

# Pràctica 4

---

*Introducció a la simulació en Octave/Matlab*

## Exercicis

1. -	<p>A un RDTA hi creix un microorganisme X que consumeix el substrat limitant S seguint una cinètica de Monod amb constants <math>\mu_{\max}</math>: 0.25 h<sup>-1</sup> i <math>K_m</math>: 0.5 mol/l. El rendiment de la biomassa sobre el substrat es pot considerar constant i de valor: <math>Y_{xs}</math>: 2.75 gDW/mol.</p> <p>a) Representa l'evolució de les concentracions de X i S duran un període de 60 hores si inicialment hi ha al tanc 0.1 g/l de biomassa i 1.5 mols de substrat.</p> <p>b) Representa l'efecte, en l'evolució del sistema, de variar cadascun dels paràmetres en 5 nivells entre els rangs <math>\mu_{\max}</math>: 0.1 a 1, <math>K_m</math>: 0.1 a 2, <math>Y_{xs}</math>: 1 a 4.</p>
2. -	<p>L'atractor de Lorentz és un exemple clàssic de sistema senzill amb les característiques de sensibilitat extrema a les condicions inicials representat segons les equacions:</p> $\frac{dx}{dt} = 10 \cdot (y - x)$ $\frac{dy}{dt} = r \cdot x - y - x \cdot z$ $\frac{dz}{dt} = x \cdot y - \frac{8}{3}z$ <p>a) Simula l'evolució d'aquest sistema a partir del punt inicial: [-7.69 -15.61 90.4]. Durant un espai de temps entre 0 i 8. Fes servir com a valor de r: 126.62. Representa l'evolució temporal de les variables x, y i z respecte al temps. Representa el pla de fase de x vs. z. Prova també el resultat amb un valor de r=1,</p> <p>b) Repeteix la simulació anterior i les gràfiques dels plans de fase a partir del punt inicial: [-7.69 -15.61 90.5]. Representa els plans de fase de x vs. z i x vs. y. Marca amb un asterisc l'últim punt de la simulació a cada pla de fase.</p>
3. -	<p>Redueix el següent sistema d'equacions a una equació en funció de x i resol l'equació resultant utilitzant la funció 'fzero'. Després determina al valor de y.</p> $\sqrt{5y + 25} = x$ $y = \sin(0.1x^2)$ <p>Utilitza la funció 'broyden' o 'fsolve' per resoldre simultàniament les equacions i compara posteriorment les solucions. Fes servir una aproximació inicial <math>x = 10</math> per fzero i aproximacions inicials de <math>x = 10</math> i <math>y = 10</math> per al broyden i fsolve, amb una precisió de 1E-5 en ambdós casos.</p> <p>Compara el número d'iteracions necessàries amb cada mètode.</p>
4. -	<p>Un RDTA es carrega inicialment amb una mescla equimolar de dos compostos A y B (concentració inicial de A i de B 2.5 Kmol/m<sup>3</sup>). A aquest reactor es produeixen dues reaccions químiques, amb les següents estequiometries i constants termodinàmiques d'equilibri.</p> $A \leftrightarrow 2C \quad K_{eq1} = 3.5$ $B + C \leftrightarrow D \quad K_{eq2} = 1.4$ <p>Per tal d'obtenir les concentracions de les quatre espècies a l'equilibri, desenvolupa el sistema de dues equacions i dues incògnites i resol el sistema.</p>

	Nota: Vigila que les concentracions obtingudes siguin possibles.
5. -	<p>Les equacions de les cinètiques enzimàtiques, es deriven a partir de les equacions de balanç que resulten d'un mecanisme de reacció i de l'aplicació de simplificacions. El mecanisme de reacció proposat per Michaelis-Menten es representa per les següents reaccions elementals:</p> $E + S \xrightleftharpoons[k_{-1}]{k_1} ES \xrightarrow{k_2} E + P$ <ul style="list-style-type: none"> <li>- Escribeu en una funció les equacions diferencials de balanç per cada component. Considera com a valors dels paràmetres <math>k_1</math>: 20 (l·μmol<sup>-1</sup>·min<sup>-1</sup>), <math>k_{-1}</math>: 1 (min<sup>-1</sup>) <math>k_2</math>: 10 (min<sup>-1</sup>).</li> <li>- Fes una simulació per a un temps de 1.4 minuts amb valors inicials de <math>S_0</math>: 10 i <math>E_0</math>: 1 μmol.</li> </ul> <p>Per derivar l'equació clàssica de la cinètica de Michaelis-Menten es pot aplicar tant la aproximació d'equilibri ràpid de la primera reacció com la suposició de que el complex ES es troba estat (pseudo)estacionari assumida per Briggs-Haldane. En ambdós casos s'arriba a la mateixa equació. També en ambdós casos es suposa que la concentració de substrat lliure és igual a la del total de substrat no convertit. Equivalent a assumir que hi ha molt més substrat que enzim i que els llocs actius de l'enzim estan sempre ocupats. Això permet determinar paràmetres a partir de velocitats inicials.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- La derivació de l'equació de Michaelis-Menten indica que: <math display="block">K_M = \frac{k_{-1} + k_2}{k_1} \quad \text{i} \quad V_{\max} = k_2 \cdot E_0</math> </li> <li>- Simula l'evolució de S i P fent servir la cinètica de Michaelis-Menten i compara amb la primera simulació. En base a la simulació feta, per a quin rang de concentracions de S i P o de la relació S/E creus que l'equació de Michaelis-Menten deixa de ser vàlida.</li> <li>- Si la segona reacció és irreversible, quina seria la primera conseqüència al considerar una xarxa d'enzims d'aquest tipus?.</li> </ul>
6. -	<p>Un sistema metabòlic model està format per les reaccions:</p> <p>R1: A → B  R2: B → C  R3: B → D</p> <p>Cada reacció es pot representar per una cinètica Michaelis-Menten, amb totes les <math>K_m</math>=0.1mmol/l i les velocitats màximes iguals a <math>V_{mr1}</math>=10, <math>V_{mr2}</math>=5, <math>V_{mr3}</math>=2.5 (mmol/(l·min)).</p> <p>Crea la funció d'equacions diferencials de manera que la derivada (sortida de la funció) es calculi com una sola operació <math>S \cdot v</math>, on S sigui la matriu estequiomètrica i v el vector de velocitats de reacció.</p> <p>Simula l'evolució del sistema durant 1 minut partint d'una concentració inicial de A:1 (mmol/l) i zero les altres. Dibuixa el resultat i explica perquè s'obtenen aquestes concentracions finals.</p> <p>Afegeix una entrada constant de A de '0.05 mmol/(l·min) i dues sortides de C i D proporcionals a la concentració de cadascun d'aquests amb una constant de proporcionalitat de 0.1 min<sup>-1</sup>). Repeteix la simulació per un temps de 3 minuts i dibuixa-la. Troba les concentracions a l'estat estacionari.</p>