Pràctica 3

Introducció a la simulació en Matlab



Exercicis

1.- 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/m³ del reactiu A. La variació de la concentració de reactius durant el temps es pot descriure amb les següents equacions diferencials:

$$\frac{dC_A}{dt} = -2 \cdot k_1 \cdot C_A^2 \qquad ; \quad \frac{dC_B}{dt} = k_1 \cdot C_A^2 - k_2 \cdot C_B \quad ; \quad \frac{dC_C}{dt} = k_2 \cdot C_B$$

on $k_1=0.2 \text{ m}^3 \cdot \text{kmol}^{-1} \cdot \text{h}^{-1} \text{ i } k_2=0.142 \text{ h}^{-1}$

- 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.
- 2.- 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 duran 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 .
- 3.- 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.