Pràctica 2

Introducció a la simulació en Matlab

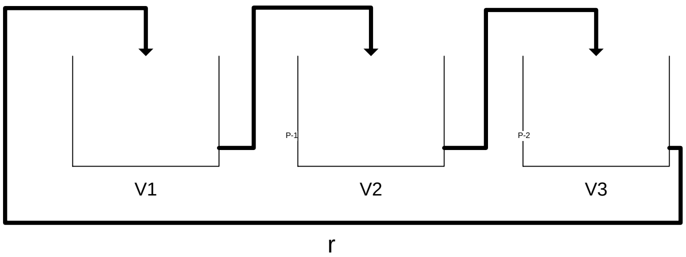
Exercicis

1.- A un RCTA, inicialment ple amb 1 litre d'aigua, entra un corrent d'aigua de 0.5 L/h amb un component S dissolt a una concentració de 1 mol/l. El cabal de sortida s'ajusta per mantenir el volum constant.

a) Representa l'evolució del component S al tanc durant 30 hores.
b) Quina serà la concentració del component S quan ha transcorregut 1 temps de residència.

$$\frac{dC_s}{dt} = \frac{F}{V}(C_{Sent} - C_s)$$

2.- Es necessita simular el comportament d'un sistema tancat de tres tancs de volums V_1,V_2 i V_3 amb un component dissolt (sal) que no reacciona. El cabal de líquid que connecta tots els tancs és el mateix. Es a dir el cabal que entra en el tanc 1 és igual al cabal que surt del tanc 3 i també és igual al cabal de connexió entre el 1 i el 2 i entre el 2 i el 3:



La variable $\mathbf{X_i(t)}$ representa el valor de la quantitat de sal (g) al tanc i, en el instant t i $\mathbf{x_i(t)}$ la seva concentració. El sistema d'equacions diferencials que modelitza la variació de sal en els tancs és:

$$\begin{array}{llll}
V_1 \cdot x'_1(t) = -F\dfrac{X_1(t)}{V_1} & & & F\dfrac{X_3(t)}{V_3} \\
V_2 \cdot x'_2(t) = F\dfrac{X_1(t)}{V_1} & -F\dfrac{X_2(t)}{V_2} & & \\
V_3 \cdot x'_3(t) = & F\dfrac{X_2(t)}{V_2} & -F\dfrac{X_3(t)}{V_3} &
\end{array}$$

Agrupant cabals (F) i volums constants (V_i) I posant-ho tot en funció de les concentracions totals queda:

$$\begin{array}{llll}
X'_1(t) = -k_1X_1(t) & & & k_3X_3(t) \\
X'_2(t) = k_1X_1(t) & -k_2X_2(t) & & \\
X'_3(t) = & k_2X_2(t) & -k_3X_3(t) &
\end{array}$$

On la constant k_i és $k_i = F/V_i$. F és el cabal i V_i el Volum del tanc

	El sistema es pot representar en forma matricial com: $$\mathbf{X}'(t)=\mathbf{K}\cdot\mathbf{X}$$ On: $$\mathbf{X}'(t)=\begin{bmatrix} X'_1(t) \\ X'_2(t) \\ X'_3(t) \end{bmatrix};\ \mathbf{K}=\begin{bmatrix} -k_1 & 0 & k_3 \\ k_1 & -k_2 & 0 \\ 0 & k_2 & -k_3 \end{bmatrix};\ \mathbf{X}(t)=\begin{bmatrix} X_1(t) \\ X_2(t) \\ X_3(t) \end{bmatrix}$$ Els volums dels tancs són V_1=50 l, V_2=25 l V_3=50 l Si les condicions inicials (contingut de sal en grams a cada tanc) són: $x_1(t=0)=10$, $x_2(t=0)=5$, $x_3(t=0)=8$ i el cabal és F=10 l/min, a) Representa gràficament la variació de la quantitat total de sal en cada tanc al llarg del temps (0 a 20 minuts) en el gràfic superior d'una figura i la variació de la concentració a cada tanc al gràfic inferior. Posa títols als gràfics i eixos i inclou les llegendes corresponents. b) Una vegada la simulació és correcta intenta posar el sistema com a producte matriu x vector i comprova que el resultat és el mateix.
3.-	En un RDTA es porta a terme una reacció elemental irreversible en sèrie en fase líquida de la següent forma: $$2A \xrightarrow{k_1} B \xrightarrow{k_2} C$$ Inicialment s'introdueix 1 kmol/m^3 del reactiu A. La variació de la concentració de reactius durant el temps es pot descriure amb les següents equacions diferencials: $$\frac{dC_A}{dt}=-2\cdot k_1\cdot C_A^2 \quad ; \quad \frac{dC_B}{dt}=k_1\cdot C_A^2-k_2\cdot C_B \ ; \ \frac{dC_C}{dt}=k_2\cdot C_B$$ on k_1=0.2 m^3·kmol^{-1}·h^{-1} i k_2=0.142 h^{-1} a) Representa el perfil de concentracions de A, B i C al llarg del temps (interval de temps de 0-50 h) b) Troba el valor màxim de concentració de B que es pot aconseguir i a quin temps. Dibuixa el punt màxim de B sobre el gràfic amb un punt vermell. c) A quin temps la concentració de A i C son iguals? Troba quina és la concentració i dibuixa-ho a la gràfica amb un asterisc punt vermell.

4.-	A un RDTA hi creix un microorganisme X que consumeix el substrat limitant S seguint una cinètica de Monod amb constants µmax: 0.25 h^{-1} i Km: 0.5 mol/l. El rendiment de la biomassa sobre el substrat es pot considerar constant i de valor: Yxs: 2.75 gDW/mol. a) Representa l'evolució de les concentracions de X i S durant un període de 60 hores si inicialment hi ha al tanc 0.1 g/l de biomassa i 1.5 mols de substrat. b) Representa l'efecte, en l'evolució del sistema, de variar cadascun dels paràmetres en 5 nivells entre els rangs µmax: 0.1 a 1, Km: 0.1 a 2,Yxs: 1 a 4 .
5.-	L'atractor de Lorentz és un exemple clàssic de sistema senzill amb les característiques de sensibilitat extrema a les condicions inicials i es representa segons les equacions: $$\frac{dx}{dt} = 10 \cdot (y - x)$$ $$\frac{dy}{dt} = r \cdot x - y - x \cdot z$$ $$\frac{dz}{dt} = x \cdot y - \frac{8}{3} z$$ 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, 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.