

# Diseño, Simulación, Optimización y Seguridad de Procesos

Librerías termodinámicas para Excel

2024

Prof.: Dr. Nicolás J. Scenna

Prof.: Dr. Néstor H. Rodríguez

J.T.P.: Dr. Juan I. Manassaldi

# Librerías Termodinámicas para Excel

- Se desarrollaron tres planillas de calculo que incluyen funciones para el calculo de propiedades termodinámicas.
- Cada planilla contiene las mismas funciones pero cada una utiliza un modelo fisicoquímico en particular.
- Todas utilizan la misma PCD (ChemSep)



NRTL IG.xlsm



Peng Robinson.xlsm



Raoult Law.xlsm

# Librerías Termodinámicas para Excel

Fase líquida: Modelo de líquido ideal

Fase vapor: Ley de los Gases ideal



Raoult Law.xlsm

Fase líquida: Modelo de actividad NRTL

Fase vapor: Ley de los Gases ideal



NRTL IG.xlsm

Fase líquida: Peng Robinson EOS

Fase vapor: Peng Robinson EOS



Peng Robinson.xlsm

# Librerías Termodinámicas para Excel

## Funciones disponibles:

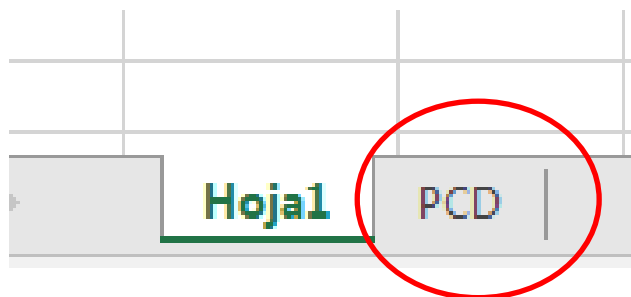
- Entalpía de la fase líquida.
- Entalpía de la fase vapor.
- Entropía de la fase líquida.
- Entropía de la fase vapor.
- Densidad de la fase líquida.
- Densidad de la fase vapor.
- Constante de equilibrio líquido-vapor de cada componente.

Todas las funciones tiene los mismos argumentos de entrada salvo la constante de equilibrio que es diferente para cada modelo

# Identificación de los compuestos de la mezcla

- La base de datos contiene información de 430 compuestos.
- Cada compuesto se ubica por su ID.
- Soportan mezclas de hasta 10 componentes
- Toda la información de la mezcla se carga en la hoja PCD (Pure Compound Database).
- No debe cambiarse el nombre de la hoja PCD.
- En la hoja PCD, solo se pueden modificar las celdas en color verde.

# Identificación de los compuestos de la mezcla



No cambiar el nombre

Se cargan los ID y luego se presiona el botón actualizar

	A	B	C	D	E
1	ID	Nombre	NC		
2	501	Benzene	2		
3	502	Toluene			
4					
5					
6					
7					
8					
9					
10					
11					

Actualizar

# Identificación de los compuestos de la mezcla

A partir de la fila 112 se pueden buscar los IDs de todos los compuestos disponibles.

111		
112	Name	ID
113	Methane	1
114	Ethane	2
115	Propane	3
116	Isobutane	4
117	N-butane	5
118	N-pentane	7
119	Isopentane	8
120	Neopentane	9
121	N-hexane	11
122	2-methylpentane	12
123	3-methylpentane	13
124	2,2-dimethylbutane	14
125	2,3-dimethylbutane	15
126	N-heptane	17
127	2-methylhexane	18
128	3-methylhexane	19
129	3-ethylpentane	20
130	2,2-dimethylpentane	21
131	2,3-dimethylpentane	22
132	2,4-dimethylpentane	23
133	3,3-dimethylpentane	24
134	2,2,3-trimethylbutane	25
135	N-octane	27
136	2-methylheptane	28
137	3-methylheptane	29
138	4-methylheptane	30
139	3-ethylhexane	31
140	2,2-dimethylhexane	32
141	2,3-dimethylhexane	33
142	2,4-dimethylhexane	34
143	2,5-dimethylhexane	35
144	3,3-dimethylhexane	36

Navigation: Hoja1 PCD (+)





# Entalpía de la fase líquida

**LiquidEnthalpy**( $T$  [K],  $P$  [bar],  $x_1, x_2, \dots, x_n$ )

Nombre de la función  
Entalpía [J/mol]

Temperatura [K]

Presión [bar]

Fracción molar de cada componente  
Numero máximo 10 y mínimo 1

Ejemplos:

	A	B	C	D
1	T	298.15 K		
2	P	1.01325 bar		
3	x1	0.5		
4	x2	0.5		
5	H	=LiquidEnthalpy(B1,B2,B3,B4)		
6				

```
=LiquidEnthalpy(298.15,1.01325,0.5,0.5)
```

# Raoult Law: Liquid Enthalpy

1. Busca y almacena todos los parámetros de los compuestos puros.
2. Calcula el calor de vaporización ( $\Delta H_v$ ) de cada compuesto (Chemsep equation).
3. Calcula la entalpia de cada compuesto puro:

$$H_{i,T,P}^l = \Delta H_{i,f}^0 + \int_{298.15}^T c p_i^{IG} dT + \cancel{H_{i,T,P}^{d,sat}} - \Delta H_{i,v} + \left( \cancel{H_{i,T,P}^l} - \cancel{H_{i,T,P}^{l,sat}} \right)$$

4. Calcula la entalpia de la mezcla y devuelve su valor:

$$H_{T,P} = \sum_{i=1:n} x_i H_{i,T,P}^l + \cancel{H^{ex}}$$

# NRTL + IG: Liquid Enthalpy

1. Busca y almacena todos los parámetros de los compuestos puros.
2. Calcula el calor de vaporización ( $\Delta H_v$ ) de cada compuesto (Chemsep equation).
3. Calcula la entalpia de cada compuesto puro:

$$H_{i,T,P}^l = \Delta H_{i,f}^0 + \int_{298.15}^T c p_i^{IG} dT + \cancel{H_{i,T,P}^{d,sat}} - \Delta H_{i,v} + \left( \cancel{H_{i,T,P}^l} - \cancel{H_{i,T,P}^{l,sat}} \right)$$

4. Calcula la entalpia de exceso:

$$H^{ex} = -RT^2 \sum_{i=1}^n x_i \frac{\partial \ln \gamma_i}{\partial T}$$

5. Calcula la entalpia de la mezcla y devuelve su valor:

$$H_{T,P} = \sum_{i=1:n} x_i H_{i,T,P}^l + H^{ex}$$

# Peng Robinson: Liquid Enthalpy

1. Busca y almacena todos los parámetros de los compuestos puros.

2. Calcula todos los parámetros de la mezcla según las reglas de mezclado:

$$b_m = \sum_{i=1}^n y_i b_i; \quad \Theta_m = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n y_i y_j (1 - k_{ij}) \sqrt{\Theta_i \Theta_j}; \quad B'_m = \frac{b_m P}{RT}; \quad \Theta'_m = \frac{\Theta_m P}{(RT)^2}$$



3. Resuelve el polinomio cúbico de Peng Robinson seleccionando la raíz mas pequeña:

$$z^3 + (B'_m - 1)z^2 + (\Theta'_m - 3B'_m{}^2 - 2B')z + (B'_m{}^3 + B'_m{}^2 - \Theta'_m B'_m) = 0$$

4. Calcula la entalpía departure o residual de la mezcla:

$$H^d = \frac{(\Theta_m - T(d\Theta_m/dT))}{2\sqrt{2}b_m} \ln \left( \frac{Z + B'_m(1 - \sqrt{2})}{Z + B'_m(1 + \sqrt{2})} \right) + RT(Z - 1)$$

5. Calcula la entalpía de cada compuesto puro como gas ideal:

$$H_{i,T,P}^{IG} = \Delta H_{i,f}^0 + \int_{298.15}^T c_{p_i}^{IG} dT$$

6. Calcula la entalpía de la mezcla y devuelve su valor:

$$H_{T,P} = \sum_{i=1:n} x_i H_{i,T,P}^{IG} + H^d$$

# Entropía de la fase líquida

Temperatura [K]      Presión [bar]

**LiquidEntropy**(T [K], P [bar],  $x_1, x_2, \dots, x_n$ )

Nombre de la función      Fracción molar de cada componente

Entropía [J/(mol.K)]

Ejemplo:

	A	B	C	D
1	T	298.15 K		
2	P	1.01325 bar		
3	x1	0.5		
4	x2	0.5		
5	S	=LiquidEntropy(B1,B2,B3,B4)		

# Raoult Law: Liquid Entropy

1. Busca y almacena todos los parámetros de los compuestos puros.
2. Calcula el calor de vaporización ( $\Delta H_{i,v}$ ) y presión de saturación ( $P^{sat}$ ) de cada compuesto (Chemsep equations).
3. Calcula la entropía de cada compuesto puro:

$$S_{i,T,P}^l = S_{i,0}^{IG} + \int_{298.15}^T \frac{cP_i^{IG}}{T} dT - R \ln \left( \frac{P_{i,T}^{sat}}{P_0} \right) + \cancel{S_{i,T,P^{sat}}^{d}} - \frac{\Delta H_{i,v}}{T} + \left( \cancel{S_{i,T,P}^l} - \cancel{S_{i,T,P^{sat}}^l} \right)$$

4. Calcula la entropía de la mezcla y devuelve su valor:

$$S_{T,P}^l = \sum_{i=1:n} x_i S_{i,T,P}^l - R \sum_{i=1:n} x_i \ln(x_i) + \cancel{S^{ex}}$$

# NRTL + IG: Liquid Entropy

1. Busca y almacena todos los parámetros de los compuestos puros.
2. Calcula el calor de vaporización ( $\Delta H_{i,v}$ ) y presión de saturación ( $P^{sat}$ ) de cada compuesto (Chemsep equations).
3. Calcula la entropía de cada compuesto puro:

$$S_{i,T,P}^l = S_{i,0}^{IG} + \int_{298.15}^T \frac{cp_i^{IG}}{T} dT - R \ln \left( \frac{P_{i,T}^{sat}}{P_0} \right) + \cancel{S_{i,T,P^{sat}}^d} - \frac{\Delta H_{i,v}}{T} + \left( \cancel{S_{i,T,P}^l} - \cancel{S_{i,T,P^{sat}}^l} \right)$$

4. Calcula la entropía de exceso:

$$S^{ex} = - \sum_{i=1}^n x_i \left( R \ln \gamma_i + RT \frac{\partial \ln \gamma_i}{\partial T} \right)$$

5. Calcula la entropía de la mezcla y devuelve su valor:

$$S_{T,P}^l = \sum_{i=1:n} x_i S_{i,T,P}^l - R \sum_{i=1:n} x_i \ln(x_i) + S^{ex}$$

# Peng Robinson: LiquidEntropy

1. Busca y almacena todos los parámetros de los compuestos puros.

2. Calcula todos los parámetros de la mezcla según las reglas de mezclado:

$$b_m = \sum_{i=1}^n y_i b_i; \quad \Theta_m = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n y_i y_j (1 - k_{ij}) \sqrt{\Theta_i \Theta_j}; \quad B'_m = \frac{b_m P}{RT}; \quad \Theta'_m = \frac{\Theta_m P}{(RT)^2}$$

3. Resuelve el polinomio cúbico de Peng Robinson seleccionando la raíz mas pequeña:

$$z^3 + (B'_m - 1) z^2 + (\Theta'_m - 3B'_m{}^2 - 2B') z + (B'_m{}^3 + B'_m{}^2 - \Theta'_m B'_m) = 0$$

4. Calcula la entropía departure o residual de la mezcla:

$$S^d = \frac{-(d\Theta_m/dT)}{2\sqrt{2}b_m} \ln \left( \frac{Z + B'_m(1 - \sqrt{2})}{Z + B'_m(1 + \sqrt{2})} \right) + R \ln(Z - B'_m)$$

5. Calcula la entropía de cada compuesto puro como gas ideal:

$$S_{i,T,P}^{IG} = S_{i,0}^{IG} - R \ln \left( \frac{P}{P_0} \right) + \int_{T_0}^T \frac{c p_i^{IG}}{T} dT$$

6. Calcula la entropía de la mezcla y devuelve su valor:

$$S_{T,P} = \sum_{i=1:n} x_i S_{i,T,P}^{IG} - R \sum_{i=1:n} x_i \ln(x_i) + S_{T,P}^d$$



# Entalpía y Entropía de la fase vapor

**VaporEnthalpy**(T [K], P [bar],  $x_1, x_2, \dots, x_n$ )

Temperatura [K]      Presión [bar]

Nombre de la función      Fracción molar de cada componente

Entalpía en [J/mol]

**VaporEntropy**(T [K], P [bar],  $x_1, x_2, \dots, x_n$ )

Temperatura [K]      Presión [bar]

Nombre de la función      Fracción molar de cada componente

Entropía en [J/(mol.K)]

# Raoult Law y NRTL + IG: VaporEnthalpy

1. Busca y almacena todos los parámetros de los compuestos puros.
2. Calcula la entalpía de cada compuesto puro como gas ideal:

$$H_{i,T,P}^{IG} = \Delta H_{i,f}^0 + \int_{298.15}^T c_{p_i}^{IG} dT$$

3. Calcula la entalpía de la mezcla y devuelve su valor:

$$H_{T,P} = \sum_{i=1:n} x_i H_{i,T,P}^{IG} + \cancel{H^d}$$

# Peng Robinson: VaporEnthalpy

1. Busca y almacena todos los parámetros de los compuestos puros.

2. Calcula todos los parámetros de la mezcla según las reglas de mezclado:

$$b_m = \sum_{i=1}^n y_i b_i; \quad \Theta_m = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n y_i y_j (1 - k_{ij}) \sqrt{\Theta_i \Theta_j}; \quad B'_m = \frac{b_m P}{RT}; \quad \Theta'_m = \frac{\Theta_m P}{(RT)^2}$$

3. Resuelve el polinomio cúbico de Peng Robinson seleccionando la raíz mas grande:

$$z^3 + (B'_m - 1)z^2 + (\Theta'_m - 3B'_m{}^2 - 2B')z + (B'_m{}^3 + B'_m{}^2 - \Theta'_m B'_m) = 0$$

4. Calcula la entalpía departure o residual de la mezcla:

$$H^d = \frac{(\Theta_m - T(d\Theta_m/dT))}{2\sqrt{2}b_m} \ln \left( \frac{Z + B'_m(1 - \sqrt{2})}{Z + B'_m(1 + \sqrt{2})} \right) + RT(Z - 1)$$

5. Calcula la entalpía de cada compuesto puro como gas ideal:

$$H_{i,T,P}^{IG} = \Delta H_{i,f}^0 + \int_{298.15}^T c p_i^{IG} dT$$

6. Calcula la entalpía de la mezcla y devuelve su valor:

$$H_{T,P} = \sum_{i=1:n} x_i H_{i,T,P}^{IG} + H^d$$

# Raoult Law y NRTL + IG: VaporEntropy

1. Busca y almacena todos los parámetros de los compuestos puros.
2. Calcula la entropía de cada compuesto puro como gas ideal:

$$S_{i,T,P}^{IG} = S_{i,0}^{IG} - R \ln \left( \frac{P}{P_0} \right) + \int_{T_0}^T \frac{cp_i^{IG}}{T} dT$$

3. Calcula la entropía de la mezcla y devuelve su valor:

$$S_{T,P} = \sum_{i=1:n} x_i S_{i,T,P}^{IG} - R \sum_{i=1:n} x_i \ln(x_i) + \cancel{S_{T,P}^d}$$

# Peng Robinson: VaporEntropy

1. Busca y almacena todos los parámetros de los compuestos puros.

2. Calcula todos los parámetros de la mezcla según las reglas de mezclado:

$$b_m = \sum_{i=1}^n y_i b_i; \quad \Theta_m = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n y_i y_j (1 - k_{ij}) \sqrt{\Theta_i \Theta_j}; \quad B'_m = \frac{b_m P}{RT}; \quad \Theta'_m = \frac{\Theta_m P}{(RT)^2}$$

3. Resuelve el polinomio cúbico de Peng Robinson seleccionando la raíz mas grande:

$$z^3 + (B'_m - 1)z^2 + (\Theta'_m - 3B'_m{}^2 - 2B')z + (B'_m{}^3 + B'_m{}^2 - \Theta'_m B'_m) = 0$$

4. Calcula la entropía departure o residual de la mezcla:

$$S^d = \frac{-(d\Theta_m/dT)}{2\sqrt{2}b_m} \ln \left( \frac{Z + B'_m(1 - \sqrt{2})}{Z + B'_m(1 + \sqrt{2})} \right) + R \ln(Z - B'_m)$$

5. Calcula la entropía de cada compuesto puro como gas ideal:

$$S_{i,T,P}^{IG} = S_{i,0}^{IG} - R \ln \left( \frac{P}{P_0} \right) + \int_{T_0}^T \frac{cP_i^{IG}}{T} dT$$

6. Calcula la entropía de la mezcla y devuelve su valor:

$$S_{T,P} = \sum_{i=1:n} x_i S_{i,T,P}^{IG} - R \sum_{i=1:n} x_i \ln(x_i) + S_{T,P}^d$$

# Densidad de la fase líquida o vapor

Temperatura [K]

Presión [bar]

**VaporDensity**(T [K], P [bar],  $x_1, x_2, \dots, x_n$ )

Nombre de la función

Fracción molar de cada componente

Densidad para el vapor en [mol/m<sup>3</sup>]

Temperatura [K]

Presión [bar]

**LiquidDensity**(T [K], P [bar],  $x_1, x_2, \dots, x_n$ )

Nombre de la función

Fracción molar de cada componente

Densidad para el liquido en [mol/m<sup>3</sup>]

# Raoult Law y NRTL + IG: VaporDensity

1. Calcula la densidad como gas ideal y devuelve su valor:

$$\rho_v = \frac{P}{RT}$$

# Peng Robinson: VaporDensity

1. Busca y almacena todos los parámetros de los compuestos puros.
2. Calcula todos los parámetros de la mezcla según las reglas de mezclado:

$$b_m = \sum_{i=1}^n y_i b_i; \quad \Theta_m = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n y_i y_j (1 - k_{ij}) \sqrt{\Theta_i \Theta_j}; \quad B'_m = \frac{b_m P}{RT}; \quad \Theta'_m = \frac{\Theta_m P}{(RT)^2}$$

3. Resuelve el polinomio cúbico de Peng Robinson seleccionando la raíz mas grande:

$$z^3 + (B'_m - 1)z^2 + (\Theta'_m - 3B'_m{}^2 - 2B'_m)z + (B'_m{}^3 + B'_m{}^2 - \Theta'_m B'_m) = 0$$

4. Calcula la densidad de la mezcla y devuelve su valor:

$$\rho_v = \frac{P}{z_v RT}$$



# Raoult Law y NRTL + IG: LiquidDensity

1. Busca y almacena todos los parámetros de los compuestos puros.
2. Calcula todos los parámetros de la mezcla según las reglas de mezclado de Hankinson y Thomson:

$$(V^*Tc)_{ij} = \sqrt{V_i^*Tc_i V_j^*Tc_j}$$

$$Tr_m = \frac{T}{Tc_m}$$

$$V_m^* = \frac{1}{4} \left( \sum_{i=1:n} x_i V_i^* + 3 \left( \sum_{i=1:n} x_i (V_i^*)^{\frac{2}{3}} \right) \left( \sum_{i=1:n} x_i (V_i^*)^{\frac{1}{3}} \right) \right)$$

$$\omega_{m,SRK} = \sum_{i=1:n} x_i \omega_{i,SRK}$$

$$Tc_m = \frac{\sum_{i=1:n} \sum_{j=1:n} x_i x_j (V^*Tc)_{ij}}{V_m^*}$$

3. Calcula la densidad de la mezcla y devuelve su valor:

$$\rho_l = \frac{1}{V_m^* V_m^{(0)} \left[ 1 - \omega_{m,SRK} V_m^{(\delta)} \right]}$$

# Peng Robinson: LiquidDensity

1. Busca y almacena todos los parámetros de los compuestos puros.
2. Calcula todos los parámetros de la mezcla según las reglas de mezclado:

$$b_m = \sum_{i=1}^n y_i b_i; \quad \Theta_m = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n y_i y_j (1 - k_{ij}) \sqrt{\Theta_i \Theta_j}; \quad B'_m = \frac{b_m P}{RT}; \quad \Theta'_m = \frac{\Theta_m P}{(RT)^2}$$

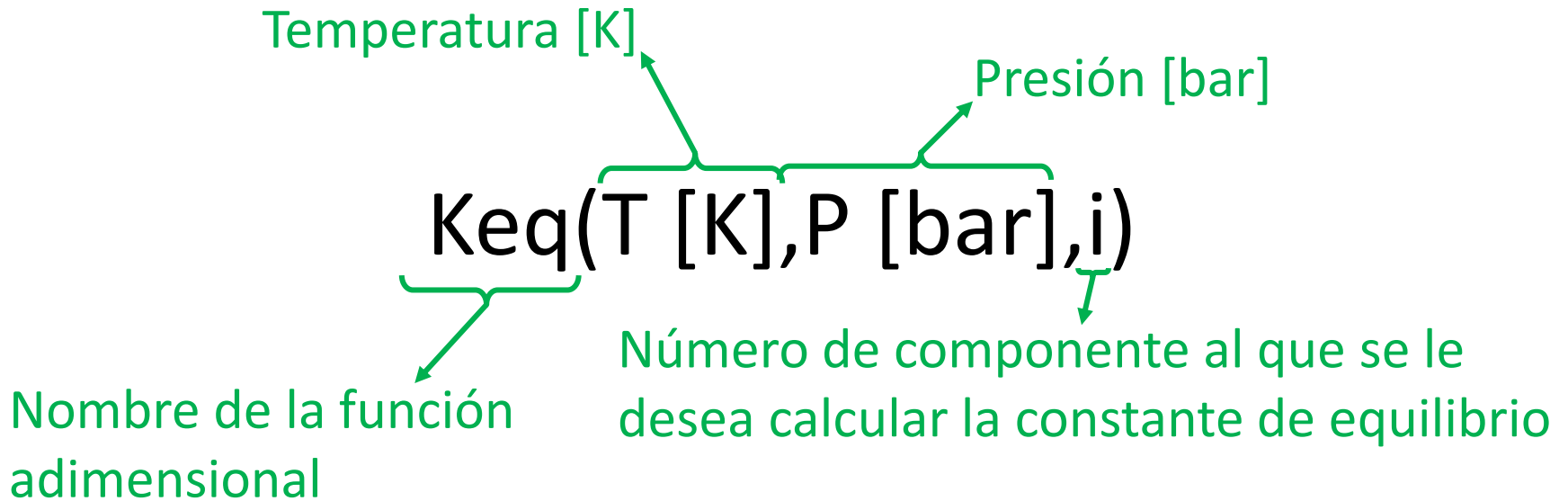
3. Resuelve el polinomio cúbico de Peng Robinson seleccionando la raíz mas pequeña:

$$z^3 + (B'_m - 1)z^2 + (\Theta'_m - 3B'_m{}^2 - 2B'_m)z + (B'_m{}^3 + B'_m{}^2 - \Theta'_m B'_m) = 0$$

4. Calcula la densidad de la mezcla y devuelve su valor:

$$\rho_l = \frac{P}{z_l RT}$$

# Constante de equilibrio Ley de Raoult



Ejemplo:

	A	B	
1	T	298.15	K
2	P	1.01325	bar
3	x1	0.5	
4	x2	0.5	
5	K1	=keq(B1,B2,1)	
6	K2	=keq(B1,B2,2)	

# Raoult Law: Keq

1. Busca y almacena todos los parámetros de los compuestos puros.
2. Calcula la presión de saturación ( $P^{sat}$ ) del compuesto (Chemsep equation).

$$P^{sat} = \exp\left(a + \frac{b}{T} + c \ln(T) + dT^e\right)$$

3. Calcula la constante de equilibrio y devuelve su valor:

$$K_i = \frac{P_i^s}{P} \quad \leftarrow \quad K_i = \frac{\cancel{\gamma_i} \cancel{\phi_i^s} P_i^s \cancel{P} \cancel{y_i}}{\cancel{\phi_i^V} P}$$

# Constante de equilibrio NRTL IG

Temperatura [K]      Presión [bar]      Fracción molar de la fase líquida

$$\text{Keq}(T [K], P [\text{bar}], x_1, x_2, \dots, x_n, i)$$

Nombre de la función  
adimensional

Número de componente al que se le  
desea calcular la constante de equilibrio

Ejemplo:

	O	P	
T		359.844110387919	K
P		1.01325	bar
x1		0.1	
x2		0.9	
K1		=keq(P1,P2,P3,P4,1)	
K2		=keq(P1,P2,P3,P4,2)	
y1		=P5*P3	
y2		=P6*P4	

# NRTL + IG: Keq

1. Busca y almacena todos los parámetros de los compuestos puros.
2. Calcula la presión de saturación ( $P^{sat}$ ) del compuesto (Chemsep equations).

$$P^{sat} = \exp\left(a + \frac{b}{T} + c \ln(T) + d T^e\right)$$

3. Calcula el volumen del compuesto puro y el factor de poynting

$$v_i^L = V_i^* V_i^{(0)} \left[1 - \omega_{i,SRK} V_i^{(\delta)}\right] \quad Poy_i = \exp\left(\frac{v_i^L (P - P_i^{sat})}{RT}\right)$$

4. Calcula el coeficiente de actividad del compuesto

$$\gamma_i = \exp\left(\frac{C_i}{S_i} + \sum_{k=1}^N x_k G_{i,k} \left(\frac{\tau_{i,k}}{S_k} - \frac{C_k}{S_k^2}\right)\right)$$

5. Calcula la constante de equilibrio y devuelve su valor

$$K_i = \frac{\gamma_i P_i^s Poy_i}{P} \quad \leftarrow \quad K_i = \frac{\gamma_i \cancel{\phi_i^s} P_i^s Poy_i}{\cancel{\phi_i^L} P}$$

# Constante de equilibrio Peng Robinson

Temperatura [K]      Presión [bar]      Fracción molar de la fase líquida  
 Fracción molar de la fase vapor

$$K_{eq}(T [K], P [\text{bar}], x_1, \dots, x_n, y_1, \dots, y_n, i)$$

Nombre de la función  
adimensional

Número de componente al que se le  
desea calcular la constante de equilibrio

Ejemplo:

	A	B	
1	T	339.944193097948	K
2	P	1.01325	bar
3	x1	0.209187575432374	
4	x2	0.336922158234058	
5	x3	0.453890266333558	
6	y1	0.51121863685144	
7	y2	0.319616762648912	
8	y3	0.169164600499663	
9	K1	=Keq(B1,B2,B3,B4,B5,B6,B7,B8,1)	
10	K2	=Keq(B1,B2,B3,B4,B5,B6,B7,B8,2)	
11	K3	=Keq(B1,B2,B3,B4,B5,B6,B7,B8,3)	
12	y1=K1*x1	0.511218634370478	
13	y2=K2*x2	0.319616762486832	
14	y3=K3*x3	0.16916460118867	

# Peng Robinson: Keq

1. Busca y almacena todos los parámetros de los compuestos puros.
2. Calcula todos los parámetros de la mezcla de líquido según las reglas de mezclado:

$$b_L = \sum_{i=1}^n x_i b_i; \quad \Theta_L = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n x_i x_j (1 - k_{ij}) \sqrt{\Theta_i \Theta_j}; \quad B'_L = \frac{b_L P}{RT}; \quad \Theta'_L = \frac{\Theta_L P}{(RT)^2}$$

3. Resuelve el polinomio cúbico de Peng Robinson seleccionando la raíz mas pequeña:

$$z^3 + (B'_L - 1)z^2 + (\Theta'_L - 3B'_L{}^2 - 2B'_L)z + (B'_L{}^3 + B'_L{}^2 - \Theta'_L B'_L) = 0$$

4. Calcula el coeficiente de fugacidad para la fase líquida

$$\phi_i^L = \exp \left[ (Z_L - 1) \frac{b_i}{b_L} - \ln(Z_L - B'_L) + \frac{\Theta'_L}{2\sqrt{2}B'_L} \left( \frac{2 \sum_{k=1}^n x_k (1 - k_{ki}) \sqrt{\Theta_k \Theta_i}}{\Theta_L} - \frac{b_i}{b_L} \right) \ln \left\{ \frac{Z_L + B'_L (1 - \sqrt{2})}{Z_L + B'_L (1 + \sqrt{2})} \right\} \right]$$



# Peng Robinson: Keq

5. Calcula todos los parámetros de la mezcla de vapor según las reglas de mezclado:

$$b_V = \sum_{i=1}^n y_i b_i; \quad \Theta_V = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n y_i y_j (1 - k_{ij}) \sqrt{\Theta_i \Theta_j}; \quad B'_V = \frac{b_V P}{RT}; \quad \Theta'_V = \frac{\Theta_V P}{(RT)^2}$$

6. Resuelve el polinomio cúbico de Peng Robinson seleccionando la raíz mas grande:

$$z^3 + (B'_V - 1)z^2 + (\Theta'_V - 3B'_V{}^2 - 2B'_V)z + (B'_V{}^3 + B'_V{}^2 - \Theta'_V B'_V) = 0$$

7. Calcula el coeficiente de fugacidad para la fase vapor

$$\phi_i^V = \exp \left[ (Z_V - 1) \frac{b_i}{b_V} - \ln(Z_V - B'_V) + \frac{\Theta'_V}{2\sqrt{2}B'_V} \left( \frac{2 \sum_{k=1}^n y_k (1 - k_{ki}) \sqrt{\Theta_k \Theta_i}}{\Theta_V} - \frac{b_i}{b_V} \right) \ln \left\{ \frac{Z_V + B'_V (1 - \sqrt{2})}{Z_V + B'_V (1 + \sqrt{2})} \right\} \right]$$

8. Calcula la constante de equilibrio y devuelve su valor

$$K_i = \frac{\phi_i^L}{\phi_i^V}$$

# ¡Precaución!

Revisar: Según la configuración del idioma los argumentos de las funciones de Excel se separan con coma (,) o punto y coma (;).

En caso de no funcionar con la coma utilizar el punto y coma.

Por ejemplo:



VaporEnthalpy(T [K];P [bar];x<sub>1</sub>; x<sub>2</sub>; ...; x<sub>n</sub>)

## Mejoras para el año 2022

- Incluir en NRTL la variación por temperatura en los parámetros de interacción binaria.

$$\tau_{i,j} = \frac{a_{i,j} + b_{i,j}T}{RT}$$

- Implementar las derivadas analíticas para mejorar los algoritmos de resolución.
- Agregar algún modelo de actividad y/o ecuación de estado.
- Unir todos los modelos en una sola planilla para poder seleccionar un modelo para fase líquida y otro para vapor (Ej: NRTL + PR).