

# **THERMOKIT v1.2**

Desarrollado por:

David Jhonatan Baez Pérez

Lima, Perú

2021

## TABLA DE CONTENIDO

INTRODUCCIÓN.....	1
INSTALACIÓN .....	1
INICIO DE LA APLICACIÓN.....	2
PROGRAMAS .....	2
EoSolver.....	2
Uso de EoSolver.....	2
Hojas de Cálculo (Ecuación de estado del Virial) .....	4
Uso de las Hojas de Cálculo.....	4
Funciones específicas .....	5
Uso de las funciones.....	6
EJEMPLOS .....	6
Ejemplo 1 .....	6
Ejemplo 2.....	9
Ejemplo 3.....	12
Ejemplo 4.....	16
Ejemplo 5.....	18
APÉNDICE A: ECUACIONES EMPLEADAS EN THERMOKIT .....	20
A-1 La ecuación de estado cúbica genérica.....	21
A-2 Propiedades Residuales .....	22
A-3 Fugacidad.....	22
A-4 Ecuación del Virial .....	22
A-5 Funciones específicas .....	24
HISTORIAL DE VERSIONES.....	25
Versión 1.1 .....	25
Versión 1.2.....	25
CRÉDITOS.....	26
REFERENCIAS .....	26

## INTRODUCCIÓN

La aplicación ThermoKit para HP Prime contiene programas que permiten resolver ecuaciones cúbicas de estado, calcular propiedades residuales (en su forma adimensional) y calcular coeficientes de fugacidad. Las ecuaciones cúbicas de estado disponibles son: van der Waals, Redlich-Kwong, Soave-Redlich-Kwong y Peng-Robinson. También se dispone de la ecuación de estado del Virial, pero los cálculos se realizan en la Hoja de Cálculo de la aplicación.

Las ecuaciones que utiliza el programa se extrajeron del libro *Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics, 8th Edition* de J. M. Smith.

Esta aplicación ha sido probada y funciona correctamente en una calculadora gráfica HP Prime con la siguiente versión de software: **2.1.14425 (2020 01 16)**. La aplicación puede funcionar bien en calculadoras con otras versiones de software, pero no lo garantizo; es responsabilidad del usuario verificar que la aplicación no presente problemas con la versión de software de su calculadora.

## INSTALACIÓN

- 1) Conecta tu calculadora a tu PC y ejecuta el Kit de Conectividad HP (HP Connectivity Kit).
- 2) Arrastra la carpeta **ThermoKit.hpappdir** al panel de calculadoras en el Kit de Conectividad HP.
- 3) Verifica que la app ThermoKit se haya instalado en tu calculadora.

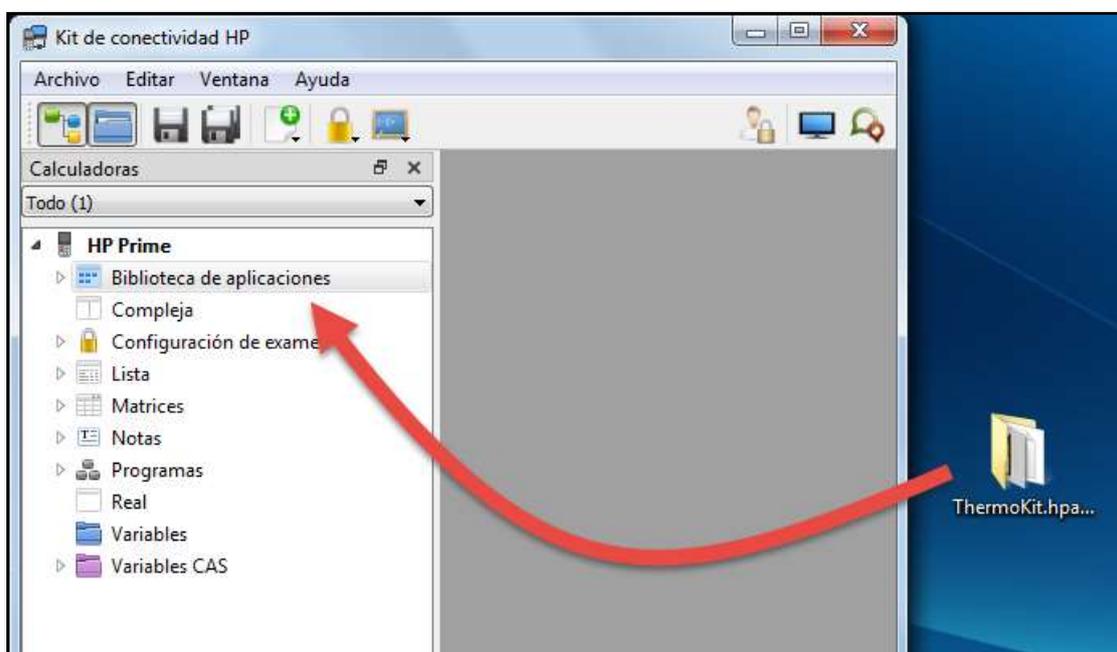


Figura 1. Instalación de ThermoKit

## INICIO DE LA APLICACIÓN



- 1) Para iniciar la app ThermoKit, presione la tecla .
- 2) Luego, busque la app ThermoKit y pulse sobre el ícono.
- 3) Al iniciar la app, será dirigido a la pantalla de inicio.

## PROGRAMAS

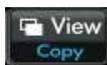
La app ThermoKit contiene programas que pueden resolver ecuaciones de estado, hace uso de la Hoja de Cálculo para resolver la ecuación de estado del Virial y contiene funciones que permiten calcular la variación de entalpía y la variación de entropía para un gas ideal.

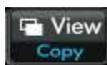
A continuación, se procede a describir los programas.

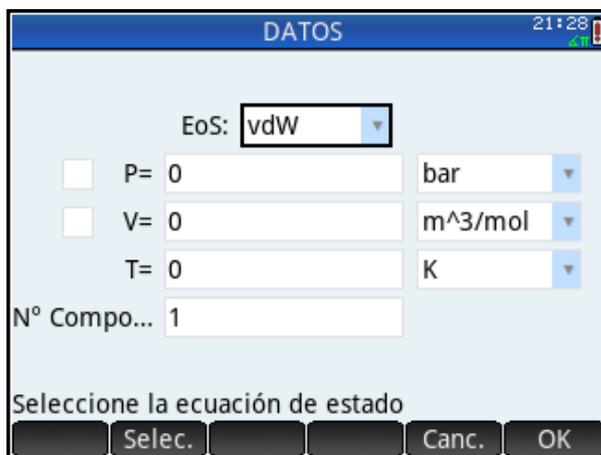
### EoSolver

EoSolver permite calcular el volumen molar o la presión, y el coeficiente de fugacidad para una especie pura o una mezcla utilizando una ecuación cúbica de estado. Las propiedades residuales (en su forma adimensional) se calculan solo para una especie pura. Las ecuaciones cúbicas que puede elegir son: van der Waals (vdW), Redlich-Kwong (RK), Soave-Redlich-Kwong (SRK) y Peng-Robinson (PR).

### Uso de EoSolver



- 1) Para acceder a EoSolver, presione la tecla , seleccione y ejecute EoSolver.
- 2) En la siguiente ventana, ingrese los datos que se le solicita:
  - a) Seleccione la ecuación cúbica de estado que utilizará.
  - b) Marque la casilla asociada a la variable que desea hallar (presión o volumen molar).
  - c) Ingrese la temperatura y, la presión o el volumen molar del sistema. Seleccione sus unidades.
  - d) Ingrese el número de componentes presentes en el sistema.



La imagen muestra una interfaz de usuario de una aplicación titulada "DATOS". En la parte superior derecha, se muestra el tiempo "21:28". El formulario contiene los siguientes elementos:

- Un menú desplegable etiquetado "EoS:" con "vdW" seleccionado.
- Una fila de entrada con un cuadro de verificación desactivado, "P=" seguido de un campo de texto con "0" y un menú desplegable con "bar".
- Una fila de entrada con un cuadro de verificación desactivado, "V=" seguido de un campo de texto con "0" y un menú desplegable con "m^3/mol".
- Una fila de entrada con "T=" seguido de un campo de texto con "0" y un menú desplegable con "K".
- Una fila de entrada con "Nº Compo..." seguido de un campo de texto con "1".
- Una etiqueta "Seleccione la ecuación de estado" ubicada sobre una barra de botones que incluye "Selec.", "Canc." y "OK".

Figura 2. Ingreso de datos del sistema en EoSolver

- 3) Si ingresó una (1) componente, es decir, una especie pura:
  - a) Ingrese las propiedades críticas de la especie y su factor acéntrico.
  - b) El valor del factor acéntrico solo es necesario en las ecuaciones de estado de SRK y PR; si seleccionó la ecuación de vDW o RK, el programa no tomará en cuenta el factor acéntrico.
  - c) Se muestra una matriz de resultados; las unidades de las variables están en SI.
  - d) Se muestran los resultados en el Terminal.

The screenshot shows a dialog box titled 'DATOS' with a system clock of 21:30. It contains three input fields: 'Pc=' with a value of '0' and a unit dropdown set to 'bar'; 'Tc=' with a value of '0' and a unit dropdown set to 'K'; and 'omega=' with a value of '0'. Below the inputs, the text 'Ingrese la Presión crítica' is displayed. At the bottom, there are buttons for 'Editar', 'Canc.', and 'OK'.

Figura 3. Ingreso de propiedades críticas para una especie pura en EoSolver

- 4) Si ingresó más de una componente, es decir, una mezcla:
  - a) Selecciones las unidades de las propiedades críticas de las componentes. Si cuenta los parámetros de interacción binaria  $k_{ij}$ , marque la casilla (Figura 4). Si no marca la casilla, se asumirá  $k_{ij} = 0$ .
  - b) En la matriz de datos, ingrese la fracción molar, las propiedades críticas (de acuerdo con las unidades que seleccionó anteriormente) y el factor acéntrico para cada componente (Figura 5).
  - c) Nuevamente, el valor del factor acéntrico solo es necesario en las ecuaciones de estado de SRK y PR; si seleccionó la ecuación de vDW o RK, el programa no tomará en cuenta el factor acéntrico.
  - d) Se muestra la matriz de resultados para cada componente; las unidades de las variables están en SI.
  - e) Se muestran los resultados para la mezcla en el Terminal.

The screenshot shows a dialog box titled 'DATOS' with a system clock of 22:51. It contains two dropdown menus: 'Unidades Pc:' set to 'MPa' and 'Unidades Tc:' set to 'K'. Below them is a checkbox labeled 'Kij:' which is currently unchecked. At the bottom, the text 'Marque si usará parám. de interacción binaria Kij' is displayed. Below this text are buttons for '✓', 'Canc.', and 'OK'.

Figura 4. Selección de unidades para las propiedades críticas



ThermoKit				
A	B	C	D	E
1	T (K)	P (bar)	Tc (K)	Pc (bar)
2	298.15	20	132.2	37.45
3				
4	Tr	Pr	B0	B1
5	2.255295	0.534045	-3.186E-2	0.133350
6				
7	Z	Hr/(R Tc)	Hr [J/mol]	Sr/R
8	0.993465	-0.11326	-124.500	-4.369E-2
9				
10				

Figura 6. Hoja de Cálculo para una especie pura

c) Hoja de Cálculo “Mezcla Binaria”

- i) Ingrese la temperatura (T) y presión (P) del sistema, la fracción molar ( $y_i$ ), la temperatura crítica ( $T_{ci}$ ), la presión crítica ( $P_{ci}$ ), el volumen crítico ( $V_{ci}$ ), el factor de compresibilidad crítico ( $Z_{ci}$ ) y el factor acéntrico ( $\omega_i$ ) para cada componente. Opcionalmente, puede ingresar el parámetro  $k_{ij}$ .

ThermoKit				
A	B	C	D	E
1	Mezcla Bin			
2		T (K)	P (bar)	
3		323.15	0.25	
4		Nombre	Fraccion M	Tc (K)
5	Especie 1	Metil-Etil	0.5	535.5
6	Especie 2	Tolueno	0.5	591.8
7				
8		Cross-Par	$k_{ij}$	Tc (K)
9			0	562.9466
10				41.283

Figura 7. Hoja de Cálculo para una mezcla binaria

Si por equivocación modificó alguna de las celdas que contenía fórmulas, puede formatear la Hoja de Cálculo otra vez para restablecer el contenido de todas las celdas.

### Funciones específicas

ThermoKit también contiene las siguientes cuatro funciones:

- MCPH
- ICPH
- MCPS
- ICPS

Estas funciones son idénticas a las funciones presentadas en el libro de Smith.

## Uso de las funciones

Los argumentos de estas funciones son: (T<sub>0</sub>, T, A, B, C, D). Los argumentos deben ubicarse en ese orden y dentro de los paréntesis.

Para acceder a éstas funciones:



- 1) Presione la tecla .
- 2) Pulse **Apl.** en la pantalla.
- 3) Pulse **1ThermoKit**  en la pantalla.
- 4) Pulse **2Programa >** en la pantalla.
- 5) Seleccione la función que desea utilizar.

También puede acceder a estas funciones por medio del catálogo:



- 1) Presione la tecla .
- 2) Pulse **Catlg** en la pantalla.
- 3) Busque la función que desea utilizar.

## EJEMPLOS

Los siguientes ejemplos tratarán de guiar al usuario en la manipulación adecuada de la aplicación ThermoKit. Todos los ejemplos fueron extraídos del libro *Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics, 8th Edition* de J. M. Smith.

### Ejemplo 1

Teniendo en cuenta que la presión de vapor para el n-butano a 350 K es 9.4573 bar, halle los volúmenes molares de a) vapor saturado y b) líquido saturado de n-butano a esas condiciones.

Datos para n-butano:

$$T_c = 425.1 \text{ K}$$

$$P_c = 37.96 \text{ bar}$$

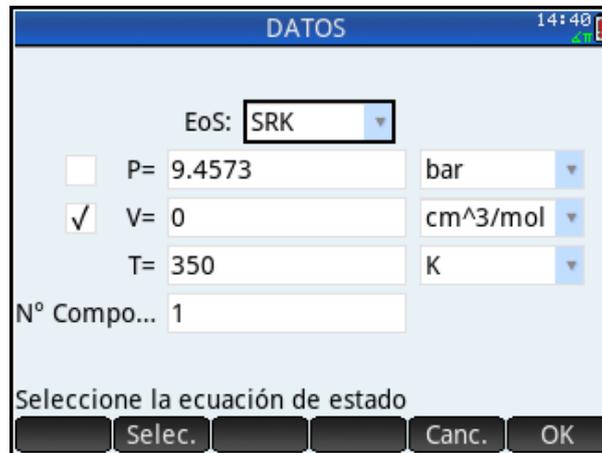
$$\omega = 0.200$$

Solución:

Emplearemos la ecuación de Soave-Redlich-Kwong.

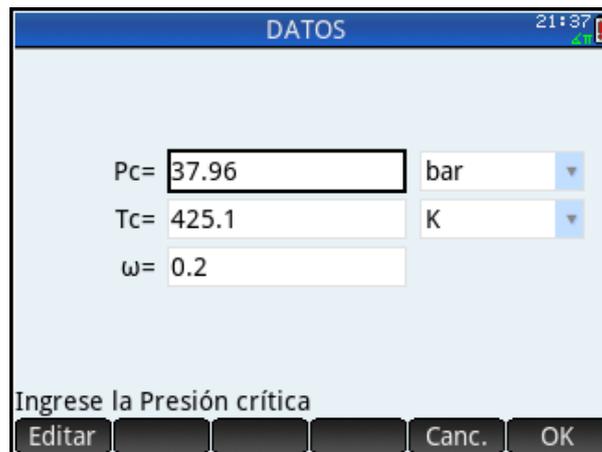
- 1) Ingresamos los datos del sistema al programa (Figura 8).
- 2) Ingresamos las propiedades críticas de la especie. Es necesario ingresar el factor acéntrico debido a que estamos utilizando la ecuación SRK (Figura 9).
- 3) Se muestra la matriz de resultados (Figura 10 y Figura 11). Los parámetros a y b de la ecuación cúbica tienen unidades del SI, las demás variables son adimensionales.

- 4) Se muestran los resultados en el Terminal: resultados de ecuación cúbica de estado (Figura 12), propiedades residuales (Figura 13) y coeficiente de fugacidad (Figura 14).
- a) Observe que el programa solo muestra dos de las tres raíces reales positivas de la ecuación cúbica:  $V_1$  (o  $Z_1$ ) y  $V_3$  (o  $Z_3$ ).  $V_1$  y  $Z_1$  corresponden al líquido,  $V_3$  y  $Z_3$  corresponden al vapor. El programa siempre calcula las propiedades residuales y el coeficiente de fugacidad para la mayor raíz, es decir,  $V_3$  y  $Z_3$ .



The screenshot shows a software interface titled 'DATOS' with a time of 14:40. It features several input fields and dropdown menus. The 'EoS' field is set to 'SRK'. There are three rows of input: the first row has a checkbox, 'P=' followed by the value '9.4573' and a unit dropdown set to 'bar'; the second row has a checked checkbox, 'V=' followed by the value '0' and a unit dropdown set to 'cm^3/mol'; the third row has 'T=' followed by the value '350' and a unit dropdown set to 'K'. Below these is a field for 'Nº Compo...' with the value '1'. At the bottom, there is a prompt 'Seleccione la ecuación de estado' and a row of buttons: 'Selec.', 'Canc.', and 'OK'.

Figura 8. Ingreso de datos del sistema (ejemplo 1)



The screenshot shows a software interface titled 'DATOS' with a time of 21:37. It features three rows of input fields: the first row has 'Pc=' followed by the value '37.96' and a unit dropdown set to 'bar'; the second row has 'Tc=' followed by the value '425.1' and a unit dropdown set to 'K'; the third row has 'ω=' followed by the value '0.2'. At the bottom, there is a prompt 'Ingrese la Presión crítica' and a row of buttons: 'Editar', 'Canc.', and 'OK'.

Figura 9. Ingreso de las propiedades críticas de la especie pura

RESULTADOS PARA LA ESPECIE PURA 21:37				
	Pr	Tr	a	b
1	0.2491386	0.8233357	1.6196124	8.0671E-5
2				

Editar Más Ir a Ir → Canc. OK

Figura 10. Matriz de resultados (parte 1) de la especie pura

RESULTADOS PARA LA ESPECIE PURA 21:37				
	$\beta$	q	$\ln \varphi$	$\varphi$
1	2.6217E-2	6.8990667	-0.166179	0.8468947
2				

Editar Más Ir a Ir → Canc. OK

Figura 11. Matriz de resultados (parte 2) de la especie pura

Terminal 21:38	
a =	1.61961236674 _Pa * m <sup>6</sup> / mol <sup>2</sup>
b =	8.06711076317E-5 _m <sup>3</sup> / mol
$\beta$ =	2.62169681355E-2
q =	6.89906671744
P =	9.4573 _bar
T =	350 _K
$V_1$ =	127.820104947 _cm <sup>3</sup> /mol
$Z_1$ =	4.15397249008E-2
$V_3$ =	2520.39873218 _cm <sup>3</sup> /mol
$Z_3$ =	0.819093913421

Figura 12. Solución de la ecuación de estado (ejemplo 1)



Figura 13. Propiedades residuales (ejemplo 1)

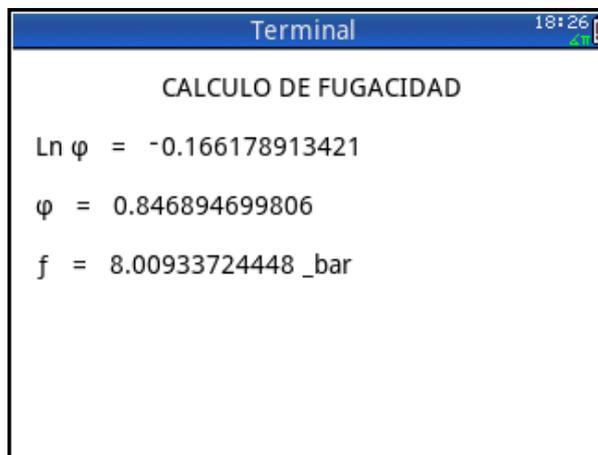


Figura 14. Coeficiente de fugacidad (ejemplo 1)

## Ejemplo 2

Una mezcla de vapor de  $N_2$  (1) y  $CH_4$  (2) a 200K y 30 bar contiene 40%mol de  $N_2$ . Determine los coeficientes de fugacidad para nitrógeno y metano en la mezcla utilizando la ecuación de Redlich-Kwong.

Datos para cada componente:

$$T_c (1) = 126.2 \text{ K}$$

$$T_c (2) = 190.6 \text{ K}$$

$$P_c (1) = 34 \text{ bar}$$

$$P_c (2) = 45.99 \text{ bar}$$

Solución:

- 1) Ingresamos los datos del sistema (Figura 15).
- 2) Seleccionamos las unidades de las propiedades críticas de las dos componentes (Figura 16).

- 3) Ingresamos la fracción molar y las propiedades críticas (según las unidades que seleccionamos en la ventana anterior) para cada componente (Figura 17).
  - a) Debido a que estamos utilizando la ecuación de estado RK, no es necesario ingresar el factor acéntrico para ninguna componente (el programa ignorará los valores que aparezcan en la columna del factor acéntrico).
- 4) Se muestran los resultados para cada componente (Figura 18 y Figura 19):
  - a)  $Pr_i$ : presión reducida de la componente  $i$  (adimensional).
  - b)  $Tr_i$ : temperatura reducida de la componente  $i$  (adimensional).
  - c)  $a_i$ : parámetro  $a_i$  de la ecuación de estado para la componente  $i$  (unidades SI).
  - d)  $b_i$ : parámetro  $b_i$  de la ecuación de estado para la componente  $i$ . (unidades SI).
  - e)  $(a \text{ Hat})_i$ : parámetro  $\bar{a}_i$  para la componente  $i$  (adimensional).
  - f)  $(q \text{ Hat})_i$ : parámetro  $\bar{q}_i$  para la componente  $i$  (adimensional).
- 5) Se muestra la solución de la ecuación cúbica de estado para la mezcla (Figura 20).

DATOS 14:40

EoS: RK

P= 30 bar

V= 0 cm<sup>3</sup>/mol

T= 200 K

N° Compo... 2

Ingrese la cantidad de componentes

Editar Canc. OK

Figura 15. Ingreso de los datos del sistema (ejemplo 2)

DATOS 23:03

Unidades Pc: bar

Unidades Tc: K

Seleccione las unidades de la Presión crítica

Selec. Canc. OK

Figura 16. Selección de unidades de las propiedades críticas

DATOS DE LAS COMPONENTES <span style="float: right;">23:05</span>				
	$y_i$	$Pc_i$	$Tc_i$	$\omega_i$
C-1	0.4	34	126.2	0
C-2	0.6	45.99	190.6	0
3				

Edit Más Ir a Ir ↓ Canc. OK

Figura 17. Ingreso de propiedades de las componentes

RESULTADOS PARA CADA COMPONENTE <span style="float: right;">23:05</span>				
	$Pr_i$	$Tr_i$	$a_i$	$b_i$
C-1	0.8823529	1.5847861	0.1099612	2.6738E-5
C-2	0.6523157	1.0493179	0.2278841	2.9855E-5
3				

Edit Más Ir a Ir → Canc. OK

Figura 18. Matriz de resultados (parte 1) para cada componente

RESULTADOS PARA CADA COMPONENTE <span style="float: right;">23:06</span>				
	$(a \text{ Hat})_i$	$(q \text{ Hat})_i$	$\ln \varphi_i$	$\varphi_i$
C-1	0.1023118	2.3919418	-5.664E-2	0.9449331
C-2	0.2244843	4.5579494	-0.199663	0.8190063
3				

Edit Más Ir a Ir → Canc. OK

Figura 19. Matriz de resultados (parte 2) para cada componente

```

Terminal 23:06
RESULTADOS

a = 0.175615347324_Pa * m^6 / mol^2
b = 2.86081298379E-5 _m^3 / mol
β = 5.16114489974E-2
q = 3.69154637

P = 30_bar
T = 200_K

V1 = 473.330318532_cm^3/mol
Z1 = 0.853927318293

```

Figura 20. Resultados para la mezcla

### Ejemplo 3

Calcular las raíces de la ecuación cúbica de estado Peng-Robinson para una mezcla de metano (1), etano (2) y propano (3) a una temperatura 233.2 K y una presión 0.1 MPa.

Componente	$y_i$	$P_{c_i}$ [MPa]	$T_{c_i}$ [K]	$\omega_i$
1	0.1	4.599	190.56	0.011
2	0.3	4.872	305.32	0.099
3	0.6	4.248	369.83	0.152

Los parámetros de interacción binaria son:

$$k_{12} = 0.0034$$

$$k_{13} = 0.0107$$

$$k_{23} = 0.009$$

Este ejemplo se extrajo de <https://www.youtube.com/watch?v=ooougQgYKYTM> (Belton, 2019).

#### Solución:

- 1) Ingresar los datos del sistema (Figura 21).
- 2) Seleccionamos las unidades de las propiedades críticas de las tres componentes. Debido a que tenemos de datos los parámetros de interacción binaria, marcamos la casilla  $K_{ij}$  (Figura 22).
- 3) Ingresamos la fracción molar y las propiedades críticas (según las unidades que seleccionamos en la ventana anterior) para cada componente; además, debido a que estamos utilizando la ecuación de estado PR, debemos ingresar el factor acéntrico para cada componente (Figura 23).
- 4) Ingresamos parámetros de interacción binaria (Figura 24 y Figura 25).
- 5) Se muestran los resultados para cada componente (Figura 26 y Figura 27):
- 6) Se muestra la solución de la ecuación cúbica de estado para la mezcla (Figura 28 y Figura 29).

22:59

**DATOS**

EoS: PR

P= 0.1 MPa

V= 0 m<sup>3</sup>/mol

T= 233.2 K

Nº Compo... 3

Seleccione la ecuación de estado

Selec. Canc. OK

Figura 21. Ingreso de los datos del sistema (ejemplo 3)

22:59

**DATOS**

Unidades Pc: MPa

Unidades Tc: K

Kij:

Marque si usará parám. de interacción binaria Kij

✓ Canc. OK

Figura 22. Selección de unidades de las propiedades críticas

22:59

**DATOS DE LAS COMPONENTES**

	y <sub>i</sub>	Pc <sub>i</sub>	Tc <sub>i</sub>	ω <sub>i</sub>
C-1	0.1	4.599	190.56	0.011
C-2	0.3	4.872	305.32	0.099
C-3	0.6	4.248	369.83	0.152
4				

Editar Más Ir a Ir → Canc. OK

Figura 23. Ingreso de datos de cada componente

Parám. de Interac. Binaria		22:59
	Kij	
K1-2	0.0034	
K1-3	0.0107	
3		

Editar Más Ir a Ir → Canc. OK

Figura 24. Ingreso de parámetros de interacción binaria de la componente 1

Parám. de Interac. Binaria		22:59
	Kij	
K2-3	0.009	
2		

Editar Más Ir a Ir → Canc. OK

Figura 25. Ingreso de parámetros de interacción binaria de la componente 2

RESULTADOS PARA CADA COMPONENTE					23:00
	Pr <sub>i</sub>	Tr <sub>i</sub>	a <sub>i</sub>	b <sub>i</sub>	
C-1	2.1744E-2	1.2237615	0.2292491	2.6803E-5	
C-2	2.0525E-2	0.7637888	0.6874509	4.0538E-5	
C-3	2.3540E-2	0.6305600	1.2860876	5.6316E-5	
4					

Editar Más Ir a Ir → Canc. OK

Figura 26. Matriz de resultados (parte 1) para cada componente

RESULTADOS PARA CADA COMPONENTE				
	(a Hat) <sub>i</sub>	(q Hat) <sub>i</sub>	ln φ <sub>i</sub>	φ <sub>i</sub>
C-1	-2.296E-2	4.2824990	2.2826E-3	1.0022853
C-2	0.6589685	8.6666480	-1.549E-2	0.9846256
C-3	1.2590221	11.758843	-3.094E-2	0.9695382
4				

Editar Más Ir a Ir → Canc. OK

Figura 27. Matriz de resultados (parte 2) para cada componente

Terminal	
RESULTADOS	
a =	0.950807407015 _Pa * m <sup>6</sup> / mol <sup>2</sup>
b =	4.86313009231E-5 _m <sup>3</sup> / mol
β =	2.50814515049E-3
q =	10.0835498048
P =	0.1 _MPa
T =	233.2 _K
V <sub>1</sub> =	6.5563659553E-5 _m <sup>3</sup> /mol
Z <sub>1</sub> =	3.38142660457E-3
V <sub>2</sub> =	3.353450417E-4 m <sup>3</sup> /mol

Figura 28. Resultados para la mezcla (parte 1)

Terminal	
q =	10.0835498048
P =	0.1 _MPa
T =	233.2 _K
V <sub>1</sub> =	6.5563659553E-5 _m <sup>3</sup> /mol
Z <sub>1</sub> =	3.38142660457E-3
V <sub>2</sub> =	3.353450417E-4 _m <sup>3</sup> /mol
Z <sub>2</sub> =	1.72953226444E-2
V <sub>3</sub> =	1.89398087018E-2 _m <sup>3</sup> /mol
Z <sub>3</sub> =	0.976815105601

Figura 29. Resultados para la mezcla (parte 2)

## Ejemplo 4

¿Cuál es la temperatura final cuando se agrega una cantidad de calor de  $400 \times 10^6$  J a  $11 \times 10^3$  mol de amoníaco inicialmente a 530 K en un proceso de flujo estable a 1 bar?

Constantes de la ecuación de la capacidad calorífica del metano:

$$A = 3.578$$

$$B = 3.020 \text{ E-3}$$

$$C = 0.0$$

$$D = -0.186 \text{ E5}$$

Solución:

Recordar que:

$$\frac{\Delta H^{ig}}{R} = \int_{T_0}^T \frac{C_P^{ig}}{R} dT = ICPH(T_0, T, A, B, C, D)$$

Para este proceso:

$$\Delta H^{ig} = \frac{400 \times 10^6 \text{ J}}{11 \times 10^3 \text{ mol}} \approx 36\,363 \frac{\text{J}}{\text{mol}}$$

Reemplazando:

$$\frac{36\,363}{R} = ICPH(530, T, A, B, C, D)$$

Para resolver esta ecuación, utilizaremos la aplicación Solucionador:

- 1) Inicie la aplicación Solucionador e ingrese esta ecuación en la vista simbólica (Figura 30).
- 2) Ingresamos los datos en la vista numérica (presione la tecla  para acceder a esta vista), seleccionamos la variable que deseamos hallar (la variable T) y pulsamos . Para llegar a esta solución, se empleó un valor inicial de  $T = 540$  (Figura 31).
- 3) La solución se presenta de inmediato (Figura 32):  $T \approx 1234 \text{ K}$

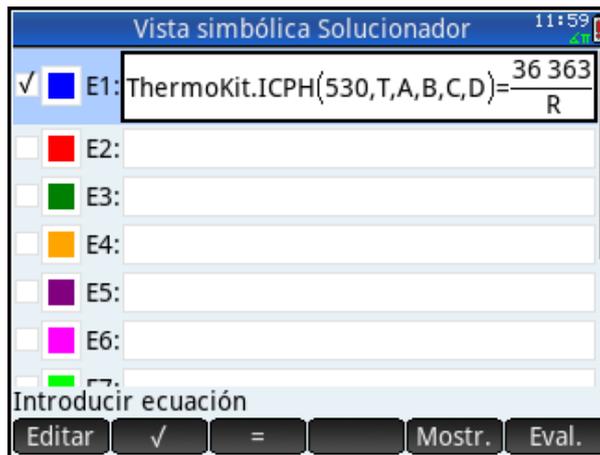


Figura 30. Ingreso de la ecuación a la aplicación Solucionador (ejemplo 4)

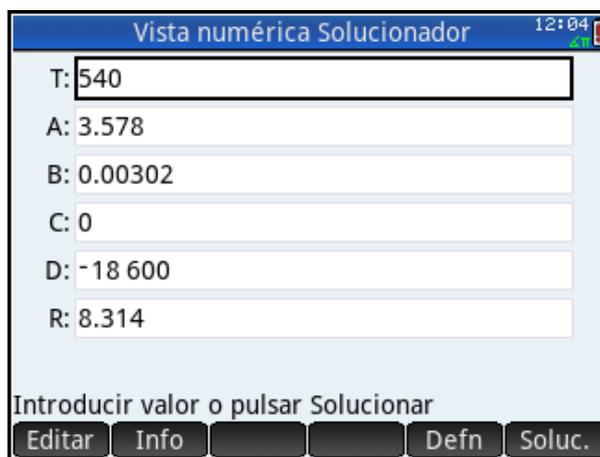


Figura 31. Ingreso de datos en la vista numérica (ejemplo 4)

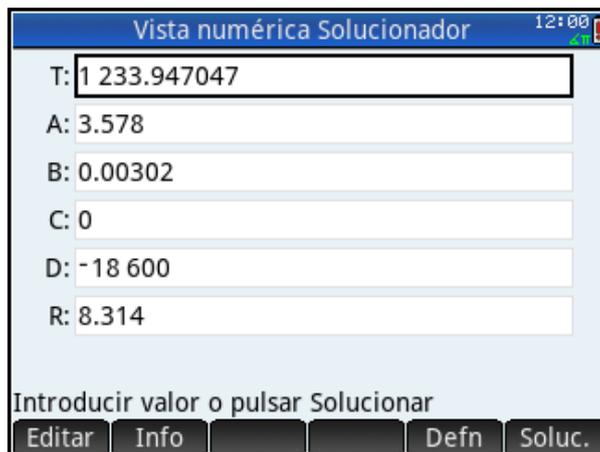


Figura 32. Solución del ejemplo 4

## Ejemplo 5

Gas metano a 550 K y 5 bar se somete a una expansión adiabática reversible a 1 bar. Asumiendo que el metano es un gas ideal bajo estas condiciones, halle su temperatura final.

Constantes de la ecuación de la capacidad calorífica del metano:

$$A = 1.702$$

$$B = 9.081 \text{ E-3}$$

$$C = -2.164 \text{ E-6}$$

$$D = 0.0$$

Solución:

Recordar que:

$$\frac{\Delta S^{ig}}{R} = \int_{T_0}^T \frac{C_p^{ig}}{R} \frac{dT}{T} - \ln \frac{P}{P_0} = ICPS(T_0, T, A, B, C, D) - \ln \frac{P}{P_0}$$

Para este proceso:  $\Delta S^{ig} = 0$

Por lo tanto:

$$ICPS(T_0, T, A, B, C, D) = \ln \frac{P}{P_0}$$

$$ICPS(550, T, A, B, C, D) = \ln \frac{1}{5}$$

Para resolver esta ecuación, utilizaremos la aplicación Solucionador:

- 1) Inicie la aplicación Solucionador e ingrese esta ecuación en la vista simbólica (Figura 33).
- 2) Ingresamos los datos en la vista numérica (presione la tecla  para acceder a esta vista), seleccionamos la variable que deseamos hallar (la variable T) y pulsamos . Para llegar a esta solución, se empleó un valor inicial de T = 540 (Figura 34).
- 3) La solución se presenta de inmediato (Figura 35):  $T \approx 411.33 \text{ K}$

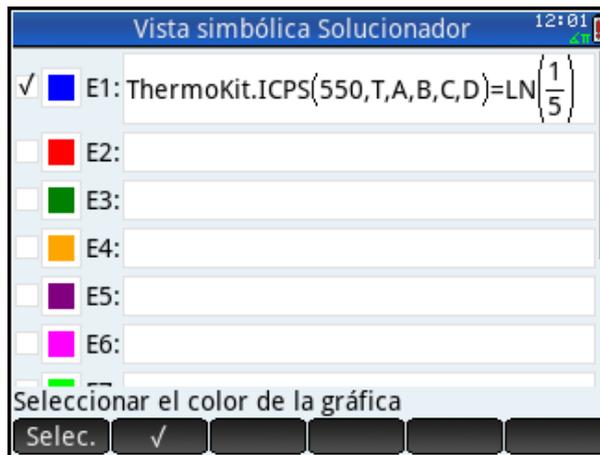


Figura 33. Ingreso de la ecuación a la aplicación Solucionador (ejemplo 5)

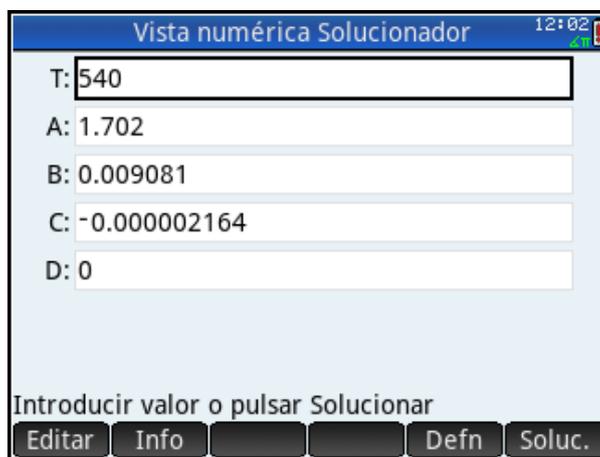


Figura 34. Ingreso de los datos a la vista numérica (ejemplo 5)

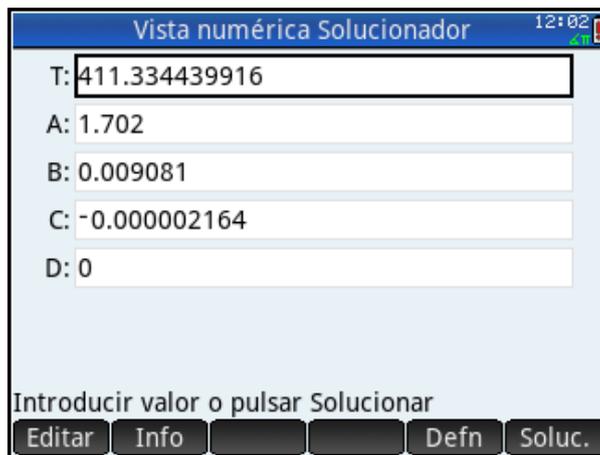


Figura 35. Solución del ejemplo 5

# APÉNDICE A: ECUACIONES EMPLEADAS EN THERMOKIT

**A-1** La ecuación de estado cúbica genérica

**A-2** Propiedades residuales

**A-3** Fugacidad

**A-4** Ecuación del Virial

**A-5** Funciones específicas

Todas las ecuaciones que utiliza la aplicación ThermoKit fueron extraídas del libro *Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics, 8th Edition* de J. M. Smith.

## A-1 La ecuación de estado cúbica genérica

$$P = \frac{RT}{V - b} - \frac{a}{(V + \epsilon b)(V + \sigma b)}$$

Tabla 1. Asignación de parámetros para las ecuaciones de estado

Ecuación de Estado	$\alpha(T_r; \omega)$	$\sigma$	$\epsilon$	$\Omega$	$\Psi$
vdW	1	0	0	1/8	27/64
RK	$T_r^{-1/2}$	1	0	0.08664	0.42748
SRK	$\alpha_{SRK}(T_r; \omega)^\dagger$	1	0	0.08664	0.42748
PR	$\alpha_{PR}(T_r; \omega)^\ddagger$	$1 + \sqrt{2}$	$1 - \sqrt{2}$	0.07780	0.45724

$$^\dagger \alpha_{SRK}(T_r; \omega) = [1 + (0.480 + 1.574\omega - 0.176\omega^2)(1 - T_r^{1/2})]^2$$

$$^\ddagger \alpha_{PR}(T_r; \omega) = [1 + (0.37464 + 1.54226\omega - 0.26992\omega^2)(1 - T_r^{1/2})]^2$$

$$a = \Psi \frac{\alpha(T_r; \omega) R^2 T_c^2}{P_c}$$

$$b = \Omega \frac{RT_c}{P_c}$$

$$\beta = \frac{bP}{RT}$$

$$q = \frac{a}{bRT}$$

Para el caso de una mezcla:

$$a_i = \Psi \frac{\alpha_i(T_{ri}; \omega) R^2 T_{ci}^2}{P_{ci}}$$

$$b_i = \Omega \frac{RT_{ci}}{P_{ci}}$$

$$a_{ij} = \sqrt{a_i a_j} \cdot (1 - k_{ij})$$

$$a = \sum_i \sum_j x_i x_j a_{ij}$$

$$b = \sum_i x_i b_i$$

## A-2 Propiedades Residuales

$$\frac{G^R}{RT} = (Z - 1) - \ln(Z - \beta) - qI$$

$$\frac{H^R}{RT} = (Z - 1) + \left[ \frac{d \ln \alpha(T_r)}{d \ln T_r} - 1 \right] qI$$

$$\frac{S^R}{RT} = \ln(Z - \beta) + \frac{d \ln \alpha(T_r)}{d \ln T_r} qI$$

Si  $\epsilon \neq \sigma$ :

$$I = \frac{1}{\sigma - \epsilon} \ln \left( \frac{Z + \sigma\beta}{Z + \epsilon\beta} \right)$$

Si  $\epsilon = \sigma$ :

$$I = \frac{\beta}{Z}$$

## A-3 Fugacidad

$$\bar{a}_i = 2 \sum_j x_j a_{ij} - a$$

$$\bar{q}_i = q \left( 1 + \frac{\bar{a}_i}{a} - \frac{b_i}{b} \right)$$

$$\ln \hat{\phi}_i = \frac{b_i}{b} (Z - 1) - \ln(Z - \beta) - \bar{q}_i I$$

$$\ln \phi_i = (Z_i - 1) - \ln(Z_i - \beta_i) - q_i I_i$$

## A-4 Ecuación del Virial

Especie Pura:

$$Z = 1 + B^0 \frac{P_r}{T_r} + \omega B^1 \frac{P_r}{T_r}$$

$$\frac{H^R}{RT_c} = P_r \left[ B^0 - T_r \frac{dB^0}{dT_r} + \omega \left( B^1 - T_r \frac{dB^1}{dT_r} \right) \right]$$

$$\frac{S^R}{R} = -P_r \left( \frac{dB^0}{dT_r} + \omega \frac{dB^1}{dT_r} \right)$$

$$\phi = \exp \left[ \frac{P_r}{T_r} (B^0 + \omega B^1) \right]$$

$$B^0 = 0.083 - \frac{0.422}{T_r^{1.6}}$$

$$B^1 = 0.139 - \frac{0.172}{T_r^{4.2}}$$

$$\frac{dB^0}{dT_r} = \frac{0.675}{T_r^{2.6}}$$

$$\frac{dB^1}{dT_r} = \frac{0.722}{T_r^{5.2}}$$

Mezcla binaria:

$$\omega_{ij} = \frac{\omega_i + \omega_j}{2}$$

$$T_{cij} = (T_{ci}T_{cj})^{1/2}(1 - k_{ij})$$

$$P_{cij} = \frac{Z_{cij}RT_{cij}}{V_{cij}}$$

$$Z_{cij} = \frac{Z_{ci} + Z_{cj}}{2}$$

$$V_{cij} = \left( \frac{V_{ci}^{1/3} + V_{cj}^{1/3}}{2} \right)^3$$

$$B^0_{ij} = 0.083 - \frac{0.422}{T_{rij}^{1.6}}$$

$$B^1_{ij} = 0.139 - \frac{0.172}{T_{rij}^{4.2}}$$

$$B_{ij} = \frac{(B^0_{ij} + \omega_{ij}B^1_{ij})RT_{cij}}{P_{cij}}$$

$$\delta_{ij} = 2B_{12} - B_{11} - B_{22}$$

$$\ln \hat{\phi}_1 = \frac{P}{RT}(B_{11} + y_2^2 \delta_{12})$$

$$\ln \hat{\phi}_2 = \frac{P}{RT}(B_{22} + y_1^2 \delta_{12})$$

## A-5 Funciones específicas

$$\int_{T_0}^T \frac{C_P}{R} dT \equiv ICPH(T_0, T, A, B, C, D)$$

$$\frac{\langle C_P \rangle_H}{R} = MCPH(T_0, T, A, B, C, D) = \frac{ICPH(T_0, T, A, B, C, D)}{(T - T_0)}$$

$$\int_{T_0}^T \frac{C_P}{R} \frac{dT}{T} \equiv ICPS(T_0, T, A, B, C, D)$$

$$\frac{\langle C_P \rangle_S}{R} = MCPS(T_0, T, A, B, C, D) = \frac{ICPS(T_0, T, A, B, C, D)}{\ln\left(\frac{T}{T_0}\right)}$$

$$MCPH(T_0, T, A, B, C, D) = A + \frac{B}{2}(T + T_0) + \frac{C}{3}(T^2 + T_0^2 + TT_0) + \frac{D}{TT_0}$$

$$ICPH(T_0, T, A, B, C, D) = \left[ A + \frac{B}{2}(T + T_0) + \frac{C}{3}(T^2 + T_0^2 + TT_0) + \frac{D}{TT_0} \right] (T - T_0)$$

$$MCPS(T_0, T, A, B, C, D) = A + \left[ BT_0 + \left( CT_0^2 + \frac{D}{T^2} \right) \left( \frac{T + T_0}{2T_0} \right) \right] \left( \frac{T - T_0}{T_0 \ln \frac{T}{T_0}} \right)$$

$$ICPS(T_0, T, A, B, C, D) = A \ln \frac{T}{T_0} + B(T - T_0) + \left( C + \frac{D}{T^2 T_0^2} \right) \left( \frac{T^2 - T_0^2}{2} \right)$$

# HISTORIAL DE VERSIONES

## Versión 1.1

- Se corrigió la selección de unidades de la temperatura crítica de las componentes de una mezcla.
  - En la versión 1.0, las unidades seleccionadas para la temperatura crítica eran ignoradas y se asumía que estas unidades eran iguales a las de la temperatura del sistema.
- Se corrigió la fórmula para el cálculo de la fugacidad de una especie pura.
  - En la versión 1.0 se utilizaba la variable global  $P$  (no definida en el código del programa) para calcular la fugacidad, esta variable se cambió por la variable local *pressure*.

## Versión 1.2

- Se muestran todas las raíces positivas de las ecuaciones de estado (anteriormente solo se mostraban como máximo dos raíces: la raíz menor y la raíz mayor).
  - Las propiedades residuales y las fugacidades se calculan para la raíz mayor.
- Se agrega la posibilidad de ingresar parámetros de interacción binaria  $k_{ij}$  para el caso de mezclas.

# CRÉDITOS

## **Autor:**

David Jhonatan Baez Pérez

djbaez26mdc@outlook.com

## **Programas usados:**

HP Connectivity Kit

HP Prime Virtual Calculator

PrimeComm

# REFERENCIAS

Belton, D. [ChemEngTutor]. (19 de agosto de 2019). *Equations of State part 7: Peng-Robinson mixing rules* [Archivo de video]. Recuperado de <https://www.youtube.com/watch?v=oougQgYKYTM>.

Smith, J. M., Van Ness, H. M., Abbott, M. M., & Swihart, M. T. (2018). *Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics* (Eighth ed.). New York, NY, United States of America: McGraw-Hill Education.