

*Programa para la obtención de los coeficientes de actividad en la destilación del aire utilizando la ecuación de Wilson y la entalpía de mezcla a partir de datos no isotermos.*

*Copyright J.I. Zubizarreta*

$$P = x_1 \cdot P_{01} \cdot \gamma_1 + x_2 \cdot P_{02} \cdot \gamma_2$$

$$R = 8,314 \text{ [kJ/kmol-K]}$$

$$N = 78$$

$$T_i = \text{Lookup} \left[ \text{'Equilibrio P = 1 atm'}; i; 'T' \right] \quad \text{for } i = 1 \text{ to } 39$$

$$x_i = \text{Lookup} \left[ \text{'Equilibrio P = 1 atm'}; i; 'x' \right] \quad \text{for } i = 1 \text{ to } 39$$

$$y_i = \text{Lookup} \left[ \text{'Equilibrio P = 1 atm'}; i; 'y' \right] \quad \text{for } i = 1 \text{ to } 39$$

$$G_{12,i} = \frac{v \left[ \text{'Oxygen'}; T = T_i; P = 1 \text{ [atm]} \cdot \left| 1,01325 \cdot \frac{\text{bar}}{\text{atm}} \right| \right]}{v \left[ \text{'Nitrogen'}; T = T_i; P = 1 \text{ [atm]} \cdot \left| 1,01325 \cdot \frac{\text{bar}}{\text{atm}} \right| \right]} \cdot \exp \left[ \frac{-a_{12}}{R \cdot T_i} \right] \quad \text{for } i = 1 \text{ to } 39$$

$$G_{21,i} = \frac{v \left[ \text{'Nitrogen'}; T = T_i; P = 1 \text{ [atm]} \cdot \left| 1,01325 \cdot \frac{\text{bar}}{\text{atm}} \right| \right]}{v \left[ \text{'Oxygen'}; T = T_i; P = 1 \text{ [atm]} \cdot \left| 1,01325 \cdot \frac{\text{bar}}{\text{atm}} \right| \right]} \cdot \exp \left[ \frac{-a_{21}}{R \cdot T_i} \right] \quad \text{for } i = 1 \text{ to } 39$$

$$\ln [\gamma_{1,i}] = -\ln [x_i + (1 - x_i) \cdot G_{12,i}] + [1 - x_i] \cdot \left[ \frac{G_{12,i}}{x_i + (1 - x_i) \cdot G_{12,i}} - \left( \frac{G_{21,i}}{1 - x_i + x_i \cdot G_{21,i}} \right) \right]$$

for  $i = 1$  to  $39$

$$\ln [\gamma_{2,i}] = -\ln [1 - x_i + x_i \cdot G_{21,i}] - x_i \cdot \left[ \frac{G_{12,i}}{x_i + (1 - x_i) \cdot G_{12,i}} - \left( \frac{G_{21,i}}{1 - x_i + x_i \cdot G_{21,i}} \right) \right] \quad \text{for } i = 1 \text{ to } 39$$

$$\sigma_i = \left[ 1 - x_i \cdot \frac{\gamma_{1,i}}{760} \cdot \exp \left( 14,9342 - \left[ \frac{588,72}{T_i - 6,6} \right] \right) - \left( [1 - x_i] \cdot \frac{\gamma_{2,i}}{760} \cdot \exp \left[ 15,4075 - \left( \frac{734,55}{T_i - 6,45} \right) \right] \right) \right]^2 \quad \text{for } i = 1 \text{ to } 39$$

*Entalpía de mezcla*

$$\Delta h_i = x_i \cdot a_{12} \cdot [1 - x_i] \cdot \left[ \frac{G_{12,i}}{x_i + G_{12,i} \cdot (1 - x_i)} \right] + [1 - x_i] \cdot a_{21} \cdot x_i \cdot \left[ \frac{G_{21,i}}{1 - x_i + x_i \cdot G_{21,i}} \right]$$

for  $i = 1$  to  $39$

$$T_{39+i} = \text{Lookup} \left[ \text{'Equilibrio P = 5 atm'}; i; 'T' \right] \quad \text{for } i = 1 \text{ to } 39$$

$$x_{39+i} = \text{Lookup} \left[ \text{'Equilibrio P = 5 atm'}; i; 'x' \right] \quad \text{for } i = 1 \text{ to } 39$$

$$y_{39+i} = \text{Lookup} \left[ \text{'Equilibrio P = 5 atm'}; i; 'y' \right] \quad \text{for } i = 1 \text{ to } 39$$

$$G_{12,39+i} = \frac{v \left[ \text{'Oxygen'}; T = T_{39+i}; P = 5 \text{ [atm]} \cdot \left| 1,01325 \cdot \frac{\text{bar}}{\text{atm}} \right| \right]}{v \left[ \text{'Nitrogen'}; T = T_{39+i}; P = 5 \text{ [atm]} \cdot \left| 1,01325 \cdot \frac{\text{bar}}{\text{atm}} \right| \right]} \cdot \exp \left[ \frac{-a_{12}}{R \cdot T_{39+i}} \right] \quad \text{for } i = 1 \text{ to } 39$$

$$G_{21;39+i} = \frac{v \left[ \text{'Nitrogen'} ; T = T_{39+i} ; P = 5 \text{ [atm]} \cdot \left| 1,01325 \cdot \frac{\text{bar}}{\text{atm}} \right| \right]}{v \left[ \text{'Oxygen'} ; T = T_{39+i} ; P = 5 \text{ [atm]} \cdot \left| 1,01325 \cdot \frac{\text{bar}}{\text{atm}} \right| \right]} \cdot \exp \left[ \frac{-a_{21}}{R \cdot T_{39+i}} \right] \quad \text{for } i = 1 \text{ to } 39$$

$$\ln [\gamma_{1;39+i}] = -\ln [x_{39+i} + (1 - x_{39+i}) \cdot G_{12;39+i}] + [1 - x_{39+i}] \cdot \left[ \frac{G_{12;39+i}}{x_{39+i} + (1 - x_{39+i}) \cdot G_{12;39+i}} - \left( \frac{G_{21;39+i}}{1 - x_{39+i} + x_{39+i} \cdot G_{21;39+i}} \right) \right] \quad \text{for } i = 1 \text{ to } 39$$

$$\ln [\gamma_{2;39+i}] = -\ln [1 - x_{39+i} + x_{39+i} \cdot G_{21;39+i}] - x_{39+i} \cdot \left[ \frac{G_{12;39+i}}{x_{39+i} + (1 - x_{39+i}) \cdot G_{12;39+i}} - \left( \frac{G_{21;39+i}}{1 - x_{39+i} + x_{39+i} \cdot G_{21;39+i}} \right) \right] \quad \text{for } i = 1 \text{ to } 39$$

$$\sigma_{39+i} = \left[ 5 - x_{39+i} \cdot \frac{\gamma_{1;39+i}}{760} \cdot \exp \left( 14,9342 - \left[ \frac{588,72}{T_{39+i} - 6,6} \right] \right) - \left( [1 - x_i] \cdot \frac{\gamma_{2;39+i}}{760} \cdot \exp [15,4075 - \left( \frac{734,55}{T_{39+i} - 6,45} \right)] \right) \right]^2 \quad \text{for } i = 1 \text{ to } 39$$

### Entalpía de mezcla

$$\Delta h_{39+i} = x_{39+i} \cdot a_{12} \cdot [1 - x_{39+i}] \cdot \left[ \frac{G_{12;39+i}}{x_{39+i} + G_{12;39+i} \cdot (1 - x_{39+i})} \right] + [1 - x_{39+i}] \cdot a_{21} \cdot x_{39+i} \cdot \left[ \frac{G_{21;39+i}}{1 - x_{39+i} + x_{39+i} \cdot G_{21;39+i}} \right] \quad \text{for } i = 1 \text{ to } 39$$

$$\sigma_{\text{total}} = \sum_{j=1}^N [\sigma_j]$$

### SOLUTION

Unit Settings: [kJ]/[K]/[bar]/[kmol]/[degrees]

Minimization of sigma\_total(a\_12,a\_21) 43 iterations: Variable Metric method

a12 = -3356 [kJ/kmol]

a21 = 3517 [kJ/kmol]

N = 78

R = 8,314 [kJ/kmol-K]

$\sigma_{\text{total}} = 0,1573$

78 potential unit problems were detected.

### Arrays Table

	$\gamma_{1;i}$	$\gamma_{2;i}$	$G_{12;i}$	$G_{21;i}$	$T_i$ [K]	$x_i$	$y_i$	$\sigma_i$	$\Delta h_i$ [kJ/kmol]
1	0,8179	0,9999	0,36	2,234	89,3	0,025	0,092	0,002302	107,5
2	0,8621	0,9996	0,3742	2,145	88,6	0,050	0,173	0,004113	22,43
3	0,8985	0,9995	0,3882	2,065	88,0	0,075	0,245	0,005278	-52,65
4	0,9282	0,9996	0,4019	1,992	87,4	0,100	0,308	0,005759	-119,5
5	0,9524	1	0,4154	1,924	86,9	0,125	0,364	0,005715	-179,4
6	0,972	1,001	0,4287	1,862	86,4	0,150	0,415	0,005329	-233,3
7	0,9876	1,002	0,4417	1,805	85,9	0,175	0,460	0,004754	-281,9
8	1	1,003	0,4545	1,752	85,4	0,200	0,501	0,004104	-325,8
9	1,01	1,005	0,4671	1,703	85,0	0,225	0,538	0,00345	-365,4
10	1,017	1,007	0,4794	1,657	84,6	0,250	0,572	0,00284	-401
11	1,023	1,01	0,4916	1,615	84,2	0,275	0,603	0,002294	-432,8
12	1,027	1,012	0,5036	1,575	83,9	0,300	0,632	0,001822	-461,2

**Arrays Table**

	$\gamma_{1,i}$	$\gamma_{2,i}$	$G_{12,i}$	$G_{21,i}$	$T_i$ [K]	$x_i$	$y_i$	$\sigma_i$	$\Delta h_i$ [kJ/kmol]
13	1,03	1,016	0,5154	1,537	83,5	0,325	0,658	0,001425	-486,2
14	1,032	1,019	0,527	1,502	83,2	0,350	0,682	0,001097	-507,9
15	1,033	1,023	0,5385	1,469	82,9	0,375	0,705	0,0008325	-526,5
16	1,033	1,027	0,5498	1,437	82,6	0,400	0,726	0,0006221	-542,1
17	1,033	1,032	0,561	1,407	82,3	0,425	0,746	0,000457	-554,7
18	1,032	1,037	0,572	1,379	82,0	0,450	0,764	0,0003305	-564,4
19	1,031	1,042	0,583	1,352	81,7	0,475	0,781	0,0002345	-571,1
20	1,03	1,048	0,5938	1,326	81,5	0,500	0,797	0,0001635	-575
21	1,028	1,053	0,6046	1,302	81,2	0,525	0,812	0,0001116	-576
22	1,026	1,06	0,6152	1,278	81,0	0,550	0,827	0,00007459	-574,1
23	1,024	1,067	0,6258	1,256	80,7	0,575	0,840	0,00004865	-569,3
24	1,022	1,074	0,6363	1,234	80,5	0,600	0,853	0,00003114	-561,6
25	1,02	1,081	0,6467	1,213	80,3	0,625	0,866	0,00001961	-551
26	1,018	1,089	0,6571	1,193	80,1	0,650	0,877	0,00001222	-537,4
27	1,016	1,097	0,6674	1,174	79,9	0,675	0,889	0,000007644	-520,9
28	1,014	1,106	0,6777	1,156	79,6	0,700	0,899	0,000004945	-501,2
29	1,012	1,115	0,688	1,138	79,4	0,725	0,910	0,00000347	-478,5
30	1,01	1,125	0,6982	1,12	79,2	0,750	0,919	0,000002735	-452,6
31	1,009	1,135	0,7084	1,104	79,1	0,775	0,929	0,000002541	-423,4
32	1,007	1,146	0,7186	1,087	78,9	0,800	0,938	0,000002759	-391
33	1,005	1,157	0,7288	1,072	78,7	0,825	0,947	0,000003412	-355,1
34	1,004	1,169	0,7389	1,056	78,5	0,850	0,955	0,000004556	-315,7
35	1,003	1,182	0,7491	1,041	78,3	0,875	0,963	0,000006231	-272,8
36	1,002	1,195	0,7593	1,027	78,1	0,900	0,971	0,000008656	-226,2
37	1,001	1,209	0,7695	1,013	78,0	0,925	0,979	0,00001189	-175,7
38	1	1,224	0,7797	0,9988	77,8	0,950	0,986	0,00001604	-121,3
39	1	1,24	0,7899	0,9853	77,6	0,975	0,993	0,00002107	-62,76
40	1,182	1	0,7827	1,067	108,2	0,025	0,064	0,0006089	10,13
41	1,174	1,001	0,8034	1,039	107,6	0,050	0,124	0,00008681	-70,87
42	1,165	1,001	0,824	1,012	106,9	0,075	0,179	0,00001984	-146,9
43	1,157	1,002	0,8445	0,9862	106,4	0,100	0,230	0,0002566	-218,4
44	1,148	1,003	0,8648	0,9621	105,8	0,125	0,277	0,0006475	-285,6
45	1,14	1,004	0,885	0,9393	105,3	0,150	0,321	0,001075	-348,8
46	1,132	1,006	0,9051	0,9176	104,8	0,175	0,363	0,001461	-408,2
47	1,123	1,007	0,925	0,8971	104,3	0,200	0,401	0,001759	-463,9
48	1,116	1,009	0,9448	0,8775	103,8	0,225	0,437	0,001946	-516,1
49	1,108	1,011	0,9645	0,8589	103,4	0,250	0,471	0,002017	-564,7
50	1,1	1,013	0,984	0,8412	102,9	0,275	0,503	0,001976	-610
51	1,093	1,015	1,004	0,8234	102,5	0,300	0,533	0,001829	-652,1
52	1,086	1,017	1,024	0,8072	102,1	0,325	0,561	0,001624	-690,7
53	1,08	1,02	1,043	0,7918	101,7	0,350	0,588	0,001367	-725,8
54	1,074	1,022	1,062	0,7769	101,3	0,375	0,613	0,001088	-757,6
55	1,068	1,025	1,081	0,7627	101,0	0,400	0,637	0,0008073	-785,9
56	1,062	1,027	1,1	0,749	100,6	0,425	0,660	0,0005436	-810,7
57	1,056	1,03	1,119	0,7358	100,2	0,450	0,682	0,0003159	-832
58	1,051	1,033	1,138	0,7231	99,9	0,475	0,703	0,0001428	-849,6
59	1,046	1,036	1,157	0,7109	99,6	0,500	0,723	0,00003356	-863,4
60	1,042	1,039	1,176	0,6991	99,3	0,525	0,742	3,318E-07	-873,4
61	1,037	1,042	1,195	0,6877	98,9	0,550	0,760	0,00004988	-879,4
62	1,033	1,045	1,213	0,6766	98,6	0,575	0,778	0,0001877	-881,2
63	1,029	1,048	1,232	0,6659	98,3	0,600	0,795	0,0004173	-878,7
64	1,026	1,051	1,251	0,6556	98,1	0,625	0,811	0,0007379	-871,6
65	1,023	1,054	1,27	0,6455	97,8	0,650	0,826	0,001147	-859,9
66	1,019	1,058	1,288	0,6357	97,5	0,675	0,841	0,001646	-843,1
67	1,017	1,061	1,307	0,6262	97,2	0,700	0,856	0,002229	-821,1

**Arrays Table**

	$\gamma_{1,i}$	$\gamma_{2,i}$	$G_{12,i}$	$G_{21,i}$	$T_i$ [K]	$x_i$	$y_i$	$\sigma_i$	$\Delta h_i$ [kJ/kmol]
68	1,014	1,064	1,326	0,617	97,0	0,725	0,870	0,002887	-793,5
69	1,012	1,068	1,345	0,608	96,7	0,750	0,884	0,003615	-760,1
70	1,009	1,071	1,364	0,5992	96,4	0,775	0,897	0,004401	-720,5
71	1,007	1,074	1,383	0,5907	96,2	0,800	0,910	0,005237	-674,3
72	1,006	1,078	1,402	0,5823	95,9	0,825	0,922	0,00612	-620,9
73	1,004	1,081	1,421	0,5741	95,7	0,850	0,934	0,007026	-560,1
74	1,003	1,085	1,441	0,5661	95,4	0,875	0,946	0,007946	-491,1
75	1,002	1,088	1,46	0,5583	95,2	0,900	0,957	0,008864	-413,4
76	1,001	1,092	1,48	0,5507	95,0	0,925	0,968	0,009765	-326,3
77	1	1,096	1,499	0,5432	94,7	0,950	0,979	0,01064	-228,9
78	1	1,099	1,519	0,5358	94,5	0,975	0,990	0,01145	-120,5

**Lookup Table: Equilibrio P = 1 atm**

	T [K]	x	y
Row 1	89,26	0,025	0,09225
Row 2	88,6	0,05	0,1732
Row 3	87,99	0,075	0,2445
Row 4	87,42	0,1	0,3078
Row 5	86,88	0,125	0,3642
Row 6	86,37	0,15	0,4146
Row 7	85,9	0,175	0,46
Row 8	85,45	0,2	0,5011
Row 9	85,02	0,225	0,5383
Row 10	84,62	0,25	0,5723
Row 11	84,24	0,275	0,6033
Row 12	83,88	0,3	0,6318
Row 13	83,53	0,325	0,6581
Row 14	83,2	0,35	0,6824
Row 15	82,88	0,375	0,705
Row 16	82,58	0,4	0,726
Row 17	82,28	0,425	0,7455
Row 18	82	0,45	0,7638
Row 19	81,73	0,475	0,781
Row 20	81,47	0,5	0,7972
Row 21	81,22	0,525	0,8124
Row 22	80,97	0,55	0,8269
Row 23	80,74	0,575	0,8405
Row 24	80,51	0,6	0,8534
Row 25	80,28	0,625	0,8657
Row 26	80,06	0,65	0,8775
Row 27	79,85	0,675	0,8886
Row 28	79,65	0,7	0,8993
Row 29	79,44	0,725	0,9096
Row 30	79,25	0,75	0,9194
Row 31	79,06	0,775	0,9288
Row 32	78,87	0,8	0,9379
Row 33	78,68	0,825	0,9466
Row 34	78,5	0,85	0,955
Row 35	78,32	0,875	0,9631
Row 36	78,15	0,9	0,971
Row 37	77,98	0,925	0,9786
Row 38	77,81	0,95	0,9859

**Lookup Table: Equilibrio P = 1 atm**

	T	x	y
	[K]		
Row 39	77,64	0,975	0,9931

**Lookup Table: Equilibrio P = 5 atm**

	T	x	y
	[K]		
Row 1	108,2	0,025	0,0644
Row 2	107,6	0,05	0,1239
Row 3	106,9	0,075	0,1789
Row 4	106,4	0,1	0,2299
Row 5	105,8	0,125	0,2772
Row 6	105,3	0,15	0,3214
Row 7	104,8	0,175	0,3625
Row 8	104,3	0,2	0,401
Row 9	103,8	0,225	0,4371
Row 10	103,4	0,25	0,4709
Row 11	102,9	0,275	0,5027
Row 12	102,5	0,3	0,5328
Row 13	102,1	0,325	0,5611
Row 14	101,7	0,35	0,5879
Row 15	101,3	0,375	0,6133
Row 16	101	0,4	0,6374
Row 17	100,6	0,425	0,6603
Row 18	100,2	0,45	0,6822
Row 19	99,91	0,475	0,703
Row 20	99,58	0,5	0,7229
Row 21	99,26	0,525	0,742
Row 22	98,95	0,55	0,7602
Row 23	98,64	0,575	0,7778
Row 24	98,35	0,6	0,7946
Row 25	98,05	0,625	0,8108
Row 26	97,77	0,65	0,8264
Row 27	97,49	0,675	0,8414
Row 28	97,22	0,7	0,856
Row 29	96,95	0,725	0,87
Row 30	96,69	0,75	0,8836
Row 31	96,43	0,775	0,8968
Row 32	96,18	0,8	0,9095
Row 33	95,93	0,825	0,9219
Row 34	95,69	0,85	0,934
Row 35	95,44	0,875	0,9457
Row 36	95,21	0,9	0,9571
Row 37	94,97	0,925	0,9682
Row 38	94,74	0,95	0,9791
Row 39	94,51	0,975	0,9897

