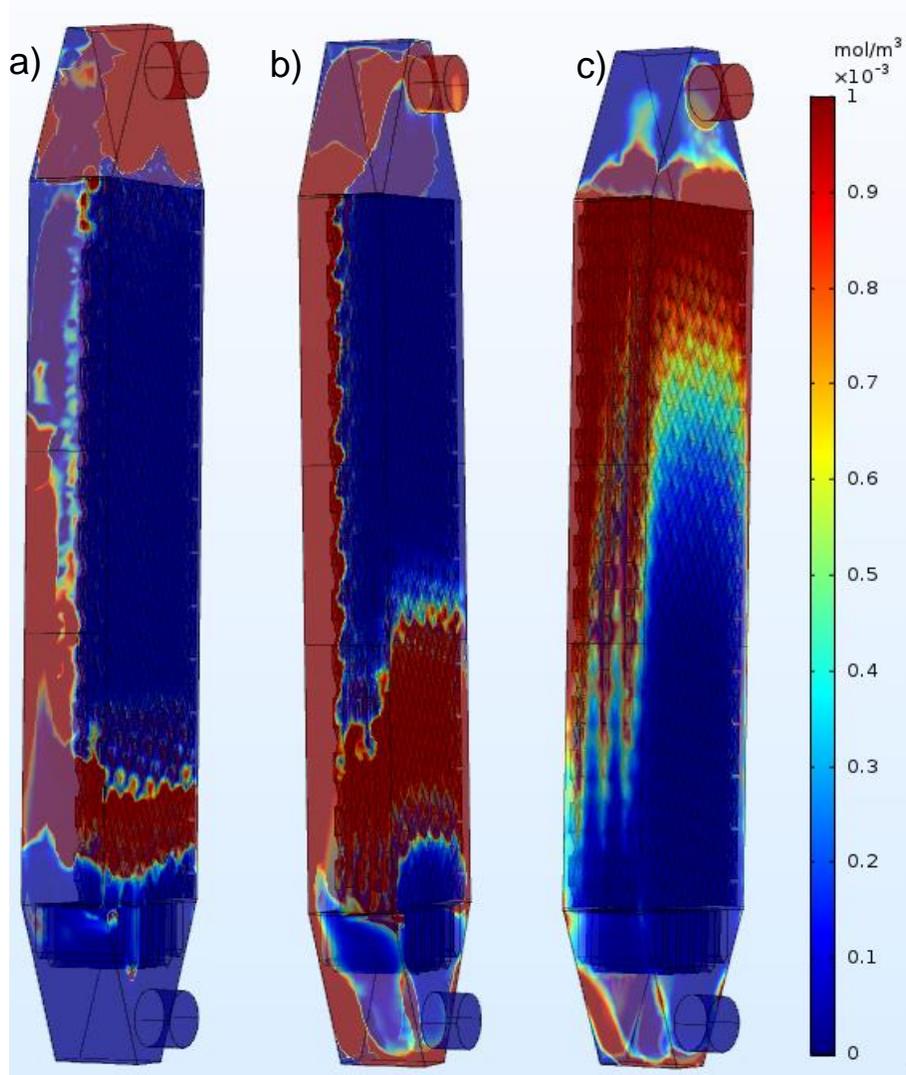


Fig. 3- 10 Canal inter-electrónico FM-01-LC-C, simulación del cambio de la concentración (mol/m^3) a) 3 mallas, b) 5 mallas y c) 7 mallas a un flujo de (0.8 L/min) y un tiempo 130 (θ)

Al tener un flujo de 1.0 L/m y un tiempo adimensional de 0.274 θ se observa que la Fig 3-11a y la Fig 3-11b siguen sin mantener un buen contacto con las mallas y hay un aumento de flujo preferencial por debajo de ellas a medida que hay mayor flujo. Sin embargo, en la Fig 3-11c con 7 se aprecia una zona de alta velocidad entre mallas y los vectores de velocidad se desplazan entre ellas sin retomezclados.

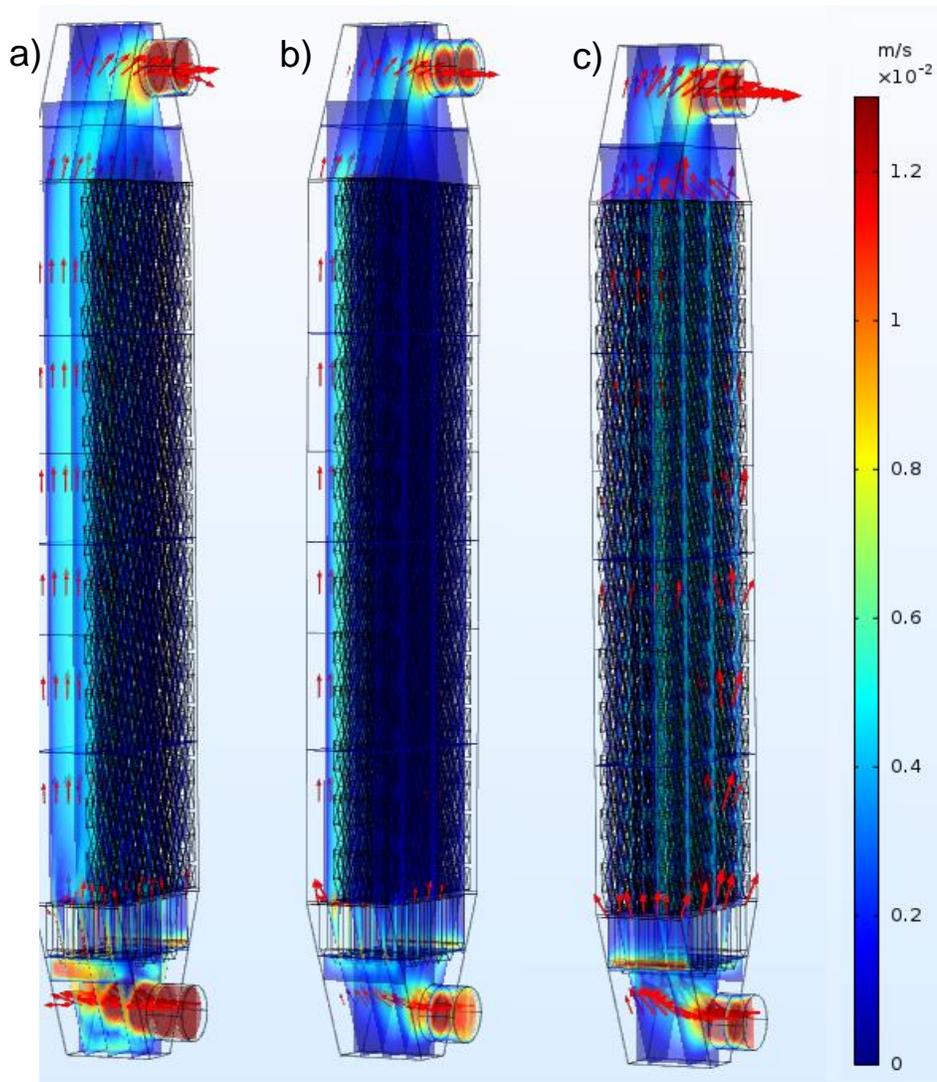


Fig. 3- 11 Canal inter-electrónico FM-01-LC-C, simulación del campo de velocidad, a) 3 mallas (0.0255 m/s), b) 5 mallas (0.0288 m/s) y c) 7 mallas (0.0330 m/s) a un flujo de (1.0L/min) y un tiempo 110 (θ)

Como se ha previsto mientras mayor es el flujo menor es el tiempo que tarda el fluido en salir, esto es a un flujo de 1.0 L/min y un tiempo adimensional de 0.275 θ . La Fig. 3-12a y Fig. 3-12b se observan zonas muertas a la salida del distribuidor y zonas de estancamiento, en la Fig. 3-12c se observa existen canalamientos.

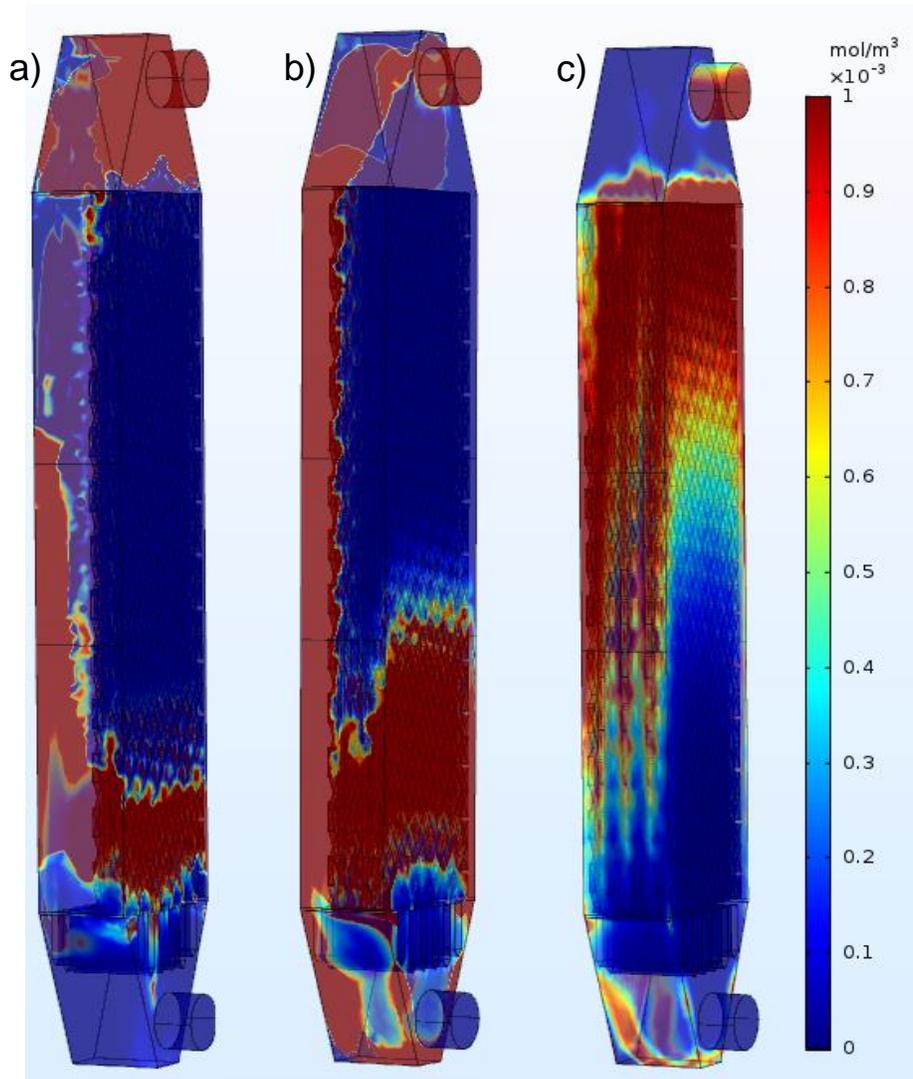


Fig. 3- 12 Canal inter-electrónico FM-01-LC-C, simulación del cambio de la concentración (mol/m³) a) 3 mallas, b) 5 mallas y c) 7 mallas a un flujo de (1.0 L/min) y un tiempo 110 (θ)

Por ultimo en la figura 3-13 a 2.0 L/min con un tiempo adimensional de 0.2 θ , estos resultados muestran que siguen siendo similares a los anteriores con las zonas de alta velocidad en las figuras 3-12a y 3-12b, aunque en 3-12c las mallas ayudan a desaparecer esas zonas y observando una distribución de flujo homogénea dentro de este canal.

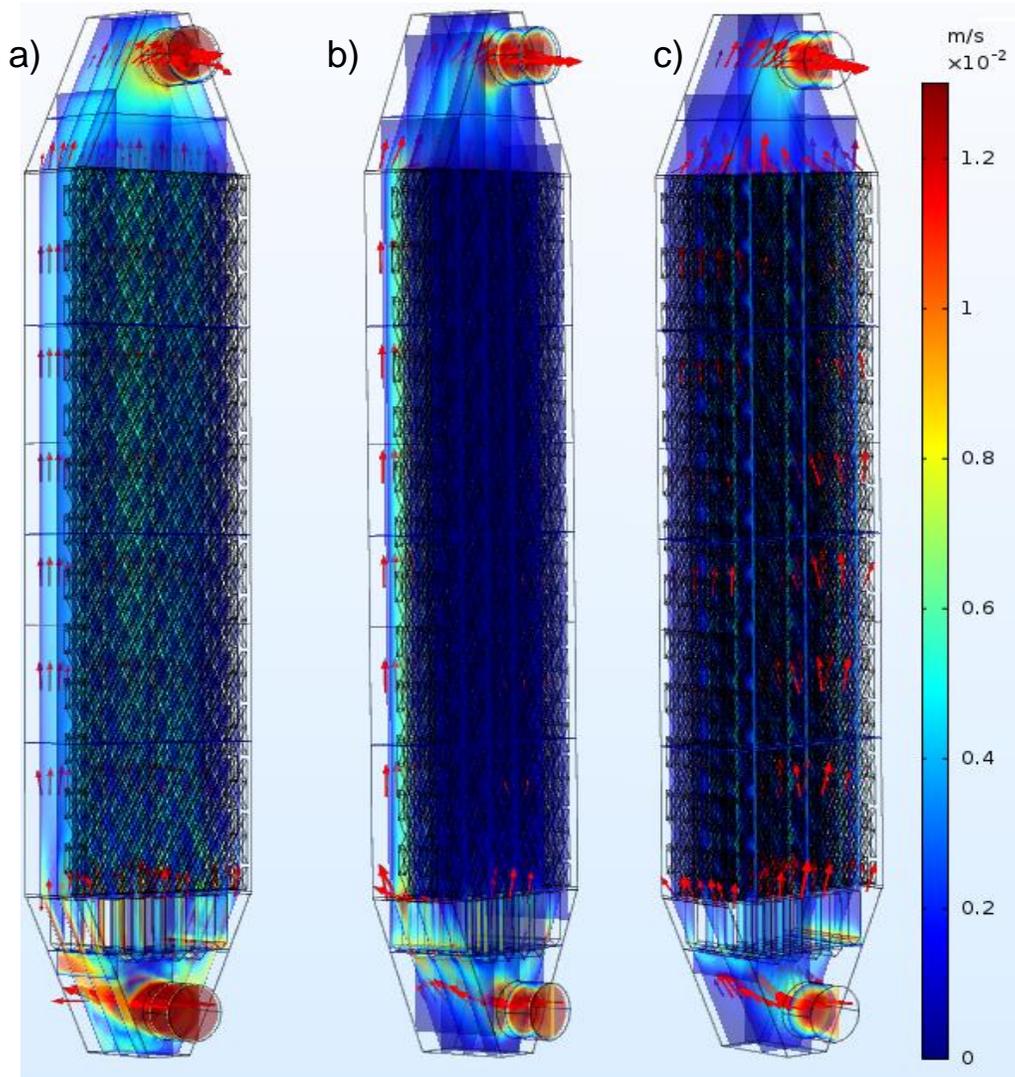


Fig. 3- 13 Canal inter-electrónico FM-01-LC-C, simulación del campo de velocidad, a) 3 mallas (0.0511 m/s), b) 5 mallas (0.0576 m/s) y c) 7 mallas (0.0660 m/s) a un flujo de (2.0 L/min) y un tiempo 80 (θ)

Finalizando observamos como a 2.0 L/min con un tiempo adimensional de 0.2 θ la concentración es más homogénea para la Fig 3-14c con 7 mallas. En las Fig 3-14 a y 3-14b se observa que sigue existiendo zonas de alta y baja velocidad, así como zonas muertas y zonas de estancamiento.

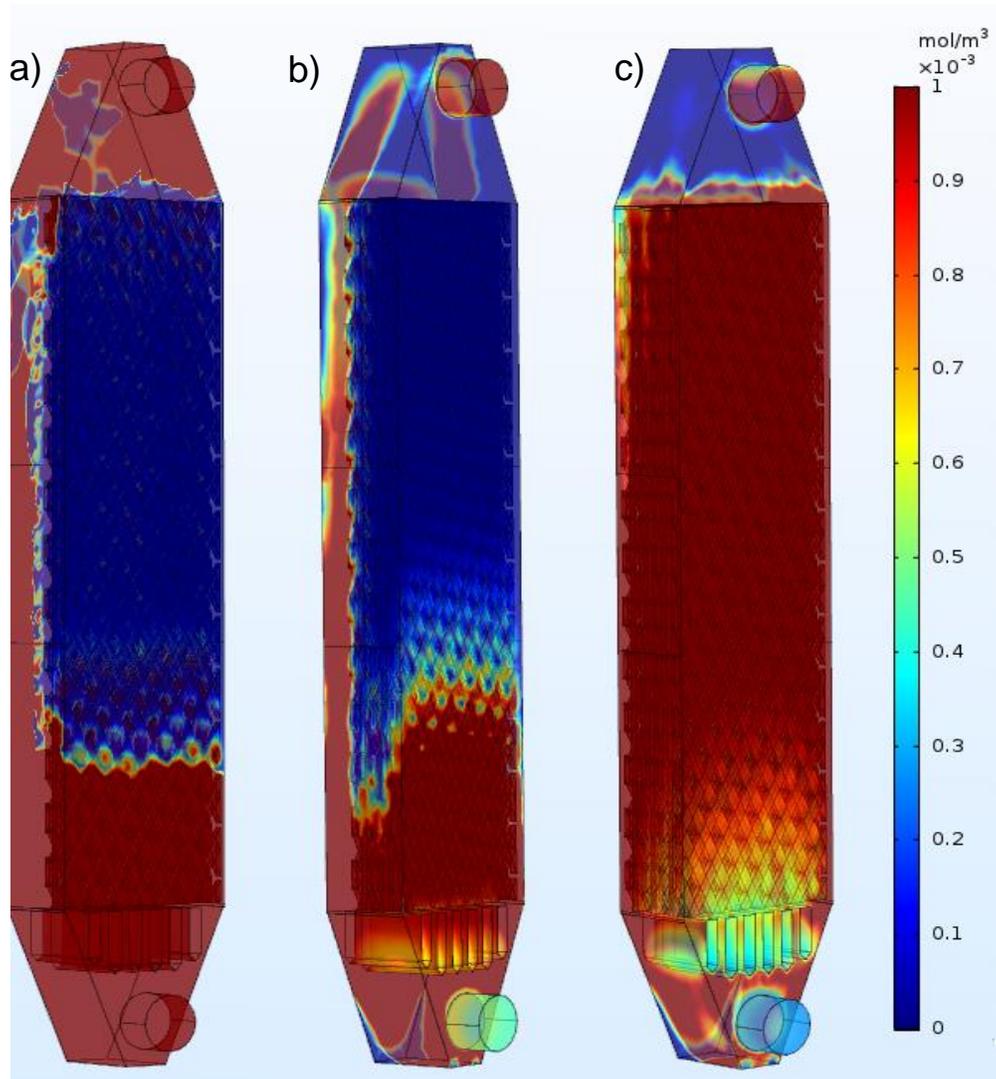


Fig. 3- 14 Canal inter-electrónico FM-01-LC-C, simulación del cambio de la concentración (mol/m^3) a) 3 mallas, b) 5 mallas y c) 7 mallas a un flujo de (2.0 L/min) y un tiempo 80 (θ)

En base a las figuras observadas de las simulaciones se aprecian mejores resultados con 7 mallas. En cuanto a las zonas de estancamiento comienza a ser menor mientras que el flujo sea mayor por ejemplo con una concentración de 0.4 L/m (Fig. 3-6 c) se observaban más canalamientos en las paredes laterales del canal y en la Fig. 3-14c se observa que las mallas hacen que desaparezcan zonas de alta y baja velocidad y una mejor distribución del flujo a lo largo y ancho del canal. A continuación, se muestran los tiempos de residencia de la fase líquida.

3.5.1 *Distribución de tiempos de residencia.*

A fin de realizar un análisis cuantitativo de la visualización de flujo, se construyeron curvas de distribución de tiempos de residencia (DTR) teóricas resolviendo el modelo de difusión-convección para flujo laminar, tomando los vectores de velocidad local de los obtenidos en la resolución de las ecuaciones de Navier Stokes.

Las figuras 3-15 muestra las curvas DTR simuladas en canal con 3, 5 y 7 mallas y a diferentes flujos de entrada de 0.4, 0.6, 0.8, 1.0 y 2.0 L/min, como una función del tiempo de residencia adimensional ($\theta = t/\tau$), donde τ es el tiempo de residencia promedio dado por la relación entre la longitud del canal FM-01-LC-C y la velocidad de flujo de entrada ($\tau = L/U_0$) donde L es la longitud del canal y U_0 la velocidad de entrada.

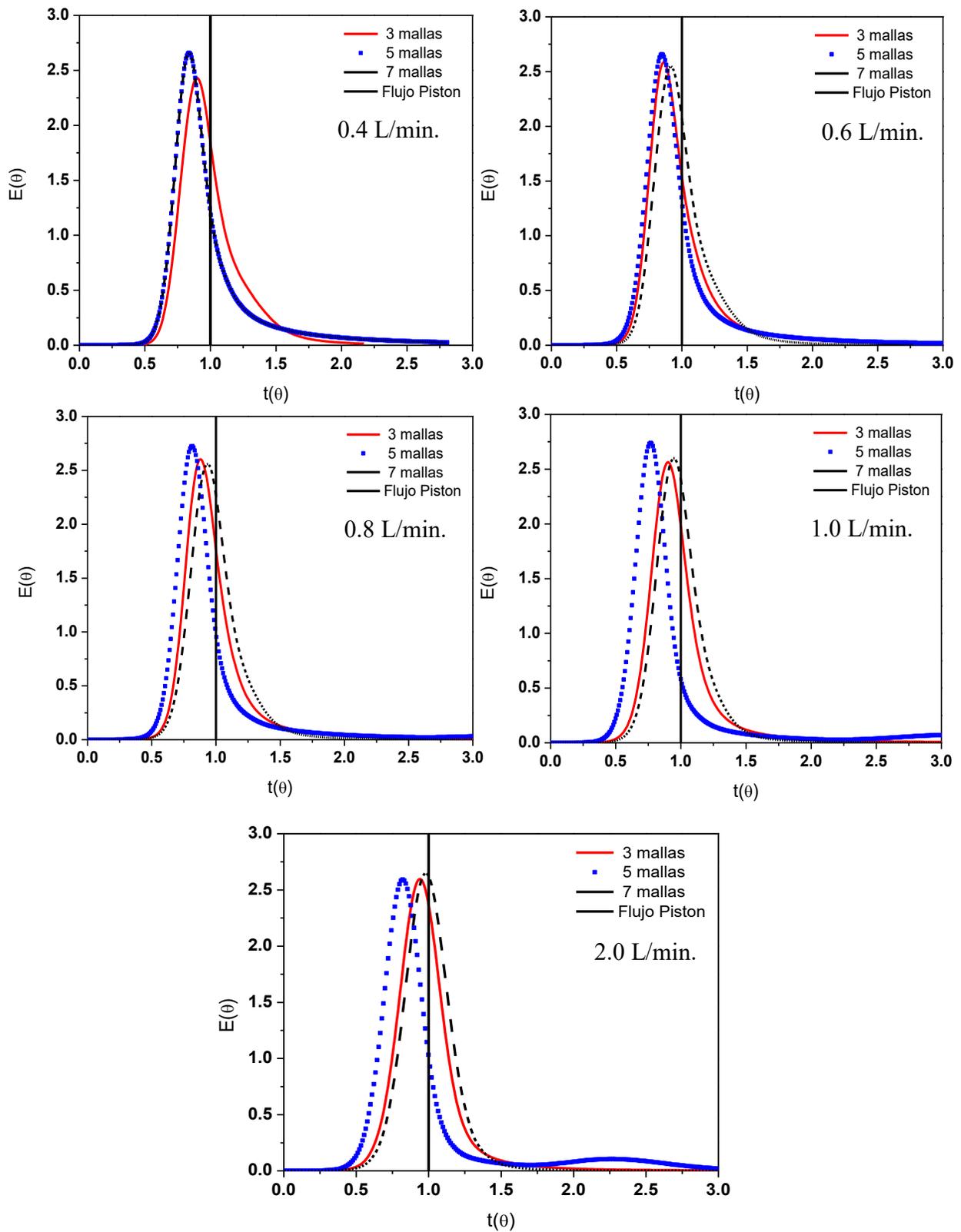


Fig. 3- 15 DTR representadas a diferentes flujos a) 0.4 LPM b) 0.6LPM c) 0.8LPM d) 1.0 LPM y e) 2.0 LPM; realizando una comparación en la diferentes mallas.

Como se observa en las gráficas de la Fig. 3-15 el modelo que más se acerca a las desviaciones de la idealidad en un reactor tipo flujo pistón (línea negra), son las curvas de 7 mallas, en todas existe un desplazamiento hacia la izquierda esto quiere decir que existe canalamientos o zonas de baja velocidad dentro del Canal inter-electródico con dispersiones medianas ($D_{ax}/UL=0.025$) como se muestran en las siguientes tablas. Sin embargo, en la Fig 3-15e (específicamente 2.0 L/min a 7 mallas) se observa que la curva está casi al par con el flujo pistón y comparando con la Fig 3-14c se observa que la dispersión es más ideal.

Tabla 3- 1 Dispersión axial de simulación en COMSOL con 3 mallas

| COMSOL | | | |
|----------------------|-----------|----------------------------|-------------------------------|
| 3 mallas | | | |
| Flujo (L/min) | Re | D_{ax} | D_{ax}/UL |
| 0.4 | 128.01 | 0.0000558 | 0.02182 |
| 0.6 | 192.02 | 0.0001012 | 0.02640 |
| 0.8 | 256.02 | 0.0001372 | 0.02683 |
| 1 | 320.03 | 0.0001691 | 0.02646 |
| 2 | 640.06 | 0.0003227 | 0.02525 |

Tabla 3- 2 Dispersión axial de simulación en COMSOL con 5 mallas

| COMSOL | | | |
|----------------------|-----------|----------------------------|-------------------------------|
| 5 mallas | | | |
| Flujo (L/min) | Re | D_{ax} | D_{ax}/UL |
| 0.4 | 144.28 | 0.0000968 | 0.03361 |
| 0.6 | 216.41 | 0.0001758 | 0.04069 |
| 0.8 | 288.55 | 0.0004064 | 0.07054 |
| 1 | 360.69 | 0.0007624 | 0.10585 |
| 2 | 721.38 | 0.0009326 | 0.06474 |

Tabla 3- 3 Dispersión axial de simulación en COMSOL con 7 mallas

| COMSOL | | | |
|----------------------|-----------|----------------------------|-------------------------------|
| 7 mallas | | | |
| Flujo (L/min) | Re | D_{ax} | D_{ax}/UL |
| 0.4 | 165.27 | 0.0000458 | 0.01387 |
| 0.6 | 247.91 | 0.0000665 | 0.01343 |
| 0.8 | 330.55 | 0.0000832 | 0.01261 |
| 1 | 413.19 | 0.0000997 | 0.01208 |
| 2 | 826.37 | 0.0001409 | 0.00854 |

En las tablas 3-1, 3-2 y 3-3 muestran a las columnas correspondientes al coeficiente de dispersión axial D_{ax} y el inverso del Peclet (D_{ax}/UL) teóricas, en base a las DTR obtenidas con el software *COMSOL Multiphysics 5.3*. Donde D_{ax} es la dispersión axial, L es el termino característico de la longitud del canal y U es la velocidad de entrada al canal.

- $D_{ax}/uL \rightarrow 0$ (dispersión despreciable), se puede hablar de flujo en pistón
- $D_{ax}/uL \rightarrow \infty$ (dispersión grande), se puede hablar de flujo en mezcla completa

Donde uL representa la velocidad de transporte por convección y D_{ax} el coeficiente de transporte por difusión o por dispersión.

Comparando el inverso del Peclet con la fig. 1-2 del capítulo uno se puede decir que tenemos una dispersión mediana ($D_{ax}/UL=0.025$) dentro del nuevo canal inter-electrónico FM-01-LC-C.

3.6 Conclusiones parciales

El canal inter-electrónico FM-01-LC-C mejoro debido a la nueva geometría y a sus distribuidores de flujo, confirmado esto anteriormente por las simulaciones llevadas a cabo en *COMSOL Multiphysics 5.3*. donde se validó el transporte hidrodinámico y de masa, el cual proporciona una mejor distribución en el patrón de flujo, esto con lleva a que es más homogénea dentro del canal inter-electrónico

Analizando las simulaciones se observa que a un flujo de 2.0 L/min con 7 mallas es más homogéneo la Fig. 3-14c y en la gráfica de la Fig 3-15e se observa como cuando hay 7 mallas casi se tiene un flujo pistón.

Conclusiones

De la presente investigación se concluye que:

- Para analizar el comportamiento dentro del canal en presencia de 3 mallas del FM-01-LC de manera teórica en cuanto a la hidrodinámica, se implementó el modelo de convección-difusión en 3-D tomando en cuenta los vectores de velocidad local obtenidos al resolver las ecuaciones para analizar las DTR experimentales y teóricas, en el cual se obtuvo una validación de los modelos utilizados en la simulación de la curva de distribución de tiempos de residencia (Fig.1-9), con el software *COMSOL Multiphysics 5.3* y donde se observan las desviaciones y fenómenos que existen dentro del canal.
- En cuanto al diseño se logró desarrollar un nuevo canal inter-electródico (FM-01-LC-C) a partir de uno convencional FM-01 por medio de simulaciones en *COMSOL Multiphysics 5.3b*. Con la finalidad de mejorar las desviaciones del patrón de flujo de mezclado de la fase líquida, por lo siguiente se realizaron 3 diferentes geometrías de canales inter-electródicos a canal vacío (Fig 2-5) de estas 3 geometrías se acordó utilizar el canal FM-01-LC-C ya que se aprovecha toda el área activa y el cual asegura un contacto entre el electrodo y el electrolito, se logró concluir que el comportamiento del fluido en canal vacío es influenciado por los distribuidores de flujo de entrada el cual hace que se desarrollen los caminos preferenciales. Estas desviaciones de flujo no ideal son evitadas mediante el uso de las mallas, la cual incrementa la velocidad dentro del canal y el mezclado dentro de la misma.
- Por último, se estudió el comportamiento del nuevo canal FM-01-LC con diferente número de mallas tridimensionales que actúan como electrodo y promotor de turbulencia. El uso de estas mallas dentro del canal en un reactor de tipo filtro prensa disminuye las desviaciones de flujo no ideal, lo cual es deseable en la caracterización de las reacciones en este tipo de reactores. Al acoplar mallas al nuevo canal inter-electródico (FM-01-LC-C) se observó que su funcionamiento mejora cuando tiene 7 mallas, ya que tanto en las Fig 3-13c y Fig 3-14c se aprecia la homogeneidad que existe como también se aprecia en la Fig 3-15e donde la curva de 7 mallas y con un flujo de 2L/min tiene un acercamiento considerable al del flujo pistón.

Anexo I

Transformación de la curva de DTR a edades adimensionales.

Para conocer la distribución de tiempo de residencia a edades adimensionales, se realizó la siguiente secuencia de cálculo.

En primera instancia se obtuvo el área bajo la curva la cual se determinó por medio de la siguiente expresión.

$$\text{Área}_{\text{curva}} = \sum C_i * \Delta t_i$$

En donde:

C_i = Es la concentración del trazador en el efluente.

Δt_i = Es el intervalo de tiempo.

Posteriormente se calcula el tiempo promedio de residencia del trazador en el reactor, con las siguientes ecuaciones.

$$\sum t_i C_i \Delta t_i$$

$$\bar{t} = \frac{\sum C_i * \Delta t_i}{\sum t_i C_i \Delta t_i}$$

Una vez obtenido el área bajo la curva y el tiempo promedio, se procederá adimensionalizar el tiempo ($t(\theta)$) y la edad ($E(\theta)$) con las siguientes expresiones.

$$t(\theta) = \frac{t_i}{\bar{t}}$$

$$E = \frac{C_i}{\sum C_i * \Delta t_i}$$

$$E(\theta) = E * \bar{t}$$

En donde:

t_i = Es el tiempo.

\bar{t} = Es el tiempo promedio de residencia del trazador.

$t(\theta)$ = Es el tiempo adimensional.

$E(\theta)$ = Es la Edad adimensional.

| Tiempo | Ci (Mol) | Δt | Ci Δt | tiCi Δt | ti ² Ci Δt | t θ | E | E θ |
|--------|-----------|------------|---------------|-----------------|-------------------------------|------------|----------|------------|
| 10 | 2.05E-12 | 1 | 2.05E-12 | 2.05E-11 | 2.0546E-10 | 0.05953945 | 2.12E-12 | 3.56E-10 |
| 20 | 8.62E-08 | 1 | 8.62E-08 | 1.72E-06 | 3.44872E-05 | 0.11907891 | 8.89E-08 | 1.49E-05 |
| 30 | 2.62E-07 | 1 | 2.62E-07 | 7.87E-06 | 0.000236016 | 0.17861836 | 2.71E-07 | 4.54E-05 |
| 40 | 6.74E-07 | 1 | 6.74E-07 | 2.69E-05 | 0.001077744 | 0.23815782 | 6.95E-07 | 1.17E-04 |
| 50 | 1.68E-06 | 1 | 1.68E-06 | 8.39E-05 | 0.0041955 | 0.29769727 | 1.73E-06 | 2.91E-04 |
| 60 | 4.23E-06 | 1 | 4.23E-06 | 2.54E-04 | 0.01521828 | 0.35723672 | 4.36E-06 | 7.32E-04 |
| 70 | 1.22E-05 | 1 | 1.22E-05 | 8.51E-04 | 0.0595742 | 0.41677618 | 1.25E-05 | 2.11E-03 |
| 80 | 4.33E-05 | 1 | 4.33E-05 | 3.46E-03 | 0.2768128 | 0.47631563 | 4.46E-05 | 7.49E-03 |
| 90 | 1.83E-04 | 1 | 1.83E-04 | 1.64E-02 | 1.479222 | 0.53585509 | 1.88E-04 | 3.16E-02 |
| 100 | 7.49E-04 | 1 | 7.49E-04 | 7.49E-02 | 7.4935 | 0.59539454 | 7.73E-04 | 1.30E-01 |
| 110 | 0.0025191 | 1 | 2.52E-03 | 2.77E-01 | 30.48111 | 0.65493399 | 2.60E-03 | 4.36E-01 |
| 120 | 0.0063305 | 1 | 6.33E-03 | 7.60E-01 | 91.1592 | 0.71447345 | 6.53E-03 | 1.10E+00 |
| 130 | 0.011414 | 1 | 1.14E-02 | 1.48E+00 | 192.8966 | 0.7740129 | 1.18E-02 | 1.98E+00 |
| 140 | 0.014661 | 1 | 1.47E-02 | 2.05E+00 | 287.3556 | 0.83355236 | 1.51E-02 | 2.54E+00 |
| 150 | 0.013874 | 1 | 1.39E-02 | 2.08E+00 | 312.165 | 0.89309181 | 1.43E-02 | 2.40E+00 |
| 160 | 0.010571 | 1 | 1.06E-02 | 1.69E+00 | 270.6176 | 0.95263126 | 1.09E-02 | 1.83E+00 |
| 170 | 0.0075981 | 1 | 7.60E-03 | 1.29E+00 | 219.58509 | 1.01217072 | 7.84E-03 | 1.32E+00 |
| 180 | 0.0057457 | 1 | 5.75E-03 | 1.03E+00 | 186.16068 | 1.07171017 | 5.93E-03 | 9.96E-01 |
| 190 | 0.0044668 | 1 | 4.47E-03 | 8.49E-01 | 161.25148 | 1.13124963 | 4.61E-03 | 7.74E-01 |
| 200 | 0.0034699 | 1 | 3.47E-03 | 6.94E-01 | 138.796 | 1.19078908 | 3.58E-03 | 6.01E-01 |
| 210 | 0.002709 | 1 | 2.71E-03 | 5.69E-01 | 119.4669 | 1.25032853 | 2.79E-03 | 4.69E-01 |
| 220 | 0.0021288 | 1 | 2.13E-03 | 4.68E-01 | 103.03392 | 1.30986799 | 2.20E-03 | 3.69E-01 |
| 230 | 0.0016918 | 1 | 1.69E-03 | 3.89E-01 | 89.49622 | 1.36940744 | 1.75E-03 | 2.93E-01 |
| 240 | 0.0013626 | 1 | 1.36E-03 | 3.27E-01 | 78.48576 | 1.4289469 | 1.41E-03 | 2.36E-01 |
| 250 | 0.001113 | 1 | 1.11E-03 | 2.78E-01 | 69.5625 | 1.48848635 | 1.15E-03 | 1.93E-01 |
| 260 | 9.22E-04 | 1 | 9.22E-04 | 2.40E-01 | 62.350184 | 1.54802581 | 9.52E-04 | 1.60E-01 |
| 270 | 7.76E-04 | 1 | 7.76E-04 | 2.09E-01 | 56.552175 | 1.60756526 | 8.00E-04 | 1.34E-01 |
| 280 | 6.62E-04 | 1 | 6.62E-04 | 1.85E-01 | 51.879632 | 1.66710471 | 6.83E-04 | 1.15E-01 |
| 290 | 5.72E-04 | 1 | 5.72E-04 | 1.66E-01 | 48.09679 | 1.72664417 | 5.90E-04 | 9.91E-02 |
| 300 | 5.00E-04 | 1 | 5.00E-04 | 1.50E-01 | 45.0081 | 1.78618362 | 5.16E-04 | 8.67E-02 |
| 310 | 4.42E-04 | 1 | 4.42E-04 | 1.37E-01 | 42.450253 | 1.84572308 | 4.56E-04 | 7.65E-02 |
| 320 | 3.94E-04 | 1 | 3.94E-04 | 1.26E-01 | 40.305664 | 1.90526253 | 4.06E-04 | 6.82E-02 |
| 330 | 3.54E-04 | 1 | 3.54E-04 | 1.17E-01 | 38.497239 | 1.96480198 | 3.65E-04 | 6.13E-02 |
| 340 | 3.20E-04 | 1 | 3.20E-04 | 1.09E-01 | 37.011652 | 2.02434144 | 3.30E-04 | 5.55E-02 |
| 350 | 2.92E-04 | 1 | 2.92E-04 | 1.02E-01 | 35.785925 | 2.08388089 | 3.01E-04 | 5.06E-02 |
| 360 | 2.68E-04 | 1 | 2.68E-04 | 9.64E-02 | 34.696512 | 2.14342035 | 2.76E-04 | 4.64E-02 |
| 370 | 2.46E-04 | 1 | 2.46E-04 | 9.11E-02 | 33.689721 | 2.2029598 | 2.54E-04 | 4.26E-02 |
| 380 | 2.27E-04 | 1 | 2.27E-04 | 8.62E-02 | 32.765804 | 2.26249925 | 2.34E-04 | 3.93E-02 |
| 390 | 2.10E-04 | 1 | 2.10E-04 | 8.19E-02 | 31.928832 | 2.32203871 | 2.17E-04 | 3.64E-02 |
| 400 | 1.95E-04 | 1 | 1.95E-04 | 7.79E-02 | 31.1696 | 2.38157816 | 2.01E-04 | 3.38E-02 |
| | | $\Sigma =$ | 0.97 | 162.80 | 29678.79 | | | |
| | | $t =$ | 1.68E+02 | | | | | |

Tabla a- 1 Datos obtenidos en COMSOL para adimensionalizar las edades, a un flujo de 0.4 L/min con 3 mallas

| Tiempo (s) | Ci (Mol) | Δt | $C_i\Delta t$ | $t_i C_i \Delta t_i$ | $t_i^2 C_i^* \Delta t_i$ | $t\theta$ | E | $E\theta$ |
|------------|-----------|------------|---------------|----------------------|--------------------------|------------|----------|-----------|
| 10 | 6.27E-11 | 1 | 6.27E-11 | 6.27E-10 | 6.27E-09 | 0.07306149 | 6.36E-11 | 8.71E-09 |
| 20 | 5.75E-07 | 1 | 5.75E-07 | 1.15E-05 | 0.00023009 | 0.14612298 | 5.84E-07 | 7.99E-05 |
| 30 | 1.85E-06 | 1 | 1.85E-06 | 5.55E-05 | 0.00166401 | 0.21918447 | 1.88E-06 | 2.57E-04 |
| 40 | 5.00E-06 | 1 | 5.00E-06 | 2.00E-04 | 0.00800784 | 0.29224595 | 5.08E-06 | 6.95E-04 |
| 50 | 1.39E-05 | 1 | 1.39E-05 | 6.97E-04 | 0.0348425 | 0.36530744 | 1.41E-05 | 1.94E-03 |
| 60 | 4.47E-05 | 1 | 4.47E-05 | 2.68E-03 | 0.1610964 | 0.43836893 | 4.54E-05 | 6.21E-03 |
| 70 | 1.86E-04 | 1 | 1.86E-04 | 1.30E-02 | 0.910469 | 0.51143042 | 1.88E-04 | 2.58E-02 |
| 80 | 8.64E-04 | 1 | 8.64E-04 | 6.91E-02 | 5.527936 | 0.58449191 | 8.76E-04 | 1.20E-01 |
| 90 | 0.0034039 | 1 | 3.40E-03 | 3.06E-01 | 27.57159 | 0.6575534 | 3.45E-03 | 4.73E-01 |
| 100 | 0.009328 | 1 | 9.33E-03 | 9.33E-01 | 93.28 | 0.73061489 | 9.46E-03 | 1.30E+00 |
| 110 | 0.016397 | 1 | 1.64E-02 | 1.80E+00 | 198.4037 | 0.80367638 | 1.66E-02 | 2.28E+00 |
| 120 | 0.018424 | 1 | 1.84E-02 | 2.21E+00 | 265.3056 | 0.87673786 | 1.87E-02 | 2.56E+00 |
| 130 | 0.014536 | 1 | 1.45E-02 | 1.89E+00 | 245.6584 | 0.94979935 | 1.47E-02 | 2.02E+00 |
| 140 | 0.009746 | 1 | 9.75E-03 | 1.36E+00 | 191.0216 | 1.02286084 | 9.89E-03 | 1.35E+00 |
| 150 | 0.0065823 | 1 | 6.58E-03 | 9.87E-01 | 148.10175 | 1.09592233 | 6.68E-03 | 9.14E-01 |
| 160 | 0.0044943 | 1 | 4.49E-03 | 7.19E-01 | 115.05408 | 1.16898382 | 4.56E-03 | 6.24E-01 |
| 170 | 0.0030871 | 1 | 3.09E-03 | 5.25E-01 | 89.21719 | 1.24204531 | 3.13E-03 | 4.29E-01 |
| 180 | 0.0021757 | 1 | 2.18E-03 | 3.92E-01 | 70.49268 | 1.3151068 | 2.21E-03 | 3.02E-01 |
| 190 | 0.0015905 | 1 | 1.59E-03 | 3.02E-01 | 57.41705 | 1.38816828 | 1.61E-03 | 2.21E-01 |
| 200 | 0.0012068 | 1 | 1.21E-03 | 2.41E-01 | 48.272 | 1.46122977 | 1.22E-03 | 1.68E-01 |
| 210 | 9.47E-04 | 1 | 9.47E-04 | 1.99E-01 | 41.748147 | 1.53429126 | 9.60E-04 | 1.31E-01 |
| 220 | 7.66E-04 | 1 | 7.66E-04 | 1.68E-01 | 37.060364 | 1.60735275 | 7.77E-04 | 1.06E-01 |
| 230 | 6.35E-04 | 1 | 6.35E-04 | 1.46E-01 | 33.583036 | 1.68041424 | 6.44E-04 | 8.81E-02 |
| 240 | 5.37E-04 | 1 | 5.37E-04 | 1.29E-01 | 30.920832 | 1.75347573 | 5.45E-04 | 7.45E-02 |
| 250 | 4.61E-04 | 1 | 4.61E-04 | 1.15E-01 | 28.824375 | 1.82653722 | 4.68E-04 | 6.40E-02 |
| 260 | 4.01E-04 | 1 | 4.01E-04 | 1.04E-01 | 27.123148 | 1.89959871 | 4.07E-04 | 5.57E-02 |
| 270 | 3.53E-04 | 1 | 3.53E-04 | 9.52E-02 | 25.71183 | 1.97266019 | 3.58E-04 | 4.90E-02 |
| 280 | 3.13E-04 | 1 | 3.13E-04 | 8.77E-02 | 24.542336 | 2.04572168 | 3.18E-04 | 4.35E-02 |
| 290 | 2.80E-04 | 1 | 2.80E-04 | 8.12E-02 | 23.561456 | 2.11878317 | 2.84E-04 | 3.89E-02 |
| 300 | 2.52E-04 | 1 | 2.52E-04 | 7.57E-02 | 22.7205 | 2.19184466 | 2.56E-04 | 3.51E-02 |
| 310 | 2.29E-04 | 1 | 2.29E-04 | 7.11E-02 | 22.034769 | 2.26490615 | 2.33E-04 | 3.18E-02 |
| 320 | 2.09E-04 | 1 | 2.09E-04 | 6.69E-02 | 21.395456 | 2.33796764 | 2.12E-04 | 2.90E-02 |
| 330 | 1.90E-04 | 1 | 1.90E-04 | 6.27E-02 | 20.702979 | 2.41102913 | 1.93E-04 | 2.64E-02 |
| 340 | 1.73E-04 | 1 | 1.73E-04 | 5.89E-02 | 20.012672 | 2.48409061 | 1.76E-04 | 2.40E-02 |
| 350 | 1.58E-04 | 1 | 1.58E-04 | 5.53E-02 | 19.351325 | 2.5571521 | 1.60E-04 | 2.19E-02 |
| 360 | 1.45E-04 | 1 | 1.45E-04 | 5.20E-02 | 18.736272 | 2.63021359 | 1.47E-04 | 2.01E-02 |
| 370 | 1.33E-04 | 1 | 1.33E-04 | 4.91E-02 | 18.150202 | 2.70327508 | 1.34E-04 | 1.84E-02 |
| 380 | 1.22E-04 | 1 | 1.22E-04 | 4.63E-02 | 17.59514 | 2.77633657 | 1.24E-04 | 1.69E-02 |
| 390 | 1.12E-04 | 1 | 1.12E-04 | 4.37E-02 | 17.042805 | 2.84939806 | 1.14E-04 | 1.56E-02 |
| 400 | 1.03E-04 | 1 | 1.03E-04 | 4.12E-02 | 16.496 | 2.92E+00 | 1.05E-04 | 1.43E-02 |
| | | $\Sigma =$ | 9.86E-01 | 1.35E+02 | 20365.3973 | | | |
| | | $t =$ | 1.37E+02 | | | | | |

Tabla a- 2 Datos obtenidos en COMSOL para adimensionalizar las edades, a un flujo de 0.6 L/min con 3 mallas

| Tiempo (s) | Ci (Mol) | Δt | Ci Δt | tiCi Δt i | ti ² Ci ² Δt i | t θ | E | E θ |
|------------|-----------|------------|---------------|-------------------|--|------------|----------|------------|
| 10 | 3.60E-10 | 1 | 3.60E-10 | 3.60E-09 | 3.6016E-08 | 0.08343351 | 3.63E-10 | 4.35E-08 |
| 20 | 1.64E-06 | 1 | 1.64E-06 | 3.28E-05 | 0.00065676 | 0.16686702 | 1.66E-06 | 1.98E-04 |
| 30 | 5.36E-06 | 1 | 5.36E-06 | 1.61E-04 | 0.00482751 | 0.25030053 | 5.41E-06 | 6.48E-04 |
| 40 | 1.53E-05 | 1 | 1.53E-05 | 6.13E-04 | 0.0245104 | 0.33373403 | 1.54E-05 | 1.85E-03 |
| 50 | 4.88E-05 | 1 | 4.88E-05 | 2.44E-03 | 0.122065 | 0.41716754 | 4.92E-05 | 5.90E-03 |
| 60 | 1.95E-04 | 1 | 1.95E-04 | 1.17E-02 | 0.701136 | 0.50060105 | 1.96E-04 | 2.35E-02 |
| 70 | 9.55E-04 | 1 | 9.55E-04 | 6.68E-02 | 4.678765 | 0.58403456 | 9.63E-04 | 1.15E-01 |
| 80 | 0.0041311 | 1 | 4.13E-03 | 3.30E-01 | 26.43904 | 0.66746807 | 4.17E-03 | 4.99E-01 |
| 90 | 0.011849 | 1 | 1.18E-02 | 1.07E+00 | 95.9769 | 0.75090158 | 1.19E-02 | 1.43E+00 |
| 100 | 0.020114 | 1 | 2.01E-02 | 2.01E+00 | 201.14 | 0.83433508 | 2.03E-02 | 2.43E+00 |
| 110 | 0.020573 | 1 | 2.06E-02 | 2.26E+00 | 248.9333 | 0.91776859 | 2.07E-02 | 2.49E+00 |
| 120 | 0.014498 | 1 | 1.45E-02 | 1.74E+00 | 208.7712 | 1.0012021 | 1.46E-02 | 1.75E+00 |
| 130 | 0.0086874 | 1 | 8.69E-03 | 1.13E+00 | 146.81706 | 1.08463561 | 8.76E-03 | 1.05E+00 |
| 140 | 0.0051001 | 1 | 5.10E-03 | 7.14E-01 | 99.96196 | 1.16806912 | 5.14E-03 | 6.16E-01 |
| 150 | 0.0031099 | 1 | 3.11E-03 | 4.66E-01 | 69.97275 | 1.25150263 | 3.14E-03 | 3.76E-01 |
| 160 | 0.0020351 | 1 | 2.04E-03 | 3.26E-01 | 52.09856 | 1.33493613 | 2.05E-03 | 2.46E-01 |
| 170 | 0.001424 | 1 | 1.42E-03 | 2.42E-01 | 41.1536 | 1.41836964 | 1.44E-03 | 1.72E-01 |
| 180 | 0.0010584 | 1 | 1.06E-03 | 1.91E-01 | 34.29216 | 1.50180315 | 1.07E-03 | 1.28E-01 |
| 190 | 8.21E-04 | 1 | 8.21E-04 | 1.56E-01 | 29.653623 | 1.58523666 | 8.28E-04 | 9.93E-02 |
| 200 | 6.58E-04 | 1 | 6.58E-04 | 1.32E-01 | 26.322 | 1.66867017 | 6.63E-04 | 7.95E-02 |
| 220 | 4.55E-04 | 1 | 4.55E-04 | 1.00E-01 | 22.014256 | 1.83553718 | 4.59E-04 | 5.50E-02 |
| 230 | 3.88E-04 | 1 | 3.88E-04 | 8.93E-02 | 20.546889 | 1.91897069 | 3.92E-04 | 4.69E-02 |
| 240 | 3.35E-04 | 1 | 3.35E-04 | 8.05E-02 | 19.324224 | 2.0024042 | 3.38E-04 | 4.05E-02 |
| 250 | 2.93E-04 | 1 | 2.93E-04 | 7.31E-02 | 18.284375 | 2.08583771 | 2.95E-04 | 3.54E-02 |
| 260 | 2.56E-04 | 1 | 2.56E-04 | 6.67E-02 | 17.336696 | 2.16927122 | 2.59E-04 | 3.10E-02 |
| 270 | 2.26E-04 | 1 | 2.26E-04 | 6.10E-02 | 16.458633 | 2.25270473 | 2.28E-04 | 2.73E-02 |
| 280 | 2.00E-04 | 1 | 2.00E-04 | 5.59E-02 | 15.642368 | 2.33613823 | 2.01E-04 | 2.41E-02 |
| 290 | 1.77E-04 | 1 | 1.77E-04 | 5.13E-02 | 14.882336 | 2.41957174 | 1.78E-04 | 2.14E-02 |
| 300 | 1.58E-04 | 1 | 1.58E-04 | 4.73E-02 | 14.2011 | 2.50300525 | 1.59E-04 | 1.91E-02 |
| 310 | 1.40E-04 | 1 | 1.40E-04 | 4.35E-02 | 13.499167 | 2.58643876 | 1.42E-04 | 1.70E-02 |
| 320 | 1.24E-04 | 1 | 1.24E-04 | 3.98E-02 | 12.734464 | 2.66987227 | 1.25E-04 | 1.50E-02 |
| 330 | 1.10E-04 | 1 | 1.10E-04 | 3.64E-02 | 12.00078 | 2.75330578 | 1.11E-04 | 1.33E-02 |
| 340 | 9.82E-05 | 1 | 9.82E-05 | 3.34E-02 | 11.3557348 | 2.83673929 | 9.90E-05 | 1.19E-02 |
| 350 | 8.81E-05 | 1 | 8.81E-05 | 3.08E-02 | 10.791025 | 2.92017279 | 8.88E-05 | 1.06E-02 |
| 360 | 7.94E-05 | 1 | 7.94E-05 | 2.86E-02 | 10.2897216 | 3.0036063 | 8.01E-05 | 9.59E-03 |
| 370 | 7.19E-05 | 1 | 7.19E-05 | 2.66E-02 | 9.8473539 | 3.08703981 | 7.25E-05 | 8.69E-03 |
| 380 | 6.54E-05 | 1 | 6.54E-05 | 2.49E-02 | 9.4496804 | 3.17047332 | 6.60E-05 | 7.91E-03 |
| 390 | 5.98E-05 | 1 | 5.98E-05 | 2.33E-02 | 9.0977094 | 3.25390683 | 6.03E-05 | 7.23E-03 |
| 400 | 5.49E-05 | 1 | 5.49E-05 | 2.20E-02 | 8.79168 | 3.33734034 | 5.54E-05 | 6.64E-03 |
| | | $\Sigma =$ | 9.92E-01 | 1.19E+02 | 15735.8976 | | | |
| | | $t =$ | 1.20E+02 | | | | | |

Tabla a- 3 Datos obtenidos en COMSOL para adimensionalizar las edades, a un flujo de 0.8 L/min con 3 mallas

| Tiempo (s) | Ci (Mol) | Δt | $C_i \Delta t$ | $t_i C_i \Delta t$ | $t_i^2 C_i \Delta t$ | $t \theta$ | E | $E \theta$ |
|------------|-----------|------------|----------------|--------------------|----------------------|------------|----------|------------|
| 10 | 1.19E-10 | 1 | 1.19E-10 | 1.19E-09 | 1.185E-08 | 0.09218914 | 1.16E-10 | 1.26E-08 |
| 20 | 2.86E-06 | 1 | 2.86E-06 | 5.72E-05 | 0.00114496 | 0.18437828 | 2.81E-06 | 3.05E-04 |
| 30 | 1.03E-05 | 1 | 1.03E-05 | 3.10E-04 | 0.0093033 | 0.27656743 | 1.01E-05 | 1.10E-03 |
| 40 | 3.81E-05 | 1 | 3.81E-05 | 1.52E-03 | 0.0609824 | 0.36875657 | 3.74E-05 | 4.06E-03 |
| 50 | 1.74E-04 | 1 | 1.74E-04 | 8.68E-03 | 0.433975 | 0.46094571 | 1.70E-04 | 1.85E-02 |
| 60 | 8.22E-04 | 1 | 8.22E-04 | 4.93E-02 | 2.958984 | 0.55313485 | 8.07E-04 | 8.75E-02 |
| 70 | 0.0034276 | 1 | 3.43E-03 | 2.40E-01 | 16.79524 | 0.645324 | 3.36E-03 | 3.65E-01 |
| 80 | 0.01056 | 1 | 1.06E-02 | 8.45E-01 | 67.584 | 0.73751314 | 1.04E-02 | 1.12E+00 |
| 90 | 0.020603 | 1 | 2.06E-02 | 1.85E+00 | 166.8843 | 0.82970228 | 2.02E-02 | 2.19E+00 |
| 100 | 0.023773 | 1 | 2.38E-02 | 2.38E+00 | 237.73 | 0.92189142 | 2.33E-02 | 2.53E+00 |
| 110 | 0.017213 | 1 | 1.72E-02 | 1.89E+00 | 208.2773 | 1.01408057 | 1.69E-02 | 1.83E+00 |
| 120 | 0.0093567 | 1 | 9.36E-03 | 1.12E+00 | 134.73648 | 1.10626971 | 9.19E-03 | 9.96E-01 |
| 130 | 0.0048503 | 1 | 4.85E-03 | 6.31E-01 | 81.97007 | 1.19845885 | 4.76E-03 | 5.16E-01 |
| 140 | 0.0027663 | 1 | 2.77E-03 | 3.87E-01 | 54.21948 | 1.29064799 | 2.72E-03 | 2.95E-01 |
| 150 | 0.0017613 | 1 | 1.76E-03 | 2.64E-01 | 39.62925 | 1.38283713 | 1.73E-03 | 1.88E-01 |
| 160 | 0.0012268 | 1 | 1.23E-03 | 1.96E-01 | 31.40608 | 1.47502628 | 1.20E-03 | 1.31E-01 |
| 170 | 9.09E-04 | 1 | 9.09E-04 | 1.54E-01 | 26.262008 | 1.56721542 | 8.92E-04 | 9.68E-02 |
| 180 | 7.04E-04 | 1 | 7.04E-04 | 1.27E-01 | 22.794372 | 1.65940456 | 6.91E-04 | 7.49E-02 |
| 190 | 5.63E-04 | 1 | 5.63E-04 | 1.07E-01 | 20.314914 | 1.7515937 | 5.52E-04 | 5.99E-02 |
| 200 | 4.60E-04 | 1 | 4.60E-04 | 9.21E-02 | 18.4112 | 1.84378285 | 4.52E-04 | 4.90E-02 |
| 210 | 3.82E-04 | 1 | 3.82E-04 | 8.03E-02 | 16.866045 | 1.93597199 | 3.75E-04 | 4.07E-02 |
| 220 | 3.21E-04 | 1 | 3.21E-04 | 7.07E-02 | 15.55818 | 2.02816113 | 3.16E-04 | 3.42E-02 |
| 230 | 2.73E-04 | 1 | 2.73E-04 | 6.27E-02 | 14.420011 | 2.12035027 | 2.68E-04 | 2.90E-02 |
| 240 | 2.32E-04 | 1 | 2.32E-04 | 5.58E-02 | 13.383936 | 2.21253942 | 2.28E-04 | 2.47E-02 |
| 250 | 1.99E-04 | 1 | 1.99E-04 | 4.97E-02 | 12.435 | 2.30472856 | 1.95E-04 | 2.12E-02 |
| 260 | 1.71E-04 | 1 | 1.71E-04 | 4.45E-02 | 11.575824 | 2.3969177 | 1.68E-04 | 1.82E-02 |
| 270 | 1.48E-04 | 1 | 1.48E-04 | 4.00E-02 | 10.792116 | 2.48910684 | 1.45E-04 | 1.58E-02 |
| 280 | 1.29E-04 | 1 | 1.29E-04 | 3.61E-02 | 10.099488 | 2.58129598 | 1.26E-04 | 1.37E-02 |
| 290 | 1.13E-04 | 1 | 1.13E-04 | 3.28E-02 | 9.517597 | 2.67348513 | 1.11E-04 | 1.21E-02 |
| 300 | 1.00E-04 | 1 | 1.00E-04 | 3.01E-02 | 9.0432 | 2.76567427 | 9.86E-05 | 1.07E-02 |
| 310 | 8.86E-05 | 1 | 8.86E-05 | 2.75E-02 | 8.518304 | 2.85786341 | 8.70E-05 | 9.44E-03 |
| 320 | 7.84E-05 | 1 | 7.84E-05 | 2.51E-02 | 8.0260096 | 2.95005255 | 7.69E-05 | 8.35E-03 |
| 330 | 7.01E-05 | 1 | 7.01E-05 | 2.31E-02 | 7.6345434 | 3.0422417 | 6.88E-05 | 7.47E-03 |
| 340 | 6.33E-05 | 1 | 6.33E-05 | 2.15E-02 | 7.3136652 | 3.13443084 | 6.21E-05 | 6.74E-03 |
| 350 | 5.74E-05 | 1 | 5.74E-05 | 2.01E-02 | 7.0306425 | 3.22661998 | 5.63E-05 | 6.11E-03 |
| 360 | 5.24E-05 | 1 | 5.24E-05 | 1.88E-02 | 6.78456 | 3.31880912 | 5.14E-05 | 5.57E-03 |
| 370 | 4.80E-05 | 1 | 4.80E-05 | 1.78E-02 | 6.5687358 | 3.41099826 | 4.71E-05 | 5.11E-03 |
| 380 | 4.42E-05 | 1 | 4.42E-05 | 1.68E-02 | 6.3852236 | 3.50318741 | 4.34E-05 | 4.71E-03 |
| 390 | 4.09E-05 | 1 | 4.09E-05 | 1.60E-02 | 6.22089 | 3.59537655 | 4.01E-05 | 4.36E-03 |
| 400 | 3.79E-05 | 1 | 3.79E-05 | 1.52E-02 | 6.07104 | 3.68756569 | 3.72E-05 | 4.04E-03 |
| | | $\Sigma =$ | 1.02E+00 | 1.10E+02 | 13221.1717 | | | |
| | | $t =$ | 1.08E+02 | | | | | |

Tabla a- 4 Datos obtenidos en COMSOL para adimensionalizar las edades, a un flujo de 1.0 L/min con 3 mallas

| Tiempo (s) | Ci (Mol) | Δt | $C_i \Delta t$ | $t_i C_i \Delta t$ | $t_i^2 C_i \Delta t$ | $t_i \theta$ | E | $E \theta$ |
|------------|-----------|------------|----------------|--------------------|----------------------|--------------|----------|------------|
| 10 | 7.01E-09 | 1 | 7.01E-09 | 7.01E-08 | 7.0094E-07 | 0.11602744 | 6.92E-09 | 5.97E-07 |
| 20 | 1.16E-05 | 1 | 1.16E-05 | 2.33E-04 | 0.0046576 | 0.23205488 | 1.15E-05 | 9.91E-04 |
| 30 | 5.20E-05 | 1 | 5.20E-05 | 1.56E-03 | 0.0468099 | 0.34808232 | 5.14E-05 | 4.43E-03 |
| 40 | 2.50E-04 | 1 | 2.50E-04 | 1.00E-02 | 0.39984 | 0.46410977 | 2.47E-04 | 2.13E-02 |
| 50 | 0.0014652 | 1 | 1.47E-03 | 7.33E-02 | 3.663 | 0.58013721 | 1.45E-03 | 1.25E-01 |
| 60 | 0.0068157 | 1 | 6.82E-03 | 4.09E-01 | 24.53652 | 0.69616465 | 6.73E-03 | 5.80E-01 |
| 70 | 0.019905 | 1 | 1.99E-02 | 1.39E+00 | 97.5345 | 0.81219209 | 1.97E-02 | 1.69E+00 |
| 80 | 0.030416 | 1 | 3.04E-02 | 2.43E+00 | 194.6624 | 0.92821953 | 3.00E-02 | 2.59E+00 |
| 90 | 0.023128 | 1 | 2.31E-02 | 2.08E+00 | 187.3368 | 1.04424697 | 2.28E-02 | 1.97E+00 |
| 100 | 0.0097285 | 1 | 9.73E-03 | 9.73E-01 | 97.285 | 1.16027441 | 9.61E-03 | 8.28E-01 |
| 110 | 0.0035565 | 1 | 3.56E-03 | 3.91E-01 | 43.03365 | 1.27630185 | 3.51E-03 | 3.03E-01 |
| 120 | 0.0017374 | 1 | 1.74E-03 | 2.08E-01 | 25.01856 | 1.3923293 | 1.72E-03 | 1.48E-01 |
| 130 | 0.0010476 | 1 | 1.05E-03 | 1.36E-01 | 17.70444 | 1.50835674 | 1.03E-03 | 8.92E-02 |
| 140 | 6.89E-04 | 1 | 6.89E-04 | 9.65E-02 | 13.512436 | 1.62438418 | 6.81E-04 | 5.87E-02 |
| 150 | 4.75E-04 | 1 | 4.75E-04 | 7.13E-02 | 10.68885 | 1.74041162 | 4.69E-04 | 4.04E-02 |
| 160 | 3.40E-04 | 1 | 3.40E-04 | 5.43E-02 | 8.691712 | 1.85643906 | 3.35E-04 | 2.89E-02 |
| 170 | 2.51E-04 | 1 | 2.51E-04 | 4.26E-02 | 7.243785 | 1.9724665 | 2.48E-04 | 2.13E-02 |
| 180 | 1.91E-04 | 1 | 1.91E-04 | 3.44E-02 | 6.192612 | 2.08849394 | 1.89E-04 | 1.63E-02 |
| 190 | 1.51E-04 | 1 | 1.51E-04 | 2.87E-02 | 5.448212 | 2.20452139 | 1.49E-04 | 1.28E-02 |
| 200 | 1.23E-04 | 1 | 1.23E-04 | 2.46E-02 | 4.9284 | 2.32054883 | 1.22E-04 | 1.05E-02 |
| 210 | 1.03E-04 | 1 | 1.03E-04 | 2.15E-02 | 4.521573 | 2.43657627 | 1.01E-04 | 8.73E-03 |
| 220 | 8.70E-05 | 1 | 8.70E-05 | 1.91E-02 | 4.2096384 | 2.55260371 | 8.59E-05 | 7.40E-03 |
| 230 | 7.49E-05 | 1 | 7.49E-05 | 1.72E-02 | 3.961681 | 2.66863115 | 7.40E-05 | 6.37E-03 |
| 240 | 6.52E-05 | 1 | 6.52E-05 | 1.56E-02 | 3.7538496 | 2.78465859 | 6.44E-05 | 5.55E-03 |
| 250 | 5.75E-05 | 1 | 5.75E-05 | 1.44E-02 | 3.5954375 | 2.90068603 | 5.68E-05 | 4.90E-03 |
| 260 | 5.12E-05 | 1 | 5.12E-05 | 1.33E-02 | 3.4581456 | 3.01671347 | 5.05E-05 | 4.35E-03 |
| 270 | 4.48E-05 | 1 | 4.48E-05 | 1.21E-02 | 3.2680341 | 3.13274092 | 4.43E-05 | 3.82E-03 |
| 280 | 4.01E-05 | 1 | 4.01E-05 | 1.12E-02 | 3.142272 | 3.24876836 | 3.96E-05 | 3.41E-03 |
| 290 | 3.63E-05 | 1 | 3.63E-05 | 1.05E-02 | 3.0545961 | 3.3647958 | 3.59E-05 | 3.09E-03 |
| 300 | 3.34E-05 | 1 | 3.34E-05 | 1.00E-02 | 3.00294 | 3.48082324 | 3.30E-05 | 2.84E-03 |
| 310 | 3.15E-05 | 1 | 3.15E-05 | 9.77E-03 | 3.0297447 | 3.59685068 | 3.11E-05 | 2.68E-03 |
| 320 | 3.08E-05 | 1 | 3.08E-05 | 9.85E-03 | 3.15136 | 3.71287812 | 3.04E-05 | 2.62E-03 |
| 330 | 3.09E-05 | 1 | 3.09E-05 | 1.02E-02 | 3.3638121 | 3.82890556 | 3.05E-05 | 2.63E-03 |
| 340 | 3.20E-05 | 1 | 3.20E-05 | 1.09E-02 | 3.7030148 | 3.94493301 | 3.16E-05 | 2.73E-03 |
| 350 | 3.41E-05 | 1 | 3.41E-05 | 1.19E-02 | 4.1736975 | 4.06096045 | 3.36E-05 | 2.90E-03 |
| 360 | 3.63E-05 | 1 | 3.63E-05 | 1.31E-02 | 4.7075904 | 4.17698789 | 3.59E-05 | 3.09E-03 |
| 370 | 3.82E-05 | 1 | 3.82E-05 | 1.41E-02 | 5.2230088 | 4.29301533 | 3.77E-05 | 3.25E-03 |
| 380 | 3.91E-05 | 1 | 3.91E-05 | 1.49E-02 | 5.6454624 | 4.40904277 | 3.86E-05 | 3.33E-03 |
| 390 | 3.89E-05 | 1 | 3.89E-05 | 1.52E-02 | 5.9153211 | 4.52507021 | 3.84E-05 | 3.31E-03 |
| 400 | 3.76E-05 | 1 | 3.76E-05 | 1.50E-02 | 6.01728 | 4.64109765 | 3.71E-05 | 3.20E-03 |
| | | $\Sigma =$ | 1.01E+00 | 8.73E+01 | 8261.72752 | | | |
| | | $t =$ | 8.62E+01 | | | | | |

Tabla a- 5 Datos obtenidos en COMSOL para adimensionalizar las edades, a un flujo de 2.0 L/min con 3 mallas

| Tiempo (s) | Ci (Mol) | Δt | $C_i \Delta t$ | $t_i C_i \Delta t_i$ | $t_i^2 C_i \Delta t_i$ | $t\theta$ | E | $E\theta$ |
|------------|-----------|------------|----------------|----------------------|------------------------|------------|----------|-----------|
| 10 | 5.82E-11 | 1 | 5.82E-11 | 5.82E-10 | 5.8187E-09 | 0.07019635 | 6.45E-11 | 9.20E-09 |
| 20 | 4.47E-07 | 1 | 4.47E-07 | 8.95E-06 | 0.000179 | 0.1403927 | 4.96E-07 | 7.07E-05 |
| 30 | 1.39E-06 | 1 | 1.39E-06 | 4.18E-05 | 0.00125541 | 0.21058905 | 1.55E-06 | 2.20E-04 |
| 40 | 3.97E-06 | 1 | 3.97E-06 | 1.59E-04 | 0.0063528 | 0.2807854 | 4.40E-06 | 6.27E-04 |
| 50 | 1.19E-05 | 1 | 1.19E-05 | 5.96E-04 | 0.0298075 | 0.35098175 | 1.32E-05 | 1.88E-03 |
| 60 | 3.99E-05 | 1 | 3.99E-05 | 2.40E-03 | 0.1437192 | 0.4211781 | 4.43E-05 | 6.31E-03 |
| 70 | 1.66E-04 | 1 | 1.66E-04 | 1.16E-02 | 0.812861 | 0.49137445 | 1.84E-04 | 2.62E-02 |
| 80 | 7.35E-04 | 1 | 7.35E-04 | 5.88E-02 | 4.701312 | 0.5615708 | 8.15E-04 | 1.16E-01 |
| 90 | 0.0027603 | 1 | 2.76E-03 | 2.48E-01 | 22.35843 | 0.63176715 | 3.06E-03 | 4.36E-01 |
| 100 | 0.0075864 | 1 | 7.59E-03 | 7.59E-01 | 75.864 | 0.7019635 | 8.42E-03 | 1.20E+00 |
| 110 | 0.014055 | 1 | 1.41E-02 | 1.55E+00 | 170.0655 | 0.77215985 | 1.56E-02 | 2.22E+00 |
| 120 | 0.016807 | 1 | 1.68E-02 | 2.02E+00 | 242.0208 | 0.8423562 | 1.86E-02 | 2.66E+00 |
| 130 | 0.013569 | 1 | 1.36E-02 | 1.76E+00 | 229.3161 | 0.91255255 | 1.51E-02 | 2.14E+00 |
| 140 | 0.0086705 | 1 | 8.67E-03 | 1.21E+00 | 169.9418 | 0.98274891 | 9.62E-03 | 1.37E+00 |
| 150 | 0.0054809 | 1 | 5.48E-03 | 8.22E-01 | 123.32025 | 1.05294526 | 6.08E-03 | 8.66E-01 |
| 160 | 0.0037646 | 1 | 3.76E-03 | 6.02E-01 | 96.37376 | 1.12314161 | 4.18E-03 | 5.95E-01 |
| 170 | 0.0026947 | 1 | 2.69E-03 | 4.58E-01 | 77.87683 | 1.19333796 | 2.99E-03 | 4.26E-01 |
| 180 | 0.0020313 | 1 | 2.03E-03 | 3.66E-01 | 65.81412 | 1.26353431 | 2.25E-03 | 3.21E-01 |
| 190 | 0.0016026 | 1 | 1.60E-03 | 3.04E-01 | 57.85386 | 1.33373066 | 1.78E-03 | 2.53E-01 |
| 200 | 0.0013105 | 1 | 1.31E-03 | 2.62E-01 | 52.42 | 1.40392701 | 1.45E-03 | 2.07E-01 |
| 210 | 0.0011014 | 1 | 1.10E-03 | 2.31E-01 | 48.57174 | 1.47412336 | 1.22E-03 | 1.74E-01 |
| 220 | 9.44E-04 | 1 | 9.44E-04 | 2.08E-01 | 45.685728 | 1.54431971 | 1.05E-03 | 1.49E-01 |
| 230 | 8.19E-04 | 1 | 8.19E-04 | 1.88E-01 | 43.338325 | 1.61451606 | 9.09E-04 | 1.29E-01 |
| 240 | 7.18E-04 | 1 | 7.18E-04 | 1.72E-01 | 41.361984 | 1.68471241 | 7.97E-04 | 1.13E-01 |
| 250 | 6.35E-04 | 1 | 6.35E-04 | 1.59E-01 | 39.659375 | 1.75490876 | 7.04E-04 | 1.00E-01 |
| 260 | 5.65E-04 | 1 | 5.65E-04 | 1.47E-01 | 38.195352 | 1.82510511 | 6.27E-04 | 8.93E-02 |
| 270 | 5.06E-04 | 1 | 5.06E-04 | 1.37E-01 | 36.919476 | 1.89530146 | 5.62E-04 | 8.00E-02 |
| 280 | 4.56E-04 | 1 | 4.56E-04 | 1.28E-01 | 35.777056 | 1.96549781 | 5.06E-04 | 7.21E-02 |
| 290 | 4.13E-04 | 1 | 4.13E-04 | 1.20E-01 | 34.726572 | 2.03569416 | 4.58E-04 | 6.53E-02 |
| 300 | 3.75E-04 | 1 | 3.75E-04 | 1.12E-01 | 33.7392 | 2.10589051 | 4.16E-04 | 5.92E-02 |
| 310 | 3.41E-04 | 1 | 3.41E-04 | 1.06E-01 | 32.799891 | 2.17608686 | 3.79E-04 | 5.39E-02 |
| 320 | 3.12E-04 | 1 | 3.12E-04 | 9.97E-02 | 31.899648 | 2.24628321 | 3.46E-04 | 4.92E-02 |
| 330 | 2.85E-04 | 1 | 2.85E-04 | 9.41E-02 | 31.037589 | 2.31647956 | 3.16E-04 | 4.50E-02 |
| 340 | 2.61E-04 | 1 | 2.61E-04 | 8.88E-02 | 30.201656 | 2.38667591 | 2.90E-04 | 4.13E-02 |
| 350 | 2.40E-04 | 1 | 2.40E-04 | 8.40E-02 | 29.386525 | 2.45687226 | 2.66E-04 | 3.79E-02 |
| 360 | 2.21E-04 | 1 | 2.21E-04 | 7.95E-02 | 28.627344 | 2.52706861 | 2.45E-04 | 3.49E-02 |
| 370 | 2.04E-04 | 1 | 2.04E-04 | 7.55E-02 | 27.928969 | 2.59726496 | 2.26E-04 | 3.22E-02 |
| 380 | 1.89E-04 | 1 | 1.89E-04 | 7.18E-02 | 27.280048 | 2.66746131 | 2.10E-04 | 2.99E-02 |
| 390 | 1.75E-04 | 1 | 1.75E-04 | 6.83E-02 | 26.652483 | 2.73765766 | 1.94E-04 | 2.77E-02 |
| 400 | 1.63E-04 | 1 | 1.63E-04 | 6.50E-02 | 26.0144 | 2.81E+00 | 1.80E-04 | 2.57E-02 |
| | | $\Sigma =$ | 9.01E-01 | 1.28E+02 | 20671.1861 | | | |
| | | $t =$ | 1.42E+02 | | | | | |

Tabla a- 6 Datos obtenidos en COMSOL para adimensionalizar las edades, a un flujo de 0.4 L/min con 5 mallas

| Tiempo (s) | Ci (Mol) | Δt | CiΔt | tiCiΔti | ti²Ci²Dti | tθ | E | Eθ |
|------------|-----------|----|----------|----------|------------|------------|----------|----------|
| 10 | 7.35E-10 | 1 | 7.35E-10 | 7.35E-09 | 7.3515E-08 | 0.083768 | 8.03E-10 | 9.58E-08 |
| 20 | 1.99E-06 | 1 | 1.99E-06 | 3.99E-05 | 0.00079728 | 0.16753599 | 2.18E-06 | 2.60E-04 |
| 30 | 6.73E-06 | 1 | 6.73E-06 | 2.02E-04 | 0.00605628 | 0.25130399 | 7.35E-06 | 8.77E-04 |
| 40 | 2.11E-05 | 1 | 2.11E-05 | 8.45E-04 | 0.033784 | 0.33507199 | 2.31E-05 | 2.75E-03 |
| 50 | 7.79E-05 | 1 | 7.79E-05 | 3.90E-03 | 0.1948275 | 0.41883999 | 8.51E-05 | 1.02E-02 |
| 60 | 3.50E-04 | 1 | 3.50E-04 | 2.10E-02 | 1.260324 | 0.50260798 | 3.82E-04 | 4.56E-02 |
| 70 | 0.0016721 | 1 | 1.67E-03 | 1.17E-01 | 8.19329 | 0.58637598 | 1.83E-03 | 2.18E-01 |
| 80 | 0.0062062 | 1 | 6.21E-03 | 4.96E-01 | 39.71968 | 0.67014398 | 6.78E-03 | 8.09E-01 |
| 90 | 0.014673 | 1 | 1.47E-02 | 1.32E+00 | 118.8513 | 0.75391198 | 1.60E-02 | 1.91E+00 |
| 100 | 0.020334 | 1 | 2.03E-02 | 2.03E+00 | 203.34 | 0.83767997 | 2.22E-02 | 2.65E+00 |
| 110 | 0.016894 | 1 | 1.69E-02 | 1.86E+00 | 204.4174 | 0.92144797 | 1.84E-02 | 2.20E+00 |
| 120 | 0.0097163 | 1 | 9.72E-03 | 1.17E+00 | 139.91472 | 1.00521597 | 1.06E-02 | 1.27E+00 |
| 130 | 0.0052381 | 1 | 5.24E-03 | 6.81E-01 | 88.52389 | 1.08898397 | 5.72E-03 | 6.83E-01 |
| 140 | 0.0032339 | 1 | 3.23E-03 | 4.53E-01 | 63.38444 | 1.17275196 | 3.53E-03 | 4.22E-01 |
| 150 | 0.0022273 | 1 | 2.23E-03 | 3.34E-01 | 50.11425 | 1.25651996 | 2.43E-03 | 2.90E-01 |
| 160 | 0.0016618 | 1 | 1.66E-03 | 2.66E-01 | 42.54208 | 1.34028796 | 1.81E-03 | 2.17E-01 |
| 170 | 0.0012951 | 1 | 1.30E-03 | 2.20E-01 | 37.42839 | 1.42405596 | 1.41E-03 | 1.69E-01 |
| 180 | 0.0010398 | 1 | 1.04E-03 | 1.87E-01 | 33.68952 | 1.50782395 | 1.14E-03 | 1.36E-01 |
| 190 | 8.64E-04 | 1 | 8.64E-04 | 1.64E-01 | 31.178126 | 1.59159195 | 9.43E-04 | 1.13E-01 |
| 200 | 7.34E-04 | 1 | 7.34E-04 | 1.47E-01 | 29.3412 | 1.67535995 | 8.01E-04 | 9.56E-02 |
| 210 | 6.34E-04 | 1 | 6.34E-04 | 1.33E-01 | 27.947934 | 1.75912795 | 6.92E-04 | 8.26E-02 |
| 220 | 5.54E-04 | 1 | 5.54E-04 | 1.22E-01 | 26.819408 | 1.84289594 | 6.05E-04 | 7.22E-02 |
| 230 | 4.86E-04 | 1 | 4.86E-04 | 1.12E-01 | 25.713103 | 1.92666394 | 5.31E-04 | 6.34E-02 |
| 240 | 4.28E-04 | 1 | 4.28E-04 | 1.03E-01 | 24.678144 | 2.01043194 | 4.68E-04 | 5.59E-02 |
| 250 | 3.80E-04 | 1 | 3.80E-04 | 9.50E-02 | 23.7375 | 2.09419994 | 4.15E-04 | 4.95E-02 |
| 260 | 3.38E-04 | 1 | 3.38E-04 | 8.79E-02 | 22.849476 | 2.17796793 | 3.69E-04 | 4.41E-02 |
| 270 | 3.02E-04 | 1 | 3.02E-04 | 8.16E-02 | 22.022361 | 2.26173593 | 3.30E-04 | 3.94E-02 |
| 280 | 2.71E-04 | 1 | 2.71E-04 | 7.60E-02 | 21.266 | 2.34550393 | 2.96E-04 | 3.54E-02 |
| 290 | 2.45E-04 | 1 | 2.45E-04 | 7.10E-02 | 20.581793 | 2.42927193 | 2.67E-04 | 3.19E-02 |
| 300 | 2.22E-04 | 1 | 2.22E-04 | 6.65E-02 | 19.9629 | 2.51303992 | 2.42E-04 | 2.89E-02 |
| 310 | 2.02E-04 | 1 | 2.02E-04 | 6.26E-02 | 19.409317 | 2.59680792 | 2.21E-04 | 2.63E-02 |
| 320 | 1.84E-04 | 1 | 1.84E-04 | 5.90E-02 | 18.888704 | 2.68057592 | 2.01E-04 | 2.40E-02 |
| 330 | 1.69E-04 | 1 | 1.69E-04 | 5.58E-02 | 18.428058 | 2.76434392 | 1.85E-04 | 2.21E-02 |
| 340 | 1.57E-04 | 1 | 1.57E-04 | 5.32E-02 | 18.104116 | 2.84811191 | 1.71E-04 | 2.04E-02 |
| 350 | 1.46E-04 | 1 | 1.46E-04 | 5.13E-02 | 17.94135 | 2.93187991 | 1.60E-04 | 1.91E-02 |
| 360 | 1.39E-04 | 1 | 1.39E-04 | 5.00E-02 | 17.984592 | 3.01564791 | 1.52E-04 | 1.81E-02 |
| 370 | 1.34E-04 | 1 | 1.34E-04 | 4.95E-02 | 18.315851 | 3.09941591 | 1.46E-04 | 1.74E-02 |
| 380 | 1.32E-04 | 1 | 1.32E-04 | 5.03E-02 | 19.107008 | 3.1831839 | 1.45E-04 | 1.73E-02 |
| 390 | 1.35E-04 | 1 | 1.35E-04 | 5.27E-02 | 20.562399 | 3.2669519 | 1.48E-04 | 1.76E-02 |
| 400 | 1.43E-04 | 1 | 1.43E-04 | 5.70E-02 | 22.8128 | 3.35E+00 | 1.56E-04 | 1.86E-02 |
| | | Σ= | 9.16E-01 | 1.09E+02 | 15086.6861 | | | |
| | | t= | 1.19E+02 | | | | | |

Tabla a- 7 Datos obtenidos en COMSOL para adimensionalizar las edades, a un flujo de 0.6 L/min con 5 mallas

| Tiempo (s) | Ci (Mol) | Δt | CiΔt | tiCiΔti | ti²Ci²Dti | tθ | E | Eθ |
|------------|-----------|----|----------|----------|------------|------------|----------|----------|
| 10 | 3.33E-08 | 1 | 3.33E-08 | 3.33E-07 | 3.3319E-06 | 0.1109541 | 3.26E-08 | 2.94E-06 |
| 20 | 1.74E-05 | 1 | 1.74E-05 | 3.47E-04 | 0.0069448 | 0.22190819 | 1.70E-05 | 1.53E-03 |
| 30 | 9.52E-05 | 1 | 9.52E-05 | 2.86E-03 | 0.0856647 | 0.33286229 | 9.33E-05 | 8.41E-03 |
| 40 | 5.91E-04 | 1 | 5.91E-04 | 2.36E-02 | 0.945152 | 0.44381639 | 5.79E-04 | 5.22E-02 |
| 50 | 0.003611 | 1 | 3.61E-03 | 1.81E-01 | 9.0275 | 0.55477049 | 3.54E-03 | 3.19E-01 |
| 60 | 0.013883 | 1 | 1.39E-02 | 8.33E-01 | 49.9788 | 0.66572458 | 1.36E-02 | 1.23E+00 |
| 70 | 0.027571 | 1 | 2.76E-02 | 1.93E+00 | 135.0979 | 0.77667868 | 2.70E-02 | 2.43E+00 |
| 80 | 0.025688 | 1 | 2.57E-02 | 2.06E+00 | 164.4032 | 0.88763278 | 2.52E-02 | 2.27E+00 |
| 90 | 0.011695 | 1 | 1.17E-02 | 1.05E+00 | 94.7295 | 0.99858688 | 1.15E-02 | 1.03E+00 |
| 100 | 0.0039954 | 1 | 4.00E-03 | 4.00E-01 | 39.954 | 1.10954097 | 3.92E-03 | 3.53E-01 |
| 110 | 0.001815 | 1 | 1.82E-03 | 2.00E-01 | 21.9615 | 1.22049507 | 1.78E-03 | 1.60E-01 |
| 120 | 0.0011578 | 1 | 1.16E-03 | 1.39E-01 | 16.67232 | 1.33144917 | 1.13E-03 | 1.02E-01 |
| 130 | 8.56E-04 | 1 | 8.56E-04 | 1.11E-01 | 14.463358 | 1.44240327 | 8.39E-04 | 7.56E-02 |
| 140 | 6.77E-04 | 1 | 6.77E-04 | 9.48E-02 | 13.267828 | 1.55335736 | 6.63E-04 | 5.98E-02 |
| 150 | 5.84E-04 | 1 | 5.84E-04 | 8.76E-02 | 13.147425 | 1.66431146 | 5.73E-04 | 5.16E-02 |
| 160 | 6.01E-04 | 1 | 6.01E-04 | 9.62E-02 | 15.396352 | 1.77526556 | 5.89E-04 | 5.31E-02 |
| 170 | 7.26E-04 | 1 | 7.26E-04 | 1.23E-01 | 20.982556 | 1.88621966 | 7.11E-04 | 6.41E-02 |
| 180 | 9.10E-04 | 1 | 9.10E-04 | 1.64E-01 | 29.474928 | 1.99717375 | 8.91E-04 | 8.03E-02 |
| 190 | 0.0010809 | 1 | 1.08E-03 | 2.05E-01 | 39.02049 | 2.10812785 | 1.06E-03 | 9.55E-02 |
| 200 | 0.0011759 | 1 | 1.18E-03 | 2.35E-01 | 47.036 | 2.21908195 | 1.15E-03 | 1.04E-01 |
| 210 | 0.0011651 | 1 | 1.17E-03 | 2.45E-01 | 51.38091 | 2.33003605 | 1.14E-03 | 1.03E-01 |
| 220 | 0.0010542 | 1 | 1.05E-03 | 2.32E-01 | 51.02328 | 2.44099014 | 1.03E-03 | 9.31E-02 |
| 230 | 8.79E-04 | 1 | 8.79E-04 | 2.02E-01 | 46.486933 | 2.55194424 | 8.61E-04 | 7.76E-02 |
| 240 | 6.82E-04 | 1 | 6.82E-04 | 1.64E-01 | 39.26592 | 2.66289834 | 6.68E-04 | 6.02E-02 |
| 250 | 4.97E-04 | 1 | 4.97E-04 | 1.24E-01 | 31.03375 | 2.77385244 | 4.87E-04 | 4.39E-02 |
| 260 | 3.43E-04 | 1 | 3.43E-04 | 8.92E-02 | 23.189504 | 2.88480653 | 3.36E-04 | 3.03E-02 |
| 270 | 2.28E-04 | 1 | 2.28E-04 | 6.16E-02 | 16.62849 | 2.99576063 | 2.24E-04 | 2.01E-02 |
| 280 | 1.49E-04 | 1 | 1.49E-04 | 4.18E-02 | 11.690224 | 3.10671473 | 1.46E-04 | 1.32E-02 |
| 290 | 9.82E-05 | 1 | 9.82E-05 | 2.85E-02 | 8.2613112 | 3.21766883 | 9.63E-05 | 8.68E-03 |
| 300 | 6.65E-05 | 1 | 6.65E-05 | 1.99E-02 | 5.9832 | 3.32862292 | 6.51E-05 | 5.87E-03 |
| 310 | 4.65E-05 | 1 | 4.65E-05 | 1.44E-02 | 4.4683617 | 3.43957702 | 4.56E-05 | 4.11E-03 |
| 320 | 3.33E-05 | 1 | 3.33E-05 | 1.07E-02 | 3.414016 | 3.55053112 | 3.27E-05 | 2.94E-03 |
| 330 | 2.46E-05 | 1 | 2.46E-05 | 8.13E-03 | 2.6834049 | 3.66148522 | 2.41E-05 | 2.18E-03 |
| 340 | 1.87E-05 | 1 | 1.87E-05 | 6.35E-03 | 2.1573272 | 3.77243931 | 1.83E-05 | 1.65E-03 |
| 350 | 1.43E-05 | 1 | 1.43E-05 | 5.01E-03 | 1.7538325 | 3.88339341 | 1.40E-05 | 1.26E-03 |
| 360 | 1.11E-05 | 1 | 1.11E-05 | 3.99E-03 | 1.435968 | 3.99434751 | 1.09E-05 | 9.79E-04 |
| 370 | 8.62E-06 | 1 | 8.62E-06 | 3.19E-03 | 1.18011907 | 4.10530161 | 8.45E-06 | 7.61E-04 |
| 380 | 6.67E-06 | 1 | 6.67E-06 | 2.54E-03 | 0.96375448 | 4.2162557 | 6.54E-06 | 5.89E-04 |
| 390 | 5.15E-06 | 1 | 5.15E-06 | 2.01E-03 | 0.78358878 | 4.3272098 | 5.05E-06 | 4.55E-04 |
| 400 | 3.93E-06 | 1 | 3.93E-06 | 1.57E-03 | 0.628848 | 4.4381639 | 3.85E-06 | 3.47E-04 |
| | | Σ= | 1.02E+00 | 9.20E+01 | 10297.3099 | | | |
| | | t= | 9.01E+01 | | | | | |

Tabla a- 8 Datos obtenidos en COMSOL para adimensionalizar las edades, a un flujo de 0.8 L/min con 5 mallas

| Tiempo (s) | Ci (Mol) | Δt | CiΔt | tiCiΔti | ti²Ci²Dt | tθ | E | Eθ |
|------------|-----------|----|----------|----------|------------|------------|----------|----------|
| 10 | 6.12E-09 | 1 | 6.12E-09 | 6.12E-08 | 6.1163E-07 | 0.08918613 | 6.07E-09 | 6.81E-07 |
| 20 | 6.68E-06 | 1 | 6.68E-06 | 1.34E-04 | 0.00267392 | 0.17837226 | 6.64E-06 | 7.44E-04 |
| 30 | 2.71E-05 | 1 | 2.71E-05 | 8.12E-04 | 0.0243567 | 0.26755839 | 2.69E-05 | 3.01E-03 |
| 40 | 1.33E-04 | 1 | 1.33E-04 | 5.31E-03 | 0.21232 | 0.35674452 | 1.32E-04 | 1.48E-02 |
| 50 | 7.59E-04 | 1 | 7.59E-04 | 3.80E-02 | 1.898425 | 0.44593065 | 7.54E-04 | 8.46E-02 |
| 60 | 0.0035066 | 1 | 3.51E-03 | 2.10E-01 | 12.62376 | 0.53511678 | 3.48E-03 | 3.90E-01 |
| 70 | 0.011279 | 1 | 1.13E-02 | 7.90E-01 | 55.2671 | 0.62430291 | 1.12E-02 | 1.26E+00 |
| 80 | 0.021966 | 1 | 2.20E-02 | 1.76E+00 | 140.5824 | 0.71348904 | 2.18E-02 | 2.45E+00 |
| 90 | 0.023483 | 1 | 2.35E-02 | 2.11E+00 | 190.2123 | 0.80267517 | 2.33E-02 | 2.62E+00 |
| 100 | 0.014115 | 1 | 1.41E-02 | 1.41E+00 | 141.15 | 0.8918613 | 1.40E-02 | 1.57E+00 |
| 110 | 0.0061258 | 1 | 6.13E-03 | 6.74E-01 | 74.12218 | 0.98104743 | 6.08E-03 | 6.82E-01 |
| 120 | 0.0031102 | 1 | 3.11E-03 | 3.73E-01 | 44.78688 | 1.07023356 | 3.09E-03 | 3.46E-01 |
| 130 | 0.0019785 | 1 | 1.98E-03 | 2.57E-01 | 33.43665 | 1.15941968 | 1.97E-03 | 2.20E-01 |
| 140 | 0.0013707 | 1 | 1.37E-03 | 1.92E-01 | 26.86572 | 1.24860581 | 1.36E-03 | 1.53E-01 |
| 150 | 0.0010399 | 1 | 1.04E-03 | 1.56E-01 | 23.39775 | 1.33779194 | 1.03E-03 | 1.16E-01 |
| 160 | 8.35E-04 | 1 | 8.35E-04 | 1.34E-01 | 21.371136 | 1.42697807 | 8.29E-04 | 9.30E-02 |
| 170 | 6.89E-04 | 1 | 6.89E-04 | 1.17E-01 | 19.922504 | 1.5161642 | 6.85E-04 | 7.68E-02 |
| 180 | 5.79E-04 | 1 | 5.79E-04 | 1.04E-01 | 18.768672 | 1.60535033 | 5.75E-04 | 6.45E-02 |
| 190 | 4.92E-04 | 1 | 4.92E-04 | 9.35E-02 | 17.774196 | 1.69453646 | 4.89E-04 | 5.48E-02 |
| 200 | 4.23E-04 | 1 | 4.23E-04 | 8.46E-02 | 16.9244 | 1.78372259 | 4.20E-04 | 4.71E-02 |
| 210 | 3.68E-04 | 1 | 3.68E-04 | 7.72E-02 | 16.208955 | 1.87290872 | 3.65E-04 | 4.09E-02 |
| 220 | 3.19E-04 | 1 | 3.19E-04 | 7.02E-02 | 15.43718 | 1.96209485 | 3.17E-04 | 3.55E-02 |
| 230 | 2.82E-04 | 1 | 2.82E-04 | 6.48E-02 | 14.900343 | 2.05128098 | 2.80E-04 | 3.14E-02 |
| 240 | 2.59E-04 | 1 | 2.59E-04 | 6.21E-02 | 14.899968 | 2.14046711 | 2.57E-04 | 2.88E-02 |
| 250 | 2.52E-04 | 1 | 2.52E-04 | 6.31E-02 | 15.775625 | 2.22965324 | 2.51E-04 | 2.81E-02 |
| 260 | 2.65E-04 | 1 | 2.65E-04 | 6.89E-02 | 17.906564 | 2.31883937 | 2.63E-04 | 2.95E-02 |
| 270 | 2.95E-04 | 1 | 2.95E-04 | 7.97E-02 | 21.513519 | 2.4080255 | 2.93E-04 | 3.29E-02 |
| 280 | 3.39E-04 | 1 | 3.39E-04 | 9.50E-02 | 26.611312 | 2.49721163 | 3.37E-04 | 3.78E-02 |
| 290 | 3.95E-04 | 1 | 3.95E-04 | 1.14E-01 | 33.197634 | 2.58639776 | 3.92E-04 | 4.40E-02 |
| 300 | 4.57E-04 | 1 | 4.57E-04 | 1.37E-01 | 41.1219 | 2.67558389 | 4.54E-04 | 5.09E-02 |
| 310 | 5.19E-04 | 1 | 5.19E-04 | 1.61E-01 | 49.901847 | 2.76477002 | 5.16E-04 | 5.78E-02 |
| 320 | 5.74E-04 | 1 | 5.74E-04 | 1.84E-01 | 58.774528 | 2.85395615 | 5.70E-04 | 6.39E-02 |
| 330 | 6.15E-04 | 1 | 6.15E-04 | 2.03E-01 | 66.971322 | 2.94314228 | 6.11E-04 | 6.85E-02 |
| 340 | 6.38E-04 | 1 | 6.38E-04 | 2.17E-01 | 73.74702 | 3.03232841 | 6.34E-04 | 7.10E-02 |
| 350 | 6.42E-04 | 1 | 6.42E-04 | 2.25E-01 | 78.641325 | 3.12151454 | 6.38E-04 | 7.15E-02 |
| 360 | 6.28E-04 | 1 | 6.28E-04 | 2.26E-01 | 81.392688 | 3.21070067 | 6.24E-04 | 6.99E-02 |
| 370 | 5.98E-04 | 1 | 5.98E-04 | 2.21E-01 | 81.8662 | 3.2998868 | 5.94E-04 | 6.66E-02 |
| 380 | 5.55E-04 | 1 | 5.55E-04 | 2.11E-01 | 80.186764 | 3.38907292 | 5.52E-04 | 6.18E-02 |
| 390 | 5.04E-04 | 1 | 5.04E-04 | 1.97E-01 | 76.675131 | 3.47825905 | 5.01E-04 | 5.61E-02 |
| 400 | 4.49E-04 | 1 | 4.49E-04 | 1.79E-01 | 71.7648 | 3.56744518 | 4.45E-04 | 4.99E-02 |
| | | Σ= | 1.01E+00 | 1.13E+02 | 17450.553 | | | |
| | | t= | 1.12E+02 | | | | | |

Tabla a- 9 Datos obtenidos en COMSOL para adimensionalizar las edades, a un flujo de 1.0 L/min con 5 mallas

| Tiempo (s) | Ci (Mol) | Δt | CiΔt | tiCiΔti | ti²Ci*Dti | tθ | E | Eθ |
|------------|-----------|----|----------|----------|------------|------------|----------|----------|
| 10 | 3.33E-08 | 1 | 3.33E-08 | 3.33E-07 | 3.3319E-06 | 0.1109541 | 3.26E-08 | 2.94E-06 |
| 20 | 1.74E-05 | 1 | 1.74E-05 | 3.47E-04 | 0.0069448 | 0.22190819 | 1.70E-05 | 1.53E-03 |
| 30 | 9.52E-05 | 1 | 9.52E-05 | 2.86E-03 | 0.0856647 | 0.33286229 | 9.33E-05 | 8.41E-03 |
| 40 | 5.91E-04 | 1 | 5.91E-04 | 2.36E-02 | 0.945152 | 0.44381639 | 5.79E-04 | 5.22E-02 |
| 50 | 0.003611 | 1 | 3.61E-03 | 1.81E-01 | 9.0275 | 0.55477049 | 3.54E-03 | 3.19E-01 |
| 60 | 0.013883 | 1 | 1.39E-02 | 8.33E-01 | 49.9788 | 0.66572458 | 1.36E-02 | 1.23E+00 |
| 70 | 0.027571 | 1 | 2.76E-02 | 1.93E+00 | 135.0979 | 0.77667868 | 2.70E-02 | 2.43E+00 |
| 80 | 0.025688 | 1 | 2.57E-02 | 2.06E+00 | 164.4032 | 0.88763278 | 2.52E-02 | 2.27E+00 |
| 90 | 0.011695 | 1 | 1.17E-02 | 1.05E+00 | 94.7295 | 0.99858688 | 1.15E-02 | 1.03E+00 |
| 100 | 0.0039954 | 1 | 4.00E-03 | 4.00E-01 | 39.954 | 1.10954097 | 3.92E-03 | 3.53E-01 |
| 110 | 0.001815 | 1 | 1.82E-03 | 2.00E-01 | 21.9615 | 1.22049507 | 1.78E-03 | 1.60E-01 |
| 120 | 0.0011578 | 1 | 1.16E-03 | 1.39E-01 | 16.67232 | 1.33144917 | 1.13E-03 | 1.02E-01 |
| 130 | 8.56E-04 | 1 | 8.56E-04 | 1.11E-01 | 14.463358 | 1.44240327 | 8.39E-04 | 7.56E-02 |
| 140 | 6.77E-04 | 1 | 6.77E-04 | 9.48E-02 | 13.267828 | 1.55335736 | 6.63E-04 | 5.98E-02 |
| 150 | 5.84E-04 | 1 | 5.84E-04 | 8.76E-02 | 13.147425 | 1.66431146 | 5.73E-04 | 5.16E-02 |
| 160 | 6.01E-04 | 1 | 6.01E-04 | 9.62E-02 | 15.396352 | 1.77526556 | 5.89E-04 | 5.31E-02 |
| 170 | 7.26E-04 | 1 | 7.26E-04 | 1.23E-01 | 20.982556 | 1.88621966 | 7.11E-04 | 6.41E-02 |
| 180 | 9.10E-04 | 1 | 9.10E-04 | 1.64E-01 | 29.474928 | 1.99717375 | 8.91E-04 | 8.03E-02 |
| 190 | 0.0010809 | 1 | 1.08E-03 | 2.05E-01 | 39.02049 | 2.10812785 | 1.06E-03 | 9.55E-02 |
| 200 | 0.0011759 | 1 | 1.18E-03 | 2.35E-01 | 47.036 | 2.21908195 | 1.15E-03 | 1.04E-01 |
| 210 | 0.0011651 | 1 | 1.17E-03 | 2.45E-01 | 51.38091 | 2.33003605 | 1.14E-03 | 1.03E-01 |
| 220 | 0.0010542 | 1 | 1.05E-03 | 2.32E-01 | 51.02328 | 2.44099014 | 1.03E-03 | 9.31E-02 |
| 230 | 8.79E-04 | 1 | 8.79E-04 | 2.02E-01 | 46.486933 | 2.55194424 | 8.61E-04 | 7.76E-02 |
| 240 | 6.82E-04 | 1 | 6.82E-04 | 1.64E-01 | 39.26592 | 2.66289834 | 6.68E-04 | 6.02E-02 |
| 250 | 4.97E-04 | 1 | 4.97E-04 | 1.24E-01 | 31.03375 | 2.77385244 | 4.87E-04 | 4.39E-02 |
| 260 | 3.43E-04 | 1 | 3.43E-04 | 8.92E-02 | 23.189504 | 2.88480653 | 3.36E-04 | 3.03E-02 |
| 270 | 2.28E-04 | 1 | 2.28E-04 | 6.16E-02 | 16.62849 | 2.99576063 | 2.24E-04 | 2.01E-02 |
| 280 | 1.49E-04 | 1 | 1.49E-04 | 4.18E-02 | 11.690224 | 3.10671473 | 1.46E-04 | 1.32E-02 |
| 290 | 9.82E-05 | 1 | 9.82E-05 | 2.85E-02 | 8.2613112 | 3.21766883 | 9.63E-05 | 8.68E-03 |
| 300 | 6.65E-05 | 1 | 6.65E-05 | 1.99E-02 | 5.9832 | 3.32862292 | 6.51E-05 | 5.87E-03 |
| 310 | 4.65E-05 | 1 | 4.65E-05 | 1.44E-02 | 4.4683617 | 3.43957702 | 4.56E-05 | 4.11E-03 |
| 320 | 3.33E-05 | 1 | 3.33E-05 | 1.07E-02 | 3.414016 | 3.55053112 | 3.27E-05 | 2.94E-03 |
| 330 | 2.46E-05 | 1 | 2.46E-05 | 8.13E-03 | 2.6834049 | 3.66148522 | 2.41E-05 | 2.18E-03 |
| 340 | 1.87E-05 | 1 | 1.87E-05 | 6.35E-03 | 2.1573272 | 3.77243931 | 1.83E-05 | 1.65E-03 |
| 350 | 1.43E-05 | 1 | 1.43E-05 | 5.01E-03 | 1.7538325 | 3.88339341 | 1.40E-05 | 1.26E-03 |
| 360 | 1.11E-05 | 1 | 1.11E-05 | 3.99E-03 | 1.435968 | 3.99434751 | 1.09E-05 | 9.79E-04 |
| 370 | 8.62E-06 | 1 | 8.62E-06 | 3.19E-03 | 1.18011907 | 4.10530161 | 8.45E-06 | 7.61E-04 |
| 380 | 6.67E-06 | 1 | 6.67E-06 | 2.54E-03 | 0.96375448 | 4.2162557 | 6.54E-06 | 5.89E-04 |
| 390 | 5.15E-06 | 1 | 5.15E-06 | 2.01E-03 | 0.78358878 | 4.3272098 | 5.05E-06 | 4.55E-04 |
| 400 | 3.93E-06 | 1 | 3.93E-06 | 1.57E-03 | 0.628848 | 4.4381639 | 3.85E-06 | 3.47E-04 |
| | | Σ= | 1.02E+00 | 9.20E+01 | 10297.3099 | | | |
| | | t= | 9.01E+01 | | | | | |

Tabla a- 10 Datos obtenidos en COMSOL para adimensionalizar las edades, a un flujo de 2.0 L/min con 5 mallas

| Tiempo (s) | Ci (Mol) | Δt | CiΔt | tiCiΔti | ti²Ci²Dti | tθ | E | Eθ |
|------------|-----------|----|----------|----------|------------|------------|----------|----------|
| 10 | 4.37E-13 | 1 | 4.37E-13 | 4.37E-12 | 4.3676E-11 | 0.05427501 | 4.34E-13 | 8.00E-11 |
| 20 | 2.23E-08 | 1 | 2.23E-08 | 4.46E-07 | 8.9176E-06 | 0.10855002 | 2.22E-08 | 4.08E-06 |
| 30 | 6.94E-08 | 1 | 6.94E-08 | 2.08E-06 | 6.2453E-05 | 0.16282503 | 6.90E-08 | 1.27E-05 |
| 40 | 1.85E-07 | 1 | 1.85E-07 | 7.41E-06 | 0.00029659 | 0.21710004 | 1.84E-07 | 3.39E-05 |
| 50 | 4.85E-07 | 1 | 4.85E-07 | 2.42E-05 | 0.0012116 | 0.27137505 | 4.82E-07 | 8.88E-05 |
| 60 | 1.25E-06 | 1 | 1.25E-06 | 7.49E-05 | 0.00449316 | 0.32565006 | 1.24E-06 | 2.29E-04 |
| 70 | 3.32E-06 | 1 | 3.32E-06 | 2.32E-04 | 0.01626016 | 0.37992507 | 3.30E-06 | 6.08E-04 |
| 80 | 1.02E-05 | 1 | 1.02E-05 | 8.17E-04 | 0.0653632 | 0.43420008 | 1.02E-05 | 1.87E-03 |
| 90 | 3.86E-05 | 1 | 3.86E-05 | 3.47E-03 | 0.3122631 | 0.48847509 | 3.83E-05 | 7.06E-03 |
| 100 | 1.56E-04 | 1 | 1.56E-04 | 1.56E-02 | 1.5634 | 0.5427501 | 1.55E-04 | 2.86E-02 |
| 110 | 5.77E-04 | 1 | 5.77E-04 | 6.35E-02 | 6.980853 | 0.59702511 | 5.73E-04 | 1.06E-01 |
| 120 | 0.0017282 | 1 | 1.73E-03 | 2.07E-01 | 24.88608 | 0.65130012 | 1.72E-03 | 3.16E-01 |
| 130 | 0.0040175 | 1 | 4.02E-03 | 5.22E-01 | 67.89575 | 0.70557513 | 3.99E-03 | 7.36E-01 |
| 140 | 0.007299 | 1 | 7.30E-03 | 1.02E+00 | 143.0604 | 0.75985014 | 7.25E-03 | 1.34E+00 |
| 150 | 0.010687 | 1 | 1.07E-02 | 1.60E+00 | 240.4575 | 0.81412516 | 1.06E-02 | 1.96E+00 |
| 160 | 0.012929 | 1 | 1.29E-02 | 2.07E+00 | 330.9824 | 0.86840017 | 1.29E-02 | 2.37E+00 |
| 170 | 0.013023 | 1 | 1.30E-02 | 2.21E+00 | 376.3647 | 0.92267518 | 1.29E-02 | 2.38E+00 |
| 180 | 0.011142 | 1 | 1.11E-02 | 2.01E+00 | 361.0008 | 0.97695019 | 1.11E-02 | 2.04E+00 |
| 190 | 0.0085746 | 1 | 8.57E-03 | 1.63E+00 | 309.54306 | 1.0312252 | 8.52E-03 | 1.57E+00 |
| 200 | 0.0064237 | 1 | 6.42E-03 | 1.28E+00 | 256.948 | 1.08550021 | 6.38E-03 | 1.18E+00 |
| 210 | 0.0049145 | 1 | 4.91E-03 | 1.03E+00 | 216.72945 | 1.13977522 | 4.88E-03 | 9.00E-01 |
| 220 | 0.0039133 | 1 | 3.91E-03 | 8.61E-01 | 189.40372 | 1.19405023 | 3.89E-03 | 7.17E-01 |
| 230 | 0.0032101 | 1 | 3.21E-03 | 7.38E-01 | 169.81429 | 1.24832524 | 3.19E-03 | 5.88E-01 |
| 240 | 0.0026418 | 1 | 2.64E-03 | 6.34E-01 | 152.16768 | 1.30260025 | 2.63E-03 | 4.84E-01 |
| 250 | 0.0021365 | 1 | 2.14E-03 | 5.34E-01 | 133.53125 | 1.35687526 | 2.12E-03 | 3.91E-01 |
| 260 | 0.0016853 | 1 | 1.69E-03 | 4.38E-01 | 113.92628 | 1.41115027 | 1.68E-03 | 3.09E-01 |
| 270 | 0.0012957 | 1 | 1.30E-03 | 3.50E-01 | 94.45653 | 1.46542528 | 1.29E-03 | 2.37E-01 |
| 280 | 9.74E-04 | 1 | 9.74E-04 | 2.73E-01 | 76.400016 | 1.51970029 | 9.69E-04 | 1.78E-01 |
| 290 | 7.29E-04 | 1 | 7.29E-04 | 2.11E-01 | 61.292921 | 1.5739753 | 7.24E-04 | 1.33E-01 |
| 300 | 5.51E-04 | 1 | 5.51E-04 | 1.65E-01 | 49.5855 | 1.62825031 | 5.48E-04 | 1.01E-01 |
| 310 | 4.27E-04 | 1 | 4.27E-04 | 1.32E-01 | 41.030856 | 1.68252532 | 4.24E-04 | 7.82E-02 |
| 320 | 3.36E-04 | 1 | 3.36E-04 | 1.07E-01 | 34.379776 | 1.73680033 | 3.34E-04 | 6.15E-02 |
| 330 | 2.69E-04 | 1 | 2.69E-04 | 8.89E-02 | 29.331126 | 1.79107534 | 2.68E-04 | 4.93E-02 |
| 340 | 2.19E-04 | 1 | 2.19E-04 | 7.43E-02 | 25.266692 | 1.84535035 | 2.17E-04 | 4.00E-02 |
| 350 | 1.79E-04 | 1 | 1.79E-04 | 6.27E-02 | 21.9471 | 1.89962536 | 1.78E-04 | 3.28E-02 |
| 360 | 1.50E-04 | 1 | 1.50E-04 | 5.39E-02 | 19.41408 | 1.95390037 | 1.49E-04 | 2.74E-02 |
| 370 | 1.26E-04 | 1 | 1.26E-04 | 4.68E-02 | 17.301422 | 2.00817538 | 1.26E-04 | 2.31E-02 |
| 380 | 1.07E-04 | 1 | 1.07E-04 | 4.06E-02 | 15.439248 | 2.06245039 | 1.06E-04 | 1.96E-02 |
| 390 | 9.14E-05 | 1 | 9.14E-05 | 3.56E-02 | 13.8996585 | 2.1167254 | 9.08E-05 | 1.67E-02 |
| 400 | 7.86E-05 | 1 | 7.86E-05 | 3.14E-02 | 12.56944 | 2.17100041 | 7.81E-05 | 1.44E-02 |
| | | Σ= | 1.01E+00 | 1.85E+02 | 36021.4437 | | | |
| | | t= | 1.84E+02 | | | | | |

Tabla a- 11 Datos obtenidos en COMSOL para adimensionalizar las edades, a un flujo de 0.4 L/min con 7 mallas

| Tiempo (s) | Ci (Mol) | Δt | CiΔt | tiCiΔti | ti²Ci²Dti | tθ | E | Eθ |
|------------|-----------|----|----------|----------|-------------|------------|----------|----------|
| 10 | 2.06E-11 | 1 | 2.06E-11 | 2.06E-10 | 2.0606E-09 | 0.06944167 | 2.05E-11 | 2.95E-09 |
| 20 | 2.49E-07 | 1 | 2.49E-07 | 4.98E-06 | 0.00099688 | 0.13888335 | 2.47E-07 | 3.56E-05 |
| 30 | 8.02E-07 | 1 | 8.02E-07 | 2.41E-05 | 0.000722133 | 0.20832502 | 7.97E-07 | 1.15E-04 |
| 40 | 2.15E-06 | 1 | 2.15E-06 | 8.60E-05 | 0.00344032 | 0.2777667 | 2.13E-06 | 3.07E-04 |
| 50 | 5.72E-06 | 1 | 5.72E-06 | 2.86E-04 | 0.0142915 | 0.34720837 | 5.68E-06 | 8.17E-04 |
| 60 | 1.63E-05 | 1 | 1.63E-05 | 9.79E-04 | 0.0587592 | 0.41665004 | 1.62E-05 | 2.33E-03 |
| 70 | 5.77E-05 | 1 | 5.77E-05 | 4.04E-03 | 0.2829554 | 0.48609172 | 5.73E-05 | 8.26E-03 |
| 80 | 2.53E-04 | 1 | 2.53E-04 | 2.02E-02 | 1.619968 | 0.55553339 | 2.51E-04 | 3.62E-02 |
| 90 | 0.0010798 | 1 | 1.08E-03 | 9.72E-02 | 8.74638 | 0.62497507 | 1.07E-03 | 1.54E-01 |
| 100 | 0.0036074 | 1 | 3.61E-03 | 3.61E-01 | 36.074 | 0.69441674 | 3.58E-03 | 5.16E-01 |
| 110 | 0.0085987 | 1 | 8.60E-03 | 9.46E-01 | 104.04427 | 0.76385842 | 8.54E-03 | 1.23E+00 |
| 120 | 0.014511 | 1 | 1.45E-02 | 1.74E+00 | 208.9584 | 0.83330009 | 1.44E-02 | 2.07E+00 |
| 130 | 0.017737 | 1 | 1.77E-02 | 2.31E+00 | 299.7553 | 0.90274176 | 1.76E-02 | 2.54E+00 |
| 140 | 0.016169 | 1 | 1.62E-02 | 2.26E+00 | 316.9124 | 0.97218344 | 1.61E-02 | 2.31E+00 |
| 150 | 0.011731 | 1 | 1.17E-02 | 1.76E+00 | 263.9475 | 1.04162511 | 1.16E-02 | 1.68E+00 |
| 160 | 0.007822 | 1 | 7.82E-03 | 1.25E+00 | 200.2432 | 1.11106679 | 7.77E-03 | 1.12E+00 |
| 170 | 0.005452 | 1 | 5.45E-03 | 9.27E-01 | 157.5628 | 1.18050846 | 5.41E-03 | 7.79E-01 |
| 180 | 0.0040036 | 1 | 4.00E-03 | 7.21E-01 | 129.71664 | 1.24995013 | 3.97E-03 | 5.72E-01 |
| 190 | 0.0029067 | 1 | 2.91E-03 | 5.52E-01 | 104.93187 | 1.31939181 | 2.89E-03 | 4.16E-01 |
| 200 | 0.0020275 | 1 | 2.03E-03 | 4.06E-01 | 81.1 | 1.38883348 | 2.01E-03 | 2.90E-01 |
| 210 | 0.0013525 | 1 | 1.35E-03 | 2.84E-01 | 59.64525 | 1.45827516 | 1.34E-03 | 1.93E-01 |
| 220 | 8.83E-04 | 1 | 8.83E-04 | 1.94E-01 | 42.743492 | 1.52771683 | 8.77E-04 | 1.26E-01 |
| 230 | 5.96E-04 | 1 | 5.96E-04 | 1.37E-01 | 31.508298 | 1.59715851 | 5.91E-04 | 8.52E-02 |
| 240 | 4.22E-04 | 1 | 4.22E-04 | 1.01E-01 | 24.329088 | 1.66660018 | 4.19E-04 | 6.04E-02 |
| 250 | 3.08E-04 | 1 | 3.08E-04 | 7.71E-02 | 19.27375 | 1.73604185 | 3.06E-04 | 4.41E-02 |
| 260 | 2.29E-04 | 1 | 2.29E-04 | 5.95E-02 | 15.457416 | 1.80548353 | 2.27E-04 | 3.27E-02 |
| 270 | 1.75E-04 | 1 | 1.75E-04 | 4.72E-02 | 12.733443 | 1.8749252 | 1.73E-04 | 2.50E-02 |
| 280 | 1.39E-04 | 1 | 1.39E-04 | 3.89E-02 | 10.890544 | 1.94436688 | 1.38E-04 | 1.99E-02 |
| 290 | 1.14E-04 | 1 | 1.14E-04 | 3.29E-02 | 9.547032 | 2.01380855 | 1.13E-04 | 1.62E-02 |
| 300 | 9.45E-05 | 1 | 9.45E-05 | 2.84E-02 | 8.50554 | 2.08325022 | 9.38E-05 | 1.35E-02 |
| 310 | 7.99E-05 | 1 | 7.99E-05 | 2.48E-02 | 7.6796393 | 2.1526919 | 7.93E-05 | 1.14E-02 |
| 320 | 6.82E-05 | 1 | 6.82E-05 | 2.18E-02 | 6.9834752 | 2.22213357 | 6.77E-05 | 9.75E-03 |
| 330 | 5.84E-05 | 1 | 5.84E-05 | 1.93E-02 | 6.3589977 | 2.29157525 | 5.80E-05 | 8.35E-03 |
| 340 | 5.03E-05 | 1 | 5.03E-05 | 1.71E-02 | 5.816414 | 2.36101692 | 5.00E-05 | 7.19E-03 |
| 350 | 4.33E-05 | 1 | 4.33E-05 | 1.51E-02 | 5.298125 | 2.4304586 | 4.29E-05 | 6.18E-03 |
| 360 | 3.72E-05 | 1 | 3.72E-05 | 1.34E-02 | 4.8274704 | 2.49990027 | 3.70E-05 | 5.33E-03 |
| 370 | 3.22E-05 | 1 | 3.22E-05 | 1.19E-02 | 4.4131084 | 2.56934194 | 3.20E-05 | 4.61E-03 |
| 380 | 2.79E-05 | 1 | 2.79E-05 | 1.06E-02 | 4.0271716 | 2.63878362 | 2.77E-05 | 3.99E-03 |
| 390 | 2.43E-05 | 1 | 2.43E-05 | 9.48E-03 | 3.6954216 | 2.70822529 | 2.41E-05 | 3.47E-03 |
| 400 | 2.12E-05 | 1 | 2.12E-05 | 8.47E-03 | 3.38768 | 2.77766697 | 2.10E-05 | 3.03E-03 |

Tabla a- 12 Datos obtenidos en COMSOL para adimensionalizar las edades, a un flujo de 0.6 L/min con 7 mallas

| Tiempo (s) | Ci (Mol) | Δt | CiΔt | tiCiΔti | ti²Ci²Dti | tθ | E | Eθ |
|------------|-----------|----|----------|----------|------------|------------|----------|----------|
| 10 | 1.60E-10 | 1 | 1.60E-10 | 1.60E-09 | 1.5979E-08 | 0.0815177 | 1.55E-10 | 1.90E-08 |
| 20 | 8.91E-07 | 1 | 8.91E-07 | 1.78E-05 | 0.00035632 | 0.1630354 | 8.62E-07 | 1.06E-04 |
| 30 | 2.96E-06 | 1 | 2.96E-06 | 8.87E-05 | 0.00266247 | 0.24455311 | 2.86E-06 | 3.51E-04 |
| 40 | 9.19E-06 | 1 | 9.19E-06 | 3.68E-04 | 0.01471056 | 0.32607081 | 8.89E-06 | 1.09E-03 |
| 50 | 3.25E-05 | 1 | 3.25E-05 | 1.63E-03 | 0.08133 | 0.40758851 | 3.15E-05 | 3.86E-03 |
| 60 | 1.29E-04 | 1 | 1.29E-04 | 7.72E-03 | 0.462924 | 0.48910621 | 1.24E-04 | 1.53E-02 |
| 70 | 5.42E-04 | 1 | 5.42E-04 | 3.79E-02 | 2.655996 | 0.57062391 | 5.24E-04 | 6.43E-02 |
| 80 | 0.00214 | 1 | 2.14E-03 | 1.71E-01 | 13.696 | 0.65214162 | 2.07E-03 | 2.54E-01 |
| 90 | 0.0066115 | 1 | 6.61E-03 | 5.95E-01 | 53.55315 | 0.73365932 | 6.39E-03 | 7.84E-01 |
| 100 | 0.014293 | 1 | 1.43E-02 | 1.43E+00 | 142.93 | 0.81517702 | 1.38E-02 | 1.70E+00 |
| 110 | 0.020731 | 1 | 2.07E-02 | 2.28E+00 | 250.8451 | 0.89669472 | 2.01E-02 | 2.46E+00 |
| 120 | 0.02043 | 1 | 2.04E-02 | 2.45E+00 | 294.192 | 0.97821242 | 1.98E-02 | 2.42E+00 |
| 130 | 0.014485 | 1 | 1.45E-02 | 1.88E+00 | 244.7965 | 1.05973013 | 1.40E-02 | 1.72E+00 |
| 140 | 0.0087818 | 1 | 8.78E-03 | 1.23E+00 | 172.12328 | 1.14124783 | 8.49E-03 | 1.04E+00 |
| 150 | 0.0055008 | 1 | 5.50E-03 | 8.25E-01 | 123.768 | 1.22276553 | 5.32E-03 | 6.53E-01 |
| 160 | 0.0035645 | 1 | 3.56E-03 | 5.70E-01 | 91.2512 | 1.30428323 | 3.45E-03 | 4.23E-01 |
| 170 | 0.0021984 | 1 | 2.20E-03 | 3.74E-01 | 63.53376 | 1.38580093 | 2.13E-03 | 2.61E-01 |
| 180 | 0.001274 | 1 | 1.27E-03 | 2.29E-01 | 41.2776 | 1.46731864 | 1.23E-03 | 1.51E-01 |
| 190 | 7.61E-04 | 1 | 7.61E-04 | 1.45E-01 | 27.466685 | 1.54883634 | 7.36E-04 | 9.03E-02 |
| 200 | 4.84E-04 | 1 | 4.84E-04 | 9.68E-02 | 19.3556 | 1.63035404 | 4.68E-04 | 5.74E-02 |
| 210 | 3.24E-04 | 1 | 3.24E-04 | 6.80E-02 | 14.273847 | 1.71187174 | 3.13E-04 | 3.84E-02 |
| 220 | 2.30E-04 | 1 | 2.30E-04 | 5.05E-02 | 11.116996 | 1.79338944 | 2.22E-04 | 2.73E-02 |
| 230 | 1.72E-04 | 1 | 1.72E-04 | 3.96E-02 | 9.119431 | 1.87490714 | 1.67E-04 | 2.05E-02 |
| 240 | 1.34E-04 | 1 | 1.34E-04 | 3.23E-02 | 7.746048 | 1.95642485 | 1.30E-04 | 1.60E-02 |
| 250 | 1.06E-04 | 1 | 1.06E-04 | 2.65E-02 | 6.62 | 2.03794255 | 1.02E-04 | 1.26E-02 |
| 260 | 8.59E-05 | 1 | 8.59E-05 | 2.23E-02 | 5.803798 | 2.11946025 | 8.30E-05 | 1.02E-02 |
| 270 | 7.06E-05 | 1 | 7.06E-05 | 1.91E-02 | 5.1481251 | 2.20097795 | 6.83E-05 | 8.38E-03 |
| 280 | 5.76E-05 | 1 | 5.76E-05 | 1.61E-02 | 4.5159184 | 2.28249565 | 5.57E-05 | 6.83E-03 |
| 290 | 4.76E-05 | 1 | 4.76E-05 | 1.38E-02 | 4.0021508 | 2.36401336 | 4.60E-05 | 5.65E-03 |
| 300 | 3.91E-05 | 1 | 3.91E-05 | 1.17E-02 | 3.52278 | 2.44553106 | 3.79E-05 | 4.64E-03 |
| 310 | 3.26E-05 | 1 | 3.26E-05 | 1.01E-02 | 3.1302653 | 2.52704876 | 3.15E-05 | 3.86E-03 |
| 320 | 2.73E-05 | 1 | 2.73E-05 | 8.73E-03 | 2.7921408 | 2.60856646 | 2.64E-05 | 3.24E-03 |
| 330 | 2.28E-05 | 1 | 2.28E-05 | 7.52E-03 | 2.4806331 | 2.69008416 | 2.20E-05 | 2.70E-03 |
| 340 | 1.90E-05 | 1 | 1.90E-05 | 6.48E-03 | 2.2017176 | 2.77160187 | 1.84E-05 | 2.26E-03 |
| 350 | 1.59E-05 | 1 | 1.59E-05 | 5.57E-03 | 1.9488525 | 2.85311957 | 1.54E-05 | 1.89E-03 |
| 360 | 1.38E-05 | 1 | 1.38E-05 | 4.96E-03 | 1.7856288 | 2.93463727 | 1.33E-05 | 1.63E-03 |
| 370 | 1.20E-05 | 1 | 1.20E-05 | 4.44E-03 | 1.6440321 | 3.01615497 | 1.16E-05 | 1.42E-03 |
| 380 | 1.05E-05 | 1 | 1.05E-05 | 4.01E-03 | 1.5221204 | 3.09767267 | 1.02E-05 | 1.25E-03 |
| 390 | 9.39E-06 | 1 | 9.39E-06 | 3.66E-03 | 1.42799085 | 3.17919038 | 9.08E-06 | 1.11E-03 |
| 400 | 8.32E-06 | 1 | 8.32E-06 | 3.33E-03 | 1.330512 | 3.26070808 | 8.04E-06 | 9.87E-04 |
| | | Σ= | 1.03E+00 | 1.27E+02 | 16334.2225 | | | |
| | | t= | 1.23E+02 | | | | | |

Tabla a- 13 Datos obtenidos en COMSOL para adimensionalizar las edades, a un flujo de 0.8 L/min con 7 mallas

| Tiempo (s) | Ci (Mol) | Δt | CiΔt | tiCiΔti | ti²Ci²Dti | tθ | E | Eθ |
|------------|-----------|----|----------|----------|------------|------------|----------|----------|
| 10 | 5.84E-10 | 1 | 5.84E-10 | 5.84E-09 | 5.8424E-08 | 0.09059303 | 5.68E-10 | 6.27E-08 |
| 20 | 1.93E-06 | 1 | 1.93E-06 | 3.87E-05 | 0.00077324 | 0.18118606 | 1.88E-06 | 2.07E-04 |
| 30 | 6.67E-06 | 1 | 6.67E-06 | 2.00E-04 | 0.00600489 | 0.27177908 | 6.48E-06 | 7.16E-04 |
| 40 | 2.22E-05 | 1 | 2.22E-05 | 8.90E-04 | 0.0355936 | 0.36237211 | 2.16E-05 | 2.39E-03 |
| 50 | 8.65E-05 | 1 | 8.65E-05 | 4.32E-03 | 0.21624 | 0.45296514 | 8.40E-05 | 9.28E-03 |
| 60 | 3.80E-04 | 1 | 3.80E-04 | 2.28E-02 | 1.366524 | 0.54355817 | 3.69E-04 | 4.07E-02 |
| 70 | 0.0016719 | 1 | 1.67E-03 | 1.17E-01 | 8.19231 | 0.63415119 | 1.62E-03 | 1.79E-01 |
| 80 | 0.0060459 | 1 | 6.05E-03 | 4.84E-01 | 38.69376 | 0.72474422 | 5.87E-03 | 6.48E-01 |
| 90 | 0.014952 | 1 | 1.50E-02 | 1.35E+00 | 121.1112 | 0.81533725 | 1.45E-02 | 1.60E+00 |
| 100 | 0.023211 | 1 | 2.32E-02 | 2.32E+00 | 232.11 | 0.90593028 | 2.25E-02 | 2.49E+00 |
| 110 | 0.022592 | 1 | 2.26E-02 | 2.49E+00 | 273.3632 | 0.9965233 | 2.19E-02 | 2.42E+00 |
| 120 | 0.014866 | 1 | 1.49E-02 | 1.78E+00 | 214.0704 | 1.08711633 | 1.44E-02 | 1.59E+00 |
| 130 | 0.0081943 | 1 | 8.19E-03 | 1.07E+00 | 138.48367 | 1.17770936 | 7.96E-03 | 8.79E-01 |
| 140 | 0.0046096 | 1 | 4.61E-03 | 6.45E-01 | 90.34816 | 1.26830239 | 4.48E-03 | 4.94E-01 |
| 150 | 0.0025586 | 1 | 2.56E-03 | 3.84E-01 | 57.5685 | 1.35889541 | 2.49E-03 | 2.74E-01 |
| 160 | 0.0013328 | 1 | 1.33E-03 | 2.13E-01 | 34.11968 | 1.44948844 | 1.29E-03 | 1.43E-01 |
| 170 | 7.16E-04 | 1 | 7.16E-04 | 1.22E-01 | 20.699914 | 1.54008147 | 6.96E-04 | 7.68E-02 |
| 180 | 4.22E-04 | 1 | 4.22E-04 | 7.59E-02 | 13.663404 | 1.6306745 | 4.10E-04 | 4.52E-02 |
| 190 | 2.75E-04 | 1 | 2.75E-04 | 5.23E-02 | 9.944106 | 1.72126753 | 2.68E-04 | 2.95E-02 |
| 200 | 1.99E-04 | 1 | 1.99E-04 | 3.99E-02 | 7.9732 | 1.81186055 | 1.94E-04 | 2.14E-02 |
| 210 | 1.51E-04 | 1 | 1.51E-04 | 3.16E-02 | 6.638814 | 1.90245358 | 1.46E-04 | 1.61E-02 |
| 220 | 1.18E-04 | 1 | 1.18E-04 | 2.61E-02 | 5.734432 | 1.99304661 | 1.15E-04 | 1.27E-02 |
| 230 | 9.44E-05 | 1 | 9.44E-05 | 2.17E-02 | 4.9942361 | 2.08363964 | 9.17E-05 | 1.01E-02 |
| 240 | 7.56E-05 | 1 | 7.56E-05 | 1.81E-02 | 4.3545024 | 2.17423266 | 7.34E-05 | 8.11E-03 |
| 250 | 6.17E-05 | 1 | 6.17E-05 | 1.54E-02 | 3.85525 | 2.26482569 | 5.99E-05 | 6.61E-03 |
| 260 | 5.08E-05 | 1 | 5.08E-05 | 1.32E-02 | 3.4316464 | 2.35541872 | 4.93E-05 | 5.44E-03 |
| 270 | 4.20E-05 | 1 | 4.20E-05 | 1.13E-02 | 3.0633309 | 2.44601175 | 4.08E-05 | 4.51E-03 |
| 280 | 3.44E-05 | 1 | 3.44E-05 | 9.63E-03 | 2.6974304 | 2.53660477 | 3.34E-05 | 3.69E-03 |
| 290 | 2.89E-05 | 1 | 2.89E-05 | 8.39E-03 | 2.4323402 | 2.6271978 | 2.81E-05 | 3.10E-03 |
| 300 | 2.39E-05 | 1 | 2.39E-05 | 7.17E-03 | 2.15091 | 2.71779083 | 2.32E-05 | 2.56E-03 |
| 310 | 2.02E-05 | 1 | 2.02E-05 | 6.27E-03 | 1.9422771 | 2.80838386 | 1.96E-05 | 2.17E-03 |
| 320 | 1.69E-05 | 1 | 1.69E-05 | 5.42E-03 | 1.7345536 | 2.89897689 | 1.65E-05 | 1.82E-03 |
| 330 | 1.43E-05 | 1 | 1.43E-05 | 4.72E-03 | 1.5577056 | 2.98956991 | 1.39E-05 | 1.53E-03 |
| 340 | 1.24E-05 | 1 | 1.24E-05 | 4.21E-03 | 1.4315904 | 3.08016294 | 1.20E-05 | 1.33E-03 |
| 350 | 1.09E-05 | 1 | 1.09E-05 | 3.80E-03 | 1.3312075 | 3.17075597 | 1.06E-05 | 1.17E-03 |
| 360 | 9.35E-06 | 1 | 9.35E-06 | 3.37E-03 | 1.21168224 | 3.261349 | 9.08E-06 | 1.00E-03 |
| 370 | 7.92E-06 | 1 | 7.92E-06 | 2.93E-03 | 1.08361826 | 3.35194202 | 7.69E-06 | 8.49E-04 |
| 380 | 7.04E-06 | 1 | 7.04E-06 | 2.68E-03 | 1.01661932 | 3.44253505 | 6.84E-06 | 7.55E-04 |
| 390 | 6.17E-06 | 1 | 6.17E-06 | 2.40E-03 | 0.93772692 | 3.53312808 | 5.99E-06 | 6.61E-04 |
| 400 | 5.29E-06 | 1 | 5.29E-06 | 2.12E-03 | 0.846416 | 3.62372111 | 5.14E-06 | 5.67E-04 |

Tabla a- 14 Datos obtenidos en COMSOL para adimensionalizar las edades, a un flujo de 1.0 L/min con 7 mallas

| Tiempo (s) | Ci (Mol) | Δt | Ci Δt | tiCi Δt | ti ² Ci Δt | t θ | E | E θ |
|------------|-----------|------------|---------------|-----------------|-------------------------------|------------|----------|------------|
| 10 | 1.01E-08 | 1 | 1.01E-08 | 1.01E-07 | 1.0057E-06 | 0.11735454 | 9.85E-09 | 8.40E-07 |
| 20 | 9.91E-06 | 1 | 9.91E-06 | 1.98E-04 | 0.00396304 | 0.23470909 | 9.71E-06 | 8.27E-04 |
| 30 | 4.32E-05 | 1 | 4.32E-05 | 1.30E-03 | 0.0388602 | 0.35206363 | 4.23E-05 | 3.60E-03 |
| 40 | 1.80E-04 | 1 | 1.80E-04 | 7.20E-03 | 0.288032 | 0.46941818 | 1.76E-04 | 1.50E-02 |
| 50 | 9.94E-04 | 1 | 9.94E-04 | 4.97E-02 | 2.483975 | 0.58677272 | 9.73E-04 | 8.29E-02 |
| 60 | 0.005006 | 1 | 5.01E-03 | 3.00E-01 | 18.0216 | 0.70412727 | 4.90E-03 | 4.18E-01 |
| 70 | 0.016916 | 1 | 1.69E-02 | 1.18E+00 | 82.8884 | 0.82148181 | 1.66E-02 | 1.41E+00 |
| 80 | 0.030419 | 1 | 3.04E-02 | 2.43E+00 | 194.6816 | 0.93883636 | 2.98E-02 | 2.54E+00 |
| 90 | 0.027508 | 1 | 2.75E-02 | 2.48E+00 | 222.8148 | 1.0561909 | 2.70E-02 | 2.30E+00 |
| 100 | 0.013499 | 1 | 1.35E-02 | 1.35E+00 | 134.99 | 1.17354545 | 1.32E-02 | 1.13E+00 |
| 110 | 0.0045189 | 1 | 4.52E-03 | 4.97E-01 | 54.67869 | 1.29089999 | 4.43E-03 | 3.77E-01 |
| 120 | 0.0015521 | 1 | 1.55E-03 | 1.86E-01 | 22.35024 | 1.40825454 | 1.52E-03 | 1.30E-01 |
| 130 | 6.13E-04 | 1 | 6.13E-04 | 7.97E-02 | 10.364601 | 1.52560908 | 6.01E-04 | 5.12E-02 |
| 140 | 2.91E-04 | 1 | 2.91E-04 | 4.07E-02 | 5.703012 | 1.64296363 | 2.85E-04 | 2.43E-02 |
| 150 | 1.63E-04 | 1 | 1.63E-04 | 2.45E-02 | 3.668625 | 1.76031817 | 1.60E-04 | 1.36E-02 |
| 160 | 1.02E-04 | 1 | 1.02E-04 | 1.63E-02 | 2.607872 | 1.87767272 | 9.98E-05 | 8.50E-03 |
| 170 | 6.52E-05 | 1 | 6.52E-05 | 1.11E-02 | 1.8853782 | 1.99502726 | 6.39E-05 | 5.45E-03 |
| 180 | 4.47E-05 | 1 | 4.47E-05 | 8.05E-03 | 1.4498676 | 2.11238181 | 4.38E-05 | 3.74E-03 |
| 190 | 3.23E-05 | 1 | 3.23E-05 | 6.13E-03 | 1.1654163 | 2.22973635 | 3.16E-05 | 2.70E-03 |
| 200 | 2.48E-05 | 1 | 2.48E-05 | 4.96E-03 | 0.99208 | 2.3470909 | 2.43E-05 | 2.07E-03 |
| 210 | 1.86E-05 | 1 | 1.86E-05 | 3.90E-03 | 0.8186724 | 2.46444544 | 1.82E-05 | 1.55E-03 |
| 220 | 1.42E-05 | 1 | 1.42E-05 | 3.12E-03 | 0.68728 | 2.58179999 | 1.39E-05 | 1.19E-03 |
| 230 | 1.08E-05 | 1 | 1.08E-05 | 2.49E-03 | 0.5723251 | 2.69915453 | 1.06E-05 | 9.03E-04 |
| 240 | 8.03E-06 | 1 | 8.03E-06 | 1.93E-03 | 0.46271232 | 2.81650908 | 7.87E-06 | 6.71E-04 |
| 250 | 6.44E-06 | 1 | 6.44E-06 | 1.61E-03 | 0.40234375 | 2.93386362 | 6.31E-06 | 5.37E-04 |
| 260 | 5.03E-06 | 1 | 5.03E-06 | 1.31E-03 | 0.33975084 | 3.05121817 | 4.92E-06 | 4.20E-04 |
| 270 | 3.87E-06 | 1 | 3.87E-06 | 1.05E-03 | 0.28232712 | 3.16857271 | 3.79E-06 | 3.23E-04 |
| 280 | 2.96E-06 | 1 | 2.96E-06 | 8.28E-04 | 0.23187584 | 3.28592725 | 2.90E-06 | 2.47E-04 |
| 290 | 2.20E-06 | 1 | 2.20E-06 | 6.38E-04 | 0.18498636 | 3.4032818 | 2.16E-06 | 1.84E-04 |
| 300 | 1.85E-06 | 1 | 1.85E-06 | 5.55E-04 | 0.166446 | 3.52063634 | 1.81E-06 | 1.54E-04 |
| 310 | 1.50E-06 | 1 | 1.50E-06 | 4.65E-04 | 0.14407312 | 3.63799089 | 1.47E-06 | 1.25E-04 |
| 320 | 1.15E-06 | 1 | 1.15E-06 | 3.68E-04 | 0.1176576 | 3.75534543 | 1.13E-06 | 9.59E-05 |
| 330 | 1.01E-06 | 1 | 1.01E-06 | 3.32E-04 | 0.10958607 | 3.87269998 | 9.86E-07 | 8.40E-05 |
| 340 | 8.68E-07 | 1 | 8.68E-07 | 2.95E-04 | 0.10035467 | 3.99005452 | 8.51E-07 | 7.25E-05 |
| 350 | 7.30E-07 | 1 | 7.30E-07 | 2.55E-04 | 0.08942255 | 4.10740907 | 7.15E-07 | 6.09E-05 |
| 360 | 6.89E-07 | 1 | 6.89E-07 | 2.48E-04 | 0.08933587 | 4.22476361 | 6.75E-07 | 5.75E-05 |
| 370 | 6.79E-07 | 1 | 6.79E-07 | 2.51E-04 | 0.09302218 | 4.34211816 | 6.66E-07 | 5.67E-05 |
| 380 | 6.70E-07 | 1 | 6.70E-07 | 2.54E-04 | 0.0966989 | 4.4594727 | 6.56E-07 | 5.59E-05 |
| 390 | 5.97E-07 | 1 | 5.97E-07 | 2.33E-04 | 0.0908037 | 4.57682725 | 5.85E-07 | 4.98E-05 |
| 400 | 4.71E-07 | 1 | 4.71E-07 | 1.88E-04 | 0.0753664 | 4.69418179 | 4.61E-07 | 3.93E-05 |
| | | $\Sigma =$ | 1.02E+00 | 8.70E+01 | 7662.29099 | | | |
| | | $t =$ | 8.52E+01 | | | | | |

Tabla a- 15 Datos obtenidos en COMSOL para adimensionalizar las edades, a un flujo de 2.0 L/min con 7 mallas

Bibliografía

- [1] Viera J. (2003) “Carga rápida de baterías de ni-cd y ni-mh de media y gran capacidad. Análisis, síntesis y comparación de nuevos métodos”. Tesis doctoral, Universidad de Oviedo, España.
- [2] IRENA (October 2017) ELECTRICITY STORAGE AND RENEWABLES: COSTS AND MARKETS TO 2030 International Renewable Energy Agency, Abu Dhabi.
- [3] Barbón A. (julio 2018) Análisis de ventajas e inconvenientes de las baterías de flujo Redox frente a las baterías de iones de litio. Tesis de maestría. Universidad de Oviedo, España.
- [4] Dongjiang Y., Huamin Z. & Jian C. (2009, marzo 19). A simple model for the vanadium redox battery. *EISEVIER*, 54, pp.6827–6836.
- [5] Zeng Y., Zhao T., An L., Zhou X. & Wei L. (2015, Agosto 16). A comparative study of all-vanadium and iron-chromium redox flow batteries for large-scale energy storage. *ELSEVIER*, 300, pp.438-443
- [6] González J. (1998, enero). Desarrollo de electrodos tridimensionales para la recuperación de materiales en efluentes industriales. Tesis de doctorado. Universidad de alicate, España. p. 1.8
- [7] Hidalgo P. (2012, octubre). Estudio de los fenómenos de transporte en pilas de combustible y reactores electroquímicos. Tesis de maestría en electroquímica. Centro de investigación y desarrollo tecnológico en electroquímica. México.
- [8] Frías A. (2004, octubre). Optimización de la hidrodinámica de reactores electroquímicos: empleo de métodos experimentales y numéricos. Tesis de doctorado. Universidad de alicate, España.
- [9] Castañeda L. (2016, enero). Caracterización del reactor FM-01-LC en la regeneración de H_2SO_4 proveniente de baños de decapado agotado por el proceso de electrodiálisis: estudio teórico y práctico. Tesis de doctorado en electroquímica. Centro de investigación y desarrollo tecnológico en electroquímica. México.

- [10] Nuñez F. (2006, octubre). Electroincineración del *p* y *o*-cresol sobre electrodos de diamante dopado con boro (BDD) en una celda electroquímica FM-01-LC. Tesis de maestría en electroquímica. Universidad Autónoma Metropolitana. México.
- [11] Cruz M., Rivero E., Almazán F. & Gonzáles I. (2014, abril 9). Design of a new FM-01-LC reactor in parallel plate configuration using numerical simulation and experimental validation with residence time distribution (RTD). *ELSEVIER*, 85, pp.145-154
- [12] Distribución de tiempos de residencia.
- [13] Levenspiel O. (2004). *Ingeniería de las reacciones químicas*. México: Limusa Wiley.
- [14] Fogler H. (2008). *Elementos de ingeniería de las reacciones químicas*. México: Pearson Educación. pp. 867-994

Software utilizado COMSOL Multiphysics 5.3b (Lic. 1038192)