## Avaluable 2

Introducció a la simulació en Matlab



## **Exercicis**

Recorda. Nom de fitxer: nom\_cognom\_AV2.m

A un bioreactor (RDTA) de volum 1 litre, es porta a terme les reaccions consecutives següents:

$$A \xrightarrow{k_1 \atop k_2} B \xrightarrow{k_3} C$$

On la primera reacció és reversible amb  $k_1=2$  ( $h^{-1}$ ) i Keq=1. La segona reacció és irreversible amb  $k_3=0.2$  ( $h^{-1}$ ). Inicialment al reactor hi ha una concentració de A de 1 kmol/m<sup>3</sup>.

- a) (50%) Representa l'evolució de les concentracions de A, B i C durant un període de 30 hores (200 punts) en el subgràfic superior d'una figura i el desequilibri de la primera reacció en el subgràfic inferior de la mateixa figura. Valors inicials de A, B i C: 1, 0, 0, respectivament. Nota: fes servir la ODE15s enlloc de la ODE45.
- b) (30%) A partir del model i les condicions del apartat a) representa l'efecte de variar els següents paràmetres individualment: k<sub>1</sub>: valors: 0.02, 0.2, 0.2, 2, 10 i 20 . Keq: 0.002, 0.02, 0.2, 1 i 2. k<sub>3</sub>: 0.02, 0.2, 0.5, 1 i 2. Els paràmetres s'han de variar fent servir un 'bucle' 'for' per cada paràmetre. Els resultats s'han de representar en 3 figures (una per cada paràmetre) i a cada figura 4 subgràfics (una per cada variable: A,B,C i la última per el 'desequilibri' de la primera reacció).
- c) (20%) contesta les següents preguntes:
  - i. A la primera simulació, perquè les corbes de A i B canvien primer ràpidament i després semblen evolucionar igual?
  - ii. Al apartat b), al augmentar la  $k_1$  què passa amb la  $k_2$ , amb el temps per a que la relació de desequilibri sigui constant?. I amb la velocitat d'aparició de C?. Com canvien i perquè? .
  - iii. Al apartat b), Què passa amb el deseguilibri al augmentar la Keg?
  - iv. Al apartat b), al augmentar k<sub>3</sub> les velocitats d'aparició de A i B canvien. Perquè?.