



**Congreso Argentino de Fisicoquímica y  
Química Inorgánica - La Plata 2021**



## XXII CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUÍMICA Y QUÍMICA INORGÁNICA LA PLATA 2021

### ALGORITMOS DE CÁLCULO DE ENVOLVENTES DE FASES DE SISTEMAS REACTIVOS MULTICOMPONENTE

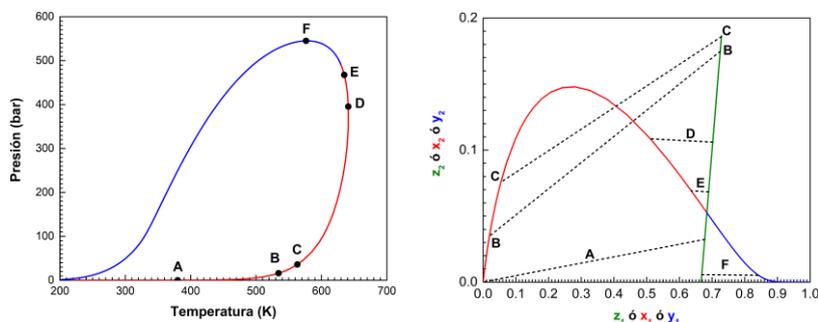
Matías J. Molina, Rodríguez-Reartes S. Belén, Zabaloy Marcelo S.  
Dpto. de Ing. Química UNS - PLAPIQUI (UNS-CONICET), Bahía Blanca, Argentina  
[mzabaloy@plapiqui.edu.ar](mailto:mzabaloy@plapiqui.edu.ar)

#### Introducción

Una envolvente de fases reactiva (EFR) es la frontera, en el plano presión-temperatura, que separa la región de homogeneidad de la de heterogeneidad, para un dado sistema multicomponente reactivo de composición global inicial especificada. En un punto de la EFR se satisfacen la igualdad de potenciales químicos, la condición de equilibrio químico para cada una de las reacciones químicas posibles, la conservación de la masa y la incipencia de una de las fases. El propósito del presente trabajo es el desarrollo de algoritmos para el cálculo de EFRs. Una vez obtenido un punto convergido de la EFR, se aplica un método de continuación numérica capaz de obtener un altamente no lineal set continuo de soluciones del sistema de ecuaciones apropiado, el cual corresponde a un punto de saturación reactivo (p.ej., punto de burbuja, punto de rocío, etc).

#### Resultados y Conclusiones

La Fig. 1 muestra una EFR, computada para un dado sistema ternario reactivo, de una dada composición global inicial. El modelo utilizado es la ecuación de estado (EDE) SRK<sup>1</sup> con reglas cuadráticas de mezclado (RsQM) y valores de parámetros obtenidos de la ref<sup>2</sup>. Las propiedades estándar a 298 K y las capacidades caloríficas en estado gas ideal provienen de la ref<sup>3</sup>. Se observa variación de la composición global (fracciones molares globales de los componentes) a lo largo de la EFR (Fig. 1, Der.: recta verde). La línea verde se reduciría a un punto si la envolvente de fases fuera la de un sistema no reactivo, para el cual la fase mayoritaria tendría fracciones molares de los componentes constantes. Se observa también en la Fig. 1 un elevado grado de no linealidad, con el que los algoritmos de cálculo lidiaron satisfactoriamente.



**Fig. 1.** EFR computada. Sist. reactivo: CO<sub>2</sub> (1) + óxido de propileno (2) + carbonato de propileno (3). Composic. molar global inicial  $z_{1,0} = 0.75$ ,  $z_{2,0} = 0.25$  y  $z_{3,0} = 0.00$ . **lza.**: Proyección P vs. T. **Rojo**: pto. de rocío (PsR). **Azul**: pto. de burbuja (PsB). **Der.**: Proyección fracc. molar del comp. 2 vs. fracc. molar del comp. 1. **Verde**: composición molar global (fase mayoritaria). **Rojo**: líquido incipiente ( $L_{incp}$ ) en PsR. **Azul**: vapor incipiente ( $V_{incp}$ ) en PsB. ----- tie lines.  $z_i$ ,  $x_i$  ó  $y_i$ : fracc. molar del comp.  $i$  global, en  $L_{incp}$  ó en  $V_{incp}$  respectivamente.

#### Referencias

- <sup>1</sup>G. Soave, *Chem. Eng. Sci.*, 27, 6, 1197–1203, 1972.
- <sup>2</sup>L. Gharnati, N. E. Musko, A. D. Jensen, G. M. Kontogeorgis, J. D. Grunwaldt, *J. Supercrit. Fluids*, 82, 106–115, 2013.
- <sup>3</sup>DIPPR 801 Database. Evaluated Process Design Data. Public Release in, American Institute of Chemical Engineers, Design Institute for Physical Property Data, BYU-DIPPR, Thermophysical Properties Laboratory: Provo, UT, 2003.