

M. Gaitán⁽¹⁾, M. Cismondi^{(1) (2)}, G. Wolfmann^{(1) (3)}

Introducción

Los **equilibrios entre fases** tienen un rol muy importante en la tecnología química, alcanzando una gran diversidad de aplicaciones, principalmente en **procesos de separación** de la industria química, petroquímica y el sector de hidrocarburos pero también en novedosos **procesos basados en fluidos supercríticos**. Estos equilibrios pueden presentar cierta complejidad, especialmente a altas presiones, y son representados por medio de distintos tipos de diagramas de fases. El modelado cuantitativo de los equilibrios de fases se realiza principalmente, y cada vez más, utilizando **ecuaciones de estado**.

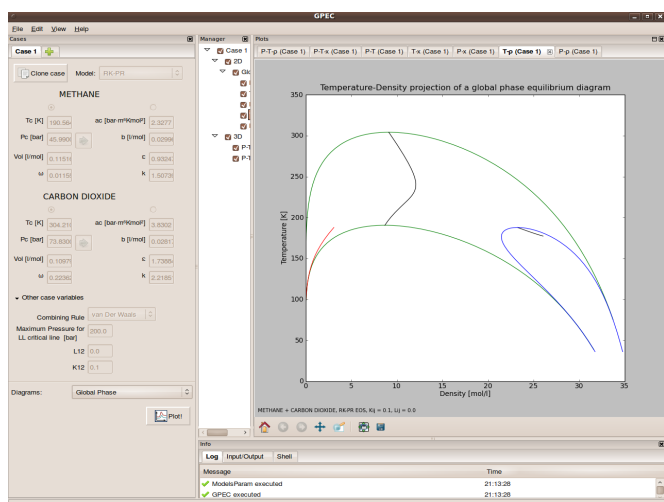


Figura 1: Pantalla principal para la definición de caso (conjunción de un sistema binario y un modelo o ecuación de estado con los correspondientes parámetros de interacción) y visualización 2-D del diagrama global Temperatura-Densidad.

Desde 2005, el desarrollo de nuevos algoritmos para la automatización de la generación de diagramas para sistemas binarios a partir de EOS condujo al software **GPEC** utilizado tanto a nivel educativo como de investigación y desarrollo en distintas partes del mundo. GPEC permitió por primera vez el cálculo y la visualización instantánea de diagramas globales de equilibrio entre fases.

GPEC 2010

Para incorporar funcionalidades y mejorar la usabilidad se desarrolló un **nuevo front-end** (en versión de prueba) implementado en **Python**, basado en la biblioteca de graficación **Matplotlib** y el toolkit para interfaces gráficas **wxPython**. Los algoritmos (el backend) se mantuvieron implementados en **Fortran**.

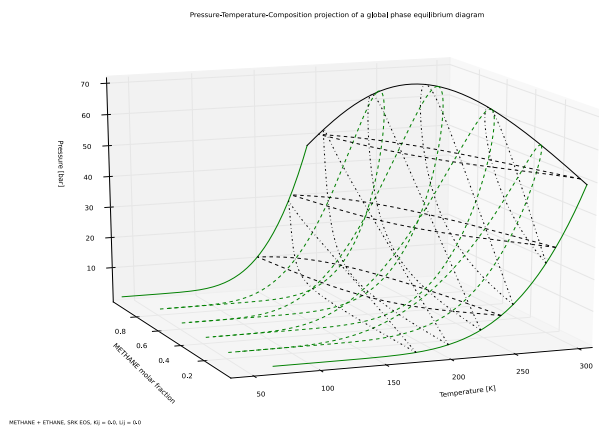


Figura 2: Visualización 3-D de un diagrama global P-T-z (comportamiento tipo I) y superposición de diagramas tipo Pxy para distintas temperaturas, Txy para distintas presiones e isopletras para distintas composiciones.

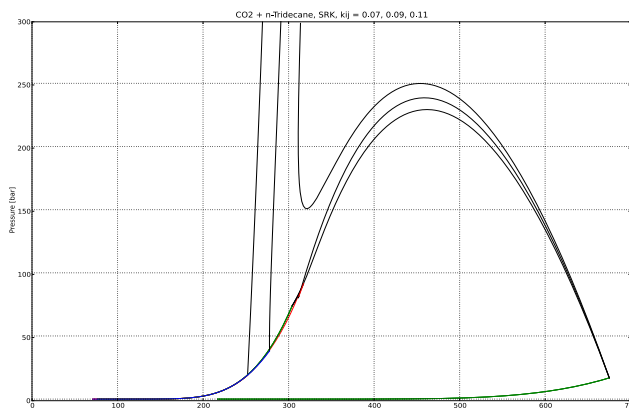
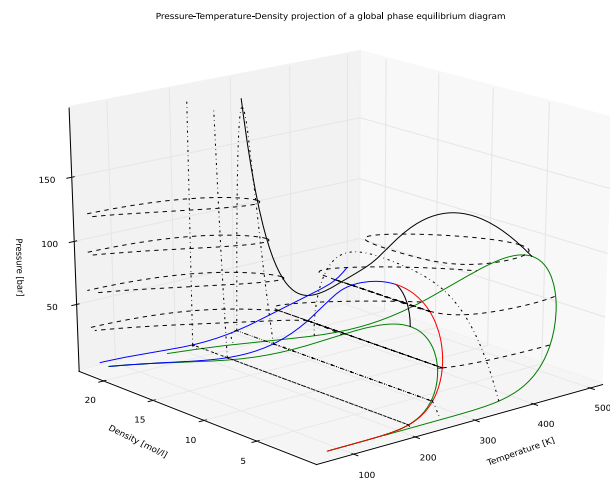


Figura 3: Superposición 2-D (Presión-Temperatura) de tres diagramas globales que permiten observar el efecto del parámetro de interacción k_{12} . La imagen fue exportada desde GPEC.

Novedades de la nueva versión

- Diagramas 3D P-T-z (composición) o P-T-p (densidad)
- Multiplataforma: corre en Windows y Linux (y probablemente en OS/X).
- Superposición y visualización simultánea de múltiples diagramas
- Gráficos exportables a múltiples formatos
- Mejoras en la usabilidad y ergonomía.
- Programado en Python: fácil de extender y mejorar
- Es Software Libre



ETHANE + METHANOL, SRK EOS, $K_1 = 0.0$, $L_1 = 0.1$

Figura 4: Visualización 3-D de un diagrama global P-T-p con superposición de curvas Pxy y Txy. Los gráficos 3D se pueden rotar para verlo en la perspectiva deseada.

Más información y descarga

<http://gpec.efn.uncor.edu/>
y
<http://code.google.com/p/gpec2010>

- (1) Facultad de Ciencias Exactas Físicas y Naturales. Universidad Nacional de Córdoba. Av. Vélez Sarsfield 1611, Ciudad Universitaria. X5016GCA Córdoba. E-mail: gaitan@gmail.com
(2) IDTQ - Grupo Vinculado PLAPIQUI - CONICET. Córdoba. E-mail: mcismondi@efn.uncor.edu
(3) Laboratorio de Computación. FCEyN - UNC. Córdoba. E-mail: gwolfmann@gmail.com