

Diseño, Simulación, Optimización y Seguridad de Procesos

Librerías termodinámicas para Excel

2025

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.xlsxsm



Peng Robinson.xlsxsm



Raoult Law.xlsxsm

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:

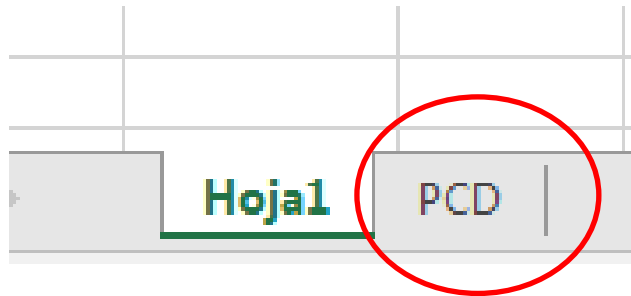
- Entalpía de la fase líquida.
- Entalpía de la fase vapor.
- Entropía de la fase líquida.
- Entropía de la fase vapor.
- Densidad de la fase líquida.
- Densidad de la fase vapor.
- Constante de equilibrio líquido-vapor de cada componente.

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

Hoja1

PCD

+

Parámetros de interacción binaria

Peng Robinson

[illegible][illegible]

NRTL + IG

[illegible]

Entalpía de la fase líquida

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

Temperatura [K] Presión [bar]

Nombre de la función
Entalpía [J/mol]

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 (ΔH_v) de cada compuesto (Chemsep equation).
3. Calcula la entalpia de cada compuesto puro:

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

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 (ΔH_v) de cada compuesto (Chemsep equation).
3. Calcula la entalpia de cada compuesto puro:

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

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:

$$Z^3 + (B'_m - 1)Z^2 + (\Theta'_m - 3B_m'^2 - 2B'_m)Z + (B_m'^3 + B_m'^2 - \Theta'_m B'_m) = 0$$

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

LiquidEntropy(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 [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 (ΔH_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: LiquidEntropy

1. Busca y almacena todos los parámetros de los compuestos puros.
2. Calcula el calor de vaporización (ΔH_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:

$$Z^3 + (B'_m - 1)Z^2 + (\Theta'_m - 3B_m'^2 - 2B'_m)Z + (B_m'^3 + B_m'^2 - \Theta'_m B'_m) = 0$$

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:

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

Entalpía y Entropía de la fase vapor

Temperatura [K] Presión [bar]

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

Nombre de la función
Entalpía en [J/mol]

Fracción molar de cada componente

Temperatura [K] Presión [bar]

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

Nombre de la función
Entropía en [J/(mol.K)]

Fracción molar de cada componente

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:

$$Z^3 + (B'_m - 1)Z^2 + (\Theta'_m - 3B_m'^2 - 2B'_m)Z + (B_m'^3 + B_m'^2 - \Theta'_m B'_m) = 0$$

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:

$$Z^3 + (B'_m - 1)Z^2 + (\Theta'_m - 3B_m'^2 - 2B'_m)Z + (B_m'^3 + B_m'^2 - \Theta'_m B'_m) = 0$$

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/m³]

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/m³]

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

Temperatura [K]

Presión [bar]

$K_{eq}(T [K], P [bar], i)$

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

Nombre de la función adimensional

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).

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

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

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

Constante de equilibrio NRTL IG

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

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

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

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

Constante de equilibrio Peng Robinson

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

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

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 liquido 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:

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

4. Calcula el coeficiente de fugacidad para la fase liquida

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

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:

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

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_1 ; x_2 ; ...; x_n)

Mejoras...

- 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 otro modelo de actividad y/o ecuación de estado (UNIQUAC, SRK, etc.).
- Unir todos los modelos en una sola planilla para poder seleccionar un modelo para fase líquida y otro para vapor (Ej: NRTL + PR).