

Sumari

SUMARI	1
A. CODI FONT DELS MODELS EN MATLAB	4
A.1. Experiment NaCl 1	4
A.1.1. Arxiu OptimitzarDExpNaCl1Cl.m	4
A.1.2. Arxiu OptimitzarDExpNaCl1Na.m	4
A.1.3. Arxiu CalculerrorExpNaCl1Cl.m	4
A.1.4. Arxiu CalculerrorExpNaCl1Na.m	5
A.1.5. Arxiu ExpNaCl1Cl_err.m	5
A.1.6. Arxiu ExpNaCl1Na_err.m	7
A.1.7. Arxiu ExpNaCl1Cl.m	9
A.1.8. Arxiu ExpNaCl1Na.m	11
A.2. Experiment NaCl 2	14
A.2.1. Arxiu OptimitzarDExpNaCl2Cl.m	14
A.2.2. Arxiu OptimitzarDExpNaCl2Na.m	14
A.2.3. Arxiu CalculerrorExpNaCl2Cl.m	14
A.2.4. Arxiu CalculerrorExpNaCl2Na.m	14
A.2.5. Arxiu ExpNaCl2Cl_err.m	15
A.2.6. Arxiu ExpNaCl2Na_err.m	16
A.2.7. Arxiu ExpNaCl2Cl.m	18
A.2.8. Arxiu ExpNaCl2Na.m	21
A.3. Experiment NaCl 3	23
A.3.1. Arxiu OptimitzarDExpNaCl3Cl.m	23
A.3.2. Arxiu OptimitzarDExpNaCl3Na.m	23
A.3.3. Arxiu CalculerrorExpNaCl3Cl.m	23
A.3.4. Arxiu CalculerrorExpNaCl3Na.m	24
A.3.5. Arxiu ExpNaCl3Cl_err.m	24
A.3.6. Arxiu ExpNaCl3Na_err.m	26
A.3.7. Arxiu ExpNaCl3Cl.m	28
A.3.8. Arxiu ExpNaCl3Na.m	30
A.4. Experiment Na ₂ SO ₄ a concentració constant	33
A.4.1. Arxiu OptimitzarDExpNa2SO4SO4.m	33
A.4.2. Arxiu OptimitzarDExpNa2SO4Na.m	33
A.4.3. Arxiu CalculerrorExpNa2SO4SO4.m	33
A.4.4. Arxiu CalculerrorExpNa2SO4Na.m	33
A.4.5. Arxiu ExpNa2SO4SO4_err.m	34
A.4.6. Arxiu ExpNa2SO4Na_err.m	35

A.4.7.	Arxiu ExpNa2SO4SO4.m	37
A.4.8.	Arxiu ExpNa2SO4Na.m.....	40
A.5.	Experiment Na ₂ SO ₄ a concentració variable	42
A.5.1.	Arxiu OptimitzarDExpNa2SO4VSO4.m	42
A.5.2.	Arxiu OptimitzarDExpNa2SO4VNa.m	42
A.5.3.	Arxiu CalculerrorExpNa2SO4VSO4.m	42
A.5.4.	Arxiu CalculerrorExpNa2SO4VNa.m.....	43
A.5.5.	Arxiu ExpNa2SO4VSO4_err.m.....	43
A.5.6.	Arxiu ExpNa2SO4VNa_err.m	45
A.5.7.	Arxiu ExpNa2SO4VSO4.m	47
A.5.8.	Arxiu ExpNa2SO4VNa.m	49

A. CODI FONT DELS MODELS EN MATLAB

En aquest capítol es presenta el codi font dels arxius de MATLAB utilitzats en la simulació dels diferents experiments. Per simplificar els arxius utilitzats en la simulació, es va separar els càlculs realitzats pels anions dels càlculs realitzats pels cations. Així, en totes les simulacions s'han utilitzat 8 arxius diferents, però aquests tenien només 4 propòsits, a realitzar per duplicat. S'han utilitzat funcions similars en les simulacions cada experiment:

- `OptimitzarDEExpX.m`: aquest arxiu calcula el mínim de la següent funció, `CalculerrorExpX.m`, variant el coeficient de difusió.
- `CalculerrorExpX.m`: aquest arxiu calcula l'error entre la simulació (calculat a les funcions `ExpX_err.m`) i les dades experimentals.
- `ExpX_err.m`: executa la simulació quan el crida `CalculerrorExpX.m`, i li'n proporciona els resultats.
- `ExpX.m`: executa la simulació.

A.1. Experiment NaCl 1

A.1.1. Arxiu `OptimitzarDEExpNaCl1Cl.m`

```
function OptimitzarDEExpNaCl1Cl
```

```
Constantsdifusio=[5e-10,5e-4];
Dopt=fminsearch(@CalculerrorExpNaCl1Cl,Constantsdifusio)
```

A.1.2. Arxiu `OptimitzarDEExpNaCl1Na.m`

```
function OptimitzarDEExpNaCl1Na
```

```
Constantsdifusio=[5e-10,5e-4];
Dopt=fminsearch(@CalculerrorExpNaCl1Na,Constantsdifusio)
```

A.1.3. Arxiu `CalculerrorExpNaCl1Cl.m`

```
function [Err]=CalculerrorExpNaCl1Cl(D)
```

```
[CCl,CC11exp,CC12exp]=expNaCl1Cl_err(D);
Errors=zeros(11,2);
s=2;
for s=2:12
    Calcerr=sqrt((CCl(s,1)-CC11exp(s))^2);
    Errors(s-1,1)=Calcerr;
    Calcerr=sqrt((CCl(s,2)-CC12exp(s))^2);
    Errors(s-1,2)=Calcerr;
end
```

```
Errsum=sum(Errors);
Err=sum(Errsum);
Errrel1=Errsum(1)/sum(CC11exp(2:12));
Errrel2=Errsum(2)/sum(CC12exp(2:12));
Errrel=Errrel1+Errrel2;
```

A.1.4. Arxiu CalculerrorExpNaCl1Na.m

```
function [Err]=CalculerrorExpNaCl1Na(D)

[CNa,CNa1exp,CNa3exp]=expNaCl1Na_err(D);
Errors=zeros(11,2);
s=2;
for s=2:12
    Calcerr=sqrt((CNa(s,1)-CNa1exp(s))^2);
    Errors(s-1,1)=Calcerr;
    Calcerr=sqrt((CNa(s,2)-CNa3exp(s))^2);
    Errors(s-1,2)=Calcerr;
end
Errsum=sum(Errors);
Err=sum(Errsum);
Errrel1=Errsum(1)/sum(CNa1exp(2:12));
Errrel2=Errsum(2)/sum(CNa3exp(2:12));
Errrel=Errrel1+Errrel2;
```

A.1.5. Arxiu ExpNaCl1Cl_err.m

```
function [CC1,CC11exp,CC12exp]=expNaCl1Cl_err(Constantsdifusio)
global F R T A zCl I Rea Lma V k Nacid tspanoriginal s

%Reservoris: 1=Sal; 2=Àcid;

cCl1i=2854.77; %Concentració inicial de clor en el reservori 1 [mol/m3]
cCl2i=58.78; %Concentració inicial de clor en el reservori 2 [mol/m3]

Lma=180e-6; %Gruix de la membrana [m]
zCl=1; %Càrrega de l'ió

F=96485; %Constant de Faraday [C/mol]
R=8.314; %Constant del gasos [J/molK]
T=30+273; %Temperatura [K]
A=64e-4; %Àrea de la membrana [m2]
I=(5/A); %Intensitat [A/m2]
Rea=2e-4; %Resistència [Ohm]
Nacid=3; %Nombre de cel·les

V10=9e-4; %Volum inicial en el reservori 1 [m3]
V20=9e-4; %Volum inicial en el reservori 2 [m3]
Vini=[V10, V20];
V=Vini;

K1=-1.3e-8; %Constant de volum en el reservori 1 [m3/s]
K2=4.8e-9; %Constant de volum en el reservori 2 [m3/s]
k=[K1,K2];
s=1;
CC1=zeros(12,2);
inicials=[cCl1i,cCl2i];
```

```

molmost=0;
for s = 1:11

    options=odeset('RelTol',1e-3, 'AbsTol',1e-3);
    %Càlcul del interval de temps

    tspanoriginal=[ 0, 2220, 3540, 4740, 6300, 7860, 9240, 10200, 12120,
15180, 17940, 22440];
    tfin=(tspanoriginal(s+1)-tspanoriginal(s));
    tspan=[0,tfin];
    [T1, C1] = ode15s(@flux1,tspan,inicials,options);

    %Càlcul del volum extret en les mostres i correcció del volum
    g=1;
    V=Vini;
    for g=1:s
        tfin=(tspanoriginal(g+1)-tspanoriginal(g));
        V=V+k*tfin-50e-6;
    end

    %Es guarden els resultats en una matriu
    if s==1
        CC1(1,:)=C1(1,:);
    end

    CC1(s+1,:)=C1(end,:);
    inicials=(C1(end,:));

    %Càlcul del nombre de mols extret en les mostres
    molmost=0;
    o=1;
    for o=1:s
        molmost=molmost+50e-6*CC1(s+1,1);
    end

end

CC11exp=[2854.77;2701.99;2797.00;2825.1;2454.54;2359.24;2584.16;1937.59;1
863.69;1583.05;1069.99;247.56]; %Concentracions de clor en el reservori 1
(valors experimentals) [mol/m3]
CC12exp=[58.78;120.05;216.93;328.63;487.97;616.1;697.93;837.23;1124.27;14
30.61;1709.41;1912.16]; %Concentracions de clor en el reservori 2 (valors
experimentals) [mol/m3]

%Model
function dc = flux1(t,c)
dc=zeros(1,2);

V1=V(1)+k(1)*t;

Cm1=0.5*(c(1) + c(2));

```

```

D0cl=Constantsdifusio(1)*exp(-Constantsdifusio(2)*Cm1);

if t==0
    EfCl=1;
else
    EfCl=F*(V10*cCl1i-molmost-
V1*c(1))/(Nacid*I*A*(tspanoriginal(s)+t));
end

dc = [-3*(A*(-D0cl*(c(2)-c(1)))/Lma+
zCl*EfCl*F*Cm1*D0cl*I*Rea/(R*T*Lma))-c(1)*k(1)]/V1; ...
      3*(A*(-D0cl*(c(2)-c(1)))/Lma+
zCl*EfCl*F*Cm1*D0cl*I*Rea/(R*T*Lma))-c(1)*k(1)]/V1];

end

end

```

A.1.6. Arxiu ExpNaCl1Na_err.m

```

function [CNa,CNa1exp,CNa3exp]=expNaCl1Na_err(Constantsdifusio)
global F R T A zNa I Rec Lmc V k Nbase tspanoriginal s

%Reservoris: 1=Sal; 3=Base;

cNali=2782.5; %Concentració inicial de sodi en el reservori 1 [mol/m3]
cNa3i=97.88; %Concentració inicial de sodi en el reservori 3 [mol/m3]

Lmc=180e-6; %Gruix de la membrana [m]
zNa=1; %Càrrega de l'ió

F=96485; %Constant de Faraday [C/mol]
R=8.314; %Constant del gasos [J/molK]
T=30+273; %Temperatura [K]
A=64e-4; %Àrea de la membrana [m2]
I=(5/A); %Intensitat [A/m2]
Rec=2.5e-4; %Resistència [Ohm]
Nbase=2; %Nombre de cel·les

V10=9e-4; %Volum inicial en el reservori 1 [m3]
V30=9e-4; %Volum inicial en el reservori 3 [m3]
Vini=[V10, V30];
V=Vini;

K1=-1.3e-8; %Constant de volum en el reservori 1 [m3/s]
K3=4.8e-9; %Constant de volum en el reservori 3 [m3/s]
k=[K1,K3];
s=1;
CNa=zeros(12,2);
inicials=[cNali,cNa3i];
molmost=0;
for s = 1:11

```

```

options=odeset('RelTol',1e-3, 'AbsTol',1e-3);
%Càlcul del interval de temps

tspanoriginal=[ 0, 2220, 3540, 4740, 6300, 7860, 9240, 10200, 12120,
15180, 17940, 22440];
tfin=(tspanoriginal(s+1)-tspanoriginal(s));
tspan=[0,tfin];
[T1, C1] = ode15s(@flux1,tspan,inicials,options);

%Càlcul del volum extret en les mostres i correcció del volum
g=1;
V=Vini;
for g=1:s
tfin=(tspanoriginal(g+1)-tspanoriginal(g));
V=V+k*tfin-50e-6;
end

%Es guarden els resultats en una matriu
if s==1
    CNa(1,:)=C1(1,:);
end

CNa(s+1,:)=C1(end,:);
inicials=(C1(end,:));

%Càlcul del nombre de mols extret en les mostres
molmost=0;
o=1;
for o=1:s
molmost=molmost+50e-6*CNa(s+1,1);
end

end

CNa1exp=[2782.5;2636.17;2729.19;2772.79;2449.92;2356.15;2564.94;1986.19;1
908.7;1645.37;1154.1;314.84]; %Concentracions de sodi en el reservori 1
(valors experimentals) [mol/m3]
CNa3exp=[97.88;443.95;256.2;621.65;857.37;1061.82;1243.61;1261.28;1595.26
;1791.46;2018.23;2272.43]; %Concentracions de sodi en el reservori 3
(valors experimentals) [mol/m3]

%Model
function dc = flux1(t,c)
dc=zeros(1,2);

V1=V(1)+k(1)*t;

Cm2=0.5*(c(1) + c(2));

D0na=Constantsdifusio(1)*exp(-Constantsdifusio(2)*Cm2);

```



```

    if t==0
        EfNa=1;
    else
        EfNa=F*(V10*cNali-molmost-
V1*c(1))/(Nbase*I*A*(tspanoriginal(s)+t));
    end

    dc = [-2*(A*(-D0na*(c(2)-c(1))/Lmc+
zNa*EfNa*F*Cm2*D0na*I*Rec/(R*T*Lmc))-c(1)*k(1))/V1; ...
        2*(A*(-D0na*(c(2)-c(1))/Lmc+
zNa*EfNa*F*Cm2*D0na*I*Rec/(R*T*Lmc))-c(1)*k(1))/V1];

    end

end

```

A.1.7. Arxiu ExpNaCl1Cl.m

```

function expNaCl1Cl
global F R T A zCl I Rea Lma D0 tau V k Nacid tspanoriginal s

%Reservoris: 1=Sal; 2=Àcid;

cCl1i=2854.77; %Concentració inicial de clor en el reservori 1 [mol/m3]
cCl2i=58.78; %Concentració inicial de clor en el reservori 2 [mol/m3]

Lma=180e-6; %Gruix de la membrana [m]
zCl=1; %Càrrega de l'ió

F=96485; %Constant de Faraday [C/mol]
R=8.314; %Constant del gasos [J/molK]
T=30+273; %Temperatura [K]
A=64e-4; %Àrea de la membrana [m2]
I=(5/A); %Intensitat [A/m2]
Rea=2e-4; %Resistència [Ohm]
D0=2e-10; %Paràmetre coeficient de difusió [m2/s]
tau=4.0e-3; %Paràmetre coeficient de difusió [m3/mol]
Nacid=3; %Nombre de cel·les

V10=9e-4; %Volum inicial en el reservori 1 [m3]
V20=9e-4; %Volum inicial en el reservori 2 [m3]
Vini=[V10, V20];
V=Vini;

K1=-1.3e-8; %Constant de volum en el reservori 1 [m3/s]
K2=4.8e-9; %Constant de volum en el reservori 2 [m3/s]
k=[K1,K2];
s=1;
CCl=zeros(12,2);
DCl=zeros(12,1);
EfiCl=zeros(12,1);
inicials=[cCl1i,cCl2i];
molmost=0;
for s = 1:11

```

```

options=odeset('RelTol',1e-3, 'AbsTol',1e-3);
%Càlcul del interval de temps

tspanoriginal=[ 0, 2220, 3540, 4740, 6300, 7860, 9240, 10200, 12120,
15180, 17940, 22440];
tfin=(tspanoriginal(s+1)-tspanoriginal(s));
tspan=[0,tfin];
[T1, C1] = ode15s(@flux1,tspan,inicials,options);

%Càlcul del volum extret en les mostres i correcció del volum
g=1;
V=Vini;
for g=1:s
tfin=(tspanoriginal(g+1)-tspanoriginal(g));
V=V+k*tfin-50e-6;
end

%Es guarden els resultats en una matriu. Es calcula el coeficient de
difusió i l'eficiència
if s==1
    CC1(1,:)=C1(1,:);
    CCM1=0.5*(C1(1,1) + C1(2,1));
    Dcl=D0*exp(-tau*CCM1);
    DCl(1)=Dcl;
    EfiCl(1)=1;
end

    CCM1=0.5*(C1(end,1) + C1(end,2));
    Dcl=D0*exp(-tau*CCM1);
    DCl(s+1)=Dcl;
    Eficl=F*(V10*cCl1i-molmost-
V1*C1(end,1))/(Nacid*I*A*tspanoriginal(s+1));
    EfiCl(s+1)=Eficl;
    CC1(s+1,:)=C1(end,:);
    inicials=(C1(end,:));

%Càlcul del nombre de mols extret en les mostres
molmost=0;
o=1;
for o=1:s
molmost=molmost+50e-6*CC1(s+1,1);
end

end

CC11exp=[2854.77;2701.99;2797.00;2825.1;2454.54;2359.24;2584.16;1937.59;1
863.69;1583.05;1069.99;247.56]; %Concentracions de clor en el reservori 1
(valors experimentals) [mol/m3]
CC12exp=[58.78;120.05;216.93;328.63;487.97;616.1;697.93;837.23;1124.27;14
30.61;1709.41;1912.16]; %Concentracions de clor en el reservori 2 (valors
experimentals) [mol/m3]

```

```

plot(tspanoriginal,CCl,'-',tspanoriginal,[CCl1exp,CCl2exp],'.')
legend('salt','acid','salt (experiment)','acid (experiment)')
title('Concentració de clor')
xlabel('temps(s)')
ylabel('Concentració (mols/m^{3})')

%Model
function dc = flux1(t,c)
dc=zeros(1,2);

V1=V(1)+k(1)*t;

Cm1=0.5*(c(1) + c(2));

D0cl=D0*exp(-tau*Cm1);

if t==0
    EfCl=1;
else
    EfCl=F*(V10*cCl1i-molmost-
V1*c(1))/(Nacid*I*A*(tspanoriginal(s)+t));
end

dc = [-3*(A*(-D0cl*(c(2)-c(1)))/Lma+
zCl*EfCl*F*Cm1*D0cl*I*Rea/(R*T*Lma))-c(1)*k(1)]/V1; ...
      3*(A*(-D0cl*(c(2)-c(1)))/Lma+
zCl*EfCl*F*Cm1*D0cl*I*Rea/(R*T*Lma))-c(1)*k(1)]/V1;

end

end

```

A.1.8. Arxiu ExpNaCl1Na.m

```

function expNaCl1Na
global F R T A zNa I Rec Lmc D0 tau V k Nbase tspanoriginal s

%Reservoris: 1=Sal; 3=Base;

cNa1i=2782.5; %Concentració inicial de sodi en el reservori 1 [mol/m3]
cNa3i=97.88; %Concentració inicial de sodi en el reservori 3 [mol/m3]

Lmc=180e-6; %Gruix de la membrana [m]
zNa=1; %Càrrega de l'ió

F=96485; %Constant de Faraday [C/mol]
R=8.314; %Constant del gasos [J/molK]
T=30+273; %Temperatura [K]
A=64e-4; %Àrea de la membrana [m2]
I=(5/A); %Intensitat [A/m2]
Rec=2.5e-4; %Resistència [Ohm]
D0=3e-10; %Paràmetre coeficient de difusió [m2/s]

```

```

tau=3e-3;      %Paràmetre coeficient de difusió [m3/mol]
Nbase=2;      %Nombre de cel·les

V10=9e-4;     %Volum inicial en el reservori 1 [m3]
V30=9e-4;     %Volum inicial en el reservori 3 [m3]
Vini=[V10,V30];
V=Vini;

K1=-1.3e-8;   %Constant de volum en el reservori 1 [m3/s]
K3=4.8e-9;   %Constant de volum en el reservori 3 [m3/s]
k=[K1,K3];
s=1;
CNa=zeros(12,2);
DNa=zeros(12,1);
EfiNa=zeros(12,1);
inicials=[cNali,cNa3i];
molmost=0;
for s = 1:11

    options=odeset('RelTol',1e-3, 'AbsTol',1e-3);
    %Càlcul del interval de temps

    tspanoriginal=[ 0, 2220, 3540, 4740, 6300, 7860, 9240, 10200, 12120,
15180, 17940, 22440];
    tfin=(tspanoriginal(s+1)-tspanoriginal(s));
    tspan=[0,tfin];
    [T1, C1] = ode15s(@flux1,tspan,inicials,options);

    %Càlcul del volum extret en les mostres i correcció del volum
    g=1;
    V=Vini;
    for g=1:s
        tfin=(tspanoriginal(g+1)-tspanoriginal(g));
        V=V+k*tfin-50e-6;
    end

    %Es guarden els resultats en una matriu. Es calcula el coeficient de
    difusió i l'eficiència
    if s==1
        CNa(1,:)=C1(1,:);
        CCM2=0.5*(C1(1,1) + C1(2,1));
        Dna=D0*exp(-tau*CCM2);
        DNa(1)=Dna;
        EfiNa(1)=1;
    end

    CCM2=0.5*(C1(end,1) + C1(end,2));
    Dna=D0*exp(-tau*CCM2);
    DNa(s+1)=Dna;
    EfiNa=F*(V10*cNali-molmost-
V1*C1(end,1))/(Nbase*I*A*tspanoriginal(s+1));
    EfiNa(s+1)=EfiNa;

```

```

CNa(s+1,:)=C1(end,:);
inicials=(C1(end,:));

%Càlcul del nombre de mols extret en les mostres
molmost=0;
o=1;
for o=1:s
    molmost=molmost+50e-6*CNa(s+1,1);
end

end

CNa1exp=[2782.5;2636.17;2729.19;2772.79;2449.92;2356.15;2564.94;1986.19;1
908.7;1645.37;1154.1;314.84]; %Concentracions de sodi en el reservori 1
(valors experimentals) [mol/m3]
CNa3exp=[97.88;443.95;256.2;621.65;857.37;1061.82;1243.61;1261.28;1595.26
;1791.46;2018.23;2272.43]; %Concentracions de sodi en el reservori 3
(valors experimentals) [mol/m3]

plot(tspanoriginal,CNa,'-',tspanoriginal,[CNa1exp,CNa3exp],'.')
legend('salt','base','salt (experiment)','base (experiment)')
title('Concentració de sodi')
xlabel('temps(s)')
ylabel('Concentració (mols/m^{3})')

%Model
function dc = flux1(t,c)
    dc=zeros(1,2);

    V1=V(1)+k(1)*t;

    Cm2=0.5*(c(1) + c(2));

    D0na=D0*exp(-tau*Cm2);

    if t==0
        EfNa=1;
    else
        EfNa=F*(V10*cNali-molmost-
V1*c(1))/(Nbase*I*A*(tspanoriginal(s)+t));
    end

    dc = [-2*(A*(-D0na*(c(2)-c(1)))/Lmc+
zNa*EfNa*F*Cm2*D0na*I*Rec/(R*T*Lmc))-c(1)*k(1)]/V1; ...
        2*(A*(-D0na*(c(2)-c(1)))/Lmc+
zNa*EfNa*F*Cm2*D0na*I*Rec/(R*T*Lmc))-c(1)*k(1)]/V1];

end

end

```

A.2. Experiment NaCl 2

A.2.1. Arxiu OptimitzarDExpNaCl2Cl.m

```
function OptimitzarDExpNaCl2Cl

Constantsdifusio=[5e-10,5e-4];
Dopt=fminsearch(@CalculerrorExpNaCl2Cl,Constantsdifusio)
```

A.2.2. Arxiu OptimitzarDExpNaCl2Na.m

```
function OptimitzarDExpNaCl2Na

Constantsdifusio=[5e-10,5e-4];
Dopt=fminsearch(@CalculerrorExpNaCl2Na,Constantsdifusio)
```

A.2.3. Arxiu CalculerrorExpNaCl2Cl.m

```
function [Err]=CalculerrorExpNaCl2Cl(D)

[CCl,CCl1exp,CCl2exp]=expNaCl2Cl_err(D);
Errors=zeros(7,2);
s=2;
for s=2:8
    Calcerr=sqrt((CCl(s,1)-CCl1exp(s))^2);
    Errors(s-1,1)=Calcerr;
    Calcerr=sqrt((CCl(s,2)-CCl2exp(s))^2);
    Errors(s-1,2)=Calcerr;
end
Errsum=sum(Errors);
Err=sum(Errsum);
Errrel1=Errsum(1)/sum(CCl1exp(2:8));
Errrel2=Errsum(2)/sum(CCl2exp(2:8));
Errrel=Errrel1+Errrel2;
```

A.2.4. Arxiu CalculerrorExpNaCl2Na.m

```
function [Err]=CalculerrorExpNaCl2Na(D)

[CNa,CNa1exp,CNa3exp]=expNaCl2Na_err(D);
Errors=zeros(7,2);
s=2;
for s=2:8
    Calcerr=sqrt((CNa(s,1)-CNa1exp(s))^2);
    Errors(s-1,1)=Calcerr;
    Calcerr=sqrt((CNa(s,2)-CNa3exp(s))^2);
    Errors(s-1,2)=Calcerr;
end
Errsum=sum(Errors);
Err=sum(Errsum);
Errrel1=Errsum(1)/sum(CNa1exp(2:8));
Errrel2=Errsum(2)/sum(CNa3exp(2:8));
Errrel=Errrel1+Errrel2;
```

A.2.5. Arxiu ExpNaCl2Cl_err.m

```
function [CC1,CC11exp,CC12exp]=expNaCl2Cl_err(Constantsdifusio)
global F R T A zCl I Rea Lma V k Nacid tspanoriginal s

%Reservoris: 1=Sal; 2=Àcid;

cCl1i=822.8; %Concentració inicial de clor en el reservori 1 [mol/m3]
cCl2i=341.58;%Concentració inicial de clor en el reservori 2 [mol/m3]

Lma=180e-6; %Gruix de la membrana [m]
zCl=1;      %Càrrega de l'ió

F=96485;    %Constant de Faraday [C/mol]
R=8.314;    %Constant del gasos [J/molK]
T=30+273;   %Temperatura [K]
A=64e-4;    %Àrea de la membrana [m2]
I=(5/A);    %Intensitat [A/m2]
Rea=2e-4;   %Resistència [Ohm]
Nacid=3;    %Nombre de cel·les

V10=9e-4;   %Volum inicial en el reservori 1 [m3]
V20=8.6e-4; %Volum inicial en el reservori 2 [m3]
Vini=[V10, V20];
V=Vini;

K1=-1.73e-8; %Constant de volum en el reservori 1 [m3/s]
K2=4.1e-9;   %Constant de volum en el reservori 2 [m3/s]
k=[K1,K2];
s=1;
CC1=zeros(8,2);
inicials=[cCl1i,cCl2i];
molmost=0;
for s = 1:7

    options=odeset('RelTol',1e-3, 'AbsTol',1e-3);
    %Càlcul del interval de temps

    tspanoriginal=[ 0, 1700.0, 2884.0, 3970.0, 5041.0, 6132.0, 7310.0,
8161.0];
    tfin=(tspanoriginal(s+1)-tspanoriginal(s));
    tspan=[0,tfin];
    [T1, C1] = ode15s(@flux1,tspan,inicials,options);

    %Càlcul del volum extret en les mostres i correcció del volum
    g=1;
    V=Vini;
    for g=1:s
        tfin=(tspanoriginal(g+1)-tspanoriginal(g));
        V=V+k*tfin-50e-6;
    end

    %Es guarden els resultats en una matriu
    if s==1
        CC1(1,:)=C1(1,:);
    end
end
```

```

CCl(s+1,:)=C1(end,:);
inicials=(C1(end,:));

%Càlcul del nombre de mols extret en les mostres
molmost=0;
o=1;
for o=1:s
molmost=molmost+50e-6*CCl(s+1,1);
end

end

CCl1exp=[822.76;638.21;522.06;484.88;366.73;281.22;180.96;93.04];%
Concentracions de clor en el reservori 1 (valors experimentals) [mol/m3]
CCl2exp=[341.58;436.29;543.17;612.58;724.16;827.22;926.65;1009.7];%
Concentracions de clor en el reservori 2 (valors experimentals) [mol/m3]

%Model
function dc = flux1(t,c)
dc=zeros(1,2);

V1=V(1)+k(1)*t;

Cm1=0.5*(c(1) + c(2));

D0c1=Constantsdifusio(1)*exp(-Constantsdifusio(2)*Cm1);

if t==0
EfCl=1;
else
EfCl=F*(V10*cCl1i-molmost-
V1*c(1))/(Nacid*I*A*(tspanoriginal(s)+t));
end

dc = [-3*(A*(-D0c1*(c(2)-c(1))/Lma+
zCl*EfCl*F*Cm1*D0c1*I*Rea/(R*T*Lma))-c(1)*k(1))/V1; ...
3*(A*(-D0c1*(c(2)-c(1))/Lma+
zCl*EfCl*F*Cm1*D0c1*I*Rea/(R*T*Lma))-c(1)*k(1))/V1];

end

end

```

A.2.6. Arxiu ExpNaCl2Na_err.m

```

function [CNa,CNa1exp,CNa3exp]=expNaCl2Na_err(Constantsdifusio)
global F R T A zNa I Rec Lmc V k Nbase tspanoriginal s

```



```

%Reservoris: 1=Sal; 3=Base;

cNa1i=822.76; %Concentració inicial de sodi en el reservori 1 [mol/m3]
cNa3i=392.43; %Concentració inicial de sodi en el reservori 3 [mol/m3]

Lmc=180e-6; %Gruix de la membrana [m]
zNa=1; %Càrrega de l'ió

F=96485; %Constant de Faraday [C/mol]
R=8.314; %Constant del gasos [J/molK]
T=30+273; %Temperatura [K]
A=64e-4; %Àrea de la membrana [m2]
I=(5/A); %Intensitat [A/m2]
Rec=2.5e-4; %Resistència [Ohm]
Nbase=2; %Nombre de cel·les

V10=9e-4; %Volum inicial en el reservori 1 [m3]
V30=9e-4; %Volum inicial en el reservori 3 [m3]
Vini=[V10, V30];
V=Vini;

K1=-1.73e-8; %Constant de volum en el reservori 1 [m3/s]
K3=5.6e-9; %Constant de volum en el reservori 3 [m3/s]
k=[K1,K3];
s=1;
CNa=zeros(8,2);
inicials=[cNa1i,cNa3i];
molmost=0;
for s = 1:7

    options=odeset('RelTol',1e-3, 'AbsTol',1e-3);
    %Càlcul del interval de temps

    tspanoriginal=[ 0, 1700.0, 2884.0, 3970.0, 5041.0, 6132.0, 7310.0,
8161.0];
    tfin=(tspanoriginal(s+1)-tspanoriginal(s));
    tspan=[0,tfin];
    [T1, C1] = ode15s(@flux1,tspan,inicials,options);

    %Càlcul del volum extret en les mostres i correcció del volum
    g=1;
    V=Vini;
    for g=1:s
        tfin=(tspanoriginal(g+1)-tspanoriginal(g));
        V=V+k*tfin-50e-6;
    end

    %Es guarden els resultats en una matriu
    if s==1
        CNa(1,:)=C1(1,:);
    end

    CNa(s+1,:)=C1(end,:);
    inicials=(C1(end,:));

```

```

%Càlcul del nombre de mols extret en les mostres
molmost=0;
o=1;
for o=1:s
molmost=molmost+50e-6*CNa(s+1,1);
end

end

CNa1exp=[822.76;638.21;522.06;484.88;366.73;281.22;180.96;93.04];
%Concentracions de sodi en el reservori 1 (valors experimentals) [mol/m3]
CNa3exp=[392.43;558.58;676.98;808.92;900.93;977.51;1020.34;1050.46];
%Concentracions de sodi en el reservori 3 (valors experimentals) [mol/m3]

%Model
function dc = flux1(t,c)
dc=zeros(1,2);

V1=V(1)+k(1)*t;

Cm2=0.5*(c(1) + c(2));

D0na=Constantsdifusio(1)*exp(-Constantsdifusio(2)*Cm2);

if t==0
EfNa=1;
else
EfNa=F*(V10*cNali-molmost-
V1*c(1))/(Nbase*I*A*(tspanoriginal(s)+t));
end

dc = [-2*(A*(-D0na*(c(2)-c(1))/Lmc+
zNa*EfNa*F*Cm2*D0na*I*Rec/(R*T*Lmc))-c(1)*k(1))/V1; ...
2*(A*(-D0na*(c(2)-c(1))/Lmc+
zNa*EfNa*F*Cm2*D0na*I*Rec/(R*T*Lmc))-c(1)*k(1))/V1];

end

end

```

A.2.7. Arxiu ExpNaCl2Cl.m

```

function expNaCl2Cl
global F R T A zCl I Rea lma D0 tau V k Nacid tspanoriginal s

%Reservoris: 1=Sal; 2=Àcid;

cCl1i=822.8; %Concentració inicial de clor en el reservori 1 [mol/m3]
cCl2i=341.58; %Concentració inicial de clor en el reservori 2 [mol/m3]

```



```

Lma=180e-6;    %Gruix de la membrana [m]
zCl=1;        %Càrrega de l'ió

F=96485;      %Constant de Faraday [C/mol]
R=8.314;      %Constant del gasos [J/molK]
T=30+273;     %Temperatura [K]
A=64e-4;      %Àrea de la membrana [m2]
I=(5/A);      %Intensitat [A/m2]
Rea=2e-4;     %Resistència [Ohm]
D0=2.691e-10; %Paràmetre coeficient de difusió [m2/s]
tau=6.978e-4; %Paràmetre coeficient de difusió [m3/mol]
Nacid=3;      %Nombre de cel·les

V10=9.0e-4;   %Volum inicial en el reservori 1 [m3]
V20=8.6e-4;   %Volum inicial en el reservori 2 [m3]
Vini=[V10, V20];
V=Vini;

K1=-1.73e-8;  %Constant de volum en el reservori 1 [m3/s]
K2=4.1e-9;    %Constant de volum en el reservori 2 [m3/s]
k=[K1,K2];
s=1;
CCl=zeros(8,2);
DCl=zeros(8,1);
EfiCl=zeros(8,1);
inicials=[cCl1i,cCl2i];
molmost=0;
for s = 1:7

    options=odeset('RelTol',1e-3, 'AbsTol',1e-3);
    %Càlcul del interval de temps

    tspanoriginal=[ 0, 1700.0, 2884.0, 3970.0, 5041.0, 6132.0, 7310.0,
8161.0];
    tfin=(tspanoriginal(s+1)-tspanoriginal(s));
    tspan=[0,tfin];
    [T1, C1] = ode15s(@flux1,tspan,inicials,options);

    %Càlcul del volum extret en les mostres i correcció del volum
    g=1;
    V=Vini;
    for g=1:s
        tfin=(tspanoriginal(g+1)-tspanoriginal(g));
        V=V+k*tfin-50e-6;
    end

    %Es guarden els resultats en una matriu. Es calcula el coeficient de
difusió i l'eficiència
    if s==1
        CCl(1,:)=C1(1,:);
        CCM1=0.5*(C1(1,1) + C1(2,1));
        Dcl=D0*exp(-tau*CCM1);
        DC1(1)=Dcl;
        EfiCl(1)=1;
    end
end

```

```

CCM1=0.5*(C1(end,1) + C1(end,2));
Dc1=D0*exp(-tau*CCM1);
DC1(s+1)=Dc1;
Efic1=F*(V10*cC1li-molmost-
V1*C1(end,1))/(Nacid*I*A*tspanoriginal(s+1));
EfiC1(s+1)=Efic1;
CC1(s+1,:)=C1(end,:);
inicials=(C1(end,:));

%Càlcul del nombre de mols extret en les mostres
molmost=0;
o=1;
for o=1:s
molmost=molmost+50e-6*CC1(s+1,1);
end

end

CC1exp=[822.76;638.21;522.06;484.88;366.73;281.22;180.96;93.04];
%Concentracions de clor en el reservori 1 (valors experimentals) [mol/m3]
CC12exp=[341.58;436.29;543.17;612.58;724.16;827.22;926.65;1009.7];
%Concentracions de clor en el reservori 2 (valors experimentals) [mol/m3]

plot(tspanoriginal,CC1,'-',tspanoriginal,[CC1exp,CC12exp],'.')
legend('salt','acid','salt (experiment)','acid (experiment)')
title('Concentració de clor')
xlabel('temps(s)')
ylabel('Concentració (mols/m^{3})')

%Model
function dc = flux1(t,c)
dc=zeros(1,2);

V1=V(1)+k(1)*t;

Cm1=0.5*(c(1) + c(2));

D0c1=D0*exp(-tau*Cm1);

if t==0
EfiC1=1;
else
EfiC1=F*(V10*cC1li-molmost-
V1*c(1))/(Nacid*I*A*(tspanoriginal(s)+t));
end

dc = [-3*(A*(-D0c1*(c(2)-c(1))/Lma+
zC1*EfiC1*F*Cm1*D0c1*I*Rea/(R*T*Lma))-c(1)*k(1))/V1; ...
3*(A*(-D0c1*(c(2)-c(1))/Lma+
zC1*EfiC1*F*Cm1*D0c1*I*Rea/(R*T*Lma))-c(1)*k(1))/V1];

```

end

end

A.2.8. Arxiu ExpNaCl2Na.m

```
function expNaCl2Na
global F R T A zNa I Rec Lmc D0 tau V k Nbase tspanoriginal s

%Reservoris: 1=Sal; 3=Base;

cNa1i=822.76; %Concentració inicial de sodi en el reservori 1 [mol/m3]
cNa3i=392.43; %Concentració inicial de sodi en el reservori 3 [mol/m3]

Lmc=180e-6; %Gruix de la membrana [m]
zNa=1; %Càrrega de l'ió

F=96485; %Constant de Faraday [C/mol]
R=8.314; %Constant del gasos [J/molK]
T=30+273; %Temperatura [K]
A=64e-4; %Àrea de la membrana [m2]
I=(5/A); %Intensitat [A/m2]
Rec=2.5e-4; %Resistència [Ohm]
D0=2.722e-10; %Paràmetre coeficient de difusió [m2/s]
tau=7.146e-4; %Paràmetre coeficient de difusió [m3/mol]
Nbase=2; %Nombre de cel·les

V10=9.0e-4; %Volum inicial en el reservori 1 [m3]
V30=9.0e-4; %Volum inicial en el reservori 3 [m3]
Vini=[V10, V30];
V=Vini;

K1=-1.73e-8; %Constant de volum en el reservori 1 [m3/s]
K3=5.6e-9; %Constant de volum en el reservori 1 [m3/s]
k=[K1,K3];
s=1;
CNa=zeros(8,2);
DNa=zeros(8,1);
EfiNa=zeros(8,1);
inicials=[cNa1i,cNa3i];
molmost=0;
for s = 1:7

    options=odeset('RelTol',1e-3, 'AbsTol',1e-3);
    %Càlcul del interval de temps

    tspanoriginal=[ 0, 1700.0, 2884.0, 3970.0, 5041.0, 6132.0, 7310.0,
8161.0];
    tfin=(tspanoriginal(s+1)-tspanoriginal(s));
    tspan=[0,tfin];
    [T1, C1] = ode15s(@flux1,tspan,inicials,options);
```

```

%Càlcul del volum extret en les mostres i correcció del volum
g=1;
V=Vini;
for g=1:s
tfin=(tspanoriginal(g+1)-tspanoriginal(g));
V=V+k*tfin-50e-6;
end

%Es guarden els resultats en una matriu. Es calcula el coeficient de
difusió i l'eficiència
if s==1
CNa(1,:)=C1(1,:);
CCM2=0.5*(C1(1,1) + C1(2,1));
Dna=D0*exp(-tau*CCM2);
DNa(1)=Dna;
EfiNa(1)=1;
end

CCM2=0.5*(C1(end,1) + C1(end,2));
Dna=D0*exp(-tau*CCM2);
DNa(s+1)=Dna;
EfiNa=F*(Vl0*cNali-molmost-
Vl*C1(end,1))/(Nbase*I*A*tspanoriginal(s+1));
EfiNa(s+1)=EfiNa;
CNa(s+1,:)=C1(end,:);
inicials=(C1(end,:));

%Càlcul del nombre de mols extret en les mostres
molmost=0;
o=1;
for o=1:s
molmost=molmost+50e-6*CNa(s+1,1);
end

end

CNa1exp=[822.76;638.21;522.06;484.88;366.73;281.22;180.96;93.04];
%Concentracions de sodi en el reservori 1 (valors experimentals) [mol/m3]
CNa3exp=[392.43;558.58;676.98;808.92;900.93;977.51;1020.34;1050.46];
%Concentracions de sodi en el reservori 3 (valors experimentals) [mol/m3]

plot(tspanoriginal,CNa,'-',tspanoriginal,[CNa1exp,CNa3exp],'.')
legend('salt','base','salt (experiment)','base (experiment)')
title('Concentració de sodi')
xlabel('temps (s)')
ylabel('Concentració (mols/m^{3})')

%Model
function dc = flux1(t,c)
dc=zeros(1,2);

Vl=V(1)+k(1)*t;

```

```

Cm2=0.5*(c(1) + c(2));

D0na=D0*exp(-tau*Cm2);

if t==0
    EfNa=1;
else
    EfNa=F*(V10*cNali-molmost-
V1*c(1))/(Nbase*I*A*(tspanoriginal(s)+t));
end

dc = [-2*(A*(-D0na*(c(2)-c(1))/Lmc+
zNa*EfNa*F*Cm2*D0na*I*Rec/(R*T*Lmc))-c(1)*k(1))/V1; ...
      2*(A*(-D0na*(c(2)-c(1))/Lmc+
zNa*EfNa*F*Cm2*D0na*I*Rec/(R*T*Lmc))-c(1)*k(1))/V1];

end

end

```

A.3. Experiment NaCl 3

A.3.1. Arxiu OptimitzarDExpNaCl3Cl.m

```

function OptimitzarDExpNaCl3Cl

Constantsdifusio=[5e-10,5e-4];
Dopt=fminsearch(@CalculerrorExpNaCl3Cl,Constantsdifusio)

```

A.3.2. Arxiu OptimitzarDExpNaCl3Na.m

```

function OptimitzarDExpNaCl3Na

Constantsdifusio=[5e-10,5e-4];
Dopt=fminsearch(@CalculerrorExpNaCl3Na,Constantsdifusio)

```

A.3.3. Arxiu CalculerrorExpNaCl3Cl.m

```

function [Err]=CalculerrorExpNaCl3Cl(D)

[CC1,CC11exp,CC12exp]=expNaCl3Cl_err(D);
Errors=zeros(11,2);
s=2;
for s=2:12
    Calcerr=sqrt((CC1(s,1)-CC11exp(s))^2);
    Errors(s-1,1)=Calcerr;
    Calcerr=sqrt((CC1(s,2)-CC12exp(s))^2);
    Errors(s-1,2)=Calcerr;
end

```

```

Errsum=sum(Errors);
Err=sum(Errsum);
Errrel1=Errsum(1)/sum(CC11exp(2:12));
Errrel2=Errsum(2)/sum(CC12exp(2:12));
Errrel=Errrel1+Errrel2;

```

A.3.4. Arxiu CalculerrorExpNaCl3Na.m

```

function [Err]=CalculerrorExpNaCl3Na(D)

[CNa,CNa1exp,CNa3exp]=expNaCl3Na_err(D);
Errors=zeros(11,2);
s=2;
for s=2:12
    Calcerr=sqrt((CNa(s,1)-CNa1exp(s))^2);
    Errors(s-1,1)=Calcerr;
    Calcerr=sqrt((CNa(s,2)-CNa3exp(s))^2);
    Errors(s-1,2)=Calcerr;
end
Errsum=sum(Errors);
Err=sum(Errsum);
Errrel1=Errsum(1)/sum(CNa1exp(2:12));
Errrel2=Errsum(2)/sum(CNa3exp(2:12));
Errrel=Errrel1+Errrel2;

```

A.3.5. Arxiu ExpNaCl3Cl_err.m

```

function [CC1,CC11exp,CC12exp]=expNaCl3Cl_err(Constantsdifusio)
global F R T A zCl I Rea Lma V k Nacid tspanoriginal s

%Reservoris: 1=Sal; 2=Àcid;

cCl1i=1550.61;%Concentració inicial de clor en el reservori 1 [mol/m3]
cCl2i=359.72;%Concentració inicial de clor en el reservori 1 [mol/m3]

Lma=180e-6; %Gruix de la membrana [m]
zCl=1; %Càrrega de l'ió

F=96485; %Constant de Faraday [C/mol]
R=8.314; %Constant del gasos [J/molK]
T=30+273; %Temperatura [K]
A=64e-4; %Àrea de la membrana [m2]
I=(5/A); %Intensitat [A/m2]
Rea=2e-4; %Resistència [Ohm]
Nacid=3; %Nombre de cel·les

V10=8.6e-4; %Volum inicial en el reservori 1 [m3]
V20=8.6e-4; %Volum inicial en el reservori 2 [m3]

```



```

Vini=[V10, V20];
V=Vini;

K1=-9.4e-9;    %Constant de volum en el reservori 1 [m3/s]
K2=5.5e-9;    %Constant de volum en el reservori 2 [m3/s]
k=[K1,K2];
s=1;
CCl=zeros(12,2);
inicials=[cCl1i,cCl2i];
molmost=0;
for s = 1:11

    options=odeset('RelTol',1e-3, 'AbsTol',1e-3);
    %Càlcul del interval de temps

    tspanoriginal=[ 0, 1440, 2640, 3660, 4800, 6060, 7380, 8580, 9780,
11100, 12300, 13980];
    tfin=(tspanoriginal(s+1)-tspanoriginal(s));
    tspan=[0,tfin];
    [T1, C1] = ode15s(@flux1,tspan,inicials,options);

    %Càlcul del volum extret en les mostres i correcció del volum
    g=1;
    V=Vini;
    for g=1:s
        tfin=(tspanoriginal(g+1)-tspanoriginal(g));
        V=V+k*tfin-50e-6;
    end

    %Es guarden els resultats en una matriu
    if s==1
        CCl(1,:)=C1(1,:);
    end

    CCl(s+1,:)=C1(end,:);
    inicials=(C1(end,:));

    %Càlcul del nombre de mols extret en les mostres
    molmost=0;
    o=1;
    for o=1:s
        molmost=molmost+50e-6*CCl(s+1,1);
    end

end

CCl1exp=[1550.61;1323.87;1233.97;1186.9;1049.67;977.88;793.38;648.57;509.
58;361.96;201.64;0]; %Concentracions de clor en el reservori 1 (valors
experimentals) [mol/m3]
CCl2exp=[359.72;463.73;504.38;663.78;700.34;901.7;1020.76;1172.12;1250.12
;1384.42;1657.47;1797.74]; %Concentracions de clor en el reservori 2
(valors experimentals) [mol/m3]

%Model
function dc = flux1(t,c)
dc=zeros(1,2);

```

```

V1=V(1)+k(1)*t;

Cm1=0.5*(c(1) + c(2));

D0c1=Constantsdifusio(1)*exp(-Constantsdifusio(2)*Cm1);

if t==0
    EfCl=1;
else
    EfCl=F*(V10*cCl1i-molmost-
V1*c(1))/(Nacid*I*A*(tspanoriginal(s)+t));
end

dc = [-3*(A*(-D0c1*(c(2)-c(1))/Lma+
zCl*EfCl*F*Cm1*D0c1*I*Rea/(R*T*Lma))-c(1)*k(1))/V1; ...
3*(A*(-D0c1*(c(2)-c(1))/Lma+
zCl*EfCl*F*Cm1*D0c1*I*Rea/(R*T*Lma))-c(1)*k(1))/V1];

end

end

```

A.3.6. Arxiu ExpNaCl3Na_err.m

```

function [CNa,CNa1exp,CNa3exp]=expNaCl3Na_err(Constantsdifusio)
global F R T A zNa I Rec Lmc V k Nbase tspanoriginal s

%Reservoris: 1=Sal; 3=Base;

cNali=1520.87; %Concentració inicial de sodi en el reservori 1 [mol/m3]
cNa3i=429.99; %Concentració inicial de sodi en el reservori 3 [mol/m3]

Lmc=180e-6; %Gruix de la membrana [m]
zNa=1; %Càrrega de l'ió

F=96485; %Constant de Faraday [C/mol]
R=8.314; %Constant del gasos [J/molK]
T=30+273; %Temperatura [K]
A=64e-4; %Àrea de la membrana [m2]
I=(5/A); %Intensitat [A/m2]
Rec=2.5e-4; %Resistència [Ohm]
Nbase=2; %Nombre de cel·les

V10=8.6e-4; %Volum inicial en el reservori 1 [m3]
V30=8.6e-4; %Volum inicial en el reservori 3 [m3]
Vini=[V10, V30];
V=Vini;

```

```

K1=-9.4e-9;      %Constant de volum en el reservori 1 [m3/s]
K3=1.8e-9;      %Constant de volum en el reservori 1 [m3/s]
k=[K1,K3];
s=1;
CNa=zeros(12,2);
inicials=[cNali,cNa3i];
molmost=0;
for s = 1:11

    options=odeset('RelTol',1e-3, 'AbsTol',1e-3);
    %Càlcul del interval de temps

    tspanoriginal=[ 0, 1440, 2640, 3660, 4800, 6060, 7380, 8580, 9780,
11100, 12300, 13980];
    tfin=(tspanoriginal(s+1)-tspanoriginal(s));
    tspan=[0,tfin];
    [T1, C1] = ode15s(@flux1,tspan,inicials,options);

    %Càlcul del volum extret en les mostres i correcció del volum
    g=1;
    V=Vini;
    for g=1:s
        tfin=(tspanoriginal(g+1)-tspanoriginal(g));
        V=V+k*tfin-50e-6;
    end

    %Es guarden els resultats en una matriu
    if s==1
        CNa(1,:)=C1(1,:);
    end

    CNa(s+1,:)=C1(end,:);
    inicials=(C1(end,:));

    %Càlcul del nombre de mols extret en les mostres
    molmost=0;
    o=1;
    for o=1:s
        molmost=molmost+50e-6*CNa(s+1,1);
    end

end

CNa1exp=[1520.87;1313.74;1232.57;1189.8;1064.36;1001.13;828.37;691.17;554
.50;408.30;242.07;0]; %Concentracions de sodi en el reservori 1 (valors
experimentals) [mol/m3]
CNa3exp=[429.99;543.33;686.60;795.77;917.06;1059.66;1181.29;50.45;2604.43
;1405.52;1474.9;1308.87]; %Concentracions de sodi en el reservori 3
(valors experimentals) [mol/m3]

%Model
function dc = flux1(t,c)
dc=zeros(1,2);

V1=V(1)+k(1)*t;

```

```

Cm2=0.5*(c(1) + c(2));

D0na=Constantsdifusio(1)*exp(-Constantsdifusio(2)*Cm2);

if t==0
    EfNa=1;
else
    EfNa=F*(V10*cNali-molmost-
V1*c(1))/(Nbase*I*A*(tspanoriginal(s)+t));
end

dc = [-2*(A*(-D0na*(c(2)-c(1))/Lmc+
zNa*EfNa*F*Cm2*D0na*I*Rec/(R*T*Lmc))-c(1)*k(1))/V1; ...
2*(A*(-D0na*(c(2)-c(1))/Lmc+
zNa*EfNa*F*Cm2*D0na*I*Rec/(R*T*Lmc))-c(1)*k(1))/V1];

end

end

```

A.3.7. Arxiu ExpNaCl3Cl.m

```

function expNaCl3Cl
global F R T A zCl I Rea Lma D0 tau V k Nacid tspanoriginal s

%Reservoris: 1=Sal; 2=Àcid;

cCl1i=1550.61; %Concentració inicial de clor en el reservori 1 [mol/m3]
cCl2i=359.72; %Concentració inicial de clor en el reservori 2 [mol/m3]

Lma=180e-6; %Gruix de la membrana [m]
zCl=1; %Càrrega de l'ió

F=96485; %Constant de Faraday [C/mol]
R=8.314; %Constant del gasos [J/molK]
T=30+273; %Temperatura [K]
A=64e-4; %Àrea de la membrana [m2]
I=(5/A); %Intensitat [A/m2]
Rea=2e-4; %Resistència [Ohm]
D0=1.937e-10; %Paràmetre coeficient de difusió [m2/s]
tau=7.776e-4; %Paràmetre coeficient de difusió [m3/mol]
Nacid=3; %Nombre de cel·les

V10=8.6e-4; %Volum inicial en el reservori 1 [m3]
V20=8.6e-4; %Volum inicial en el reservori 2 [m3]
Vini=[V10, V20];
V=Vini;

```

```

K1=-9.4e-9;      %Constant de volum en el reservori 1 [m3/s]
K2=5.5e-9;      %Constant de volum en el reservori 2 [m3/s]
k=[K1,K2];
s=1;
CCl=zeros(12,2);
DCl=zeros(12,1);
EfiCl=zeros(12,1);
inicials=[cCl1i,cCl2i];
molmost=0;
for s = 1:11

    options=odeset('RelTol',1e-3, 'AbsTol',1e-3);
    %Càlcul del interval de temps

    tspanoriginal=[ 0, 1440, 2640, 3660, 4800, 6060, 7380, 8580, 9780,
11100, 12300, 13980];
    tfin=(tspanoriginal(s+1)-tspanoriginal(s));
    tspan=[0,tfin];
    [T1, C1] = ode15s(@flux1,tspan,inicials,options);

    %Càlcul del volum extret en les mostres i correcció del volum
    g=1;
    V=Vini;
    for g=1:s
        tfin=(tspanoriginal(g+1)-tspanoriginal(g));
        V=V+k*tfin-50e-6;
    end

    %Es guarden els resultats en una matriu. Es calcula el coeficient de
    difusió i l'eficiència
    if s==1
        CCl(1,:)=C1(1,:);
        CCM1=0.5*(C1(1,1) + C1(2,1));
        Dcl=D0*exp(-tau*CCM1);
        DCl(1)=Dcl;
        EfiCl(1)=1;
    end

    CCM1=0.5*(C1(end,1) + C1(end,2));
    Dcl=D0*exp(-tau*CCM1);
    DCl(s+1)=Dcl;
    Eficl=F*(V10*cCl1i-molmost-
V1*C1(end,1))/(Nacid*I*A*tspanoriginal(s+1));
    EfiCl(s+1)=Eficl;
    CCl(s+1,:)=C1(end,:);
    inicials=(C1(end,:));

    %Càlcul del nombre de mols extret en les mostres
    molmost=0;
    o=1;
    for o=1:s
        molmost=molmost+50e-6*CCl(s+1,1);
    end

end

```

```

CCl1exp=[1550.61;1323.87;1233.97;1186.9;1049.67;977.88;793.38;648.57;509.
58;361.96;201.64;0]; %Concentracions de clor en el reservori 1 (valors
experimentals) [mol/m3]
CCl2exp=[359.72;463.73;504.38;663.78;700.34;901.7;1020.76;1172.12;1250.12
;1384.42;1657.47;1797.74]; %Concentracions de clor en el reservori 2
(valors experimentals) [mol/m3]

plot(tspanoriginal,CCl,'-',tspanoriginal,[CCl1exp,CCl2exp],'.')
legend('salt','acid','salt (experiment)','acid (experiment)')
title('Concentració de clor')
xlabel('temps(s)')
ylabel('Concentració (mols/m^{3})')

%Model
function dc = flux1(t,c)
dc=zeros(1,2);

V1=V(1)+k(1)*t;

Cm1=0.5*(c(1) + c(2));

D0cl=D0*exp(-tau*Cm1);

if t==0
    EfCl=1;
else
    EfCl=F*(V10*cCl1i-molmost-
V1*c(1))/(Nacid*I*A*(tspanoriginal(s)+t));
end

dc = [-3*(A*(-D0cl*(c(2)-c(1))/Lma+
zCl*EfCl*F*Cm1*D0cl*I*Rea/(R*T*Lma))-c(1)*k(1))/V1; ...
3*(A*(-D0cl*(c(2)-c(1))/Lma+
zCl*EfCl*F*Cm1*D0cl*I*Rea/(R*T*Lma))-c(1)*k(1))/V1];

end

end

```

A.3.8. Arxiu ExpNaCl3Na.m

```

function expNaCl3Na
global F R T A zNa I Rec Lmc D0 tau V k Nbase tspanoriginal s

%Reservoris: 1=Sal; 3=Base;

cNali=1520.87; %Concentració inicial de sodi en el reservori 1 [mol/m3]
cNa3i=429.99; %Concentració inicial de sodi en el reservori 3 [mol/m3]

```

```

Lmc=180e-6;      %Gruix de la membrana [m]
zNa=1;          %Càrrega de l'ió

F=96485;        %Constant de Faraday [C/mol]
R=8.314;        %Constant del gasos [J/molK]
T=30+273;       %Temperatura [K]
A=64e-4;        %Àrea de la membrana [m2]
I=(5/A);        %Intensitat [A/m2]
Rec=2.5e-4;     %Resistència [Ohm]
D0=2.008e-10;   %Paràmetre coeficient de difusió [m2/s]
tau=7.868e-4;   %Paràmetre coeficient de difusió [m3/mol]
Nbase=2;        %Nombre de cel·les

V10=8.6e-4;     %Volum inicial en el reservori 1 [m3]
V30=8.6e-4;     %Volum inicial en el reservori 3 [m3]
Vini=[V10, V30];
V=Vini;

K1=-9.4e-9;     %Constant de volum en el reservori 1 [m3/s]
K3=1.8e-9;     %Constant de volum en el reservori 3 [m3/s]
k=[K1,K3];
s=1;
CNa=zeros(12,2);
DNa=zeros(12,1);
EfiNa=zeros(12,1);
inicials=[cNali,cNa3i];
molmost=0;
for s = 1:11

    options=odeset('RelTol',1e-3, 'AbsTol',1e-3);
    %Càlcul del interval de temps

    tspanoriginal=[ 0, 1440, 2640, 3660, 4800, 6060, 7380, 8580, 9780,
11100, 12300, 13980];
    tfin=(tspanoriginal(s+1)-tspanoriginal(s));
    tspan=[0,tfin];
    [T1, C1] = ode15s(@flux1,tspan,inicials,options);

    %Càlcul del volum extret en les mostres i correcció del volum
    g=1;
    V=Vini;
    for g=1:s
        tfin=(tspanoriginal(g+1)-tspanoriginal(g));
        V=V+k*tfin-50e-6;
    end

    %Es guarden els resultats en una matriu. Es calcula el coeficient de
    difusió i l'eficiència
    if s==1
        CNa(1,:)=C1(1,:);
        CCM2=0.5*(C1(1,1) + C1(2,1));
        Dna=D0*exp(-tau*CCM2);
        DNa(1)=Dna;
        EfiNa(1)=1;
    end
end

```

```

    CCM2=0.5*(C1(end,1) + C1(end,2));
    Dna=D0*exp(-tau*CCM2);
    DNa(s+1)=Dna;
    EfiNa=F*(V10*cNali-molmost-
V1*C1(end,1))/(Nbase*I*A*tspanoriginal(s+1));
    EfiNa(s+1)=EfiNa;
    CNa(s+1,:)=C1(end,:);
    initials=(C1(end,:));

%Càlcul del nombre de mols extret en les mostres
molmost=0;
o=1;
for o=1:s
    molmost=molmost+50e-6*CNa(s+1,1);
end

end

CNa1exp=[1520.87;1313.74;1232.57;1189.8;1064.36;1001.13;828.37;691.17;554
.50;408.30;242.07;0]; %Concentracions de sodi en el reservori 1 (valors
experimentals) [mol/m3]
CNa3exp=[429.99;543.33;686.60;795.77;917.06;1059.66;1181.29;50.45;2604.43
;1405.52;1474.9;1308.87]; %Concentracions de sodi en el reservori 3
(valors experimentals) [mol/m3]

plot(tspanoriginal,CNa,'-',tspanoriginal,[CNa1exp,CNa3exp],'.')
legend('salt','base','salt (experiment)','base (experiment)')
title('Concentració de sodi')
xlabel('temps(s)')
ylabel('Concentració (mols/m^{3})')

%Model
function dc = flux1(t,c)
    dc=zeros(1,2);

    V1=V(1)+k(1)*t;

    Cm2=0.5*(c(1) + c(2));

    D0na=D0*exp(-tau*Cm2);

    if t==0
        EfiNa=1;
    else
        EfiNa=F*(V10*cNali-molmost-
V1*c(1))/(Nbase*I*A*(tspanoriginal(s)+t));
    end

    dc = [-2*(A*(-D0na*(c(2)-c(1)))/Lmc+
zNa*EfiNa*F*Cm2*D0na*I*Rec/(R*T*Lmc))-c(1)*k(1))/V1; ...
        2*(A*(-D0na*(c(2)-c(1)))/Lmc+
zNa*EfiNa*F*Cm2*D0na*I*Rec/(R*T*Lmc))-c(1)*k(1))/V1];

```



```
end  
  
end
```

A.4. Experiment Na_2SO_4 a concentració constant

A.4.1. Arxiu OptimitzarDExpNa2SO4SO4.m

```
function OptimitzarDExpNa2SO4SO4  
  
Constantsdifusio=[5e-10,5e-4];  
Dopt=fminsearch(@CalculerrorExpNa2SO4SO4,Constantsdifusio)
```

A.4.2. Arxiu OptimitzarDExpNa2SO4Na.m

```
function OptimitzarDExpNa2SO4Na  
  
Constantsdifusio=[5e-10,5e-4];  
Dopt=fminsearch(@CalculerrorExpNa2SO4Na,Constantsdifusio)
```

A.4.3. Arxiu CalculerrorExpNa2SO4SO4.m

```
function [Err]=CalculerrorExpNa2SO4SO4(D)  
  
[CSO4,CSO42exp]=expNa2SO4SO4_err(D);  
Errors=zeros(8,1);  
s=2;  
for s=2:9  
    Calcerr=sqrt((CSO4(s,2)-CSO42exp(s))^2);  
    Errors(s-1)=Calcerr;  
end  
Err=sum(Errors);  
Errrel=sum(Errors)/sum(CSO42exp(2:9));
```

A.4.4. Arxiu CalculerrorExpNa2SO4Na.m

```
function [Err]=CalculerrorExpNa2SO4Na(D)  
  
[CNa,CNa3exp]=expNa2SO4Na_err(D);  
Errors=zeros(8,1);  
s=2;  
for s=2:9  
    Calcerr=sqrt((CNa(s,2)-CNa3exp(s))^2);  
    Errors(s-1)=Calcerr;  
end  
Err=sum(Errors);  
Errrel=sum(Errors)/sum(CNa3exp(2:9));
```

A.4.5. Arxiu ExpNa2SO4SO4_err.m

```

function [CSO4,CSO42exp]=expNa2SO4SO4_err(Constantsdifusio)
global F R T A zSO4 I Rea Lma V k Nacid tspanoriginal s

%Reservoris: 1=Sal; 2=Àcid;

cSO41i=492.95; %Concentració inicial de sulfat en el reservori 1 [mol/m3]
cSO42i=72.82; %Concentració inicial de sulfat en el reservori 2 [mol/m3]

Lma=180e-6; %Gruix de la membrana [m]
zSO4=2; %Càrrega de l'ió

F=96485; %Constant de Faraday [C/mol]
R=8.314; %Constant del gasos [J/molK]
T=30+273; %Temperatura [K]
A=64e-4; %Àrea de la membrana [m2]
I=(5/A); %Intensitat [A/m2]
Rea=2e-4; %Resistència [Ohm]
Nacid=3; %Nombre de cel·les

V10=0.075; %Volum inicial en el reservori 1 [m3]
V20=0.0015; %Volum inicial en el reservori 2 [m3]
Vini=[V10, V20];
V=Vini;

K1=0; %Constant de volum en el reservori 1 [m3/s]
K2=1.1e-9; %Constant de volum en el reservori 2 [m3/s]
k=[K1,K2];
s=1;
CSO4=zeros(9,2);
inicials=[cSO41i,cSO42i];
molmost=0;
for s = 1:8

    options=odeset('RelTol',1e-3, 'AbsTol',1e-3);
    %Càlcul del interval de temps

    tspanoriginal=[ 0, 6000, 12000, 16320, 22800, 28920, 34320, 41520,
46980];
    tfin=(tspanoriginal(s+1)-tspanoriginal(s));
    tspan=[0,tfin];
    [T1, C1] = ode15s(@flux1,tspan,inicials,options);

    %Càlcul del volum extret en les mostres i correcció del volum
    g=1;
    V=Vini;
    for g=1:s
        tfin=(tspanoriginal(g+1)-tspanoriginal(g));
        V=V+k*tfin-100e-6;
    end
end

```

```

%Es guarden els resultats en una matriu
if s==1
    CSO4(1,:) = C1(1,:);
end

CSO4(s+1,:) = C1(end,:);
inicials = (C1(end,:));

%Càlcul del nombre de mols extret en les mostres
molmost = 0;
o = 1;
for o = 1:s
    molmost = molmost + 100e-6 * CSO4(s+1,2);
end

end

CSO42exp = [72.82; 131.98; 188.21; 224.89; 225.17; 332.57; 391.57; 439.78; 504.97];
%Concentracions de sulfat en el reservori 2 (valors experimentals)
[mol/m3]

%Model
function dc = flux1(t,c)
    dc = zeros(1,2);

    V2 = V(2) + k(2) * t;

    Cm1 = 0.5 * (c(1) + c(2));

    D0so4 = Constantsdifusio(1) * exp(-Constantsdifusio(2) * Cm1);

    if t == 0
        EfSO4 = 1;
    else
        EfSO4 = -F * (V20 * cSO42i - molmost -
        V2 * c(2)) / (Nacid * I * A * (tspanoriginal(s) + t));
    end

    dc = [-(0); ...
        3 * (A * (-D0so4 * (c(2) - c(1)) / Lma +
        zSO4 * EfSO4 * F * Cm1 * D0so4 * I * Rea / (R * T * Lma)) - c(1) * k(1)) / V2];

    end

end

```

A.4.6. Arxiu ExpNa2SO4Na_err.m

```

function [CNa, CNa3exp] = expNa2SO4Na_err(Constantsdifusio)
global F R T A zNa I Rec Lmc V k Nbase tspanoriginal s

%Reservoris: 1=Sal; 3=Base;

```

```

cNali=985.91; %Concentració inicial de sodi en el reservori 1 [mol/m3]
cNa3i=90.2; %Concentració inicial de sodi en el reservori 3 [mol/m3]

Lmc=180e-6; %Gruix de la membrana [m]
zNa=1; %Càrrega de l'ió

F=96485; %Constant de Faraday [C/mol]
R=8.314; %Constant del gasos [J/molK]
T=30+273; %Temperatura [K]
A=64e-4; %Àrea de la membrana [m2]
I=(5/A); %Intensitat [A/m2]
Rec=2.5e-4; %Resistència [Ohm]
Nbase=2; %Nombre de cel·les

V10=0.075; %Volum inicial en el reservori 1 [m3]
V30=0.0015; %Volum inicial en el reservori 3 [m3]
Vini=[V10, V30];
V=Vini;

K1=0; %Constant de volum en el reservori 1 [m3/s]
K3=7.2e-9; %Constant de volum en el reservori 3 [m3/s]
k=[K1,K3];
s=1;
CNa=zeros(9,2);
inicials=[cNali,cNa3i];
molmost=0;
for s = 1:8

    options=odeset('RelTol',1e-3, 'AbsTol',1e-3);
    %Càlcul del interval de temps

    tspanoriginal=[ 0, 6000, 12000, 16320, 22800, 28920, 34320, 41520,
46980];
    tfin=(tspanoriginal(s+1)-tspanoriginal(s));
    tspan=[0,tfin];
    [T1, C1] = ode15s(@flux1,tspan,inicials,options);

    %Càlcul del volum extret en les mostres i correcció del volum
    g=1;
    V=Vini;
    for g=1:s
        tfin=(tspanoriginal(g+1)-tspanoriginal(g));
        V=V+k*tfin-100e-6;
    end

    %Es guarden els resultats en una matriu
    if s==1
        CNa(1,:)=C1(1,:);
    end

    CNa(s+1,:)=C1(end,:);
    inicials=(C1(end,:));

```

```

%Càlcul del nombre de mols extret en les mostres
    molmost=0;
    o=1;
    for o=1:s
        molmost=molmost+100e-6*CNa(s+1,2);
    end

end

CNa3exp=[90.20;373.09;628.47;791.13;960.21;1080.15;1173.44;1276.87;1298.04]; %Concentracions de sodi en el reservori 3 (valors experimentals)
[mol/m3]

%Model
function dc = flux1(t,c)
    dc=zeros(1,2);

    V3=V(2)+k(2)*t;

    Cm2=0.5*(c(1) + c(2));

    D0na=Constantsdifusio(1)*exp(-Constantsdifusio(2)*Cm2);

    if t==0
        EfNa=1;
    else
        EfNa=-F*(V30*cNa3i-molmost-V3*c(2))/(Nbase*I*A*(tspanoriginal(s)+t));
    end

    dc = [-(0); ...
          2*(A*(-D0na*(c(2)-c(1)))/Lmc+
          zNa*EfNa*F*Cm2*D0na*I*Rec/(R*T*Lmc))-c(1)*k(1)]/V3;

end

end

```

A.4.7. Arxiu ExpNa2SO4SO4.m

```

function expNa2SO4SO4
global F R T A zSO4 I Rea Lma D0 tau V k Nacid tspanoriginal s

%Reservoris: 1=Sal; 2=Àcid;

cSO41i=492.95; %Concentració inicial de sulfat en el reservori 1
[mol/m3]
cSO42i=72.82; %Concentració inicial de sulfat en el reservori 2
[mol/m3]

Lma=180e-6; %Gruix de la membrana [m]
zSO4=2; %Càrrega de l'ió

```

```

F=96485;           %Constant de Faraday [C/mol]
R=8.314;           %Constant del gasos [J/molK]
T=30+273;         %Temperatura [K]
A=64e-4;          %Àrea de la membrana [m2]
I=(5/A);          %Intensitat [A/m2]
Rea=2e-4;         %Resistència [Ohm]
D0=2.883e-10;     %Paràmetre coeficient de difusió [m2/s]
tau=1.506e-3;     %Paràmetre coeficient de difusió [m3/mol]
Nacid=3;          %Nombre de cel·les

V10=0.075;        %Volum inicial en el reservori 1 [m3]
V20=0.0015;       %Volum inicial en el reservori 2 [m3]
Vini=[V10, V20];
V=Vini;

K1=0;             %Constant de volum en el reservori 1 [m3/s]
K2=1.1e-9;        %Constant de volum en el reservori 2 [m3/s]
k=[K1,K2];
s=1;
CSO4=zeros(9,2);
DSO4=zeros(9,1);
EfiSO4=zeros(9,1);
inicials=[cSO41i,cSO42i];
molmost=0;
for s = 1:8

    options=odeset('RelTol',1e-3, 'AbsTol',1e-3);
    %Càlcul del interval de temps

    tspanoriginal=[ 0, 6000, 12000, 16320, 22800, 28920, 34320, 41520,
46980];
    tfin=(tspanoriginal(s+1)-tspanoriginal(s));
    tspan=[0,tfin];
    [T1, C1] = ode15s(@flux1,tspan,inicials,options);

    %Càlcul del volum extret en les mostres i correcció del volum
    g=1;
    V=Vini;
    for g=1:s
        tfin=(tspanoriginal(g+1)-tspanoriginal(g));
        V=V+k*tfin-100e-6;
    end

    %Es guarden els resultats en una matriu. Es calcula el coeficient de
    difusió i l'eficiència
    if s==1
        CSO4(1,:)=C1(1,:);
        CCM1=0.5*(C1(1,1) + C1(2,1));
        Dso4=D0*exp(-tau*CCM1);
        DSO4(1)=Dso4;
        EfiSO4(1)=1;
    end
end

```

```

end

CCM1=0.5*(C1(end,1) + C1(end,2));
Dso4=D0*exp(-tau*CCM1);
DSO4(s+1)=Dso4;
Efiso4=-F*(V20*cSO42i-molmost-
V2*C1(end,2))/(Nacid*I*A*(tspanoriginal(s+1)));
EfISO4(s+1)=Efiso4;
CSO4(s+1,:)=C1(end,:);
inicials=(C1(end,:));

%Càlcul del nombre de mols extret en les mostres
molmost=0;
o=1;
for o=1:s
molmost=molmost+100e-6*CSO4(s+1,2);
end

end

CSO41exp=[456.42;516.58;511.07;510.71;490.6;523.93;513.04;538.18;538.41];
%Concentracions de sulfat en el reservori 1 (valors experimentals)
[mol/m3]
CSO42exp=[72.82;131.98;188.21;224.89;225.17;332.57;391.57;439.78;504.97];
%Concentracions de sulfat en el reservori 1 (valors experimentals)
[mol/m3]

plot(tspanoriginal,CSO4,'-',tspanoriginal,[CSO41exp,CSO42exp],'.')
legend('salt','acid','salt (experiment)','acid (experiment)')
title('Concentració de SO4')
xlabel('temps(s)')
ylabel('Concentració (mols/m^{3})')

%Model
function dc = flux1(t,c)
dc=zeros(1,2);

V2=V(2)+k(2)*t;

Cm1=0.5*(c(1) + c(2));

D0so4=D0*exp(-tau*Cm1);

if t==0
EfSO4=1;
else
EfSO4=-F*(V20*cSO42i-molmost-
V2*c(2))/(Nacid*I*A*(tspanoriginal(s)+t));
end

dc = [-(0); ...
3*(A*(-D0so4*(c(2)-c(1))/Lma+
zSO4*EfSO4*F*Cm1*D0so4*I*Rea/(R*T*Lma))-c(1)*k(1))/V2];

end

```

```
end
```

A.4.8. Arxiu ExpNa2SO4Na.m

```
function expNa2SO4Na
global F R T A zNa I Rec Lmc D0 tau V k Nbase tspanoriginal s

%Reservoris: 1=Sal; 3=Base;

cNali=985;      %Concentració inicial de sodi en el reservori 1 [mol/m3]
cNa3i=90.2;    %Concentració inicial de sodi en el reservori 3 [mol/m3]

Lmc=180e-6;    %Gruix de la membrana [m]
zNa=1;        %Càrrega de l'ió

F=96485;      %Constant de Faraday [C/mol]
R=8.314;      %Constant del gasos [J/molK]
T=30+273;     %Temperatura [K]
A=64e-4;      %Àrea de la membrana [m2]
I=(5/A);      %Intensitat [A/m2]
Rec=2.5e-4;   %Resistència [Ohm]
D0=1.3087e-9; %Paràmetre coeficient de difusió [m2/s]
tau=2.74e-3;  %Paràmetre coeficient de difusió [m3/mol]
Nbase=2;      %Nombre de cel·les

V10=0.075;    %Volum inicial en el reservori 1 [m3]
V30=0.0015;   %Volum inicial en el reservori 3 [m3]
Vini=[V10, V30];
V=Vini;

K1=0;         %Constant de volum en el reservori 1 [m3/s]
K3=7.2e-9;    %Constant de volum en el reservori 3 [m3/s]
k=[K1,K3];
s=1;
CNa=zeros(9,2);
DNa=zeros(9,1);
EfiNa=zeros(9,1);
inicials=[cNali,cNa3i];
molmost=0;
for s = 1:8

    options=odeset('RelTol',1e-3, 'AbsTol',1e-3);
    %Càlcul del interval de temps

    tspanoriginal=[ 0, 6000, 12000, 16320, 22800, 28920, 34320, 41520,
46980];
    tfin=(tspanoriginal(s+1)-tspanoriginal(s));
    tspan=[0,tfin];
    [T1, C1] = ode15s(@flux1,tspan,inicials,options);
```



```

%Càlcul del volum extret en les mostres i correcció del volum
g=1;
V=Vini;
for g=1:s
tfin=(tspanoriginal(g+1)-tspanoriginal(g));
V=V+k*tfin-100e-6;
end

%Es guarden els resultats en una matriu. Es calcula el coeficient de
difusió i l'eficiència
if s==1
    CNa(1,:)=C1(1,:);
    CCM2=0.5*(C1(1,1) + C1(2,1));
    Dna=D0*exp(-tau*CCM2);
    DNa(1)=Dna;
    EfiNa(1)=1;
end

    CCM2=0.5*(C1(end,1) + C1(end,2));
    Dna=D0*exp(-tau*CCM2);
    DNa(s+1)=Dna;
    EfiNa=-F*(V30*cNa3i-molmost-
V3*C1(end,2))/(Nbase*I*A*(tspanoriginal(s+1)));
    EfiNa(s+1)=EfiNa;
    CNa(s+1,:)=C1(end,:);
    inicials=(C1(end,:));

%Càlcul del nombre de mols extret en les mostres
molmost=0;
o=1;
for o=1:s
molmost=molmost+100e-6*CNa(s+1,2);
end

end

CNa1exp=[937.23;1046.09;1028.77;1026.53;1048.07;1053.44;1030.04;1080.88;1
080.88]; %Concentracions de sodi en el reservori 1 (valors experimentals)
[mol/m3]
CNa3exp=[90.20;373.09;628.47;791.13;960.21;1080.15;1173.44;1276.87;1298.0
4]; %Concentracions de sodi en el reservori 3 (valors experimentals)
[mol/m3]

plot(tspanoriginal, CNa, '-',tspanoriginal,[CNa1exp,CNa3exp],'.')
legend('salt','base','base (experiment)','salt (experiment)')
title('Concentració de sodi')
xlabel('temps(s)')
ylabel('Concentració (mols/m^{3})')

%Model
function dc = flux1(t,c)
dc=zeros(1,2);

V3=V(2)+k(2)*t;

```

```

Cm2=0.5*(c(1) + c(2));

D0na=D0*exp(-tau*Cm2);

if t==0
    EfNa=1;
else
    EfNa=-F*(V30*cNa3i-molmost-
V3*c(2))/(Nbase*I*A*(tspanoriginal(s)+t));
end

dc = [- (0); ...
      2*(A*(-D0na*(c(2)-c(1))/Lmc+
zNa*EfNa*F*Cm2*D0na*I*Rec/(R*T*Lmc))-c(1)*k(1))/V3];

end

end

```

A.5. Experiment Na₂SO₄ a concentració variable

A.5.1. Arxiu OptimitzarDExpNa2SO4VSO4.m

```

function OptimitzarDExpNa2SO4VSO4

Constantsdifusio=[5e-10,5e-4];
Dopt=fminsearch(@CalculerrorExpNa2SO4VSO4,Constantsdifusio)

```

A.5.2. Arxiu OptimitzarDExpNa2SO4VNa.m

```

function OptimitzarDExpNa2SO4VNa

Constantsdifusio=[5e-10,5e-4];
Dopt=fminsearch(@CalculerrorExpNa2SO4VNa,Constantsdifusio)

```

A.5.3. Arxiu CalculerrorExpNa2SO4VSO4.m

```

function [Err]=CalculerrorExpNa2SO4VSO4(D)

[CSO4,CSO42exp]=expNa2SO4VSO4_err(D);
Errors=zeros(8,1);
s=2;
for s=2:9
    Calcerr=sqrt((CSO4(s,2)-CSO42exp(s))^2);
    Errors(s-1)=Calcerr;
end
Err=sum(Errors);
Errrel=sum(Errors)/sum(CSO42exp(2:9));

```

A.5.4. Arxiu CalculerrorExpNa2SO4VNa.m

```
function [Err]=CalculerrorExpNa2SO4VNa(D)

[CNa,CNa3exp]=expNa2SO4VNa_err(D);
Errors=zeros(8,1);
s=2;
for s=2:9
    Calcerr=sqrt((CNa(s,2)-CNa3exp(s))^2);
    Errors(s-1)=Calcerr;
end
Err=sum(Errors);
Errrel=sum(Errors)/sum(CNa3exp(2:9));
```

A.5.5. Arxiu ExpNa2SO4VSO4_err.m

```
function [CSO4,CSO42exp]=expNa2SO4VSO4_err(Constantsdifusio)
global F R T A zSO4 I Rea Lma V k Nacid tspanoriginal s

%Reservoris: 1=Sal; 2=Àcid;

cSO41i=492.95; %Concentració inicial de sulfat en el reservori 1 [mol/m3]
cSO42i=72.82; %Concentració inicial de sulfat en el reservori 2 [mol/m3]

Lma=180e-6; %Gruix de la membrana [m]
zSO4=2; %Càrrega de l'ió

F=96485; %Constant de Faraday [C/mol]
R=8.314; %Constant del gasos [J/molK]
T=30+273; %Temperatura [K]
A=64e-4; %Àrea de la membrana [m2]
I=(5/A); %Intensitat [A/m2]
Rea=2e-4; %Resistència [Ohm]
Nacid=3; %Nombre de cel·les

V10=0.075; %Volum inicial en el reservori 1 [m3]
V20=0.0015; %Volum inicial en el reservori 2 [m3]
Vini=[V10, V20];
V=Vini;

K1=0; %Constant de volum en el reservori 1 [m3/s]
K2=1.1e-9; %Constant de volum en el reservori 2 [m3/s]
k=[K1,K2];
s=1;
CSO4=zeros(9,2);
inicials=[cSO41i,cSO42i];
molmost=0;
molmosts=0;
for s = 1:8

    options=odeset('RelTol',1e-3, 'AbsTol',1e-3);
    %Càlcul del interval de temps
```

```

    tspanoriginal=[ 0, 6000, 12000, 16320, 22800, 28920, 34320, 41520,
46980];
    tfin=(tspanoriginal(s+1)-tspanoriginal(s));
    tspan=[0,tfin];
    [T1, C1] = ode15s(@flux1,tspan,inicials,options);

%Càlcul del volum extret en les mostres i correcció del volum
g=1;
V=Vini;
for g=1:s
    tfin=(tspanoriginal(g+1)-tspanoriginal(g));
    V=V+k*tfin-100e-6;
end

%Es guarden els resultats en una matriu
if s==1
    CSO4(1,:)=C1(1,:);
end

    CSO4(s+1,:)=C1(end,:);
    inicials=(C1(end,:));

%Càlcul del nombre de mols extret en les mostres
molmost=0;
molmosts=0;
o=1;
for o=1:s
    molmost=molmost+100e-6*CSO4(s+1,2);
    molmosts=molmosts+100e-6*CSO4(s+1,1);
end

end

CSO42exp=[72.82;131.98;188.21;224.89;225.17;332.57;391.57;439.78;504.97];
%Concentracions de sulfat en el reservori 2 (valors experimentals)
[mol/m3]

%Model
function dc = flux1(t,c)
    dc=zeros(1,2);

    V2=V(2)+k(2)*t;
    V1=V(1)+k(1)*t;

    Cm1=0.5*(c(1) + c(2));

    D0so4=Constantsdifusio(1)*exp(-Constantsdifusio(2)*Cm1);

    if t==0
        EfSO4=1;
        EfSO4s=1;
    else

```

```

EfsO4=-F*(V20*cSO42i-molmost-
V2*c(2))/(Nacid*I*A*(tspanoriginal(s)+t));
EfsO4s=F*(V10*cSO41i-molmosts-
V1*c(1))/(Nacid*I*A*(tspanoriginal(s)+t));
end

dc = [-(3*(A*(-D0so4*(c(2)-c(1))/Lma+
zSO4*EfsO4s*F*Cm1*D0so4*I*Rea/(R*T*Lma))-c(1)*k(1))/V1); ...
3*(A*(-D0so4*(c(2)-c(1))/Lma+
zSO4*EfsO4*F*Cm1*D0so4*I*Rea/(R*T*Lma))-c(1)*k(1))/V2];

end

end

```

A.5.6. Arxiu ExpNa2SO4VNa_err.m

```

function [CNa,CNa3exp]=expNa2SO4VNa_err(Constantsdifusio)
global F R T A zNa I Rec Lmc V k Nbase tspanoriginal s

%Reservoris: 1=Sal; 3=Base;

cNali=985.91; %Concentració inicial de sodi en el reservori 1 [mol/m3]
cNa3i=90.2; %Concentració inicial de sodi en el reservori 3 [mol/m3]

Lmc=180e-6; %Gruix de la membrana [m]
zNa=1; %Càrrega de l'ió

F=96485; %Constant de Faraday [C/mol]
R=8.314; %Constant del gasos [J/molK]
T=30+273; %Temperatura [K]
A=64e-4; %Àrea de la membrana [m2]
I=(5/A); %Intensitat [A/m2]
Rec=2.5e-4; %Resistència [Ohm]
Nbase=2; %Nombre de cel·les

V10=0.075; %Volum inicial en el reservori 1 [m3]
V30=0.0015; %Volum inicial en el reservori 3 [m3]
Vini=[V10, V30];
V=Vini;

K1=0; %Constant de volum en el reservori 1 [m3/s]
K3=7.2e-9; %Constant de volum en el reservori 3 [m3/s]
k=[K1,K3];
s=1;
CNa=zeros(9,2);
inicials=[cNali,cNa3i];
molmost=0;
molmosts=0;
for s = 1:8

options=odeset('RelTol',1e-3, 'AbsTol',1e-3);
%Càlcul del interval de temps

```

```

    tspanoriginal=[ 0, 6000, 12000, 16320, 22800, 28920, 34320, 41520,
46980];
    tfin=(tspanoriginal(s+1)-tspanoriginal(s));
    tspan=[0,tfin];
    [T1, C1] = ode15s(@flux1,tspan,inicials,options);

%Càlcul del volum extret en les mostres i correcció del volum
g=1;
V=Vini;
for g=1:s
    tfin=(tspanoriginal(g+1)-tspanoriginal(g));
    V=V+k*tfin-100e-6;
end

%Es guarden els resultats en una matriu
if s==1
    CNa(1,:)=C1(1,:);
end

CNa(s+1,:)=C1(end,:);
inicials=(C1(end,:));

%Càlcul del nombre de mols extret en les mostres
molmost=0;
molmosts=0;
o=1;
for o=1:s
    molmost=molmost+100e-6*CNa(s+1,2);
    molmosts=molmosts+100e-6*CNa(s+1,1);
end

end

CNa3exp=[90.20;373.09;628.47;791.13;960.21;1080.15;1173.44;1276.87;1298.0
4]; %Concentracions de sodi en el reservori 3 (valors experimentals)
[mol/m3]

%Model
function dc = flux1(t,c)
    dc=zeros(1,2);

    V3=V(2)+k(2)*t;
    V1=V(1)+k(1)*t;

    Cm2=0.5*(c(1) + c(2));

    D0na=Constantsdifusio(1)*exp(-Constantsdifusio(2)*Cm2);

    if t==0
        EfNa=1;

```

```

        EfNas=1;
    else
        EfNa=-F*(V30*cNa3i-molmost-
V3*c(2))/(Nbase*I*A*(tspanoriginal(s)+t));
        EfNas=F*(V10*cNali-molmosts-
V1*c(1))/(Nbase*I*A*(tspanoriginal(s)+t));
    end

    dc = [-(2*(A*(-D0na*(c(2)-c(1))/Lmc+
zNa*EfNas*F*cm2*D0na*I*Rec/(R*T*Lmc))-c(1)*k(1))/V1); ...
        2*(A*(-D0na*(c(2)-c(1))/Lmc+
zNa*EfNa*F*cm2*D0na*I*Rec/(R*T*Lmc))-c(1)*k(1))/V3];

    end

end

```

A.5.7. Arxiu ExpNa2SO4VSO4.m

```

function expNa2SO4VSO4
global F R T A zSO4 I Rea Lma D0 tau V k Nacid tspanoriginal s

%Reservoris: 1=Sal; 2=Àcid;

cSO41i=492.95;    %Concentració inicial de sulfat en el reservori 1
[mol/m3]
cSO42i=72.82;    %Concentració inicial de sulfat en el reservori 2
[mol/m3]

Lma=180e-6;      %Gruix de la membrana [m]
zSO4=2;          %Càrrega de l'ió

F=96485;         %Constant de Faraday [C/mol]
R=8.314;         %Constant del gasos [J/molK]
T=30+273;       %Temperatura [K]
A=64e-4;         %Àrea de la membrana [m2]
I=(5/A);        %Intensitat [A/m2]
Rea=2e-4;       %Resistència [Ohm]
D0=2.830e-10;   %Paràmetre coeficient de difusió [m2/s]
tau=1.441e-3;   %Paràmetre coeficient de difusió [m3/mol]
Nacid=3;        %Nombre de cel·les

V10=0.075;      %Volum inicial en el reservori 1 [m3]
V20=0.0015;     %Volum inicial en el reservori 2 [m3]
Vini=[V10, V20];
V=Vini;

K1=0;           %Constant de volum en el reservori 1 [m3/s]
K2=1.1e-9;     %Constant de volum en el reservori 2 [m3/s]
k=[K1, K2];
s=1;
CSO4=zeros(9,2);
DSO4=zeros(9,1);
EfiSO4=zeros(9,2);

```

```

inicials=[cSO41i,cSO42i];
molmost=0;
molmosts=0;
for s = 1:8

    options=odeset('RelTol',1e-3, 'AbsTol',1e-3);
    %Càlcul del interval de temps

    tspanoriginal=[ 0, 6000, 12000, 16320, 22800, 28920, 34320, 41520,
46980];
    tfin=(tspanoriginal(s+1)-tspanoriginal(s));
    tspan=[0,tfin];
    [T1, C1] = ode15s(@flux1,tspan,inicials,options);

    %Càlcul del volum extret en les mostres i correcció del volum
    g=1;
    V=Vini;
    for g=1:s
        tfin=(tspanoriginal(g+1)-tspanoriginal(g));
        V=V+k*tfin-100e-6;
    end

    %Es guarden els resultats en una matriu. Es calcula el coeficient de
    difusió i l'eficiència
    if s==1
        CSO4(1,:)=C1(1,:);
        CCM1=0.5*(C1(1,1) + C1(2,1));
        Dso4=D0*exp(-tau*CCM1);
        DSO4(1)=Dso4;
        EfiSO4(1,1)=1;
        EfiSO4(1,2)=1;
    end

    CCM1=0.5*(C1(end,1) + C1(end,2));
    Dso4=D0*exp(-tau*CCM1);
    DSO4(s+1)=Dso4;
    EfiSO4=-F*(V20*cSO42i-molmost-
V2*C1(end,2))/(Nacid*I*A*(tspanoriginal(s+1)));
    EfiSO4s=F*(V10*cSO41i-molmosts-
V1*C1(end,1))/(Nacid*I*A*(tspanoriginal(s+1)));
    EfiSO4(s+1,1)=EfiSO4s;
    EfiSO4(s+1,2)=EfiSO4;
    CSO4(s+1,:)=C1(end,:);
    inicials=(C1(end,:));

    %Càlcul del nombre de mols extret en les mostres
    molmost=0;
    molmosts=0;
    o=1;
    for o=1:s
        molmost=molmost+100e-6*CSO4(s+1,2);
        molmosts=molmosts+100e-6*CSO4(s+1,1);
    end

```



```

end

CSO41exp=[456.42;516.58;511.07;510.71;490.6;523.93;513.04;538.18;538.41];
%Concentracions de sulfat en el reservori 1 (valors experimentals)
[mol/m3]
CSO42exp=[72.82;131.98;188.21;224.89;225.17;332.57;391.57;439.78;504.97];
%Concentracions de sulfat en el reservori 1 (valors experimentals)
[mol/m3]

plot(tspanoriginal,CSO4,'-',tspanoriginal,[CSO41exp,CSO42exp],'.')
legend('salt','acid','salt (experiment)','acid (experiment)')
title('Concentració de SO4')
xlabel('temps(s)')
ylabel('Concentració (mols/m^{3})')

%Model
function dc = flux1(t,c)
dc=zeros(1,2);

V2=V(2)+k(2)*t;
V1=V(1)+k(1)*t;

Cm1=0.5*(c(1) + c(2));

D0so4=D0*exp(-tau*Cm1);

if t==0
    EfSO4=1;
    EfSO4s=1;
else
    EfSO4=-F*(V20*cSO42i-molmost-
V2*c(2))/(Nacid*I*A*(tspanoriginal(s)+t));
    EfSO4s=F*(V10*cSO41i-molmosts-
V1*c(1))/(Nacid*I*A*(tspanoriginal(s)+t));
end

dc = [-(3*(A*(-D0so4*(c(2)-c(1))/Lma+
zSO4*EfSO4s*F*Cm1*D0so4*I*Rea/(R*T*Lma))-c(1)*k(1))/V1); ...
3*(A*(-D0so4*(c(2)-c(1))/Lma+
zSO4*EfSO4*F*Cm1*D0so4*I*Rea/(R*T*Lma))-c(1)*k(1))/V2];

end

end

```

A.5.8. Arxiu ExpNa2SO4VNa.m

```

function expNa2SO4VNa
global F R T A zNa I Rec Lmc D0 tau V k Nbase tspanoriginal s

%Reservoris: 1=Sal; 3=Base;

```

```

cNa1i=985;      %Concentració inicial de sodi en el reservori 1 [mol/m3]
cNa3i=90.2;     %Concentració inicial de sodi en el reservori 3 [mol/m3]

Lmc=180e-6;    %Gruix de la membrana [m]
zNa=1;         %Càrrega de l'ió

F=96485;      %Constant de Faraday [C/mol]
R=8.314;      %Constant del gasos [J/molK]
T=30+273;     %Temperatura [K]
A=64e-4;      %Àrea de la membrana [m2]
I=(5/A);      %Intensitat [A/m2]
Rec=2.5e-4;   %Resistència [Ohm]
D0=1.325e-9;  %Paràmetre coeficient de difusió [m2/s]
tau=2.765e-3; %Paràmetre coeficient de difusió [m3/mol]
Nbase=2;      %Nombre de cel·les

V10=0.075;    %Volum inicial en el reservori 1 [m3]
V30=0.0015;   %Volum inicial en el reservori 3 [m3]
Vini=[V10, V30];
V=Vini;

K1=0;         %Constant de volum en el reservori 1 [m3/s]
K3=7.2e-9;    %Constant de volum en el reservori 3 [m3/s]
k=[K1,K3];
s=1;
CNa=zeros(9,2);
DNa=zeros(9,1);
EfiNa=zeros(9,2);
inicials=[cNa1i,cNa3i];
molmost=0;
molmosts=0;
for s = 1:8

    options=odeset('RelTol',1e-3, 'AbsTol',1e-3);
    %Càlcul del interval de temps

    tspanoriginal=[ 0, 6000, 12000, 16320, 22800, 28920, 34320, 41520,
46980];
    tfin=(tspanoriginal(s+1)-tspanoriginal(s));
    tspan=[0,tfin];
    [T1, C1] = ode15s(@flux1,tspan,inicials,options);

    %Càlcul del volum extret en les mostres i correcció del volum
    g=1;
    V=Vini;
    for g=1:s
        tfin=(tspanoriginal(g+1)-tspanoriginal(g));
        V=V+k*tfin-100e-6;
    end

    %Es guarden els resultats en una matriu. Es calcula el coeficient de
    difusió i l'eficiència

```

```

if s==1
    CNa(1,:) = C1(1,:);
    CCM2 = 0.5 * (C1(1,1) + C1(2,1));
    Dna = D0 * exp(-tau * CCM2);
    DNa(1) = Dna;
    EfiNa(1,1) = 1;
    EfiNa(1,2) = 1;
end

    CCM2 = 0.5 * (C1(end,1) + C1(end,2));
    Dna = D0 * exp(-tau * CCM2);
    DNa(s+1) = Dna;
    EfiNa = -F * (V3 * cNa3i - molmost -
V3 * C1(end,2)) / (Nbase * I * A * (tspanoriginal(s+1)));
    EfiNa = F * (V10 * cNali - molmosts -
V1 * C1(end,1)) / (Nbase * I * A * (tspanoriginal(s+1)));
    EfiNa(s+1,1) = EfiNa;
    EfiNa(s+1,2) = EfiNa;
    CNa(s+1,:) = C1(end,:);
    inicials = (C1(end,:));

% Càlcul del nombre de mols extret en les mostres
    molmost = 0;
    molmosts = 0;
    o = 1;
    for o = 1:s
        molmost = molmost + 100e-6 * CNa(s+1,2);
        molmosts = molmosts + 100e-6 * CNa(s+1,1);
    end

end

CNa1exp = [937.23; 1046.09; 1028.77; 1026.53; 1048.07; 1053.44; 1030.04; 1080.88; 1
080.88]; % Concentracions de sodi en el reservori 1 (valors experimentals)
[mol/m3]
CNa3exp = [90.20; 373.09; 628.47; 791.13; 960.21; 1080.15; 1173.44; 1276.87; 1298.0
4]; % Concentracions de sodi en el reservori 3 (valors experimentals)
[mol/m3]

plot(tspanoriginal, CNa, '-', tspanoriginal, [CNa1exp, CNa3exp], '.')
legend('salt', 'base', 'base (experiment)', 'salt (experiment)')
title('Concentració de sodi')
xlabel('temps (s)')
ylabel('Concentració (mols/m^{3})')

% Model
function dc = flux1(t, c)
    dc = zeros(1, 2);

    V3 = V(2) + k(2) * t;
    V1 = V(1) + k(1) * t;

    Cm2 = 0.5 * (c(1) + c(2));

    D0na = D0 * exp(-tau * Cm2);

```

```

if t==0
    EfNa=1;
    EfNas=1;
else
    EfNa=-F*(V30*cNa3i-molmost-
V3*c(2))/(Nbase*I*A*(tspanoriginal(s)+t));
    EfNas=F*(V10*cNali-molmosts-
V1*c(1))/(Nbase*I*A*(tspanoriginal(s)+t));
end

dc = [-(2*(A*(-D0na*(c(2)-c(1))/Lmc+
zNa*EfNas*F*Cm2*D0na*I*Rec/(R*T*Lmc))-c(1)*k(1))/V1); ...
      2*(A*(-D0na*(c(2)-c(1))/Lmc+
zNa*EfNa*F*Cm2*D0na*I*Rec/(R*T*Lmc))-c(1)*k(1))/V3];

end

end

```

