

PROJETO DE OTIMIZAÇÃO DE UM REATOR CSTR-COLUNA (Economics of a reactor – column process)

HENAUTH, R. C. S.*; VASCONCELOS, R. S.*

Henauth, R. C. S. Graduada em Eng^a Química pela Universidade Católica de Pernambuco – UNICAP; Mestranda em Desenvolvimento de Processos Ambientais – DPA (UNICAP)

e-mail: rosangelahenauth@yahoo.com.br

Vasconcelos, R. S. Técnico em Química Industrial pelo Centro Federal de Tecnologia de Pernambuco – CEFET/PE; Graduado em Eng^a Química pela Universidade Católica de Pernambuco – UNICAP; Mestrando em Desenvolvimento de Processos Ambientais – DPA (UNICAP)

e-mail: robsonsv12@yahoo.com.br

RESUMO

Neste projeto será estudado e aplicados conceitos de funcionamento de reatores sejam eles de fase líquida, funcionamento contínuo, estacionário, ou com objetivo de misturar e deixar produtos finais em estado perfeitos. Os efeitos de uma grande variedade de tipos de reação que podem ser cinética, parâmetros de projeto e esquemas de remoção de calor são bastante exploradas. Os importantes efeitos de conversão e temperatura de um projeto na área de transferência de calor e outros parâmetros do processo são quantitativamente estudados.

A mensagem importante que se pode transmitir neste trabalho é que os resultados de um projeto já implantando e estável em seu processo pode ser usado para produzir informações valiosas que dão indicações razoavelmente confiáveis de como efetivamente o reator pode ser controlado dinamicamente.

Um parâmetro para avaliar a controlabilidade na fase de concepção do estado estacionário será apresentado, e indica a fração de força motriz disponível, temperatura máxima que é realmente necessário em condições de estado estacionário. Por exemplo, quando um sistema de circulação de água de resfriamento é usado o valor do cálculo da diferença de temperatura é a temperatura do reator menos a temperatura de injeção de água. A diferença de temperatura máxima é a temperatura do reator menos a temperatura de refrigeração. Uma grande fração indica um projeto em que apenas aumentos limitados na taxa de remoção de calor são possíveis e, assim, controlar a temperatura do reator podem ser pobres.

Vários tipos de reações importantes são considerados nas secções seguintes. As equações que descrevem cada um desses sistemas são desenvolvidos. O projeto de estado estacionário com essas reações são discutidos, utilizando programas como o Matlab por exemplo, química hipotética e o Aspen *software* comercial Plus para uma exemplo de química real.

Palavras - chave: Reatos CSRT, Matlab, Cinética Química.

ABSTRACT

In this chapter we study the steady-state design of perfectly mixed, continuously operating, liquid-phase reactors. The effects of a wide variety of reaction types, kinetics, design parameters, and heat removal schemes are explored. The important effects of design conversion and design temperature on heat transfer area and other process parameters are quantitatively studied.

The important message we are trying to convey in this chapter is that steady-state design results can be used to yield valuable information that gives reasonably reliable indications of how effectively the reactor can be dynamically controlled. A parameter for assessing controllability at the steady-state design stage will be presented. This parameter indicates the fraction of the maximum available temperature driving force that is actually needed under steady-state design conditions. For example, when a circulating jacket cooling water system is used, the design value of the temperature difference is the reactor temperature minus the jacket temperature. The maximum temperature difference is the reactor temperature minus the coolant supply temperature. A large fraction indicates a design in which only limited increases in the rate of heat removal are possible, and thus reactor temperature control may be poor.

Several important types of reactions are considered in the following sections. The equations describing each of these systems are developed. The steady-state design of CSTRs with these reactions are discussed, using Matlab programs for hypothetical chemical example and the commercial software Aspen Plus for a real chemical example.

Keywords: Reactors CSRT, Matlab, Chemical Kinetics.

INTRODUÇÃO

O projeto auxiliado pelo *software* Matlab é hoje uma realidade na indústria química. O desenvolvimento de equipamentos de uso geral e a maior disponibilidade de programas especializados permitem a análise de diversas alternativas de projeto, devido à maior velocidade nos cálculos associados à obtenção de uma solução, e propiciam uma diminuição dos erros humanos associados às soluções via cálculos manuais.

As técnicas de otimização podem ser consideradas como ferramentas de grande auxílio na busca de novas alternativas destes procedimentos de projeto e operação. Isto deve-se ao fato de que os problemas de projeto têm muitas e, seguidas vezes, infinitas soluções e a otimização consiste em selecionar a melhor ou uma das melhores dentre este conjunto de soluções, através de critérios preestabelecidos.

Na Engenharia Química, inúmeros são os estudos de síntese de processo (RUDD et al, 1973; GROSSMANN, 1989; BRITT et al, 1989), envolvendo a seleção da seqüência otimizada de operações unitárias (equipamentos) que produzam um produto especificado a partir da disponibilidade de matéria-prima. A síntese de processo envolve um certo grau de abstração, onde os equipamentos são projetados por métodos simplificados, já que o objetivo fundamental é verificar a viabilidade da seqüência escolhida. Somente após encontrada esta seqüência considerada ótima é que o projetista passará a etapa de projeto dos equipamentos individuais.

Várias são as propostas de algoritmos encontrados na literatura para a otimização de projeto de colunas de destilação (LOGSDON et al, 1990; SALCEDO et al, 1990; SKOVBOG e MICHELSEN, 1992; SRYGLEY e HOLLAND, 1965; WALLER e GUSTAFSSON, 1978). Como critério de otimização, os diversos autores consultados indicam essencialmente critérios econômicos para constituir a função objetivo.

OBJETIVO

Estudar a otimização de um projeto de instalação de três reatores CSTR ligados em série a utilização de um único reator, porém ligado a uma coluna de destilação, onde o destilado (produto de topo – composto em sua maior parte pelo reagente) recircula para o próprio reator CSTR. Verificando, com isso, a viabilidade econômica em ambos os casos.

REVISÃO DE LITERATURA

CINÉTICA QUÍMICA

Harris (1973), define cinética química como sendo o estudo de todos os aspectos da velocidade com que um sistema químico aborda uma condição de equilíbrio. Segundo Missen, Mims e Saville (1999), a Cinética química está preocupada com as taxas de reações químicas, isto é, com a descrição quantitativa da forma como as reações químicas ocorrem rapidamente e os fatores que afetam essas taxas. A cinética é utilizada pelos químicos como uma ferramenta onde é possível compreender aspectos fundamentais dos caminhos da reação.

A cinética química também pode ser definida como o estudo das taxas de reações químicas e os mecanismos de reação. A cinética química e o projeto do reator estão no centro da produção de quase todos os produtos químicos industriais (FOGLER, 2008).

De forma geral, um dos objetivos legítimos da cinética química é nos permitir prever, antecipadamente, a taxa no qual as dadas substâncias químicas reagem e controlar a mesma sob alguns pontos desejáveis. Como alternativa, nos permite “moldar” as reações químicas de forma a produzir substâncias com características químicas desejáveis em um modo controlável, incluindo a escolha de um catalisador adequado (MISSEN, MIMS E SAVILLE, 1999).

Introdução à Engenharia de Reações Químicas

Dizemos que uma reação química ocorreu quando um número detectável de moléculas de uma ou mais espécies perderam sua identidade e assumiram uma nova forma (FOGLER, 2008).

Classificação das Reações Químicas

As reações podem se classificar de acordo com o número de fases envolvidas, podendo ser (INGLEZAKIS E POULOPOULOS, 2006):

- ✓ reações homogêneas: que tratam de fase líquida ou sólida;
- ✓ heterogêneas, que são nas fases líquido-sólido, gás-sólido, gás-líquido e líquido-gás-sólido.

E quanto à estequiometria, podendo ser:

- ✓ Simples;
- ✓ Múltiplas.

Levenspiel diz (1999) que, além de se classificarem em homogêneas e heterogêneas, as reações também se classificam em catalíticas, onde a taxa de reação é alterada por materiais que não são reagentes nem produtos, são materiais denominados catalisadores, que não precisam estar em grande quantidade na reação e têm como função retardar ou acelerar a reação, sem serem modificados de forma expressiva. Tanto as reações homogêneas como as heterogêneas podem ser catalíticas ou não-catalíticas.

PROJETO DE REATORES E ANÁLISE DE DESEMPENHO

Um reator químico é um dispositivo que permite a mudança da composição da matéria através de reação química (MISSEM, MIMS E SAVILLE, 1999).

Os reatores são equipamentos ou aparelhos que realizam reações químicas sob condições controladas e que tem, por consequência, a obtenção de um ou mais produtos com especificação desejada. Os reatores se distinguem de acordo com sua operação, que podem ser contínua ou descontínua. Também existe a distinção de reatores segundo a maneira de operar, podendo ser de diversos tipos. (SANTOS; VASCONCELOS, 2002).

Quando se deseja projetar um reator e, conseqüentemente obter um processo ótimo, deve-se levar em consideração não apenas a minimização dos custos, mas deve-se considerar a análise de custos do projeto de um reator de forma global (SANTOS, 2010).

Parâmetros que afetam o desempenho dos reatores

O termo “Desempenho do Reator” geralmente se refere aos resultados operacionais obtidos por um reator, particularmente diz respeito à fração de reagente convertido ou distribuição de produtos para um determinado tamanho e configuração, como alternativa também pode se referir ao tamanho e configuração para uma determinada conversão ou distribuição. Em qualquer caso depende de dois principais tipos de comportamento:

- ✓ As taxas dos processos envolvidos, incluindo a reação e transferência de calor e massa, às vezes, influenciados por limitações de equilíbrio;
- ✓ Movimento relativo de elementos de fluido e partículas sólidas seja um sistema de fluxo ou não.

Segundo Missen, Mims e Saville (1999), a falta de informação suficiente sobre um ou ambos os tipos é um dos principais obstáculos de um projeto de reatores completamente racional.

EQUAÇÕES DE BALANÇO

Uma das ferramentas mais úteis para o projeto e análise de desempenho é a equação de balanço. Este tipo de equação é usado para representar uma quantidade conservada, como massa ou energia, e como as mudanças ocorrem em um sistema especificado (MISSEN, MIMS E SAVILLE, 1999).

BALANÇO DE MATERIAL

O primeiro passo, para a compreensão de reatores químicos, é o balanço de massa das espécies químicas que participam das reações químicas, esse balanço de massa leva em conta as entradas de reagentes, as saídas de produtos, o consumo de reagentes e o acúmulo de reagentes. A equação que expressa o balanço de massa de uma reação química é o modelo de equação 1 e o modelo referente ao balanço de massa para um volume de reator está mostrado na Figura1:

$$\begin{aligned}
 &\left[\begin{array}{l} \text{Taxa de escoamento} \\ \text{de reagente para} \\ \text{dentro do elemento} \\ \text{de volume} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{l} \text{Taxa de escoamento} \\ \text{de reagente para} \\ \text{fora do elemento de} \\ \text{volume} \end{array} \right] + \left[\begin{array}{l} \text{Taxa de consumo do} \\ \text{reagente devido à} \\ \text{reação química no} \\ \text{elemento de volume} \end{array} \right] + \left[\begin{array}{l} \text{Taxe de acúmulo} \\ \text{do reagente no} \\ \text{elemento de volume} \end{array} \right] \\
 &[Entra] = [Sai] + [Re age] + [Acumula] \\
 &(1)
 \end{aligned}$$

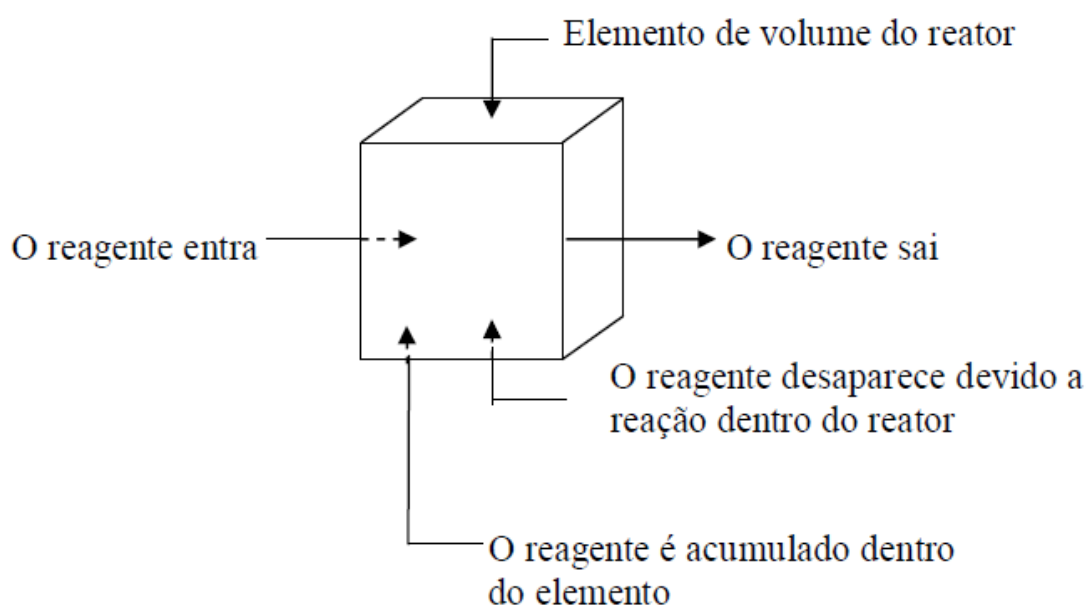


Figura 1 - Balanço de massa para um volume de reator (FONTE: LEVENSPIEL, 2000)

Quando a composição no interior do reator for uniforme, ou seja, for independente da posição, o balanço de material poderá ser feito sobre todo o reator. Porém, quando essa composição não for uniforme, o balanço deverá ser feito sobre um elemento diferencial de volume, seguido de uma equação através de todo o reator, para as condições apropriadas de escoamento e concentração. Para muitos tipos de reatores, a equação (1) pode ser simplificada e a expressão resultante, quando integrada, fornece a equação de desempenho básica para aquele tipo de unidade. Assim, no reator descontínuo, os dois primeiros termos são iguais a zero; no reator contínuo, o quarto termo desaparece; para o reator semicontínuo todos os quatro termos devem ser considerados (LEVENSPIEL, 1999).

ECONOMIA DE UM PROCESSO REATOR-COLUNA

A otimização em projeto baseia-se fundamentalmente na formulação de um padrão de medida - a função custo - que represente o desempenho ou o valor de uma decisão e, iterativamente, na busca de melhoria deste desempenho através da seleção entre um conjunto de alternativas possíveis (FOGEL, 1994).

Os métodos clássicos de otimização geram uma seqüência pré-determinada de possíveis soluções, baseados nas variações provocadas na função custo e selecionam a solução ótima (valor máximo ou mínimo da função custo). Em muitos casos,

dependendo das características desta função, estes métodos podem gerar seqüências de soluções que convergem assintoticamente para soluções ótimas locais (CARNEIRO, 1996).

Conforme EDGAR e HIMMELBLAU (1988), não existe método ou algoritmo de otimização que possa ser aplicado a todos os problemas. A escolha do método de otimização para qualquer caso particular dependerá fundamentalmente das características da função objetivo e se ela é conhecida explicitamente, da natureza das restrições e do número de variáveis independentes e dependentes.

De acordo com Fogler (2009), reatores químicos são vasos projetados para conter reações químicas de interesse em escala industrial. O projeto de um reator químico trata com múltiplos aspectos de engenharia química, sobre os quais os engenheiros químicos trabalham para obter a maximização dos valores desejáveis para a reação dada. Projetistas garantem que a reação se processe com maior eficiência para o produto de saída desejado, produzindo o mais alto rendimento do produto, mas gerando o mínimo de custos para serem comprados e operados.

Rodrigues et al (2006), diz que, um processo químico mantém suas características se os fatores de perturbação do processo como um todo forem mantidos constantes, por esse motivo, é possível diminuir os custos e o tempo de pesquisa e desenvolvimento na extrapolação dos dados obtidos em laboratório para as plantas piloto, e destas para as escalas das plantas industriais.

REATOR CONTÍNUO DE TANQUE AGITADO (CSTR)

É também chamado de reator de retromistura, utilizado principalmente para reações em fase líquida, normalmente operado em estado estacionário e necessita de uma mistura homogênea, conseqüentemente, a temperatura, a concentração e a velocidade não dependem do tempo ou da posição. Uma vez que a temperatura e a concentração são idênticas em qualquer ponto do reator, deve-se considerar que a temperatura e a concentração de saída do reator são idênticas as encontradas no seu interior. Por esse motivo os CSTR são considerados reatores ideais. Em sistemas onde a processo de mistura não é ideal deve-se recorrer a outros métodos de modelagem, tais como distribuições de tempo de residência, para obtenção de resultados significativos (JÚNIOR, 2011).

COMBINAÇÃO DE REATORES

Reatores químicos podem ser dispostos independentemente, combinados em série ou paralelo. De acordo com Pereira (2009), para qualquer tarefa particular e para todas as ordens positivas de reação, o reator de mistura perfeita é sempre maior que o reator de fluxo pistonado, para uma mesma alimentação e mesma conversão. A razão de volumes aumenta. Com a ordem de reação. Quando a conversão é pequena, o desempenho do reator é só levemente afetado pelo tipo de escoamento. A razão de desempenhos aumenta muito rapidamente a altas conversões, conseqüentemente, uma representação apropriada do escoamento se torna muito importante nesta faixa de conversão.

REATORES EM SÉRIE

Fogler (2009) diz que, reatores podem ser conectados em série, de modo que a corrente de saída de um reator é a corrente de alimentação para outro reator. Quando esse arranjo é usado, frequentemente é possível acelerar os cálculos, definindo a conversão em termos de um ponto a jusante em vez da conversão em relação a qualquer um dos reatores. Para reatores em série a conversão é encontrada através da equação 2:

$$x_A = \frac{\text{Mols totais da espécie limitante a}}{\text{Mols da espécie limitante alimentado no 1º reator}} \quad (2)$$

Segundo Pereira (2009), o reator CSTR é usado extensivamente na indústria de processos químicos. Consiste em tanques cilíndricos agitados que possuem mistura perfeita. Podem ser dispostos em múltiplos tanques individuais sem conexões entre si, podem ainda ser conectados em paralelo, ou ainda ser dispostos em série com o intuito de otimizar a cadeia produtiva. Para minimizar as necessidades de bombas e manutenção, freqüentemente, escolhe-se fluxo por gravidade entre os estágios. Reatores CSTR são empregados quando trabalha-se com sólidos ou líquidos, não sendo recomendados para operações a altas pressões. Em muitos aspectos como mecânicos e de transferência de calor, são similares aos reatores batelada. Entretanto, é necessário ter uma entrada para adição contínua de reagentes e uma saída para corrente de produtos.

Uma alternativa para reatores CSTR em série é um reator seguido por uma coluna de destilação que recicla reagente de volta para o reator. O fluxograma desse processo é mostrado pela Figura 2 o reator pode ser pequeno porque a concentração do reagente no reator pode ser grande. A conversão global do reagente (com realimentação) não é igual à conversão média (somente no reator) (LUYBEN, 2007).

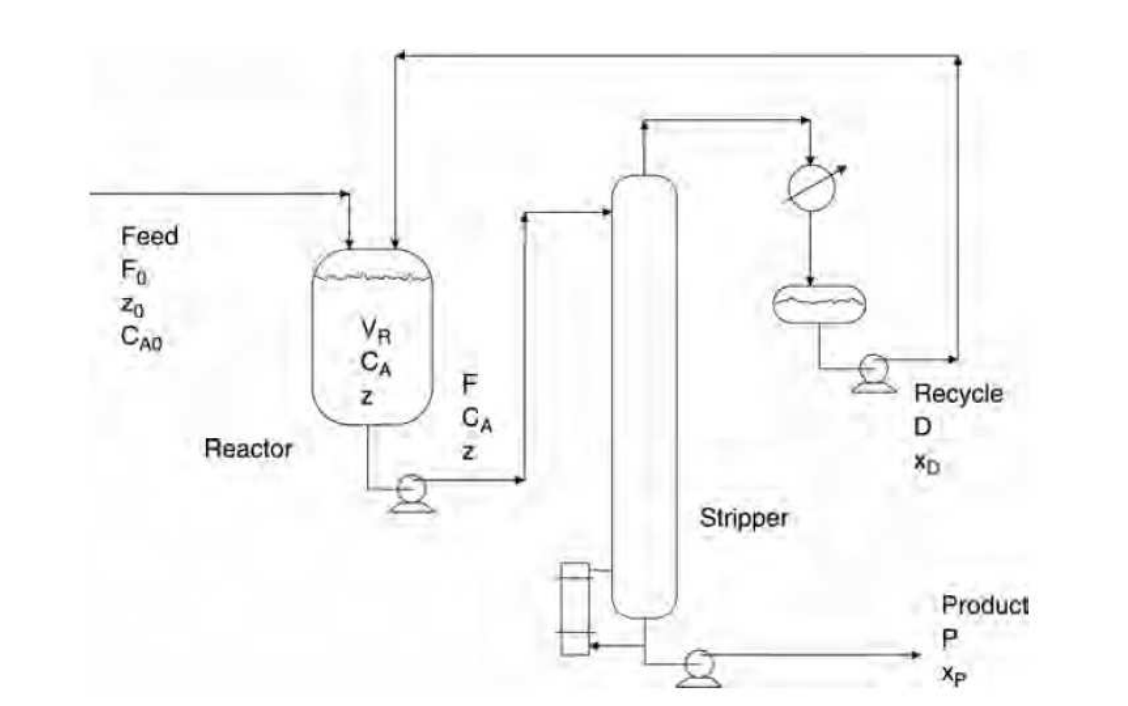


Figura 2 – Reactor stripper flowsheet (FONTE: LUYBEN, 2007)

Naturalmente, que existe um investimento na aquisição de uma coluna de destilação e trocadores associados (condensador e refeedor) e, mais importante existirá um custo adicional de energia para o refeedor. Descartaremos qualquer custo de energia no sistema de reator múltiplo porque assumiremos que o uso de água como refrigerante é de baixo custo. Este processo reator - coluna tem diferentes graus de liberdade, os quais podem ser ajustados para satisfazer objetivos econômicos o mais importante é o tamanho do reator. O reator menor, a maior coluna e o fluxo recirculado (LUYBEN, 2007).

O mesmo caso cinético considerado em seção anterior é usado no reator o efluente do reator (F) de composição (z) é alimentado na coluna de destilação de onde se obtém o componente A pelo topo como uma corrente de reciclo e o componente mais pesado B na base da coluna como uma corrente de produto. Uma vez que a corrente de topo não é uma corrente de produto não tem que ter alta pureza. O vapor que sai pelo

topo é condensado e bombeado de volta para o reator a um fluxo molar (D) de composição (x_D). A corrente líquida na coluna é (F) e a de vapor é (D) (LUYBEN, 2007).

PROJETO DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO

As colunas de destilação são projetadas usando dados das curvas de (VLE) para as misturas a serem separadas. A característica da curva de equilíbrio líquido-vapor da mistura determinará o número de estágios de equilíbrio, conseqüentemente o número de pratos necessários para a separação. Isto pode ser mostrado facilmente pela aplicação do método de McCabe-Thiele para projetos de colunas binárias (GOMIDE, 1988).

Método de McCabe-Thiele para projetos de coluna binária

O método McCabe-Thiele é aplicado usando a curva de VLE para determinar o número de estágios teóricos requeridos para efetuar a separação de uma mistura binária. Ele assume vazão molar do líquido e do vapor constante. Isto implica em:

- ✓ Calor molar de vaporização dos componentes é quase constante;
- ✓ Efeitos de calor são desprezíveis (calor da solução, perda e ganho de calor na coluna, etc.);
- ✓ Para cada mole de vapor condensado, um mole de líquido é vaporizado.

Equilíbrio e linhas de operação

O método McCabe-Thiele assume que o líquido que cai da bandeja e o vapor que sai do mesmo estão em equilíbrio. O equilíbrio líquido-vapor (VLE) e as linhas de operação são mostradas na Figura 3.

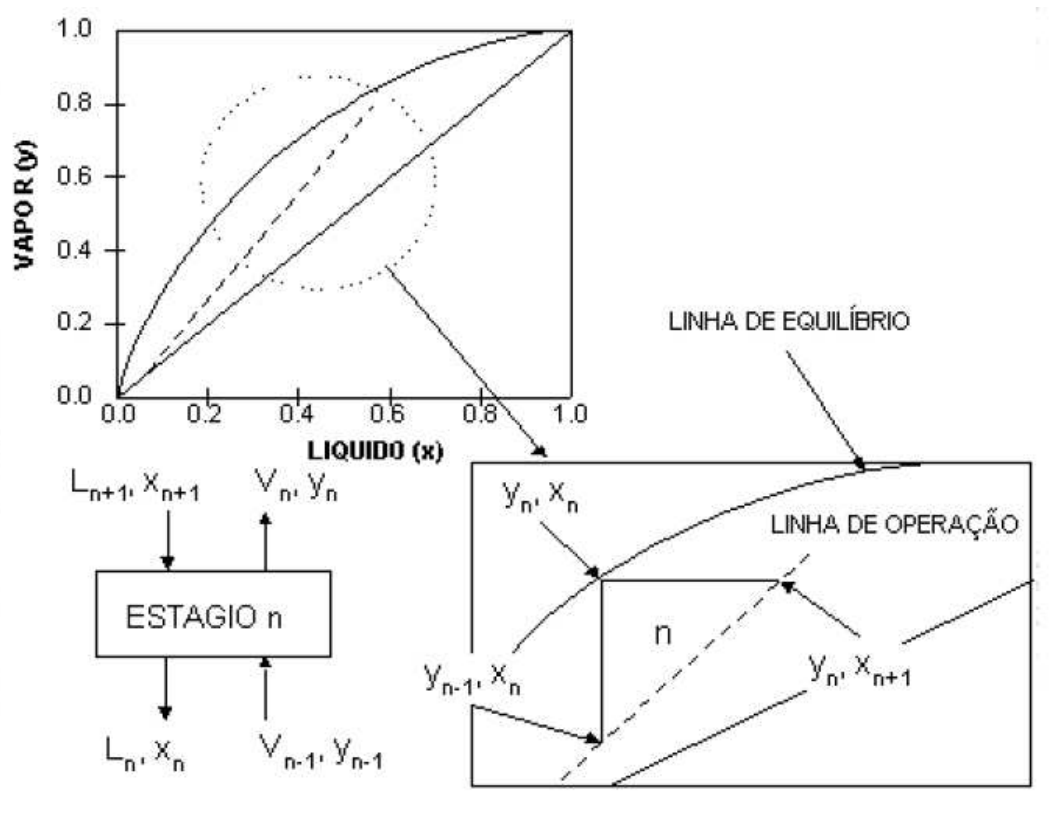


Figura 3 – VLE e linhas de operação (FONTE: GOMIDE, 1988)

PROJETO DA COLUNA DE DESTILAÇÃO

Para colunas de destilação, devemos também projetar e estimar o custo do condensador e refeedor, equações 3 e 4, respectivamente, além de especificar as exigências da água de resfriamento e vapor de aquecimento (CARNEIRO, 1996). Lyuben (2007) mostra, ainda, a equação 5 referente ao custo de uma coluna de destilação.

$$C(\$) = 7296 \cdot (\text{área})^{0,65} \quad (3)$$

Em que:

$$V_{\text{Condensador}} = 243m^2$$

$$C(\$) = 7296 \cdot (\text{área})^{0,65} \quad (4)$$

Em que:

$$V_{\text{Re fervedor}} = 146m^2$$

$$C(\$) = 17,640 \cdot (D)^{1,066} \cdot (L)^{0,802} \quad (5)$$

DOUGLAS (1988) propõe a minimização do custo anual, expresso em função do custo de capital (custo da coluna, refeedor e condensador, número de pratos) e custo das utilidades (geração de vapor de aquecimento), enquanto Logsdon et al (1990), baseia-se no critério proposto por Douglas (1988), relacionando o custo anual com a quantidade de destilado produzido e custo da alimentação.

O custo total de uma coluna é, portanto, a soma de todos os custos básicos multiplicados pelo fator que converte o custo básico em custo total instalado (PERRY e CHILTON, 1973).

Cálculo do número de pratos reais

Para o cálculo do número real de pratos, usa-se o conceito de eficiência global (E°) definida na equação 6. Geralmente, essa eficiência situa-se entre 20 e 80% (RICHARDSON, 2002) que é uma medida do afastamento das condições de equilíbrio entre as fases líquida e gasosa, uma vez que estas não são alcançadas em cada andar (DOUGLAS, 1988). Obviamente que será necessário, ao final, efetuar o arredondamento até a unidade superior, uma vez que não se usa uma fração de prato para a construção da coluna.

$$E^\circ = \frac{\text{Números de pratos teóricos}}{\text{Números de pratos reais}} \cdot (100) \quad (6)$$

Para o equilíbrio líquido - vapor (VLE) assume-se que pode ser descrito pela constante de volatilidade relativa entre o componente A e B, $\alpha = 1,5$ em cada bandeja na coluna as composições (Fração molar de A) do líquido (x) e vapor (y) são relacionadas como segue (LUYBEN, 2007; GOMIDE, 1988):

$$y = \frac{\alpha \cdot x}{1 + (\alpha - 1) \cdot x} \quad (7)$$

O projeto da coluna é baseado no *pinch point* entre a linha (VLE) e a linha de operação. Se a alimentação é em forma de líquido saturado isso ocorre a $Y_{Máximo}$ (LUYBEN, 2007):

$$Y_{máximo} = \frac{\alpha \cdot z}{1 + (\alpha - 1) \cdot z} \quad (8)$$

Quando a composição de topo for maior que (z) por 80% (E°) a diferença entre $Y_{Máximo}$ e z pode ser obtido pela equação 6 (LUYBEN, 2007):

$$X_D = Y_{NT} = z + 0,8 \cdot (Y_{máximo} - z) \quad (9)$$

Esse critério é similar ao uso de uma razão de refluxo de 1,2 vezes a razão de refluxo mínima em uma coluna cheia. Uma condição necessária deve ocorrer entre o número de bandejas e o ponto de bolha. A inclinação da linha de operação resultante é a razão líquido vapor F/D (LUYBEN, 2007):

$$\frac{F}{D} = \frac{x_D - x_p}{z - x_p} \quad (10)$$

As concentrações molares são convertidas em frações molares e vazões volumétricas são convertidas em vazões molares para o cálculo das bandejas em uma coluna. A corrente de alimentação $F_0 = 0,03506 \text{ Kmol/s}$ com uma composição $z_0 = 1$ (Fração molar de A) uma vez que a reação é equimolar (1 mol de A produz 1 mol de B) a vazão molar da base da coluna B é igual a vazão molar da alimentação (F_0). A conversão do sistema é 98% de forma que a concentração do reagente na base da coluna (a corrente de produto B) é $x_p = 0,02$ (Fração molar de A). Através da Figura 4 pode-se verificar o diagrama utilizado para o cálculo do número de pratos teóricos de strippers (LUYBEN, 2007).

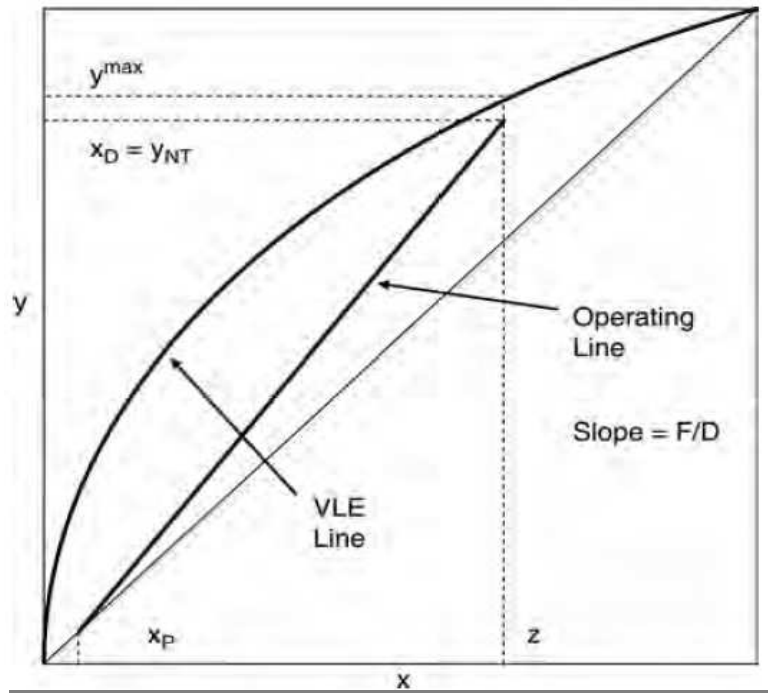


Figura 4 – McCabe-Thiele diagram of stripper (FONTE: LUYBEN, 2007)

Com relação ao diagrama mostrado acima, Gomide (1988) comenta que McCabe-Thiele mostra uma mistura binária, tendo uma curva de equilíbrio líquido-vapor uniforme e que possui uma forma relativamente fácil de separação.

O balanço do componente em torno da coluna pode ser usado para obter o fluxo de vapor no topo (D), uma vez que a razão F/D é conhecida através das seguintes equações (LUYBEN, 2007):

$$\begin{aligned}
 zF &= Dx_D + Px_p \\
 z \left[\frac{F}{D} \right] D &= Dx_D + Px_p \\
 D &= \frac{Px_p}{\left[\frac{F}{D} \right] z - x_D}
 \end{aligned} \tag{11}$$

A composição Kmol/m^3 do reagente no reator C_A , a qual é usado na avaliação cinética, é convertida em fração molar de A através de (LUYBEN, 2007):

$$z = \frac{C_A}{8,01} \quad (12)$$

A velocidade de consumo do reagente no reator pode ser obtida através da equação abaixo (LUYBEN, 2007):

$$V_R K C_A = \chi F_0 \quad (13)$$

PROJETO DO TROCADOR DE CALOR

Para projetar ou prever o desempenho de um trocador de calor é essencial relacionar a taxa total de transferência de calor a grandezas tais como: as temperaturas de entrada e de saída dos fluidos, o coeficiente global de transferência de calor, e a área superficial total disponível para transferência de calor. Duas dessas relações podem ser obtidas, de imediato, pela utilização de balanços globais de energia nos fluidos quente e frio, respectivamente, conforme mostra as equações 14 e 15 abaixo (INCROPERA, 1996): Para o nosso projeto usaremos apenas a equação 14.

$$q = \dot{m}_q \cdot (i_{q,e} - i_{q,s}) \quad (14)$$

$$q = \dot{m}_f \cdot (i_{q,s} - i_{f,e}) \quad (15)$$

Segundo Luyben (2007), para conhecer o valor numérico da área total do trocador (condensador + refeedor) é dada pela equação 16:

$$A = \frac{Q_c}{U \cdot (T_c - T_{Cc})} \quad (16)$$

Os parâmetros de projeto conhecidos são χ , k , F_0 , z_0 , x_p , como mostra a tabela 1 (apêndice 1). As etapas do roteiro para encontrar a melhor dimensão do reator são (LUYBEN, 2007):

- I. Escolha um valor para o volume (V_R) do reator em m^3 .
- II. Calcule C_A da equação 13 e z da equação 12.
- III. Calcule $Y_{\text{Máximo}}$ da equação 8.
- IV. Defina a composição de topo $x_D = Y_{NT}$ usando a equação 9.
- V. Calcule F/D da equação 10.
- VI. Calcule D da equação 11.
- VII. O número de bandejas requeridas é alcançado quando a composição do vapor saindo da bandeja é igual ou maior que x_D .

RESULTADOS

I. Diante da situação proposta, assumiremos um Volume de reator:

$$V_R = 20m^3$$

II. Conhecido o valor para V_R , mostrado acima e de posse se alguns dados fornecidos pela tabela 1 (apêndice 1) foi possível, através da equação 13, encontrar a concentração do subproduto na saída do reator C_A :

$$V_R \cdot k_{350} \cdot C_A = \chi \cdot F_0$$

$$20m^3 \cdot 8,185 \cdot 10^{-4} s^{-1} \cdot C_A = 0,98 \cdot 0,03506 Kmols^{-1}$$

$$C_A = \frac{0,98 \cdot 0,03506 Kmols^{-1}}{20m^3 \cdot 8,185 \cdot 10^{-4} s^{-1}}$$

$$C_A = 2,0990 Kmols^{-1}$$

Diante do valor obtido para C_A podemos, através da equação 12, encontrar o valor para a fração molar do produto na saída do reator (z):

$$z = \frac{C_A}{8,01} = \frac{2,0990 Kmols^{-1}}{8,01}$$

$$z = 0,262$$

III. Diante do valor da volatilidade relativa (α) e do valor para a fração molar do produto na saída do reator (z) foi possível calcularmos a fração molar máxima no vapor ($Y_{Máximo}$).

$$Y_{Máximo} = \frac{\alpha \cdot z}{1 + (\alpha - 1) \cdot z}$$

$$Y_{Máximo} = \frac{1,5 \cdot 0,262}{1 + (1,5 - 1) \cdot 0,262}$$

$$Y_{Máximo} = 0,3475$$

IV. Através da definição da composição de topo (Fração molar de A), calculada a partir da equação 9, foi possível verificar que a composição no topo da coluna é igual a composição do destilado, isto é, $x_D = Y_{NT}$, portanto, a reta de operação intersectada é $x = y$, conforme mostrado na figura 3.

$$x_D = Y_{NT} = z + 0,8 \cdot (Y_{Máximo} - z)$$

$$x_D = Y_{NT} = 0,262 + 0,8 \cdot (0,3475 - 0,262)$$

$$x_D = Y_{NT} = 0,3304$$

V. A razão entre a alimentação e a saída do produto de topo da coluna F/D pode ser obtida através da equação 10 (LUYBEN, 2007):

$$\frac{F}{D} = \frac{x_D - x_p}{z - x_p}$$

$$\frac{F}{D} = \frac{0,3304 - 0,02}{0,262 - 0,02}$$

$$\frac{F}{D} = 1,2826$$

VI. A vazão molar pode ser obtida através da equação 11 (LUYBEN, 2007):

$$D = \frac{P x_p}{\left[\frac{F}{D} \right] z - x_D}$$

$$D = \frac{0,03506 \text{ Kmole/s} \cdot 0,02}{(1,2826 \cdot 0,262) - 0,3304}$$

$$D = 0,1241 \text{ Kmole/s}$$

VII. Acima do valor de x_D fica impossibilitado o enriquecimento do vapor no composto mais volátil, pois atingiremos $Y_{Máximo}$ que é a fração molar máxima de A, ou seja, a quantidade máxima do composto A no vapor, como mostrado na Figura 4. Assim o vapor vai se enriquecendo à medida em que sobe na coluna.

Cálculo do custo da instalação

✓ Custo do Reator CSTR:

$$C(\$)_{REATOR} = (10) \cdot (17,640) \cdot (D)^{1,066} \cdot (L)^{0,802} \therefore C(\$)_{REATOR} = 1.499.155,004$$

✓ Custo do Condensador:

$$C(\$)_{CONDENSADOR} = 17,640 \cdot (D)^{1,066} \cdot (L)^{0,802} \therefore C(\$)_{CONDENSADOR} = 259.602,327$$

✓ Custo do Refervedor:

$$C(\$)_{REFERVEDOR} = 17,640 \cdot (D)^{1,066} \cdot (L)^{0,802} \therefore C(\$)_{REFERVEDOR} = 186.080,563$$

✓ Custo da Coluna:

$$C(\$)_{COLUNA} = (17,640) \cdot (D)^{1,066} \cdot (L)^{0,802} \therefore C(\$)_{COLUNA} = 123.442,674$$

✓ Custo de Energia:

$$C(\$)_{ENERGIA} = (\text{Calor fornecido ao retervedor}) \cdot (3600) \cdot (24) \cdot (365)$$

Onde :

$$\text{Calor fornecido ao retervedor} = C \cdot D$$

Em que :

$$C = 23,24 \cdot 10^6 \text{ J/Kmol}$$

$$D = 0,1241 \text{ Kmole/s}$$

Logo :

$$\text{Calor fornecido ao retervedor} = (23,24 \cdot 10^6 \text{ J/Kmol}) \cdot (0,1241 \text{ Kmole/s}) \therefore$$

$$\text{Calor fornecido ao retervedor} = 2.884.084 \text{ J/s}$$

Portanto, substituindo na equação do custo de energia, temos que:

$$C(\$)_{ENERGIA} = (2.884.084) \cdot (3600) \cdot (24) \cdot (365) \therefore C(\$)_{ENERGIA} = 427.422,072/\text{ano}$$

✓ Taxa de Custo Anual (TAC):

$$TAC = \frac{\sum \text{Custos}}{\text{Período de retorno do investimento}} + C(\$)_{ENERGIA}$$

$$TAC = \frac{1.499.155,004 + 259.602,327 + 186.080,563 + 123.442,674}{3\text{anos}} + 427.422,072$$

$$TAC = 1.116.848,928/\text{ano}$$

Cálculos para troca térmica

✓ Área da Jaqueta:

$$A_{Jaqueta} = 2\pi \cdot D^2 \Rightarrow A_{Jaqueta} = 2 \cdot 3,1416 \cdot 2,335 \cdot \therefore A_{Jaqueta} = 34,254m^2$$

✓ Vazão do Fluido Refrigerante:

$$F_J = \frac{Q}{C_J \cdot (T_J - T_{Co})} \Rightarrow \frac{9,973 \cdot 10^5}{4183 \cdot (315,78 - 294)} \therefore F_J = 10.943 \text{ Kmol/s}$$

✓ Temperatura de Saída do Fluido Refrigerante:

$$A = \frac{Q}{U \cdot (T_R - T_J)} \Rightarrow T_J = T_R - \left(\frac{\left(\frac{Q}{U} \right)}{A} \right)$$

$$T_J = 350 - \left(\frac{\left(\frac{9,973 \cdot 10^5}{851} \right)}{34,254} \right) \therefore$$

$$T_J = 315,78K$$

Cálculos adicionais referentes ao reator CSTR

✓ Diâmetro do Reator:

$$D_{REATOR} = \left(\frac{2 \cdot V_R}{\pi} \right)^{1/3} \Rightarrow D_{REATOR} = \left(\frac{2 \cdot 20}{3,1416} \right)^{1/3} \therefore D_{REATOR} = 2,335m$$

✓ Comprimento do Reator:

$$L_{REATOR} = 2 \cdot D_{REATOR} \Rightarrow L_{REATOR} = 2 \cdot 2,335 \therefore L_{REATOR} = 4,670m$$

Cálculo relativo ao número de pratos

✓ Números de Pratos Teóricos:

De acordo com o *Software* Matlab (apêndice 1), o número de pratos foi demonstrado pela equação (6) abaixo:

$$E^\circ = \frac{\text{Números de pratos teóricos}}{\text{Números de pratos reais}} \cdot (100) \Rightarrow 80 = \frac{16}{NPR} \cdot (100) \therefore NPR = 20$$

O algoritmo esquematizado no apêndice 1 permite a confirmação dos cálculos demonstrados e de outros de importância significativa. A Figura 5 (apêndice 1) mostra o esquema do reator – coluna após a otimização.

CONCLUSÃO

De um modo geral, as destilações na prática industrial envolvem misturas multicomponentes, porém a compreensão dos princípios da destilação de misturas binárias é particularmente importante do ponto de vista didático, pois constitui a base para as operações mais complexas. Além disso, permite o estabelecimento de hipóteses simplificadoras que não afetam o projeto, mas facilitam a identificação da influência das variáveis envolvidas (requisitos de projeto) sobre o processo.

Concluimos com o presente projeto que o custo para instalação e manutenção de três (3) reatores CSTR em série é bem próximo do custo de instalação e manutenção de um REATOR - COLUNA do tipo stripper, porém o retorno deste é ainda mais significativo que a primeira hipótese.

APÊNDICE

Tabela 1 – Parâmetros do projeto (FONTE: LUYBEN, 2007)

Parâmetros	Definição	Valor	Unidade de medida
$P = F_0$	Fluxo inicial de A	0,03506	$Kmol/s$
x_p	Fração molar de A (produto de base)	0,02	-
k_{350}	Const. de vel. da reação	$8,185 \cdot 10^{-4}$	s^{-1}
χ	Conversão	0.98	-
E	Energia de ativação	$69,71 \cdot 10^6$	$J/Kmol$
M	Peso mol. do processo	100	$Kg/Kmol$
$\rho_0; \rho$	Densidades inicial e final do processo	801	Kg/m^3
ρ_J	Densidade do fluido refrigerante	1000	Kg/m^3
$c_{p0}; c_p$	Cap. térm. final e inicial do processo	3137	KJ/Kg
c_J	Cap. térm. do fluido refrigerante	4183	KJ/Kg
λ	Calor liberado	$-69,71 \cdot 10^6$	$J/Kmol$
F_0	Alimentação	$4,377 \cdot 10^{-3}$	$Kmol/s$
T_J	Temp. de saída do fluido refrigerante	315,19	T_0
F_J	Vazão do fluido refrigerante	1094,3	$Kmol/s$
T_0	Temp. da alimentação	294	K
T_{CoJ}	Temp. de entrada do líq. refrigerante	294	K
L/D	Rel. da vazão de refl. pela vazão de destilado	-	2
U	Coef. global de transf. de calor	851	$W \cdot K/m^2$
C_{Ao}	Conc. inicial do reagente A	8,01	$Kmol/m^3$
α	Razão x/y	1,5	-
z_0	Fração molar inicial de A	1	-
C	Calor para o proc. de vapor.	$23,24 \cdot 10^6$	$J/Kmol$
E°	Eficiência	0,8	-

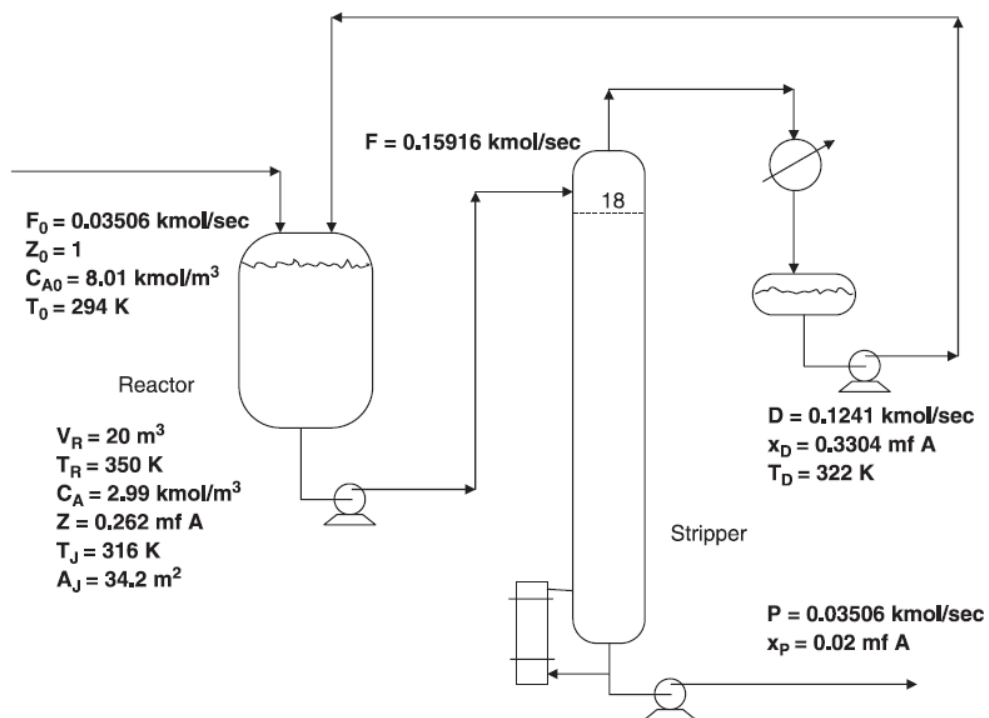


Figura 5 – Reactos striper floesheet A $\rightarrow$ B (FONTE: LUYBEN, 2007)

Programa realizado no Software Matlab

%Programa CSTR Otimização

```
clear all
clc
close all

tr=350;
conv=.98;
factor=10;
Ca0=8.01;
m=100;
td=322;
k0=20.75e6;
EA=69.71e6;
f0=0.03506;
p=f0;
z0=1;
a=1.5;

k=k0*exp(-EA/tr/8314);
xp=1-conv;

%Set Vr
Vr=20; %Volume do Reator, "m3"
diam=((2*Vr)/pi)^0.3333; %Diâmetro do Reator, "m"
comp=2*diam; %Comprimento do Reator, "m"
z=conv*f0/8.01/k/Vr;
Ca=z*8.01;
ymax=(a*z)/(1+((a-1)*z));
xd=z+(0.8*(ymax-z));
foverd=(xd-xp)/(z-xp);
d=(xp*p)/((z*foverd)-xd);
if d<=0;return;end
f=d+p;

%Cálculo do número de pratos na coluna%
[Npt,Npr]=Npratos(xp,f,a,d,p,xd);

%Cálculo da area de transferencia de calor%
t0=294;
tcin=294;
u=851;
lambda=-69.71e6;
roe=801;
cp=3137;
m=100;
cj=4183;
roej=1000;
areaj=2*pi*diam^2;
q=(1-xp)*f0*(-lambda)-cp*m*f*(tr-td);
tj=tr-q/u/areaj;
fj=q/(cj*(tj-tcin));
```

%Cálculo do diâmetro da coluna%

```
ROe=(100*115*144)/(1545*580);
vel=1/sqrt(ROe);
vapor=(d*100)/(.454*0.8*62.3);
areacol=vapor/vel;
dcol=sqrt((4*areacol)/pi);
```

%Cálculo do Custo total anual

```
qcond=852;
Tcond=13.9;
qref=568;
Tref=34.8;
Periodo=3;
```

```
[TCA,reator,refer,cndr,coluna] = custoanual(d,comp,diam,dcol,qcond,Tcond,qref,Tref,Npt,Periodo);
disp(['Taxa de custo anual: ' '$ ' num2str(TCA) '/ano'])
```

%Gráficos

```
[V]=
graf(Vr,d,conv,k,f0,a,xp,p,cp,m,f,u,lambd,tr,tj,td,xd,z,Tcond,qcond,Tref,qref,Periodo,TCA,Npt,cndr,reat
or,refer,coluna);
```

function [V]=

```
graf(Vr,d,conv,k,f0,a,xp,p,cp,m,f,u,lambd,tr,tj,td,xd,z,Tcond,qcond,Tref,qref,Periodo,TCA,Npt,cndr,reat
or,refer,coluna);
V=((Vr-Vr)+10):60;
h=1;
D=(d-d)+0.2236;
T=(tj-tj)+343.2772;
XD=(xd-xd)+0.6031;
Z=(z-z)+0.5241;
RT=(reator-reator)+0.973697;
HX=((refer+cndr)-(refer+cndr))+0.6534727862;
CL=(coluna-coluna)+0.1856841829;
```

```
CPA=(TCA-TCA)+1.374392727;
```

```
n=(V(end)-V(1))/h;
```

```
for j=1 : n
```

```
    V(j+1)=V(j)+h;
```

```
D(j+1)=(xp*p)/(((conv*f0/8.01/k/V(j+1))*(((conv*f0/8.01/k/V(j+1))+0.8*((a*(conv*f0/8.01/k/V(j+1)))/
(1+((a-1)*(conv*f0/8.01/k/V(j+1))))-(conv*f0/8.01/k/V(j+1))))-xp)/((conv*f0/8.01/k/V(j+1))-xp))-
((conv*f0/8.01/k/V(j+1))+0.8*((a*(conv*f0/8.01/k/V(j+1)))/(1+((a-1)*(conv*f0/8.01/k/V(j+1))))-
(conv*f0/8.01/k/V(j+1)))));
```

```
    T(j+1)=tr-((1-xp)*f0*(-lambda)-cp*m*(D(j+1)+p)*(tr-td))/u/(2*pi*(((2*V(j+1))/pi)^0.3333)^2);
```

```
    XD(j+1)=(conv*f0/8.01/k/V(j+1))+0.8*((a*(conv*f0/8.01/k/V(j+1)))/(1+((a-
1)*(conv*f0/8.01/k/V(j+1))))-(conv*f0/8.01/k/V(j+1)));
```

```
    Z(j+1)=(conv*f0/8.01/k/V(j+1));
```

```
    RT(j+1)
```

```
=((10*(17.640)*(((2*(V(j+1))/pi)^0.3333)^1.066)*((2*(((2*(V(j+1))/pi)^0.3333))^0.802))*1000)/1000
000;
```

```
HX(j+1)=((7296*(((D(j+1))*(23.24*(10^6)))/((qcond)*(Tcond)))^0.65))+7296*(((D(j+1))*(23.24*(10
^6)))/((qref)*(Tref)))^0.65))/1000000;
```

```

CL(j+1)=(((17.640*((sqrt((4*(((D(j+1))*100)/(.454*0.8*62.3)))/(1/sqrt((100*115*144)/(1545*580))))))/pi)
)^1.066)*(((1.2)*(Npt)*0.61)^0.802))*1000)/1000000;
CPA(j+1) =
((((10*(17.640)*(((2*(V(j+1)))/pi)^0.3333)^1.066)*((2*(((2*(V(j+1)))/pi)^0.3333))^0.802))*1000)+(((
17.640*((sqrt((4*(((D(j+1))*100)/(.454*0.8*62.3)))/(1/sqrt((100*115*144)/(1545*580))))))/pi)^1.066)*((
(1.2)*(Npt)*0.61)^0.802))*1000)+(7296*(((D(j+1))*(23.24*(10^6)))/((qcond)*(Tcond)))^0.65)+(7296
*(((D(j+1))*(23.24*(10^6)))/((qref)*(Tref)))^0.65))/Periodo)+((((D(j+1))*(23.24*(10^6)))/1000)*36
00*24*365)*(4.7*(10^-6)))/1000000;

```

```

switch V(j);

```

```

    case V(1)

```

```

yp=(a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv));
x(1)= ((D(1))*((a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv)))+f0*(1-conv))/((D(1))+f0);
ycalc=(1-conv);
n=1;
while ycalc<((Z(1))+(0.8*(((a*(Z(1)))/(1+((a-1)*(Z(1)))))-(Z(1)))));
    y(n)=(a*x(n))/(1+(a-1)*x(n));
    ycalc=y(n);
    x(n+1)=((D(1))*y(n)+f0*(1-conv))/((D(1))+f0);
    n=n+1;
end
N1=n-1;

```

```

    case V(2)

```

```

yp=(a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv));
x(1)= ((D(2))*((a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv)))+f0*(1-conv))/((D(2))+f0);
ycalc=(1-conv);
n=1;
while ycalc<((Z(2))+(0.8*(((a*(Z(2)))/(1+((a-1)*(Z(2)))))-(Z(2)))));
    y(n)=(a*x(n))/(1+(a-1)*x(n));
    ycalc=y(n);
    x(n+1)=((D(2))*y(n)+f0*(1-conv))/((D(2))+f0);
    n=n+1;
end
N2=n-1;

```

```

    case V(3)

```

```

yp=(a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv));
x(1)= ((D(3))*((a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv)))+f0*(1-conv))/((D(3))+f0);
ycalc=(1-conv);
n=1;
while ycalc<((Z(3))+(0.8*(((a*(Z(3)))/(1+((a-1)*(Z(3)))))-(Z(3)))));
    y(n)=(a*x(n))/(1+(a-1)*x(n));
    ycalc=y(n);
    x(n+1)=((D(3))*y(n)+f0*(1-conv))/((D(3))+f0);
    n=n+1;
end
N3=n-1;
case V(4)

```

```

yp=(a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv));
x(1)= ((D(4))*((a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv)))+f0*(1-conv))/((D(4))+f0);
ycalc=(1-conv);

```

```

n=1;
while ycalc<(((Z(4))+0.8*(((a*(Z(4)))/(1+((a-1)*(Z(4)))))-(Z(4)))));
    y(n)=(a*x(n)/(1+(a-1)*x(n)));
    ycalc=y(n);
    x(n+1)=((D(4))*y(n)+f0*(1-conv))/((D(4))+f0);
    n=n+1;
end
N4=n-1;
case V(5)

yp=(a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv));
x(1)= ((D(5))*((a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv)))+f0*(1-conv))/((D(5))+f0);
ycalc=(1-conv);
n=1;
while ycalc<(((Z(5))+0.8*(((a*(Z(5)))/(1+((a-1)*(Z(5)))))-(Z(5)))));
    y(n)=(a*x(n)/(1+(a-1)*x(n)));
    ycalc=y(n);
    x(n+1)=((D(5))*y(n)+f0*(1-conv))/((D(5))+f0);
    n=n+1;
end
N5=n-1;

case V(6)

yp=(a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv));
x(1)= ((D(6))*((a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv)))+f0*(1-conv))/((D(6))+f0);
ycalc=(1-conv);
n=1;
while ycalc<(((Z(6))+0.8*(((a*(Z(6)))/(1+((a-1)*(Z(6)))))-(Z(6)))));
    y(n)=(a*x(n)/(1+(a-1)*x(n)));
    ycalc=y(n);
    x(n+1)=((D(6))*y(n)+f0*(1-conv))/((D(6))+f0);
    n=n+1;
end
N6=n-1;

case V(7)

yp=(a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv));
x(1)= ((D(7))*((a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv)))+f0*(1-conv))/((D(7))+f0);
ycalc=(1-conv);
n=1;
while ycalc<(((Z(7))+0.8*(((a*(Z(7)))/(1+((a-1)*(Z(7)))))-(Z(7)))));
    y(n)=(a*x(n)/(1+(a-1)*x(n)));
    ycalc=y(n);
    x(n+1)=((D(7))*y(n)+f0*(1-conv))/((D(7))+f0);
    n=n+1;
end
N7=n-1;

case V(8)

yp=(a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv));
x(1)= ((D(8))*((a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv)))+f0*(1-conv))/((D(8))+f0);
ycalc=(1-conv);
n=1;
while ycalc<(((Z(8))+0.8*(((a*(Z(8)))/(1+((a-1)*(Z(8)))))-(Z(8)))));
    y(n)=(a*x(n)/(1+(a-1)*x(n)));
    ycalc=y(n);
    x(n+1)=((D(8))*y(n)+f0*(1-conv))/((D(8))+f0);

```



```

    n=n+1;
end
N8=n-1;

case V(9)

yp=(a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv));
x(1)= ((D(9))*((a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv)))+f0*(1-conv))/((D(9))+f0);
ycalc=(1-conv);
n=1;
while ycalc<((Z(9))+(0.8*(((a*(Z(9)))/(1+((a-1)*(Z(9)))))-(Z(9)))));
    y(n)=(a*x(n)/(1+(a-1)*x(n)));
    ycalc=y(n);
    x(n+1)=((D(9))*y(n)+f0*(1-conv))/((D(9))+f0);
    n=n+1;
end
N9=n-1;

case V(10)

yp=(a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv));
x(1)= ((D(10))*((a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv)))+f0*(1-conv))/((D(10))+f0);
ycalc=(1-conv);
n=1;
while ycalc<((Z(10))+(0.8*(((a*(Z(10)))/(1+((a-1)*(Z(10)))))-(Z(10)))));
    y(n)=(a*x(n)/(1+(a-1)*x(n)));
    ycalc=y(n);
    x(n+1)=((D(10))*y(n)+f0*(1-conv))/((D(10))+f0);
    n=n+1;
end
N10=n-1;

case V(11)

yp=(a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv));
x(1)= ((D(11))*((a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv)))+f0*(1-conv))/((D(11))+f0);
ycalc=(1-conv);
n=1;
while ycalc<((Z(11))+(0.8*(((a*(Z(11)))/(1+((a-1)*(Z(11)))))-(Z(11)))));
    y(n)=(a*x(n)/(1+(a-1)*x(n)));
    ycalc=y(n);
    x(n+1)=((D(11))*y(n)+f0*(1-conv))/((D(11))+f0);
    n=n+1;
end
N11=n-1;

case V(12)

yp=(a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv));
x(1)= ((D(12))*((a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv)))+f0*(1-conv))/((D(12))+f0);
ycalc=(1-conv);
n=1;
while ycalc<((Z(12))+(0.8*(((a*(Z(12)))/(1+((a-1)*(Z(12)))))-(Z(12)))));
    y(n)=(a*x(n)/(1+(a-1)*x(n)));
    ycalc=y(n);
    x(n+1)=((D(12))*y(n)+f0*(1-conv))/((D(12))+f0);
    n=n+1;
end
N12=n-1;

```

case V(13)

```
yp=(a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv));
x(1)= ((D(13))*((a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv)))+f0*(1-conv))/((D(13))+f0);
ycalc=(1-conv);
n=1;
while ycalc<((Z(13))+0.8*(((a*(Z(13)))/(1+((a-1)*(Z(13)))))-(Z(13)))));
    y(n)=(a*x(n)/(1+(a-1)*x(n)));
    ycalc=y(n);
    x(n+1)=((D(13))*y(n)+f0*(1-conv))/((D(13))+f0);
    n=n+1;
end
N13=n-1;
```

case V(14)

```
yp=(a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv));
x(1)= ((D(14))*((a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv)))+f0*(1-conv))/((D(14))+f0);
ycalc=(1-conv);
n=1;
while ycalc<((Z(14))+0.8*(((a*(Z(14)))/(1+((a-1)*(Z(14)))))-(Z(14)))));
    y(n)=(a*x(n)/(1+(a-1)*x(n)));
    ycalc=y(n);
    x(n+1)=((D(14))*y(n)+f0*(1-conv))/((D(14))+f0);
    n=n+1;
end
N14=n-1;
```

case V(15)

```
yp=(a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv));
x(1)= ((D(15))*((a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv)))+f0*(1-conv))/((D(15))+f0);
ycalc=(1-conv);
n=1;
while ycalc<((Z(15))+0.8*(((a*(Z(15)))/(1+((a-1)*(Z(15)))))-(Z(15)))));
    y(n)=(a*x(n)/(1+(a-1)*x(n)));
    ycalc=y(n);
    x(n+1)=((D(15))*y(n)+f0*(1-conv))/((D(15))+f0);
    n=n+1;
end
N15=n-1;
```

case V(16)

```
yp=(a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv));
x(1)= ((D(16))*((a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv)))+f0*(1-conv))/((D(16))+f0);
ycalc=(1-conv);
n=1;
while ycalc<((Z(16))+0.8*(((a*(Z(16)))/(1+((a-1)*(Z(16)))))-(Z(16)))));
    y(n)=(a*x(n)/(1+(a-1)*x(n)));
    ycalc=y(n);
    x(n+1)=((D(16))*y(n)+f0*(1-conv))/((D(16))+f0);
    n=n+1;
end
N16=n-1;
```

case V(17)

```
yp=(a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv));
x(1)= ((D(17))*((a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv)))+f0*(1-conv))/((D(17))+f0);
```

```

ycalc=(1-conv);
n=1;
while ycalc<((Z(17))+(0.8*(((a*(Z(17)))/(1+((a-1)*(Z(17)))))-(Z(17)))));
    y(n)=(a*x(n)/(1+(a-1)*x(n)));
    ycalc=y(n);
    x(n+1)=((D(17))*y(n)+f0*(1-conv))/((D(17))+f0);
    n=n+1;
end
N17=n-1;

case V(18)

yp=(a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv));
x(1)= ((D(18))*((a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv)))+f0*(1-conv))/((D(18))+f0);
ycalc=(1-conv);
n=1;
while ycalc<((Z(18))+(0.8*(((a*(Z(18)))/(1+((a-1)*(Z(18)))))-(Z(18)))));
    y(n)=(a*x(n)/(1+(a-1)*x(n)));
    ycalc=y(n);
    x(n+1)=((D(18))*y(n)+f0*(1-conv))/((D(18))+f0);
    n=n+1;
end
N18=n-1;

case V(19)

yp=(a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv));
x(1)= ((D(19))*((a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv)))+f0*(1-conv))/((D(19))+f0);
ycalc=(1-conv);
n=1;
while ycalc<((Z(19))+(0.8*(((a*(Z(19)))/(1+((a-1)*(Z(19)))))-(Z(19)))));
    y(n)=(a*x(n)/(1+(a-1)*x(n)));
    ycalc=y(n);
    x(n+1)=((D(19))*y(n)+f0*(1-conv))/((D(19))+f0);
    n=n+1;
end
N19=n-1;

case V(20)

yp=(a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv));
x(1)= ((D(20))*((a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv)))+f0*(1-conv))/((D(20))+f0);
ycalc=(1-conv);
n=1;
while ycalc<((Z(20))+(0.8*(((a*(Z(20)))/(1+((a-1)*(Z(20)))))-(Z(20)))));
    y(n)=(a*x(n)/(1+(a-1)*x(n)));
    ycalc=y(n);
    x(n+1)=((D(20))*y(n)+f0*(1-conv))/((D(20))+f0);
    n=n+1;
end
N20=n-1;

case V(21)

yp=(a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv));
x(1)= ((D(21))*((a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv)))+f0*(1-conv))/((D(21))+f0);
ycalc=(1-conv);
n=1;
while ycalc<((Z(21))+(0.8*(((a*(Z(21)))/(1+((a-1)*(Z(21)))))-(Z(21)))));
    y(n)=(a*x(n)/(1+(a-1)*x(n)));

```

```

    ycalc=y(n);
    x(n+1)=((D(21))*y(n)+f0*(1-conv))/((D(21))+f0);
    n=n+1;
end
N21=n-1;

case V(22)

yp=(a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv));
x(1)= ((D(22))*((a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv)))+f0*(1-conv))/((D(22))+f0);
ycalc=(1-conv);
n=1;
while ycalc<((Z(22))+(0.8*(((a*(Z(22)))/(1+((a-1)*(Z(22)))))-(Z(22))))));
    y(n)=(a*x(n)/(1+(a-1)*x(n)));
    ycalc=y(n);
    x(n+1)=((D(22))*y(n)+f0*(1-conv))/((D(22))+f0);
    n=n+1;
end
N22=n-1;

case V(23)

yp=(a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv));
x(1)= ((D(23))*((a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv)))+f0*(1-conv))/((D(23))+f0);
ycalc=(1-conv);
n=1;
while ycalc<((Z(23))+(0.8*(((a*(Z(23)))/(1+((a-1)*(Z(23)))))-(Z(23))))));
    y(n)=(a*x(n)/(1+(a-1)*x(n)));
    ycalc=y(n);
    x(n+1)=((D(23))*y(n)+f0*(1-conv))/((D(23))+f0);
    n=n+1;
end
N23=n-1;

case V(24)

yp=(a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv));
x(1)= ((D(24))*((a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv)))+f0*(1-conv))/((D(24))+f0);
ycalc=(1-conv);
n=1;
while ycalc<((Z(24))+(0.8*(((a*(Z(24)))/(1+((a-1)*(Z(24)))))-(Z(24))))));
    y(n)=(a*x(n)/(1+(a-1)*x(n)));
    ycalc=y(n);
    x(n+1)=((D(24))*y(n)+f0*(1-conv))/((D(24))+f0);
    n=n+1;
end
N24=n-1;

case V(25)

yp=(a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv));
x(1)= ((D(25))*((a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv)))+f0*(1-conv))/((D(25))+f0);
ycalc=(1-conv);
n=1;
while ycalc<((Z(25))+(0.8*(((a*(Z(25)))/(1+((a-1)*(Z(25)))))-(Z(25))))));
    y(n)=(a*x(n)/(1+(a-1)*x(n)));
    ycalc=y(n);
    x(n+1)=((D(25))*y(n)+f0*(1-conv))/((D(25))+f0);
    n=n+1;
end

```

```

N25=n-1;

case V(26)

yp=(a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv));
x(1)= ((D(26))*((a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv)))+f0*(1-conv))/((D(26))+f0);
ycalc=(1-conv);
n=1;
while ycalc<((Z(26))+0.8*(((a*(Z(26)))/(1+((a-1)*(Z(26)))))-(Z(26)))));
    y(n)=(a*x(n))/(1+(a-1)*x(n));
    ycalc=y(n);
    x(n+1)=((D(26))*y(n)+f0*(1-conv))/((D(26))+f0);
    n=n+1;
end
N26=n-1;

case V(27)

yp=(a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv));
x(1)= ((D(27))*((a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv)))+f0*(1-conv))/((D(27))+f0);
ycalc=(1-conv);
n=1;
while ycalc<((Z(27))+0.8*(((a*(Z(27)))/(1+((a-1)*(Z(27)))))-(Z(27)))));
    y(n)=(a*x(n))/(1+(a-1)*x(n));
    ycalc=y(n);
    x(n+1)=((D(27))*y(n)+f0*(1-conv))/((D(27))+f0);
    n=n+1;
end
N27=n-1;

case V(28)

yp=(a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv));
x(1)= ((D(28))*((a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv)))+f0*(1-conv))/((D(28))+f0);
ycalc=(1-conv);
n=1;
while ycalc<((Z(28))+0.8*(((a*(Z(28)))/(1+((a-1)*(Z(28)))))-(Z(28)))));
    y(n)=(a*x(n))/(1+(a-1)*x(n));
    ycalc=y(n);
    x(n+1)=((D(28))*y(n)+f0*(1-conv))/((D(28))+f0);
    n=n+1;
end
N28=n-1;

case V(29)

yp=(a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv));
x(1)= ((D(29))*((a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv)))+f0*(1-conv))/((D(29))+f0);
ycalc=(1-conv);
n=1;
while ycalc<((Z(29))+0.8*(((a*(Z(29)))/(1+((a-1)*(Z(29)))))-(Z(29)))));
    y(n)=(a*x(n))/(1+(a-1)*x(n));
    ycalc=y(n);
    x(n+1)=((D(29))*y(n)+f0*(1-conv))/((D(29))+f0);
    n=n+1;
end
N29=n-1;

case V(30)

```

```

yp=(a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv));
x(1)= ((D(30))*((a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv)))+f0*(1-conv))/((D(30))+f0);
ycalc=(1-conv);
n=1;
while ycalc<((Z(30))+(0.8*(((a*(Z(30)))/(1+((a-1)*(Z(30)))))-(Z(30)))));
    y(n)=(a*x(n)/(1+(a-1)*x(n)));
    ycalc=y(n);
    x(n+1)=((D(30))*y(n)+f0*(1-conv))/((D(30))+f0);
    n=n+1;
end
N30=n-1;

case V(31)

yp=(a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv));
x(1)= ((D(31))*((a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv)))+f0*(1-conv))/((D(31))+f0);
ycalc=(1-conv);
n=1;
while ycalc<((Z(31))+(0.8*(((a*(Z(31)))/(1+((a-1)*(Z(31)))))-(Z(31)))));
    y(n)=(a*x(n)/(1+(a-1)*x(n)));
    ycalc=y(n);
    x(n+1)=((D(31))*y(n)+f0*(1-conv))/((D(31))+f0);
    n=n+1;
end
N31=n-1;

case V(32)

yp=(a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv));
x(1)= ((D(32))*((a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv)))+f0*(1-conv))/((D(32))+f0);
ycalc=(1-conv);
n=1;
while ycalc<((Z(32))+(0.8*(((a*(Z(32)))/(1+((a-1)*(Z(32)))))-(Z(32)))));
    y(n)=(a*x(n)/(1+(a-1)*x(n)));
    ycalc=y(n);
    x(n+1)=((D(32))*y(n)+f0*(1-conv))/((D(32))+f0);
    n=n+1;
end
N32=n-1;

case V(33)

yp=(a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv));
x(1)= ((D(33))*((a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv)))+f0*(1-conv))/((D(33))+f0);
ycalc=(1-conv);
n=1;
while ycalc<((Z(33))+(0.8*(((a*(Z(33)))/(1+((a-1)*(Z(33)))))-(Z(33)))));
    y(n)=(a*x(n)/(1+(a-1)*x(n)));
    ycalc=y(n);
    x(n+1)=((D(33))*y(n)+f0*(1-conv))/((D(33))+f0);
    n=n+1;
end
N33=n-1;

case V(34)

yp=(a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv));
x(1)= ((D(34))*((a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv)))+f0*(1-conv))/((D(34))+f0);
ycalc=(1-conv);
n=1;

```

```

while ycalc<(((Z(34))+0.8*(((a*(Z(34)))/(1+((a-1)*(Z(34)))))-(Z(34))))));
    y(n)=(a*x(n)/(1+(a-1)*x(n)));
    ycalc=y(n);
    x(n+1)=((D(34))*y(n)+f0*(1-conv))/((D(34))+f0);
    n=n+1;
end
N34=n-1;

case V(35)

yp=(a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv));
x(1)= ((D(35))*((a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv)))+f0*(1-conv))/((D(35))+f0);
ycalc=(1-conv);
n=1;
while ycalc<(((Z(35))+0.8*(((a*(Z(35)))/(1+((a-1)*(Z(35)))))-(Z(35))))));
    y(n)=(a*x(n)/(1+(a-1)*x(n)));
    ycalc=y(n);
    x(n+1)=((D(35))*y(n)+f0*(1-conv))/((D(35))+f0);
    n=n+1;
end
N35=n-1;

case V(36)

yp=(a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv));
x(1)= ((D(36))*((a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv)))+f0*(1-conv))/((D(36))+f0);
ycalc=(1-conv);
n=1;
while ycalc<(((Z(36))+0.8*(((a*(Z(36)))/(1+((a-1)*(Z(36)))))-(Z(36))))));
    y(n)=(a*x(n)/(1+(a-1)*x(n)));
    ycalc=y(n);
    x(n+1)=((D(36))*y(n)+f0*(1-conv))/((D(36))+f0);
    n=n+1;
end
N36=n-1;

case V(37)

yp=(a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv));
x(1)= ((D(37))*((a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv)))+f0*(1-conv))/((D(37))+f0);
ycalc=(1-conv);
n=1;
while ycalc<(((Z(37))+0.8*(((a*(Z(37)))/(1+((a-1)*(Z(37)))))-(Z(37))))));
    y(n)=(a*x(n)/(1+(a-1)*x(n)));
    ycalc=y(n);
    x(n+1)=((D(37))*y(n)+f0*(1-conv))/((D(37))+f0);
    n=n+1;
end
N37=n-1;

case V(38)

yp=(a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv));
x(1)= ((D(38))*((a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv)))+f0*(1-conv))/((D(38))+f0);
ycalc=(1-conv);
n=1;
while ycalc<(((Z(38))+0.8*(((a*(Z(38)))/(1+((a-1)*(Z(38)))))-(Z(38))))));
    y(n)=(a*x(n)/(1+(a-1)*x(n)));
    ycalc=y(n);
    x(n+1)=((D(38))*y(n)+f0*(1-conv))/((D(38))+f0);

```

```

    n=n+1;
end
N38=n-1;

case V(39)

yp=(a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv));
x(1)= ((D(39))*((a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv)))+f0*(1-conv))/((D(39))+f0);
ycalc=(1-conv);
n=1;
while ycalc<((Z(39))+(0.8*(((a*(Z(39)))/(1+((a-1)*(Z(39)))))-(Z(39)))));
    y(n)=(a*x(n)/(1+(a-1)*x(n)));
    ycalc=y(n);
    x(n+1)=((D(39))*y(n)+f0*(1-conv))/((D(39))+f0);
    n=n+1;
end
N39=n-1;

case V(40)

yp=(a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv));
x(1)= ((D(40))*((a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv)))+f0*(1-conv))/((D(40))+f0);
ycalc=(1-conv);
n=1;
while ycalc<((Z(40))+(0.8*(((a*(Z(40)))/(1+((a-1)*(Z(40)))))-(Z(40)))));
    y(n)=(a*x(n)/(1+(a-1)*x(n)));
    ycalc=y(n);
    x(n+1)=((D(40))*y(n)+f0*(1-conv))/((D(40))+f0);
    n=n+1;
end
N40=n-1;

case V(41)

yp=(a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv));
x(1)= ((D(41))*((a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv)))+f0*(1-conv))/((D(41))+f0);
ycalc=(1-conv);
n=1;
while ycalc<((Z(41))+(0.8*(((a*(Z(41)))/(1+((a-1)*(Z(41)))))-(Z(41)))));
    y(n)=(a*x(n)/(1+(a-1)*x(n)));
    ycalc=y(n);
    x(n+1)=((D(41))*y(n)+f0*(1-conv))/((D(41))+f0);
    n=n+1;
end
N41=n-1;

case V(42)

yp=(a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv));
x(1)= ((D(42))*((a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv)))+f0*(1-conv))/((D(42))+f0);
ycalc=(1-conv);
n=1;
while ycalc<((Z(42))+(0.8*(((a*(Z(42)))/(1+((a-1)*(Z(42)))))-(Z(42)))));
    y(n)=(a*x(n)/(1+(a-1)*x(n)));
    ycalc=y(n);
    x(n+1)=((D(42))*y(n)+f0*(1-conv))/((D(42))+f0);
    n=n+1;
end
N42=n-1;

```


case V(43)

```
yp=(a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv));
x(1)= ((D(43))*((a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv)))+f0*(1-conv))/((D(43))+f0);
ycalc=(1-conv);
n=1;
while ycalc<((Z(43))+(0.8*(((a*(Z(43)))/(1+((a-1)*(Z(43)))))-(Z(43)))));
    y(n)=(a*x(n)/(1+(a-1)*x(n)));
    ycalc=y(n);
    x(n+1)=((D(43))*y(n)+f0*(1-conv))/((D(43))+f0);
    n=n+1;
end
N43=n-1;
```

case V(44)

```
yp=(a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv));
x(1)= ((D(44))*((a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv)))+f0*(1-conv))/((D(44))+f0);
ycalc=(1-conv);
n=1;
while ycalc<((Z(44))+(0.8*(((a*(Z(44)))/(1+((a-1)*(Z(44)))))-(Z(44)))));
    y(n)=(a*x(n)/(1+(a-1)*x(n)));
    ycalc=y(n);
    x(n+1)=((D(44))*y(n)+f0*(1-conv))/((D(44))+f0);
    n=n+1;
end
N44=n-1;
```

case V(45)

```
yp=(a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv));
x(1)= ((D(45))*((a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv)))+f0*(1-conv))/((D(45))+f0);
ycalc=(1-conv);
n=1;
while ycalc<((Z(45))+(0.8*(((a*(Z(45)))/(1+((a-1)*(Z(45)))))-(Z(45)))));
    y(n)=(a*x(n)/(1+(a-1)*x(n)));
    ycalc=y(n);
    x(n+1)=((D(45))*y(n)+f0*(1-conv))/((D(45))+f0);
    n=n+1;
end
N45=n-1;
```

case V(46)

```
yp=(a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv));
x(1)= ((D(46))*((a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv)))+f0*(1-conv))/((D(46))+f0);
ycalc=(1-conv);
n=1;
while ycalc<((Z(46))+(0.8*(((a*(Z(46)))/(1+((a-1)*(Z(46)))))-(Z(46)))));
    y(n)=(a*x(n)/(1+(a-1)*x(n)));
    ycalc=y(n);
    x(n+1)=((D(46))*y(n)+f0*(1-conv))/((D(46))+f0);
    n=n+1;
end
N46=n-1;
```

case V(47)

```
yp=(a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv));
x(1)= ((D(47))*((a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv)))+f0*(1-conv))/((D(47))+f0);
```

```

ycalc=(1-conv);
n=1;
while ycalc<((Z(47))+(0.8*(((a*(Z(47)))/(1+((a-1)*(Z(47)))))-(Z(47)))));
    y(n)=(a*x(n)/(1+(a-1)*x(n)));
    ycalc=y(n);
    x(n+1)=((D(47))*y(n)+f0*(1-conv))/((D(47))+f0);
    n=n+1;
end
N47=n-1;

case V(48)

yp=(a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv));
x(1)= ((D(48))*((a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv)))+f0*(1-conv))/((D(48))+f0);
ycalc=(1-conv);
n=1;
while ycalc<((Z(48))+(0.8*(((a*(Z(48)))/(1+((a-1)*(Z(48)))))-(Z(48)))));
    y(n)=(a*x(n)/(1+(a-1)*x(n)));
    ycalc=y(n);
    x(n+1)=((D(48))*y(n)+f0*(1-conv))/((D(48))+f0);
    n=n+1;
end
N48=n-1;

case V(49)

yp=(a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv));
x(1)= ((D(49))*((a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv)))+f0*(1-conv))/((D(49))+f0);
ycalc=(1-conv);
n=1;
while ycalc<((Z(49))+(0.8*(((a*(Z(49)))/(1+((a-1)*(Z(49)))))-(Z(49)))));
    y(n)=(a*x(n)/(1+(a-1)*x(n)));
    ycalc=y(n);
    x(n+1)=((D(49))*y(n)+f0*(1-conv))/((D(49))+f0);
    n=n+1;
end
N49=n-1;

case V(50)

yp=(a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv));
x(1)= ((D(50))*((a*(1-conv))/(1+(a-1)*(1-conv)))+f0*(1-conv))/((D(50))+f0);
ycalc=(1-conv);
n=1;
while ycalc<((Z(50))+(0.8*(((a*(Z(50)))/(1+((a-1)*(Z(50)))))-(Z(50)))));
    y(n)=(a*x(n)/(1+(a-1)*x(n)));
    ycalc=y(n);
    x(n+1)=((D(50))*y(n)+f0*(1-conv))/((D(50))+f0);
    n=n+1;
end
N50=n-1;

break
otherwise
    disp('Custo do processo inviável')

end
end
N51=10;

```

```

V(51)=60;
subplot(3,2,1),plot(V,CPA,'linewidth',1.5)
title(' ')
grid
xlabel('Volume do reator (m3)')
ylabel('TAC (10^6$/ano)')

subplot(3,2,2),plot(V,XD,'--r',V,Z,'b','linewidth',1.5)
title(' ')
grid
xlabel('Volume do reator (m3)')
ylabel('z e xd (mf A)')
legend('xd','z',1)

subplot(3,2,3),plot(V,T,'linewidth',1.5)
title(' ')
grid
xlabel('Volume do reator (m3)')
ylabel('Tj (K)')

subplot(3,2,4),plot(V,D,'linewidth',1.5)
title(' ')
grid
xlabel('Volume do reator (m3)')
ylabel('Recirculação (Kmol/sec)')

subplot(3,2,5),plot(V,RT,'b',V,HX,'--r',V,CL,'g','linewidth',1.5)
title(' ')
grid
xlabel('Volume do reator (m3)')
ylabel('Custo de capital (10^6$)')
legend('Reator','Coluna','Trocador',2)

subplot(3,2,6),plot(V(1),N1,'ob',V(2),N2,'ob',V(3),N3,'ob',V(4),N4,'ob',V(5),N5,'ob',V(6),N6,'ob',V(7),N7,
'ob',V(8),N8,'ob',V(9),N9,'ob',V(10),N10,'ob',V(11),N11,'ob',V(12),N12,'ob',V(13),N13,'ob',V(14),N14,'o
b',V(15),N15,'ob',V(16),N16,'ob',V(17),N17,'ob',V(18),N18,'ob',V(19),N19,'ob',V(20),N20,'ob',V(21),N2
1,'ob',V(22),N22,'ob',V(23),N23,'ob',V(24),N24,'ob',V(25),N25,'ob',V(26),N26,'ob',V(27),N27,'ob',V(28),
N28,'ob',V(29),N29,'ob',V(30),N30,'ob',V(31),N31,'ob',V(32),N32,'ob',V(33),N33,'ob',V(34),N34,'ob',V(3
5),N35,'ob',V(36),N36,'ob',V(37),N37,'ob',V(38),N38,'ob',V(39),N39,'ob',V(40),N40,'ob',V(41),N41,'ob',
V(42),N42,'ob',V(43),N43,'ob',V(44),N44,'ob',V(45),N45,'ob',V(46),N46,'ob',V(47),N47,'ob',V(48),N48,'
ob',V(49),N49,'ob',V(50),N50,'ob',V(51),N51,'ob','linewidth',1.5)
title(' ')
grid
xlabel('Volume do reator (m3)')
ylabel('Nº de pratos')
end

function [TCA,reator,refer,cndr,coluna] =
custoanual(d,comp,diam,dcol,qcond,Tcond,qref,Tref,Npt,Periodo);
    reator=(10*(17.640)*((diam)^1.066)*((comp)^0.802))*1000;
    calor = (d)*(23.24*(10^6));
    cndr = 7296*(((calor)/((qcond)*(Tcond)))^0.65);
    refer = 7296*(((calor)/((qref)*(Tref)))^0.65);
    coluna = ((17.640)*((dcol)^1.066)*(((1.2)*(Npt)*0.61)^0.802))*1000;
    energia = (((calor)/1000)*3600*24*365)*(4.7*(10^-6));

```

```

TCA = (((reator)+(coluna)+(cndr)+(refer))/(Periodo))+(energia);
disp(['Custo capital do reator:      '$ ' num2str(reator)])
disp(['Custo capital do Condensador: '$ ' num2str(cndr)])
disp(['Custo capital do Refevedor:   '$ ' num2str(refer)])
disp(['Custo capital da Coluna:      '$ ' num2str(coluna)])
disp(['Custo de energia térmica por ano '$ ' num2str(energia) '/ano'])
end

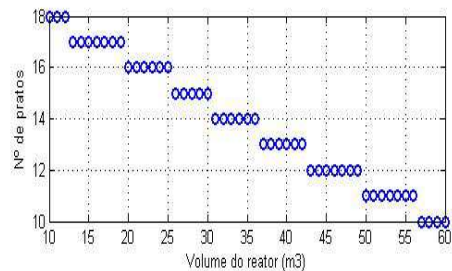
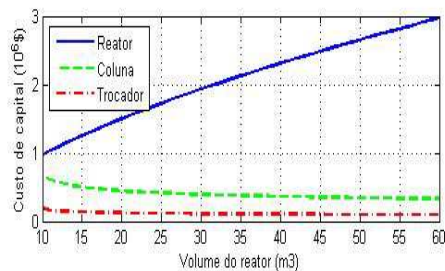
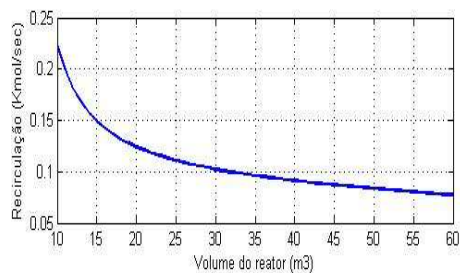
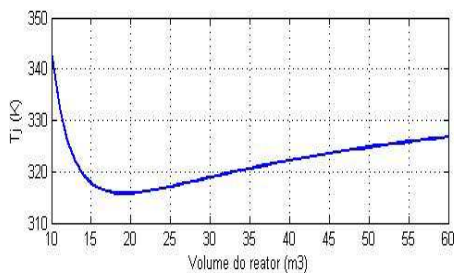
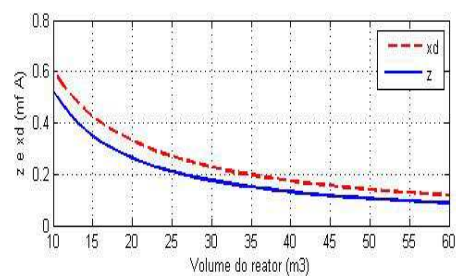
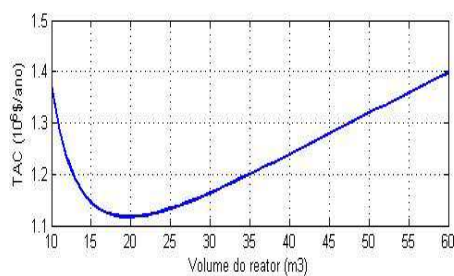
```

```

function [Npt,Npr]=Npratos(xp,f,a,d,p,xd);
yp=(a*xp)/(1+(a-1)*xp);
x(1)=(d*yp+p*xp)/f;
ycalc=yp;
n=1;
while ycalc<xd
    y(n)=(a*x(n)/(1+(a-1)*x(n)));
    ycalc=y(n);
    x(n+1)=(d*y(n)+p*xp)/f;
    n=n+1;
end
Npt=n-1;
Npr=Npt/0.8;
end

```

Gráficos



REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA

BONIATTI, Rosiana. **Combinação de Reatores**. Caxias do Sul: UCS, 2009.

CARNEIRO, Mára. L. F. Dissertação (Mestrado) – **Síntese Automatizada de Colunas de Destilação: Uma Abordagem Alternativa ao Processo de Projeto**. Instituto de Informática, PUCRS. Porto Alegre, Setembro/ 1996. 106 f.

DOUGLAS, J. M. **Conceptual Design of Chemical Processes**. Ed. McGraw-Hill Book Co. N.Y., 1988.

EDGAR, T.F e HIMMELBLAU, D.M. **Optimization of chemical processes**. New York, McGraw-Hill, 1988.

FOGLER, H. Scott. **Elements of Chemical Reaction Engineering**.g. 4^a ed. Michigan, 2008. 1080 p.

FOGEL, D. **An Introduction to Simulated Evolutionary Optimization**. IEEE Transactions on Neural Networks. New York, 5 (1):3-14, Jan. 1994.

FOGLER, H. Scott. **Elementos de Engenharia das Reações Químicas**. Ed. LTC, Rio de Janeiro. 4^a ed. 2009.

GOMIDE, Reynaldo. **Operações Unitárias – Volume IV – Operações com transferência de massa**. Ed. edição do autor, São Paulo. 1988. 444 p.

HARRIS, Gordon, M. **Cinética Química**, Ed Reverté s.a. Barcelona, 1973. 125 p.

IGLEZAKIS V. J.; POULOPOULOS S. G. **Adsorption, Ion Exchange and Catalysis**, Ed Elsevier Science Ltd. Amsterdam, 2006. 602 p.

INCROPERA, Frank, P. **Fundamentos de Transferência de Calor e Massa**. Ed. LTC, Rio de Janeiro. 4^a ed. 1996, 494 p.

JÚNIOR, Jorge. L. O. L. **Combinação de Reatores Contínuos (CSTR e PFR) validando resultados computacionais com dados obtidos experimentalmente.** UNIPAMPA- UNIVERSIDADE FEDERAL DO PAMPA. JULHO/2011.

.

LEVENSPIEL, Octave. **Engenharia das Reações Químicas.** Ed Edgard Blucher. São Paulo, 1999. 563 p.

LEVENSPIEL, Octave. **Engenharia das Reações Químicas.** 3. ed. São Paulo: Blücher, 2000.

LOGSDON, J. S.; DIWEKAR, U. M. e BIEGGLER, L. **On the simultaneous optimal design and operation of batch distillation columns.** Trans IChemE. 68 , part A:434-444, September, 1990.

LUYBEN, William, L. **Process Modeling, simulation, and Control for Chemical Engineer,** Ed Mc-Graw Hill. New Jersey, 1999. 724 p.

LUYBEN, William, L. **Chemical Reactor Design and Control.** Ed Mc-Graw Hill. New Jersey, 2007. 419 p.

MISSEN, Ronald W.; MIMS, Charles A.; SAVILLE, Bradley A; **Introduction to Chemical Reaction Engineering and Kinetics,** Ed Jonh Wiley & Sons, Inc. Toronto, 1999. 672 p.

PEREIRA, Marco A. Notas de Aula - **Introdução a Engenharia de Reatores.** USP: Escola de Engenharia de Lorena, 2009.

PERRY, R. e CHILTON, C . **Chemical Engineer's Handbook.** Tokyo, McGraw-Hill, 1973.

RICHARDSON, J. F.; HARKER, J. H., BACKHURST, J. R. **Coulson & Richardson's Chemical Engineering.** Vol.2, 5th ed. Butterworth-Heinemann, Oxford, 2002.

RODRIGUES R.; GUERRA C. D. W.; SECCHI A. R.; LANSARIN M. A. **Ensino de Cinética e Cálculo de Reatores Químicos Utilizando o Simulador Emso**. XVI Congresso Brasileiro de ENGENHARIA QUÍMICA:24 a 27 de setembro de 2006.

SANTOS, Valdemir. A.; VASCONCELOS, Eliane. C.; **Extrapolação de Dados Cinéticos Obtidos em Reatores Químicos Homogêneos**. Revista Química e Tecnologia, 2002.

SANTOS, Valdemir. A. Notas de Aula - **Cinética de reatores**. UNICAP: Universidade Católica de Pernambuco, 2010.2.