



Universidad de San Carlos de Guatemala  
Facultad de Ingeniería  
Escuela de Ingeniería Química

**DESARROLLO DE UNA APLICACIÓN UTILIZANDO VISUAL STUDIO 2010 PARA EL  
CÁLCULO DE COEFICIENTES DE ACTIVIDAD POR EL MÉTODO UNIFAC**

**Jim Kevin Cuestas Cifuentes**

Asesorado por el Ing. Jorge Emilio Godínez Lemus

Guatemala, noviembre de 2012

UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMALA



FACULTAD DE INGENIERÍA

**DESARROLLO DE UNA APLICACIÓN UTILIZANDO VISUAL STUDIO 2010 PARA EL  
CÁLCULO DE COEFICIENTES DE ACTIVIDAD POR EL MÉTODO UNIFAC**

TRABAJO DE GRADUACIÓN

PRESENTADO A LA JUNTA DIRECTIVA DE LA  
FACULTAD DE INGENIERÍA  
POR

**JIM KEVIN CUESTAS CIFUENTES**

ASESORADO POR EL ING. JORGE EMILIO GODÍNEZ LEMUS

AL CONFERÍRSELE EL TÍTULO DE

**INGENIERO QUÍMICO**

GUATEMALA, NOVIEMBRE DE 2012

UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMALA  
FACULTAD DE INGENIERÍA



**NÓMINA DE JUNTA DIRECTIVA**

DECANO	Ing. Murphy Olympo Paiz Recinos
VOCAL I	Ing. Alfredo Enrique Beber Aceituno
VOCAL II	Ing. Pedro Antonio Aguilar Polanco
VOCAL III	Inga. Elvia Mirlam Ruballos Samayoa
VOCAL IV	Br. Juan Carlos Molina Jiménez
VOCAL V	Br. Mario Maldonado Muralles
SECRETARIO	Ing. Hugo Humberto Rivera Pérez

**TRIBUNAL QUE PRACTICÓ EL EXAMEN GENERAL PRIVADO**

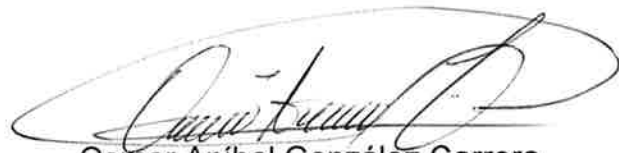
DECANO	Ing. Murphy Olympo Paiz Recinos
EXAMINADOR	Ing. Federico Guillermo Salazar Rodríguez
EXAMINADOR	Ing. Víctor Herbert de León Morales
EXAMINADOR	Ing. Jaime Domingo Carranza González
SECRETARIO	Ing. Hugo Humberto Rivera Pérez

## HONORABLE TRIBUNAL EXAMINADOR

Cumpliendo con los preceptos que establece la ley de la Universidad de San Carlos de Guatemala, presento a su consideración mi trabajo de graduación titulado:

CONTROL DE GASTOS EN EL ÁREA DE TRANSPORTES PARA UNA  
EMPRESA DE DISTRIBUCIÓN DE PRODUCTOS DE CONSUMO MASIVO

Tema que me fuera asignado por la Dirección de la Escuela de Ingeniería Mecánica Industrial, con fecha agosto de 2012.


A handwritten signature in black ink, enclosed within a large, light-colored oval. The signature is cursive and appears to read 'Osmar Aníbal González Carrera'.

Osmar Aníbal González Carrera



El Director de la Escuela de Ingeniería Mecánica Industrial de la Facultad de Ingeniería de la Universidad de San Carlos de Guatemala, luego de conocer el dictamen del Asesor, el Visto Bueno del Revisor y la aprobación del Área de Lingüística del trabajo de graduación titulado **CONTROL DE GASTOS EN EL ÁREA DE TRANSPORTES PARA UNA EMPRESA DE DISTRIBUCIÓN DE PRODUCTOS DE CONSUMO MASIVO**, presentado por el estudiante universitario **Osmar Aníbal González Carrera**, aprueba el presente trabajo y solicita la autorización del mismo.

“ID Y ENSEÑAD A TODOS”

  
Ing. César Ernesto Urquizú Rodas  
DIRECTOR

Escuela de Ingeniería Mecánica Industrial



Guatemala, noviembre de 2012.

/mgp

Guatemala Julio del 2,012

Ing. César Ernesto Urquizù Rodas  
Director  
Escuela de ingeniería mecánica industrial  
Facultad de Ingeniería.

Por medio de la presente hago constar que tuve a bien asesorar en la realización y revisión del trabajo de graduación al estudiante Osmar Aníbal González Carrera con número de carnet 97-12396 en el tema: **CONTROL DE GASTOS EN EL AREA DE TRANSPORTES PARA UNA EMPRESA DE DISTRIBUCION DE PRODUCTOS DE CONSUMO MASIVO.**

El trabajo efectuado cumple con los objetivos trazados por lo tanto a mi criterio, la estructura, contenido técnico y resultados obtenidos me permiten aprobarlo y dar como concluida mi labor como asesor.

Atentamente,



Ing. industrial. Miguel Angel Aguilar Donis  
Asesor  
Colegiado No. 5415

*Miguel Angel Aguilar Donis*  
Ingeniero Industrial  
Colegiado 5415



Como Catedrático Revisor del Trabajo de Graduación titulado **CONTROL DE GASTOS EN EL ÁREA DE TRANSPORTES PARA UNA EMPRESA DE DISTRIBUCIÓN DE PRODUCTOS DE CONSUMO MASIVO**, presentado por el estudiante universitario **Osmar Anibal González Carrera**, apruebo el presente trabajo y recomiendo la autorización del mismo.

“D Y ENSEÑAD A TODOS”

Ing. Jaime Roberto Ruiz Díaz  
Catedrático Revisor de Trabajos de Graduación  
Escuela de Ingeniería Mecánica Industrial

Guatemala septiembre de 2012.

/mjp



El Decano de la Facultad de Ingeniería de la Universidad de San Carlos de Guatemala, luego de conocer la aprobación por parte del Director de la Escuela de Ingeniería Mecánica Industrial, al trabajo de graduación titulado: **CONTROL DE GASTOS EN EL ÁREA DE TRANSPORTES PARA UNA EMPRESA DE DISTRIBUCIÓN DE PRODUCTOS DE CONSUMO MASIVO**, presentado por el estudiante universitario **Osmar Anibal González Carrera**, autoriza la impresión del mismo.

IMPRÍMASE.

Ing. Alfredo Enrique Beber Aceituno  
Decano en funciones



Guatemala, 19 de noviembre de 2012

/cc



## **AGRADECIMIENTOS A:**

- Mi padre celestial** Por todas las bendiciones que he recibido a lo largo de mi vida y de mi carrera, que han permitido que alcance todas las metas que me he trazado.
- Mi madre** Silvia Emilse Cifuentes, por ser un ejemplo a seguir, ha sido mi guía por el apoyo en todas las decisiones de mi vida y por ser quien me ha criado y enseñado para llegar a ser la persona que soy.
- Mi padre** Helmer Rolando Cuestas, por su ejemplo al enseñarme a ser persistente y constante en todo lo que me tracé en la vida. Por enseñarme a tener el carácter para poder enfrentar todos los desafíos de mi vida.
- Mis hermanos** Bruce, por todo su apoyo y enseñanzas en mi carrera y mi vida. Katherine por su constante apoyo y motivación para siempre dar lo mejor de mí. Joselyne por su constante compañía y ánimo en muchos aspectos de mi vida.
- Ingeniero Jorge Emilio Godínez Lemus** Por asesorar este trabajo de graduación. Por sus consejos, enseñanzas y apoyo en la carrera y en mi proceso de graduación.

## ÍNDICE GENERAL

ÍNDICE DE ILUSTRACIONES .....	V
LISTA DE SÍMBOLOS .....	IX
GLOSARIO .....	XI
RESUMEN .....	XV
OBJETIVOS .....	XVII
INTRODUCCIÓN .....	XIX
1. ANTECEDENTES .....	1
2. ECUACIONES Y MÉTODOS .....	5
2.1. Relaciones entre presión y temperatura .....	5
2.2. Soluciones binarias de líquidos .....	8
2.3. Sistemas de dos componentes .....	10
3. CÁLCULO DE LOS COEFICIENTES DE ACTIVIDAD Y POTENCIAL QUÍMICO .....	13
3.1. Propiedades de fase líquida a partir de los datos EVL .....	13
3.2. Fugacidad .....	14
3.3. Coeficiente de actividad .....	15
3.4. Energía de Gibbs de exceso .....	17
4. MODELOS PARA LA ENERGÍA LIBRE DE GIBBS DE EXCESO .....	19
5. MODELOS DE COMPOSICIÓN LOCAL .....	23
5.1. Ecuación UNIQUAC .....	24

6.	MÉTODO UNIFAC.....	27
6.1.	Coeficientes de actividad a partir de métodos de contribución de grupos.....	27
6.2.	Ecuación UNIFAC .....	28
6.3.	Rango de aplicabilidad del método UNIFAC.....	34
6.4.	Aplicaciones del método UNIFAC.....	34
6.5.	Ventajas y desventajas del método UNIFAC .....	35
7.	INTRODUCCIÓN A LA APLICACIÓN.....	37
7.1.	Proceso de instalación de la aplicación .....	37
7.2.	Requisitos para la instalación de la aplicación.....	43
7.3.	Modos de iniciar la aplicación Tesis UNIFAC de Jim Kevin Cuestas Cifuentes .....	43
8.	MÓDULO DE INICIO .....	45
8.1.	Pantallas de inicio.....	45
8.2.	Partes de la ventana principal de la aplicación .....	46
8.2.1.	Barra de menú.....	47
8.2.2.	Barra de iconos .....	50
9.	MÓDULO ESTUDIANTE .....	51
9.1.	Inicio del Módulo Estudiante.....	51
9.2.	Pestañas del Módulo Estudiante .....	52
9.2.1.	Pestaña introducción .....	52
9.2.2.	Pestaña molécula 1 .....	53
9.2.3.	Pestaña molécula 2 .....	54
9.2.4.	Pestaña ri y qi.....	55
9.2.5.	Pestaña e k1 .....	56
9.2.6.	Pestaña e k2 .....	57
9.2.7.	Pestañas $\tau$ mk 1 y $\tau$ mk 2.....	58

	9.2.8.	Pestañas $\beta_1$ y $\beta_2$ .....	60
	9.2.9.	Pestañas $\theta$ .....	62
	9.2.10.	Pestañas S .....	63
	9.2.11.	Pestañas resultados .....	64
10.		MÓDULO EXPERTO .....	67
	10.1.	Inicio del Módulo Experto .....	67
	10.2.	Pestañas del Módulo Experto .....	68
		10.2.1. Pestaña instrucciones .....	68
		10.2.2. Pestaña molécula 1 .....	68
		10.2.3. Pestaña molécula 2 .....	69
		10.2.4. Pestaña $r_i$ y $q_i$ .....	71
		10.2.5. Pestaña e $k_1$ .....	72
		10.2.6. Pestaña e $k_2$ .....	73
		10.2.7. Pestañas $\tau$ $m_k$ .....	74
		10.2.8. Pestañas $\beta_1$ y $\beta_2$ .....	75
		10.2.9. Pestañas $\theta$ .....	77
		10.2.10. Pestañas S .....	78
		10.2.11. Pestañas resultados .....	79
11.		BASE DE DATOS .....	83
	11.1.	Inicio de base de datos .....	83
	11.2.	Base de datos de parámetros de grupo .....	83
	11.3.	Base de datos de parámetros de interacción .....	85
12.		EXPLORADOR DE INTERNET Y CONVERTOR DE UNIDADES.....	87
	12.1.	Inicio de explorador de Internet.....	87

13.	TUTORIAL .....	89
13.1.	Inicio tutoriales .....	89
14.	MAPA MENTAL Y DIAGRAMA DE FLUJO .....	91
14.1.	Mapa mental.....	91
14.2.	Diagrama de flujo .....	93
15.	METODOLOGÍA .....	95
15.1.	Delimitación de campo de estudio .....	95
15.2.	Recursos humanos disponibles .....	95
15.3.	Recursos materiales disponibles .....	96
15.4.	Técnica cualitativa o cuantitativa .....	96
15.5.	Recolección y ordenamiento de la información.....	96
16.	INTERPRETACIÓN DE RESULTADOS .....	97
16.1.	Aplicación del Módulo Estudiante .....	97
16.2.	Aplicación del Módulo Experto.....	98
	CONCLUSIONES .....	99
	RECOMENDACIONES .....	101
	BIBLIOGRAFÍA .....	103
	APÉNDICES .....	105

## ÍNDICE DE ILUSTRACIONES

### FIGURAS

1.	Diagrama PT de fases para una sustancia pura.....	6
2.	Diagrama PTxy para el equilibrio vapor-líquido.....	12
3.	Representación de la presión de vapor.....	16
4.	Dependencia de la composición de la fugacidad para las especies en una solución binaria.....	18
5.	Carpeta contenedora de la aplicación.....	41
6.	Carpeta contenedora del archivo para instalar la aplicación.....	42
7.	Carpeta contenedora de archivo de instalación.....	43
8.	Ventana de inicio de la instalación.....	43
9.	Ventana de dirección de instalación de la aplicación.....	44
10.	Ventana de confirmación para la instalación.....	45
11.	Ventana de progreso de la instalación.....	45
12.	Ventana de finalización del progreso de la instalación.....	46
13.	Acceso directo desde el escritorio a la aplicación.....	48
14.	Acceso directo desde el menú de inicio a la aplicación.....	48
15.	Pantalla de inicio de la aplicación.....	49
16.	Ventana principal de la aplicación.....	49
17.	Barra de título.....	50
18.	Barra de menú.....	50
19.	Barra de íconos.....	50
20.	Menú archivo.....	51
21.	Menú UNIFAC.....	51
22.	Menú Base de Datos.....	52

23.	Menú Conversor de unidades.....	52
24.	Menú Ayuda.....	53
25.	Menú Ayuda.....	53
26.	Menú Ayuda.....	53
27.	Pestaña introducción.....	56
28.	Pestaña molécula 1.....	57
29.	Pestaña molécula 2.....	58
30.	Pestaña $r_i$ y $q_i$ .....	59
31.	Pestaña $e_{k1}$ .....	60
32.	Pestaña $e_{k2}$ .....	61
33.	Pestaña $\tau_{mk1}$ .....	62
34.	Pestaña $\tau_{mk2}$ .....	63
35.	Pestaña $\beta_1$ .....	64
36.	Pestaña $\beta_2$ .....	64
37.	Pestaña $\theta$ .....	65
38.	Pestaña S.....	66
39.	Pestaña resultados.....	67
40.	Botón parámetro.....	68
41.	Botón parámetro.....	68
42.	Parte combinatoria del método UNIFAC.....	68
43.	Parte residual del método UNIFAC.....	68
44.	Últimos dos botones de la pestaña resultado.....	69
45.	Pestaña instrucciones.....	73
46.	Pestaña molécula 1.....	74
47.	Pestaña molécula 2.....	74
48.	Pestaña $r_i$ y $q_i$ .....	75
49.	Pestaña $e_{k1}$ .....	76
50.	Pestaña $e_{k2}$ .....	77
51.	Pestaña $\tau_{mk}$ .....	78

52.	Pestaña $\beta_1$ .....	79
53.	Pestaña $\beta_2$ .....	80
54.	Pestaña $\theta$ .....	81
55.	Pestaña S.....	82
56.	Pestaña resultados.....	83
57.	Botón parámetro.....	83
58.	Botón parámetro L.....	84
59.	Parte combinatoria del método UNIFAC.....	84
60.	Parte residual del método UNIFAC.....	84
61.	Últimos dos botones de la pestaña resultado.....	84
62.	Menú base de datos.....	86
63.	Base de datos de parámetros de grupo del método UNIFAC.....	86
64.	Base de datos de parámetros de interacción.....	87
65.	Explorador de Internet.....	90
66.	Ejemplo de uno de los tutoriales.....	91
67.	Mapa mental.....	92
68.	Diagrama de flujo.....	93





## LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolo	Significado
$\gamma$	Coeficiente de actividad
R	Constante del gas ideal
$G^E$	Energía de Gibbs en exceso
G	Energía de Gibbs
H	Entalpía
S	Entropía
x	Fracción molar
f	Fugacidad
K	Kelvin
$\tau$	Parámetro ajustable ecuación UNIFAC
$\mu$	Potencial químico
P	Presión
T	Temperatura
$g^c$	Término combinatorio
$g^R$	Término residual
V	Volumen



## GLOSARIO

<b>Aplicación</b>	Tipo de programa diseñado para el procesamiento de datos y la obtención de resultados.
<b>Azeotropo</b>	Concentración en la que todos los componentes de una mezcla líquida ebulen a la misma temperatura.
<b>Base de datos</b>	Tabla donde se enumeran datos o valores que guardan relación con un tema o propiedad común.
<b>Botón</b>	Símbolo o cuadro con una leyenda en su interior utilizado en aplicación, para ejecutar una subrutina o conjunto de pasos al ser presionado o activado.
<b>Clic</b>	Acción de presionar cualquier botón con el <i>mouse</i> o ratón de la computadora.
<b>Destilación</b>	Operación unitaria de separación mediante, evaporación y condensación, los componentes de una mezcla líquida por medio de los diferentes puntos de ebullición de cada una de las sustancias.
<b>Energía de Gibbs</b>	Función de estado que determina la condición de equilibrio y espontaneidad de una reacción química a temperatura y presión constante.

<b>Fracción molar</b>	Unidad química usada para expresar la concentración de soluto en solvente. Expresa la proporción en que se encuentran los moles de soluto respecto al total de moles.
<b>Fugacidad</b>	Medida de la tendencia de una sustancia a preferir una fase frente a otra.
<b>Gas ideal</b>	Gas teórico en el que las moléculas del gas se consideran como partículas puntuales las cuales no interactúan entre sí.
<b>Hardware</b>	Toda parte tangible de un sistema informático.
<b>Multicomponente</b>	Que consta de dos o más componentes.
<b>Sistema operativo</b>	Programa o conjunto de programas de un sistema informática que gestionan los recursos de hardware y proveer una base para la instalación de aplicaciones y programas.
<b>Solución</b>	Mezcla homogénea a nivel molecular de dos o más sustancias que no reaccionan entre si.
<b>Software</b>	Parte intangible de un sistema informático que comprende todos los componentes lógicos que permiten la realización de tareas específicas.

**Volatilidad**

Medida de la tendencia de una sustancia a pasar a la fase de vapor, también es considerada como la facilidad de una sustancia para evaporarse.

**Volumen molar**

Unidad química que mide el volumen que ocupa una sustancia por mol de dicha sustancia.



## RESUMEN

Debido al avance de la tecnología y su influencia en el proceso de aprendizaje, surge la necesidad de crear nuevas herramientas digitales. Al generar herramientas para el aprendizaje se busca facilitar al estudiante la comprensión de temas que tienen un alto grado de complejidad. Con el fin de facilitar este proceso en la termodinámica química, en Ingeniería Química, se estableció, a través de un árbol de problemas, la necesidad de desarrollar una aplicación digital para el cálculo de coeficientes de actividad por medio del método UNIFAC (Universal Functional Activity Coefficient), el cual es uno de los más exactos y versátiles para este tipo de cálculos. Sin embargo, presenta mayor complejidad que otros métodos como el de Van Laar, Margules y Wilson.

Se inició el trabajo de graduación creando una base de datos digital de parámetros de grupo y subgrupo para el modelo UNIFAC, los cuales se utilizaron en el desarrollo de la aplicación.

Seguidamente se procedió a construir una aplicación para la enseñanza del cálculo de coeficientes de actividad, por el modelo UNIFAC, en la interfaz de programación de Microsoft Visual estudio 2010.

Además, esta herramienta cuenta con un tutorial para el aprendizaje del cálculo de coeficientes de actividad por el método UNIFAC. El tutorial se encuentra dividido en 9 partes, en las cuales se describen cada uno de los pasos para el cálculo del coeficiente de actividad y el uso del programa.



El programa se divide en dos módulos. El Módulo Estudiante está diseñado con el fin de que el usuario principiante en el uso del programa se familiarice con él. El Módulo Experto se diseñó con el fin de calcular coeficientes de actividad de moléculas complejas para ser utilizado por usuarios con experiencia en el uso del programa

Luego se diseñó y elaboró mapas conceptuales y diagramas de flujos para orientar al estudiante de Ingeniería Química en el cálculo de coeficientes de Actividad por el método UNIFAC y al usuario en el uso de la aplicación.

## **OBJETIVOS**

### **General**

Desarrollar una aplicación en Visual Studio 2010 con fines didácticos, para el cálculo de coeficientes de actividad por el método UNIFAC.

### **Específicos**

1. Elaborar una base de datos de parámetros de grupo y subgrupo, para el método UNIFAC.
2. Construir una aplicación que facilite el proceso de enseñanza del cálculo de coeficientes de actividad de mezclas binarias en la interfaz de programación Microsoft Visual Studio 2010.
3. Desarrollar un tutorial para el aprendizaje del proceso de cálculo de coeficientes de actividad por el método UNIFAC.
4. Diseñar y elaborar mapas conceptuales y diagramas de flujo, para la orientación del estudiante de Ingeniería Química, en el aprendizaje del cálculo de coeficientes de actividad por el método UNIFAC.



## INTRODUCCIÓN

La utilización de medios tecnológicos en la educación y la industria, a través del uso de aplicaciones digitales o computacionales, se ha convertido en una herramienta indispensable para obtener mejores resultados tanto en la formación de profesionales de la ingeniería como en la industria en general. El presente trabajo de graduación busca satisfacer esta necesidad al desarrollar un software, utilizando Visual Studio 2010, para la descripción del cálculo de coeficientes de actividad, considerando que este programa permite diseñar interfaces más atractivas y sencillas que al diseñar programas en hojas de cálculo.

El objetivo de esta aplicación es describir el cálculo de coeficientes de actividad por el método UNIFAC. Además explica de una manera interactiva la metodología de cálculo de coeficientes de actividad por este método. La herramienta se puede utilizar como apoyo en otras investigaciones relacionadas a la temática de los coeficientes de actividad y se podrá aplicar en la industria en operaciones unitarias de destilación, absorción y humidificación.

El software se desarrolló en Visual Studio 2010 que es una herramienta para la programación, diseño y compilación de programas. El software calcula los coeficientes de actividad con base a modelos matemáticos y algoritmos adecuados.

La temática de los coeficientes de actividad pertenece al área de Fisicoquímica de la carrera de Ingeniería Química. Específicamente en el campo de la química. El uso de software en la carrera de Ingeniería Química, promueve la innovación en aspectos educativos y de la industria que se logra al implementar nuevas técnicas de enseñanza y herramienta para la industria. El diseño de este tipo de software permite que el estudiante de Ingeniería Química refuerce sus conocimientos aprendidos en varias áreas de su carrera.

## 1. ANTECEDENTES

En los últimos años, las técnicas y métodos de enseñanza han ido evolucionando. Este cambio en la educación ha generado nuevas herramientas para la enseñanza. Las cuales están basadas en los avances tecnológicos en el diseño de software que permite un aprendizaje de una forma interactiva y al alcance de una mayor población.

En el estudio de la Ingeniería Química se ha visto la necesidad del uso de herramientas tecnológicas, para obtener un mejor aprendizaje y capacitación en las diferentes áreas de la carrera. Esta necesidad se ha producido debido al avance en descubrimientos relacionados con los tópicos de la carrera, lo que ha incrementado la complejidad de la descripción de los fenómenos, por lo que se requiere de herramientas más potentes y que permitan obtener resultados de una forma más rápida.

Al realizar una amplia búsqueda en Internet en páginas web, sitios y blogs relacionados con software se encontró que existe una cantidad muy limitada de aplicaciones para el cálculo de coeficientes de actividad, además es software desactualizado por haber sido creado hace mas de 15 años y no tener versiones mas recientes.

En enero de 1981, el estudiante de Ingeniería Química Andrés Roberto Díaz Del Valle, presentó su trabajo de graduación titulado; Adaptación de un programa de computadora para el cálculo de coeficientes de actividad haciendo uso del método UNIFAC; el cual presenta un programa de computadora escrito en lenguaje de Fortran IV, para ser usado en el sistema IBM 370 del Departamento de Procesamiento Electrónico de datos de la Universidad de San Carlos de Guatemala. El objetivo del programa era calcular los parámetros de las ecuaciones de Wilson y UNIQUAC a partir del método UNIFAC, empleando para ello, coeficientes de actividad a dilución infinita.

En noviembre de 1989, el estudiante de Ingeniería Química Edgar Rodolfo Hernández Ardon, presentó su trabajo de graduación titulado: Adaptación de un programa de computadora para el equilibrio líquido – vapor con los modelos NRTL y UNIFAC y simulaciones de una torre de destilación; en el cual se presentan programas de computación de una simulación matemática de una torre de destilación que ayuda al estudiante de Ingeniería Química y profesional en el conocimiento del comportamiento de los compuestos en una mezcla, en cada uno de los platos de la torre de destilación.

En septiembre de 2001, el estudiante de Ingeniería Química Luis Haroldo Barrera García-Salas, presentó su trabajo de graduación titulado: Diseño y elaboración de un programa tutorial para el estudio del equilibrio ácido base en solución acuosa con énfasis en la disociación, mediante el diagrama de flood y curvas de disociación, utilizando aplicaciones de Microsoft office 2000; en el cual se presenta cómo se diseñó un programa tutorial con aplicación en Ingeniería Química en la cual el programa tutorial fue diseñado mediante los subprogramas del software Microsoft Office 2000 en una estructura de archivos y presentaciones de diapositivas interconectadas (hipervínculos).

En marzo de 2006, el estudiante de Ingeniería Química Roberto Andrés Díaz Durán, presentó su trabajo de graduación titulado: Implementación de un simulador de modelos del comportamiento de equilibrios vapor-líquido de sistemas binarios, el cual tiene como fin obtener los valores numéricos de coeficientes de actividad de compuestos químicos binarios, en equilibrio vapor-líquido (EVL); incluyendo dentro del mismo, la ejecución de un programa computacional denominado simulador, escrito en lenguaje de Visual Basic, para ejecutarse como una hoja electrónica de Microsoft Excel, donde a partir de datos iniciales experimentalmente, se obtienen representaciones gráficas de equilibrio vapor-líquido, empleando las ecuaciones y los modelos de EVL de Margules, Wilson y Van Laar, así como el método UNIFAC para el cálculo de variables y coeficientes de actividad.

En marzo de 2009, el estudiante de Ingeniería Química David Alejandro Reynoso Revolorio, presentó su trabajo de graduación titulado: Desarrollo de un sistema tutorial inteligente –STI- utilizando Visual Basic 6.0 para la fundamentación teórica de la operación unitaria de lixiviación inducida (extracción sólido-líquido) orientado a materiales biológicos (metabólicos); en el cual se creó un tutorial con modalidades para estudiante, tutor, pedagogo y experto, la cual es una herramienta tecnológica para el aprendizaje de la lixiviación.





## 2. ECUACIONES Y MÉTODOS

### 2.1. Relaciones entre presión y temperatura

La presión a la cual un líquido puro está en equilibrio con su vapor se le denomina presión de vapor. Este equilibrio es dinámico; por lo que, la velocidad y el número de moléculas de líquido que se evaporan dejando la fase líquida es igual a la velocidad y número de moléculas que se condensan abandonando la fase gaseosa.

En un diagrama de presión-temperatura para una sustancia se puede observar las diferentes fases de una sustancia. En la figura 1 se observa que al aumentar la temperatura aumenta la presión de vapor. La temperatura se puede aumentar a lo largo de la curva que va de 2 a C. El punto C es el punto crítico de la sustancia, en la cual la densidad del líquido y del vapor son iguales.

Al considerar un punto cualquiera sobre la curva de equilibrio entre las fases líquido y vapor, para que exista la condición de equilibrio entre las fases debe existir equilibrio químico en el cual:

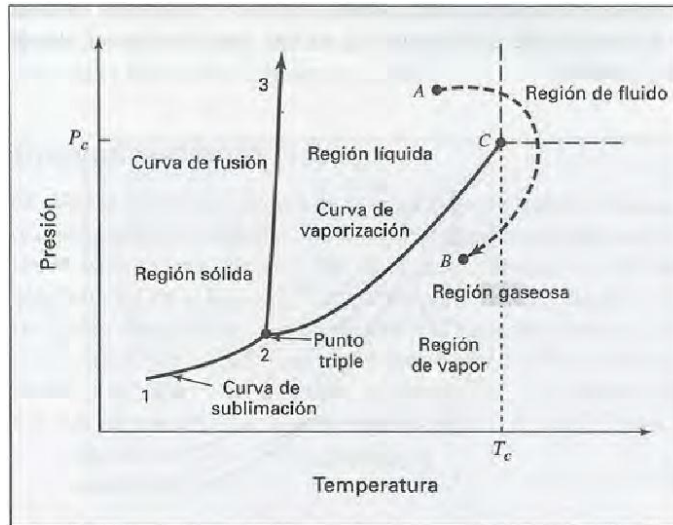
$$\mu_i^\alpha = \mu_i^\beta \quad (\text{Ecuación 1})$$

Donde:

$\mu_i$  = potencial químico de la fase " i "

$\alpha$  y  $\beta$  = son las fases líquida y vapor

Figura 1. Diagrama PT de fases para una sustancia pura



Fuente: SMITH, J. M. Introducción a la termodinámica en Ingeniería Química. p. 68.

Para una sustancia pura

$$\mu_i = \bar{G} = \left[ \frac{\partial G}{\partial n_i} \right]_{P, T, n_j} \quad (\text{Ecuación 2})$$

Por lo tanto, en cualquier punto sobre la curva de equilibrio de dos fases

$$\bar{G}^{\alpha}_i = \bar{G}^{\beta}_i \quad (\text{Ecuación 3})$$

y cualquier desplazamiento infinitesimal sobre la curva de equilibrio implica que

$$d\bar{G}^{\alpha}_i = d\bar{G}^{\beta}_i \quad (\text{Ecuación 4})$$

Sabiendo que

$$d\bar{G} = -\bar{S}dT + \bar{V}dP \quad (\text{Ecuación 5})$$

Sustituyendo la ecuación 5 en la ecuación 4 se obtiene,

$$-\bar{S}^{\alpha}dT + \bar{V}^{\alpha}dP = -\bar{S}^{\beta}dT + \bar{V}^{\beta}dP \quad (\text{Ecuación 6})$$

Reagrupando términos se obtiene la ecuación de Clausius y Clapeyron:

$$\frac{dP}{dT} = \frac{\Delta\bar{H}}{T\Delta\bar{V}} = \frac{\Delta\bar{H}}{T(V_v - V_l)} \quad (\text{Ecuación 7})$$

Donde  $V_v$  es el volumen molar de vapor, y  $V_l$  es el volumen molar del líquido y  $\Delta H_v$  es el calor molar de vaporización y  $T$  la temperatura de ebullición.

Cuando  $V_v$  es mucho mayor que  $V_l$ , y suponiendo que el vapor actúa como un gas ideal se obtiene de la ecuación del gas ideal que,  $V_v = RT / P$ ; por lo tanto la ecuación 3 se convierte en,

$$\frac{dP}{dT} = \frac{\Delta H_v P}{RT^2}; \quad (\text{Ecuación 8})$$

De donde.

$$\frac{dP}{P} = \frac{\Delta H_v dT}{RT^2} \quad (\text{Ecuación 9})$$

Considerando que  $\Delta H_v$  es independiente de la temperatura e integrando la ecuación 9:

$$\ln P = -\frac{\Delta H_v}{R} * \frac{1}{T} + C \quad (\text{Ecuación 10})$$

Al graficar  $\ln P$  en función de  $1/T$  se debe obtener una línea recta cuya pendiente es igual a  $(-\Delta H_v / R)$ .

## 2.2. Soluciones binarias de líquidos

Las soluciones son mezclas homogéneas de dos o más sustancias, con la misma composición y propiedades físicas en toda la solución.

La presión de vapor de una solución de determina igual que la de una sustancia pura, con excepción cuando la composición del vapor es más rica en el componente más volátil (componente con la presión de vapor más alta), por lo que es necesario determinar simultáneamente la composición del líquido y del vapor.

La ley de Dalton establece que la presión total de un sistema es igual a la suma de las presiones parciales de todos sus componentes:

$$P_T = P_A + P_B \quad (\text{Ecuación 11})$$

La Ley de Raoult establece que la presión parcial de cada líquido es directamente proporcional a su composición, en soluciones ideales, y la constante de proporcionalidad es la presión de vapor del componente puro ( $P_A^o$  y  $P_B^o$ ):

$$P_A = P_A^o * X_A \quad (\text{Ecuación 12})$$

$$P_B = P_B^o * X_B \quad (\text{Ecuación 13})$$

En las que  $X_A$  y  $X_B$  representan las fracciones moles del componente A y B en el líquido. Para soluciones binarias  $X_A + X_B = 1$ .

La composición de A y B en el vapor es representada como ( $Y_A$  y  $Y_B$ ) se puede conocer determinar a partir de  $X_A$  y  $X_B$ , aplicando las leyes de Dalton y Raoult:

$$Y_A = \frac{P_A}{P_T} \quad (\text{Ecuación 14})$$

$$Y_A = \frac{P_A^0 \cdot X_A}{(P_A^0 - P_B^0) \cdot X_A + P_B^0} \quad (\text{Ecuación 15})$$

Soluciones ideales son aquellas que obedecen la ley de Raoult, en la que el volumen permanece constante, por lo que los volúmenes son aditivos ( $\Delta V=0$ ) y no hay calor desprendido o absorbido ( $\Delta H=0$ ) al mezclar los componentes.

Cuando la solución tiene un comportamiento no ideal se denomina solución real y es necesario introducir un factor de corrección a la ecuación de la presión parcial llamado coeficiente de actividad ( $\gamma$ ):

$$P_A = \gamma_A \cdot P_A^0 \cdot X_A \quad (\text{Ecuación 16})$$

Las soluciones binarias de líquidos volátiles se clasifican según su desviación con respecto a la idealidad como:

- Soluciones ideales
- Soluciones con desviaciones positivas de la ley de Raoult
- Soluciones con desviaciones negativas de la ley de Raoult

En algunos sistemas, a cierta presión se presenta un punto en el que las composiciones del vapor y líquido son iguales, a este punto se le denomina punto azeótropico. En este punto todos los componentes de la mezcla se comportan como un solo componente puro y todos ebullicen o se evaporan a la vez.

Estos equilibrios son utilizados para separar soluciones por destilación en una torre de destilación. Los equilibrios ayudan a determinar el número de platos teóricos necesarios para la destilación. La eficiencia de estas torres o columnas de destilación depende del número teórico y real de platos de la torre.

Los diagramas de temperatura-composición son utilizados para determinar el número teórico de platos por los métodos de McCabe-Thiele en el cual las pérdidas de calor o calores de solución deben ser pequeños y en el cual se supone que el flujo molar líquido es constante en cada una de las zonas de la columna y la relación líquido vapor es constante para cada una de las zonas de la torre, y el método de Ponchon-Savarit, el cual hace uso de las entalpías, por lo que es un método más riguroso y exacto.

### **2.3. Sistemas de dos componentes**

En la figura 2 se observa un diagrama en tres dimensiones en las cuales se varía la presión, la temperatura y la concentración. Este diagrama muestra las condiciones en las cuales las soluciones están en fase líquida, sólida o gaseosa.

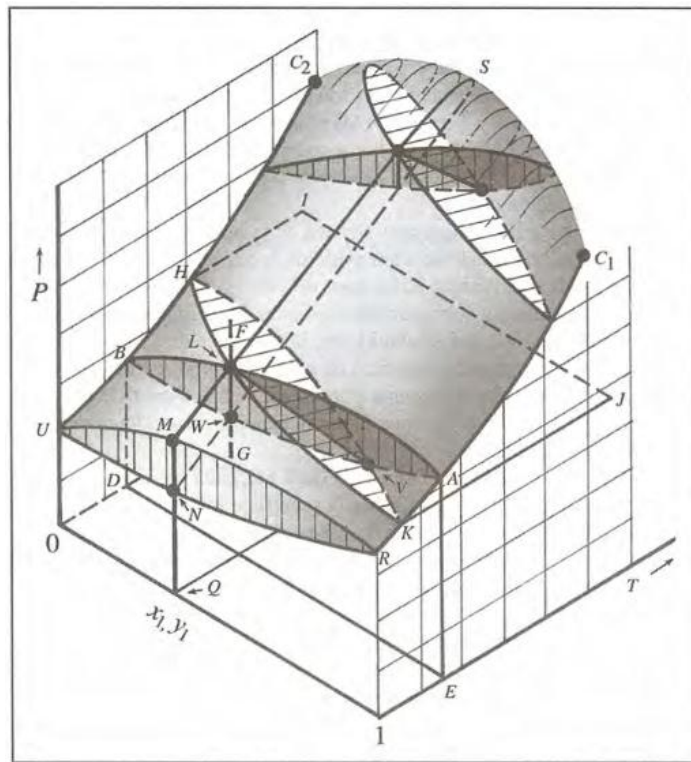
Para obtener un diagrama en dos dimensiones se fija la presión y se varía la composición y la temperatura formando diagramas líquido-líquido, líquido-gas, líquido- sólido y sólido- gas.

En los equilibrios líquido-vapor de mezclas binarias, están basados en modelos matemáticos como cualquier otro fenómeno físico, que relaciona la presión y la temperatura de un gas con su fase condensada. Derivada de la ecuación de Clausius-Clapeyron que relaciona la presión y la temperatura, surge en 1888 una correlación de datos experimentales, denominada la ecuación de Antoine, la cual relaciona la presión con la temperatura.

La ecuación de Antoine es la siguiente:

$$\log P = A - \frac{B}{C+t} \quad (\text{Ecuación 17})$$

Figura 2. **Diagrama PTxy para el equilibrio vapor-líquido**



Fuente: SMITH, J. M. Introducción a la termodinámica en Ingeniería Química. p. 360.



En donde A, B y C son constantes propias de la ecuación, donde P es la presión en milímetros de mercurio (torr) y t es la temperatura absoluta en Kelvin.

La misma ecuación de Antoine puede ser arreglada para obtener la temperatura de ebullición normal de un compuesto en función de la presión de la siguiente forma:

$$t = \left( \frac{B}{(A - \log P)} \right) - C \quad \text{(Ecuación 18)}$$

Cuando se desean hacer diagramas de temperatura, composición de datos del equilibrio muchas veces se cuenta únicamente como dato de partida la presión y con la ecuación de Antonie se puede establecer la temperatura de ebullición de los componentes de la mezcla.

Una vez se cuenta con los valores de temperatura, presión y dados los compuestos a evaluar, se eligen valores de concentración para la fase líquida para el compuesto más volátil, y el complemento de esta concentración es del compuesto en la fase de vapor, A continuación, se hacen los cálculos correspondientes para el segundo compuesto, y se procede a elaborar la curva de vapor en el equilibrio de ambos compuestos.

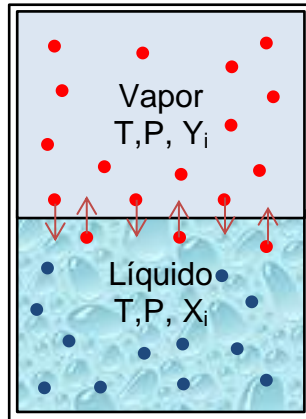
### **3. CÁLCULO DE LOS COEFICIENTES DE ACTIVIDAD Y POTENCIAL QUÍMICO**

En la termodinámica de soluciones es necesario analizar, primero la manera cómo se obtendrán los datos de equilibrio vapor-líquido (EVL), de las cuales se deducen las correlaciones del coeficiente de actividad.

#### **3.1. Propiedades de fase líquida a partir de los datos EVL**

La figura 3 muestra un sistema en el cual se ve una solución líquida en la parte inferior llenando parcialmente el recipiente cerrado, la solución líquida está en equilibrio con su vapor. La temperatura  $T$  y la presión  $P$  es uniforme en todo el sistema, se podrían medir fácilmente con los instrumentos adecuados. Para conocer las fracciones mol en el vapor ( $y_i$ ) y las fracciones mol en el líquido ( $x_i$ ) extrayendo una muestra del vapor y del líquido.

Figura 3. Representación de la presión de vapor



Fuente: elaboración propia.

### 3.2. Fugacidad

Es una forma o medida del potencial químico. La fugacidad dice la tendencia de una sustancia de preferir una fase ya sea líquida, sólida o gaseosa frente a las otras. Las fugacidades se presentan a temperaturas y presiones fijas, siendo para condiciones fijas la fugacidad diferente para cada una de las fases. La fase que tenga la fugacidad más pequeña será la que se verá más favorecida.

Para las especies *i* en fase vapor, la ecuación se describe a continuación:

$$\hat{f}_i^V = y_i^* \hat{\phi}_i^{V*} P \quad (\text{Ecuación 19})$$

Para una condición de equilibrio entre la fase líquida se denota que  $\hat{f}_i^V = \hat{f}_i^L$ , por tanto,

$$\hat{f}_i^V = y_i^* \hat{\phi}_i^{V*} P \quad (\text{Ecuación 20})$$

Para presiones bajas menores a 1 bar, la fase vapor se puede suponer comportamiento de gas ideal. Para estas condiciones  $\hat{\phi}_i^V = 1$  y las ecuaciones anteriores se reducen a:

$$\hat{f}_1^V = y_1^* P \quad (\text{Ecuación 21})$$

$$\hat{f}_2^V = y_2^* P \quad (\text{Ecuación 22})$$

### 3.3. Coeficiente de actividad

La línea punteada en la figura 4 representa la regla de Lewis/Randall, característica del comportamiento de la solución ideal. Este es el modelo más simple de la dependencia de la composición con  $\hat{f}_i$  que se usa como base para el cual se compara el comportamiento real. La siguiente ecuación define el coeficiente de actividad formalmente:

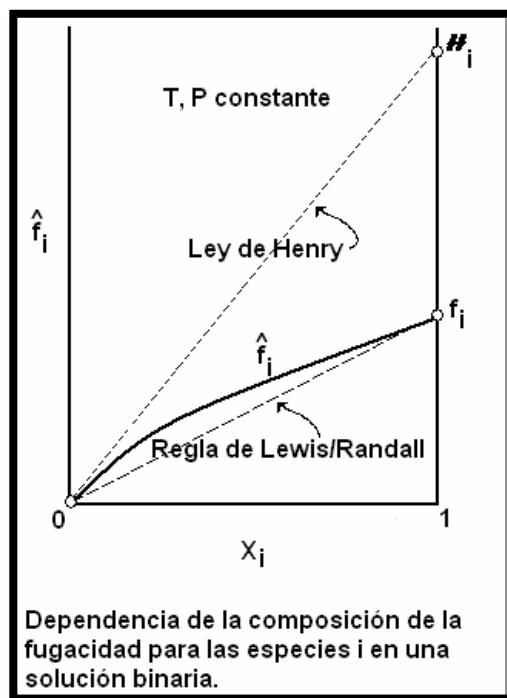
$$\gamma_i = \frac{\hat{f}_i}{x_i f_i} = \frac{\hat{f}_i}{\hat{f}_i^{id}} \quad (\text{Ecuación 23})$$

Por eso, para una especie de una solución dada el coeficiente de actividad, es la relación de su fugacidad ideal o dado por la regla de Lewis/Randall con el valor de la fugacidad real a las mismas T, P y composición. Para el cálculo de los valores experimentales, se elimina  $\hat{f}_i$  y  $\hat{f}_i^{id}$  por parámetros medibles como se muestra:

$$\gamma_i = \frac{y_i P}{x_i f_i} = \frac{y_i P}{x_i f_i^{sat}} \quad (i = 1, 2, \dots, N) \quad (\text{Ecuación 24})$$

La ecuación anterior es una nueva exposición de la ley de Raoult, y resulta idónea para el cálculo de los coeficientes de actividad de los datos experimentales de EVL a presión baja.

Figura 4. Dependencia de la composición de la fugacidad para las especies en una solución binaria



Fuente: SMITH, J. M. Introducción a la termodinámica en Ingeniería Química. p. 451.

La ley de Henry expresada como la línea tangente de la figura 4 se expresa a continuación:

$$\hat{f}_i = x_i H_i \quad (\text{Ecuación 25})$$

La ley de Henry se da por la ecuación:

$$y_i P = x_i H_i \quad (\text{Ecuación 26})$$

Donde la constante de Henry  $H_i$  es un dato experimental, es consecuencia inmediata de esta ecuación cuando  $\hat{f}_i = y_i^* P$ , es decir, cuando  $\hat{f}_i$  tiene su valor de un gas ideal.

La ley de Henry hace una relación con la regla de Lewis/Randall haciendo uso de la ecuación de Gibbs/Duhem, para solución binaria se obtiene una expresión exacta de la regla de Lewis/Randall cuando se aplica a soluciones reales, la cual se expresa de la siguiente forma:

$$\left( \frac{d\hat{f}_i}{dx_i} \right)_{x_i=1} = f_i \quad (\text{Ecuación 27})$$

Cuando una solución binaria se aproxima a una dilución infinita se puede aplicar la ley de Henry, y la ecuación de Gibbs/Duhem asegura que se cumpla la regla de Lewis/Randall para la otra especie al aproximarse a su pureza.

### 3.4. Energía de Gibbs de exceso

Algunos modelos usan como base para el cálculo de los coeficientes de actividad la siguiente ecuación.

$$\frac{G^E}{RT} = x_1 \ln \gamma_1 + x_2 \ln \gamma_2 \quad (\text{Ecuación 28})$$

Donde  $G^E$  es la energía de Gibbs en exceso  $R$  es la constante del gas ideal  $T$  es la temperatura  $x_1$  y  $x_2$  son las composiciones de los dos compuestos,  $\gamma_1$  y  $\gamma_2$  son los coeficientes de actividad de los compuestos de la mezcla binaria.



#### 4. MODELOS PARA LA ENERGÍA LIBRE DE GIBBS DE EXCESO

En la mayoría de los casos la energía de Gibbs en exceso,  $G^E / RT$  se presenta en función de  $T$ ,  $P$  y de la composición, cuando se trabajan líquidos a presiones de bajas a moderadas es una función muy débil de  $P$ . Por tanto, comúnmente se desprecia la dependencia de la presión de los coeficientes de actividad. En estos términos, para los datos a temperatura constante:

$$\frac{G^E}{RT} = g(x_1, x_2, \dots, x_N) \quad (T \text{ constante})$$

Para sistemas binarios, la función que se utiliza con una mayor frecuencia por una ecuación es  $G^E/x_1x_2RT$ , la cual se puede expresar como una serie de potencia en  $x_1$ :

$$\frac{G^E}{RTx_1x_2} = a + bx_1 + cx_1^2 + \dots (T \text{ constante})$$

Puesto que  $x_2$  puede ser expresado como  $1-x_1$ , la fracción mol  $x_1$  es la única variable independiente necesaria para estas correlaciones. Una correlación expresada como una serie de potencias equivalentes como la expansión de Redlich/Kister.

$$\frac{G^E}{RTx_1x_2} = A + B(x_1 - x_2) + C(x_1 - x_2)^2 + \dots \quad (\text{Ecuación 29})$$



Para poder aplicar esta ecuación es adecuado realizar diversos truncamientos de esta serie, y en cada caso los coeficientes de actividad de la forma  $\ln \gamma_1$  y  $\ln \gamma_2$  se generan de la ecuación [24].

Cuando  $A=B=C=\dots=0$ ,  $G^E/RT=0$ ,  $\ln \gamma_1=0$ ,  $\ln \gamma_2=0$ ,  $\gamma_1=\gamma_2=1$  y la solución es ideal. Si  $B=C=\dots=0$ , entonces:

$$\frac{G^E}{RTx_1x_2} = A \quad (\text{Ecuación 30})$$

Donde A es una constante para una temperatura dada. Las ecuaciones correspondientes para  $\ln \gamma_1$  y  $\ln \gamma_2$  son:

$$\ln \gamma_1 = Ax_1^2 \quad (\text{Ecuación 31})$$

$$\ln \gamma_2 = Ax_2^2 \quad (\text{Ecuación 32})$$

Los valores de dilución infinita de los coeficientes de actividad son  $\ln \gamma_1^\infty = \ln \gamma_2^\infty = A$

Por lo tanto, si  $C=\dots=0$ :

$$\frac{G^E}{RTx_1x_2} = A + B(x_1 - x_2) = A + B(2x_1 - 1)$$

Luego de un tratamiento de datos se obtiene la siguiente ecuación:

$$\frac{G^E}{RTx_1x_2} = \frac{A_{12}A_{21}}{A_{12}x_1 + A_{21}x_2} \quad (\text{Ecuación 33})$$

Los coeficientes de actividad implicados por esta ecuación son:

$$\ln \gamma_1 = A_{12}' \left( 1 + \frac{A_{12}' x_1}{A_{21}' x_2} \right)^{-2} \quad (\text{Ecuación 34})$$

$$\ln \gamma_2 = A_{21}' \left( 1 + \frac{A_{21}' x_2}{A_{12}' x_1} \right)^{-2} \quad (\text{Ecuación 35})$$

Conocidos también como ecuaciones de Van Laar en honor al físico químico holandés Johannes Jacobus Van Laar (1860-1938).

Los modelos para el cálculo de coeficientes de actividad se dividen en dos grupos. Los modelos simétricos como el método de Porter. Entre los asimétricos se encuentran Margules, Van Laar, Wilson, NRTL.



## 5. MODELOS DE COMPOSICIÓN LOCAL

Con los avances teóricos en el campo de la termodinámica molecular del comportamiento de una solución líquida con frecuencia se basan en el concepto de composición local. Si se analiza el interior de una solución líquida, las composiciones locales o en diferentes puntos de la solución, se observa que difieren de la composición general de las mezclas; se supone que consideran un arreglo de corto alcance y las orientaciones moleculares no aleatorias que resultan de las diferencias en los tamaños de las moléculas y en las fuerzas intermoleculares que intervienen en una solución. El concepto lo introdujo G. M. Wilson en 1964 con la publicación de un modelo del comportamiento de la solución conocido como la ecuación de Wilson.

Para varios sistemas que se desvían de la idealidad moderadamente para mezclas binarias, todas las ecuaciones de  $g^E$  que contienen dos o más parámetros binarios proporcionan buenos resultados, para estos casos es aceptable usar los modelos de Margules y Van Laar que son más antiguos que modelos como Wilson, NRTL, UNIQUAC y UNIFAC, pero matemáticamente más sencillos de manejar. Los modelos anteriores a los modelos de composición local como el método de Margules es aplicable únicamente para mezclas simples donde los componentes de la mezcla sean similares en su naturaleza química y tienen que tener un tamaño molecular similar.

## 5.1. Ecuación UNIQUAC

Muchos investigadores han intentado deducir ecuaciones de dos parámetros para la energía de Gibbs en exceso que mantengan las ventajas de la ecuación de Wilson, pero sin restringirlas a mezclas completamente miscibles. Abrams dedujo una ecuación basada en la teoría cuasi química de Guggenheim para mezclas no al azar, a disoluciones que contienen moléculas de diferentes tamaños. Esta ecuación es llamada la teoría cuasi-química universal y se conoce comúnmente como UNIQUAC.

La ecuación UNIQUAC, que es la predecesora al método UNIFAC, es la primera para la cual  $g^E$  consta de dos partes. La primera parte combinatorial que intenta describir la contribución entrópica dominante, y la segunda residual debida, principalmente a las fuerzas intermoleculares, que son responsables de la entalpia de mezcla. La parte combinatoria se determina sólo por la composición, tamaño y forma de la molécula, y requiere únicamente información de componentes puros. Para la parte residual depende también de las fuerzas intermoleculares. Los parámetros binarios ajustables de esta ecuación inciden únicamente en la parte residual. La ecuación UNIQUAC es

$$\frac{G^E}{RT} = \left(\frac{G^E}{RT}\right)_{combinatorial} + \left(\frac{G^E}{RT}\right)_{residual} \quad (\text{Ecuación 36})$$

Para una mezcla binaria,

$$\left(\frac{G^E}{RT}\right)_{comb.} = x_1 \ln \frac{\phi_1^*}{x_1} + x_2 \ln \frac{\phi_2^*}{x_2} + \frac{z}{2} \left( x_1 q_1 \ln \frac{\theta_1}{\phi_1^*} + x_2 q_2 \ln \frac{\theta_2}{\phi_2^*} \right) \quad (\text{Ecuación 37})$$

$$\left(\frac{G^E}{RT}\right)_{residual} = -x_1 q_1' \ln(\theta_1' + \theta_2' \tau_{21}) - x_2 q_2' \ln(\theta_2' + \theta_1' \tau_{12}) \quad (\text{Ecuación 38})$$

Donde el índice de coordinación  $z$ , se toma como 10. La fracción de segmentos,  $\phi^*$ , y las fracciones de área  $\theta$  y  $\theta'$ , vienen dadas por

$$\phi_1^* = \frac{x_1 r_1}{x_1 r_1 + x_2 r_2} \quad \phi_2^* = \frac{x_2 r_2}{x_1 r_1 + x_2 r_2} \quad (\text{Ecuación 39})$$

$$\theta_1 = \frac{x_1 q_1}{x_1 q_1 + x_2 q_2} \quad \theta_2 = \frac{x_2 q_2}{x_1 q_1 + x_2 q_2} \quad (\text{Ecuación 40})$$

$$\theta_1' = \frac{x_1 q_1'}{x_1 q_1' + x_2 q_2'} \quad \theta_2' = \frac{x_2 q_2'}{x_1 q_1' + x_2 q_2'} \quad (\text{Ecuación 41})$$

Los parámetros  $r$ ,  $q$  y  $q'$  son constantes relativas a la estructura molecular de los componentes puros y dependen del tamaño molecular y del área superficial externa.

Los parámetros ajustables para cada mezcla binaria,  $\tau_{12}$  y  $\tau_{21}$ . Éstos, a su vez, se expresan en función de las energías características  $\Delta u_{12}$  y  $\Delta u_{21}$ , como

$$\tau_{12} = e\left(\frac{-\Delta u_{12}}{RT}\right) = e\left(\frac{-a_{12}}{T}\right) \quad (\text{Ecuación 42})$$

$$\tau_{21} = e\left(\frac{-\Delta u_{21}}{RT}\right) = e\left(\frac{-a_{21}}{T}\right) \quad (\text{Ecuación 43})$$

Las ecuaciones anteriores proporcionan un primer efecto de la dependencia de  $\tau_{12}$  y  $\tau_{21}$  con la temperatura. Las energías características  $\Delta u_{12}$  y  $\Delta u_{21}$  no son muy dependientes de la temperatura.

Los coeficientes de actividad vienen dados por

$$\ln \gamma_1 = \ln \frac{\phi_1^*}{x_1} + \frac{z}{2} q_1 \ln \frac{\theta_1}{\phi_1^*} + \phi_2^* \left( l_1 - \frac{r_1}{r_2} l_2 \right) - q_1' \ln(\theta_1' + \theta_2' \tau_{21})$$

$$+ \theta_2' q_1' \left( \frac{\tau_{21}}{\theta_1' + \theta_2' \tau_{21}} - \frac{\tau_{12}}{\theta_2' + \theta_1' \tau_{12}} \right) \quad (\text{Ecuación 44})$$

$$\ln \gamma_2 = \ln \frac{\phi_2^*}{x_2} + \frac{z}{2} q_2 \ln \frac{\theta_2}{\phi_2^*} + \phi_1^* \left( l_2 - \frac{r_2}{r_1} l_1 \right) - q_2' \ln(\theta_2' + \theta_1' \tau_{12})$$

$$+ \theta_1' q_2' \left( \frac{\tau_{12}}{\theta_2' + \theta_1' \tau_{12}} - \frac{\tau_{21}}{\theta_1' + \theta_2' \tau_{21}} \right) \quad (\text{Ecuación 45})$$

Donde

$$l_1 = \frac{z}{2} (r_1 - q_1) - (r_1 - 1) \quad (\text{Ecuación 46})$$

$$l_2 = \frac{z}{2} (r_2 - q_2) - (r_2 - 1) \quad (\text{Ecuación 47})$$

La ecuación UNIQUAC puede ser aplicada a mezclas líquidas no electrolitos formadas por fluidos polares y no polares.

Entre las ventajas que presenta el método UNIQUAC están su relativa simplicidad, dado que sólo utiliza dos parámetros ajustables y su gran margen de aplicación.

## 6. MÉTODO UNIFAC

### 6.1. Coeficientes de actividad a partir de métodos de contribución de grupos

En muchos problemas a los que se enfrenta la Ingeniería Química suele necesitarse el cálculo de coeficientes de actividad para mezclas, para las cuales solo hay pocos datos disponibles. Para equilibrios líquido-vapor, estos cálculos pueden realizarse usando el método de contribución de grupos. Una molécula se divide en grupos funcionales. Las interacciones entre moléculas se consideran como las sumas de las interacciones grupo-grupo. Por lo tanto, para un compuesto multifuncional en un sistema multicomponente, consideran que cada grupo funcional se comporta como una molécula independiente de la molécula a la que pertenece. La ventaja de este procedimiento es que el número de posibles grupos funcionales distintos en las mezclas de no electrolitos, es menor que el número de posibles moléculas diferentes.

El cálculo de coeficientes de actividad usando el concepto de contribución de grupo, fue sugerido por primera vez por Langmuir, pero esta propuesta no se pudo llevar a cabo hasta que se contó con una base de datos suficientemente grande y hasta que se tuvo acceso fácil a computadoras. Derr y Deal realizaron un desarrollo sistémico denominado ASOG (*analytical solution of groups*).



Utilizando como base la ecuación UNIQUAC, Fredenslund, Jones y Prausnitz crean un método similar, pero más conveniente que el ASOG denominado UNIFAC (universal functional activity coefficient), el cual ha tenido numerosas modificaciones desde su aparición por varios investigadores (Poling et al. 2004)

## **6.2. Ecuación UNIFAC**

La idea fundamental la solución por el modelo de grupo es predecir coeficientes de actividad para equilibrios líquido-vapor, sin necesidad de datos experimentales.

La ecuación UNIFAC es utilizada para diseño en ingeniería, dado que es más sencillo y rápido predecir los valores de los coeficientes en lugar de realizar experimentos. En principio el método UNIFAC usa las bases del método ASOG, dado que en el cálculo de coeficientes de actividad tomó en consideración la interacción entre los grupos estructurales. Las características esenciales de este método son:

- Reducción de los datos experimentales necesarios para obtener coeficientes de actividad, a la determinación de los parámetros de interacción característicos entre parejas de grupos estructurales en sistemas no electrolíticos.
- El uso de esos parámetros, para predecir coeficientes de actividad en sistemas que no se han estudiado experimentalmente pero que contienen los mismos grupos funcionales ya estudiados con anterioridad.

Al igual que en el método UNIQUAC, el coeficiente de actividad molecular se divide en dos partes: Una considera la contribución de la diferencias en tamaños y formas entre moléculas. Y la otra considera la contribución de las interacciones moleculares. El método UNIFAC es un método que tiene todas las ventajas de los métodos de UNIQUAC y Wilson en los cuales se considera la variación de los coeficientes de actividad con la temperatura y consideran variación de tamaño y forma de las moléculas, así también, considera las interacciones moleculares y toma en cuenta el concepto de contribución de grupo.

En el método UNIFAC considera la parte combinatoria del método UNIQUAC, en la cual se usa únicamente propiedades de componentes puros. Los parámetros de volumen y área son calculados como una suma de volumen de grupos y áreas de grupos como se encuentra en las ecuaciones [54] y [55]. Este método, también cuenta con parámetros ajustables los cuales dependen de la temperatura como se ve en la ecuación [60].

La ecuación UNIFAC considera a  $g \equiv G^E/RT$ , que consta de dos partes aditivas, un término combinatorio  $g^c$  considera el tamaño molecular y las diferencias de forma, y un término residual  $g^R$ , no una propiedad residual como se define a continuación considerando las interacciones moleculares:

$$g \equiv g^c + g^R \quad \text{(Ecuación 48)}$$

La función  $g^c$  contiene únicamente parámetros de especie pura, mientras la función  $g^R$  incorpora los parámetros binarios por cada par de moléculas.

Para un sistema multicomponente,

$$g^c = \sum_i x_i \ln \frac{\phi_i}{x_i} + 5 \sum_i q_i x_i \ln \frac{\theta_i}{\phi_i} \quad (\text{Ecuación 49})$$

$$g^R = - \sum_i q_i x_i \ln (\sum_j \theta_j \tau_{ji}) \quad (\text{Ecuación 50})$$

$$\phi_i \equiv \frac{x_i r_i}{\sum_j x_j r_j} \quad (\text{Ecuación 51})$$

$$\theta_i \equiv \frac{x_i q_i}{\sum_j x_j q_j} \quad (\text{Ecuación 52})$$

El subíndice  $i$  identifica a la especie, y  $j$  es un índice ficticio; todas las sumatorias son para todas las especies. Se puede observar que  $\tau_{ji} \neq \tau_{ij}$ ; de cualquier modo, cuando  $i = j$ ,  $\tau_{ii} = \tau_{jj} = 1$ . En estas ecuaciones,  $r_i$  (un volumen molecular relativo) y  $q_i$  (un área superficial molecular relativa) son parámetros de especies puras. La influencia de la temperatura sobre  $\gamma$  se introduce a través de los parámetros de interacción  $\tau_{ji}$  de la ecuación [60], los cuales son dependientes de la temperatura.

$$\tau_{ji} = e^{\frac{-(u_{ji} - u_{ii})}{RT}} \quad (\text{Ecuación 53})$$

Los parámetros para la ecuación UNIQUAC son  $(u_{ji} - u_{ii})$ .

Una expresión para  $\gamma_i$  se encuentra por medio de la aplicación de la siguiente ecuación

$$\ln \gamma_i = \left| \frac{\partial (nG^E/RT)}{\partial n_i} \right|_{P,T,n} \quad (\text{Ecuación 54})$$

La ecuación UNIQUAC esta dada por las siguientes ecuaciones:

$$\ln \gamma_i = \ln \gamma_i^C + \ln \gamma_i^R \quad (\text{Ecuación 55})$$

$$\ln \gamma_i^C = 1 - J_i + \ln J_i - 5q_i \left( 1 - \frac{J_i}{L_i} + \ln \frac{J_i}{L_i} \right) \quad (\text{Ecuación 56})$$

$$\ln \gamma_i^R = q_i \left( 1 - \ln S_i - \sum_j \theta_j \frac{\tau_{ij}}{S_j} \right) \quad (\text{Ecuación 57})$$

Donde, además de las ecuaciones,

$$J_i = \frac{r_i}{\sum_j r_j x_j} \quad (\text{Ecuación 58})$$

$$L_i = \frac{q_i}{\sum_j q_j x_j} \quad (\text{Ecuación 59})$$

$$S_i = \sum_j \theta_j \tau_{ji} \quad (\text{Ecuación 60})$$

De nuevo, el subíndice  $i$  identifica las especies, y  $j$  y  $l$  son índices ficticios. Todas las sumas son para todas las especies, y  $\tau_{ij} = 1$  para  $i = j$ . Los valores para los parámetros  $(u_{ij} - u_{jj})$  se localizan por regresión de los datos de EVL binario.

El método UNIFAC, para la estimación de los coeficientes de actividad depende del concepto de que una mezcla líquida pueda ser considerada como una solución de las unidades estructurales de las que se forman las moléculas, más que una solución de las moléculas mismas. Estas unidades estructurales se llaman subgrupos. Un número designado  $k$ , identifica cada subgrupo. El

volumen relativo  $R_k$  y el área superficial relativa  $Q_k$  son propiedades de los subgrupos. Cuando es posible construir una molécula a partir de más de un conjunto de subgrupos, el conjunto que contiene el menor número de subgrupos diferentes es el conjunto correcto. La gran ventaja del método UNIFAC es que combina un número relativamente pequeño de subgrupos para formar un número muy grande de moléculas.

Los coeficientes de actividad dependen no sólo de las propiedades de los subgrupos  $R_k$  y  $Q_k$ , sino también de las interacciones entre los subgrupos. En este caso, los subgrupos similares se asignan a un grupo principal. Las designaciones de los grupos principales, como  $CH_2$ ,  $ACH$ , etc., son únicamente descriptivas.

Todos los subgrupos pertenecientes al mismo grupo principal se consideran idénticos respecto a las interacciones del grupo.

Debido a eso, los parámetros que caracterizan las interacciones de grupo se identifican con pares de grupos principales.

El método UNIFAC se fundamenta en la ecuación UNIQUAC, para la cual los coeficientes de actividad se dan por medio de la ecuación [46].

Cuando se aplican a una solución de grupos de acuerdo con (Smith y Van Ness 2003), las ecuaciones [49] y [51] se escriben:

$$\ln g_i^C = 1 - J_i - 5q_i \left( 1 - \frac{J_i}{L_i} + \ln \frac{J_i}{L_i} \right) \quad (\text{Ecuación 61})$$

$$\ln \gamma_i^R = q_i \left( 1 - \sum_k \left( \theta_k \frac{\beta_{jk}}{S_k} - e_{ki} \ln \frac{\beta_{jk}}{S_k} \right) \right) \quad (\text{Ecuación 62})$$

Las cantidades  $J_i$  y  $L_i$  aún se dan por las ecuaciones 58 y 59. Además, se aplican las siguientes definiciones:

$$r_i = \sum_k V_k^{(i)} R_k \quad (\text{Ecuación 63})$$

$$q_i = \sum_k V_k^{(i)} Q_k \quad (\text{Ecuación 64})$$

$$e_{ki} = \frac{V_k^{(i)} Q_k}{q_i} \quad (\text{Ecuación 65})$$

$$\beta_{ik} = \sum_m e_{mi} T_{mk} \quad (\text{Ecuación 66})$$

$$\theta_k = \frac{\sum_i x_i q_i e_{ik}}{\sum_j x_j q_j} \quad (\text{Ecuación 67})$$

$$S_k = \sum_m \theta_m T_{mk} \quad (\text{Ecuación 68})$$

$$T_{mk} = e^{-\frac{a_{mk}}{T}} \quad (\text{Ecuación 69})$$

El subíndice  $i$  identifica las especies, y  $j$  es un índice ficticio que se ocupa en todas las especies. El subíndice  $k$  identifica los subgrupos, y  $m$  es un índice ficticio que va en todos los subgrupos. La cantidad  $v_k^{(i)}$  es el número de subgrupos del tipo  $k$  en una molécula de especie  $i$ . Los valores de los parámetros de los subgrupos  $R_k$  y  $Q_k$ , así como los parámetros  $a_{mk}$  de interacción del grupo, resultan de tabulaciones en la literatura.

Las ecuaciones del método UNIFAC se presentan en este caso, como una forma conveniente para la programación en computadora. Razón por la cual es

de gran ayuda contar con aplicaciones en las cuales se pueda calcular fácilmente coeficientes de actividad, aplicaciones como la que se creará en este trabajo de graduación.

### **6.3. Rango de aplicabilidad del método UNIFAC**

Gran parte del campo de diseño en Ingeniería Química está relacionado con operaciones de separación. Entre las operaciones típicas de separación se encuentran la destilación, la absorción y la extracción. Para este tipo de separaciones se necesita información sobre el equilibrio de fases. La información disponible para estas operaciones rara vez se encuentra disponible para los rangos de presión y temperatura deseados y comúnmente no es posible realizar experimentación a estas condiciones. Para casos como estos resulta muy útil el método UNIFAC para predecir datos.

El método por contribución de grupo, UNIFAC, es un método excelente para predecir coeficientes de actividad en fase líquida de compuestos no electrolíticos y mezclas no poliméricas a presiones bajas a moderadas a temperaturas entre los 300 y 425 K.

### **6.4. Aplicaciones del método UNIFAC**

El método UNIFAC es utilizado en muchas áreas de la Ingeniería Química como lo son:

- Para calcular equilibrios líquido-vapor
- Para cálculos de destilación
- Para diseñar reactores químicos

## **6.5. Ventajas y desventajas del método UNIFAC**

Entre las ventajas del método están: su flexibilidad debido a que puede ser aplicado a muchos compuestos con grupos funcionales de diferentes tamaños y formas. Además este método puede ser aplicado a diferentes temperaturas.

Entre las desventajas del método están: que el método se complica al aumentar el número de compuestos y grupos funcionales presentes en la mezcla. Y que el método no puede ser aplicado a mezclas que contienen polímeros.



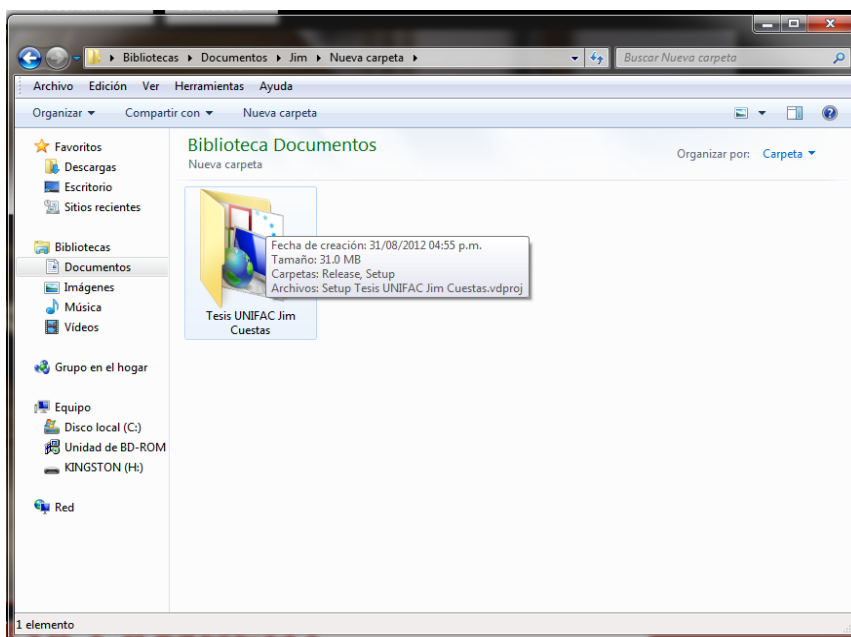


## 7. INTRODUCCIÓN A LA APLICACIÓN

### 7.1. Proceso de instalación de la aplicación

Como toda aplicación creada para ser usada sobre los sistemas operativos de Microsoft Windows, la aplicación deberá ser instalada previa a su uso. La aplicación está contenida en una carpeta como la que se observa en la figura 5.

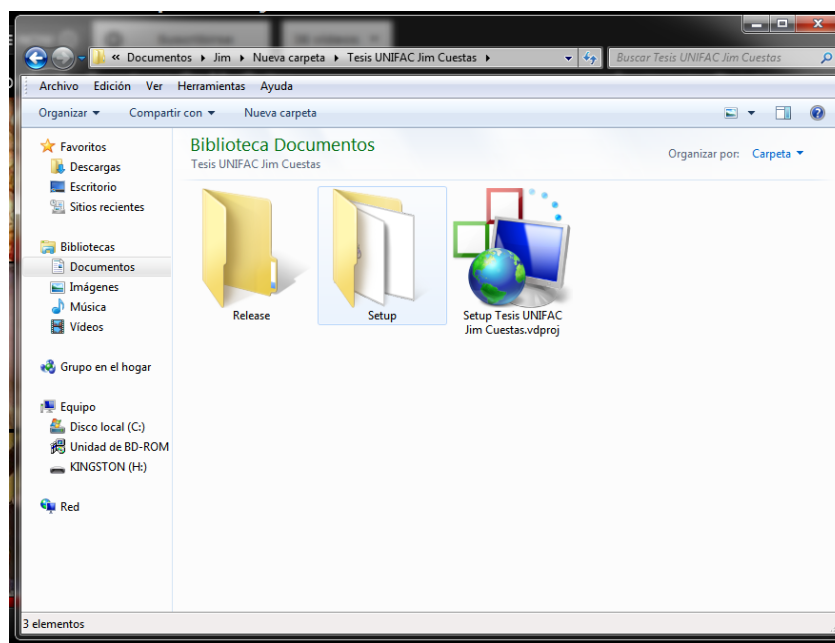
Figura 5. Carpeta contenedora de la aplicación



Fuente: elaboración propia.

Como una subcarpeta de la carpeta que se observa en la figura 5 se encontrará la carpeta setup, como se muestra en la figura 6, donde se halla el archivo ejecutable para instalar la aplicación. El archivo instalable se muestra en la figura 7.

Figura 6. **Carpeta contenedora del archivo para instalar la aplicación**

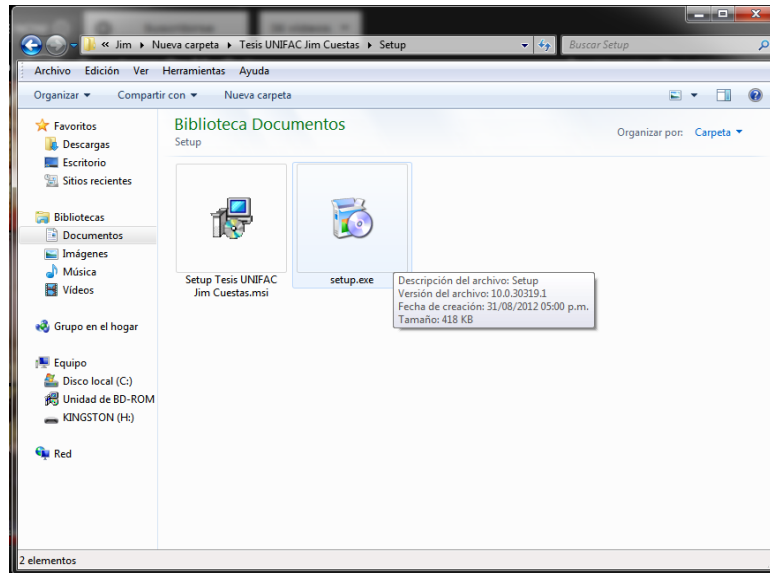


Fuente: elaboración propia.

Al abrir la carpeta titulada setup se encontrarán dos archivos, deberá abrirse el archivo titulado *setup.exe*, para poder instalar la aplicación. El otro archivo contenido en la carpeta, no se debe de abrir. Ver figura 7.

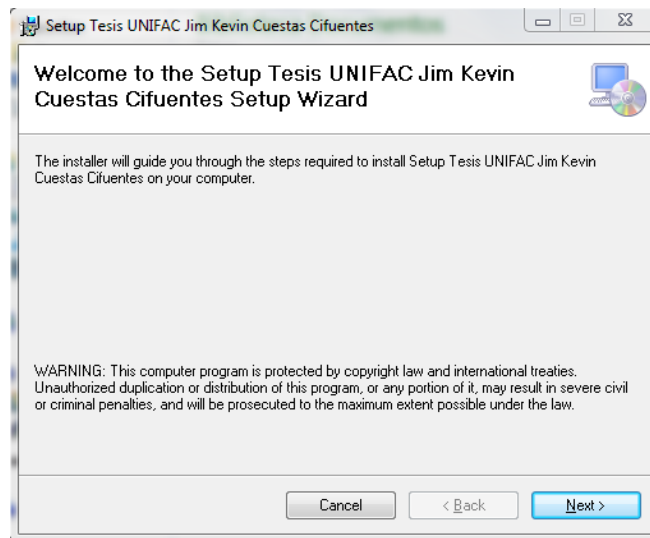
Al dar clic sobre el archivo ejecutable *setup.exe*, se desplegará o abrirá la ventana del programa de instalación de la aplicación que se observa en la figura 8. En esta pantalla, luego de leer la información se le debe dar clic en el botón *next*.

Figura 7. Carpeta contenedora de archivo de instalación



Fuente: elaboración propia.

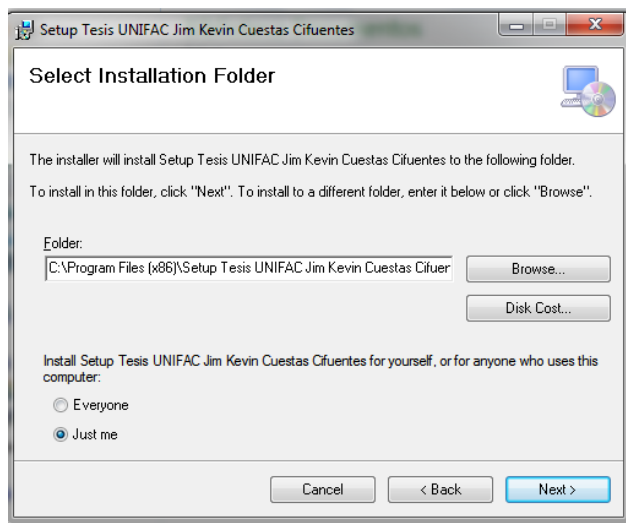
Figura 8. Ventana de inicio de la instalación



Fuente: elaboración propia.

En la ventana que se muestra en la figura 9 se indica la dirección donde se instalará la aplicación por defecto; la cual podrá ser variada a conveniencia propia del usuario. Además podrá elegir qué usuarios pueden utilizar la aplicación. Si el usuario se encuentra de acuerdo con la dirección de instalación y los usuarios que tendrán acceso a la aplicación deberán dar clic en el botón *next*.

Figura 9. **Ventana de dirección de instalación de la aplicación**

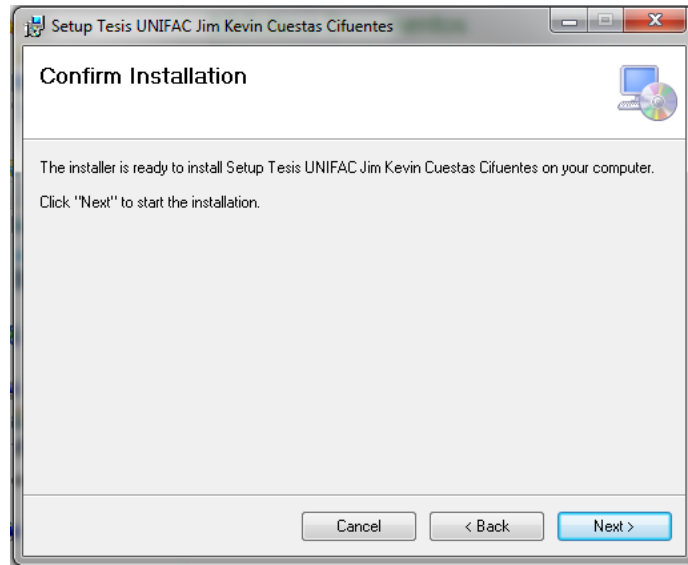


Fuente: elaboración propia.

En la ventana que se observa en la figura 10 se pedirá la confirmación de que si desea instalar la aplicación. Si se está de acuerdo con instalar la aplicación se deberá hacer clic en *next*, si no puede regresar a las ventanas anteriores con *back*.

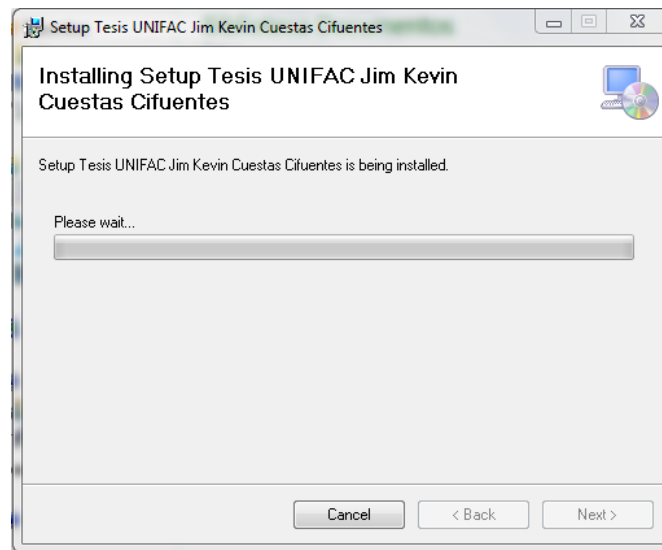
En la ventana de la figura 11, mostrará el progreso de la instalación hasta acabar la instalación. El proceso de instalación podrá tomar unos minutos, dependiendo de las características del equipo donde se instale.

Figura 10. **Ventana de confirmación para la instalación**



Fuente: elaboración propia.

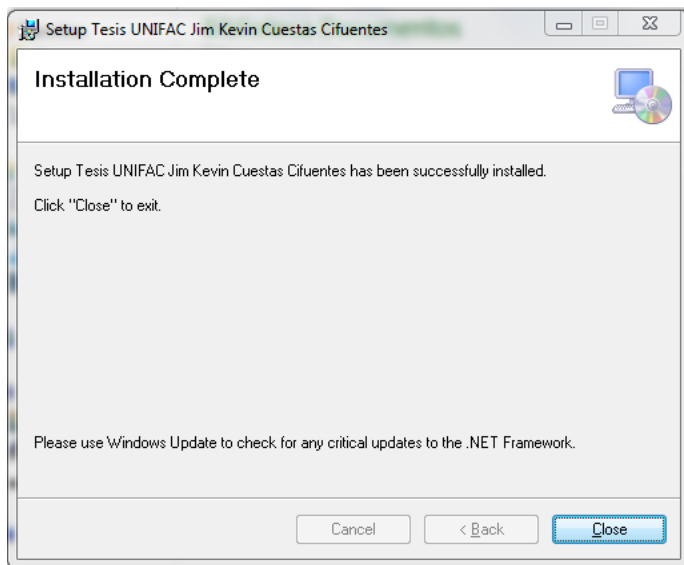
Figura 11. **Ventana de progreso de la instalación**



Fuente: elaboración propia.

Al finalizar el proceso de instalación, aparecerá la ventana que se muestra en la figura 12 donde indica que ha finalizado el proceso de instalación, se debe dar clic en *close* para cerrar el programa de instalación.

Figura 12. **Ventana de finalización del progreso de la instalación**



Fuente: elaboración propia.

## **7.2. Requisitos para la instalación de la aplicación**

Para poder utilizar la aplicación se requerirá, que tanto el Software como el Hardware llenen los siguientes requisitos mínimos para tener una operación adecuada:

- 50 MB libres en disco duro
- 2GB de memoria ram
- Procesador de 2.0 GHz
- Sistema operativo Microsoft Windows vista / 7
- Acceso a Internet

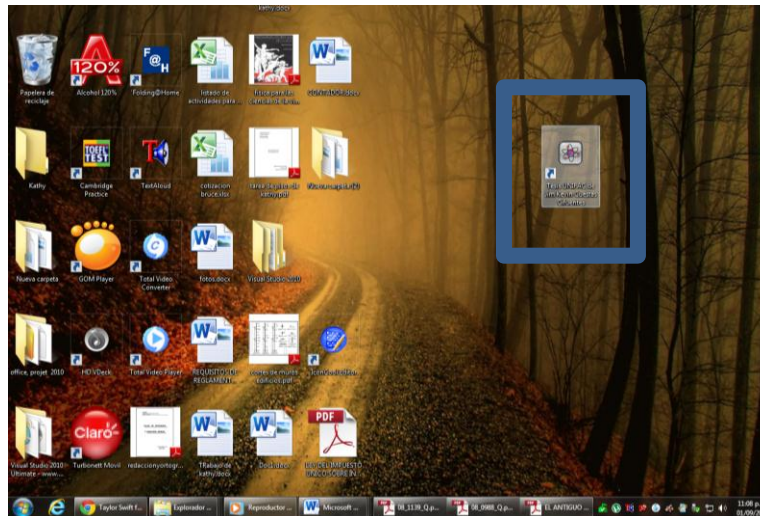
## **7.3. Modos de iniciar la aplicación Tesis UNIFAC de Jim Kevin Cuestas Cifuentes**

La aplicación al ser instalada por defecto tendrá dos modos para iniciar la aplicación.

Al instalarse la aplicación automáticamente se generará un acceso directo en el escritorio como se observa en la figura 13, para poder iniciar la aplicación. Otra forma de iniciar la aplicación es desde el menú de inicio en todos los programas como se observa en la figura 14

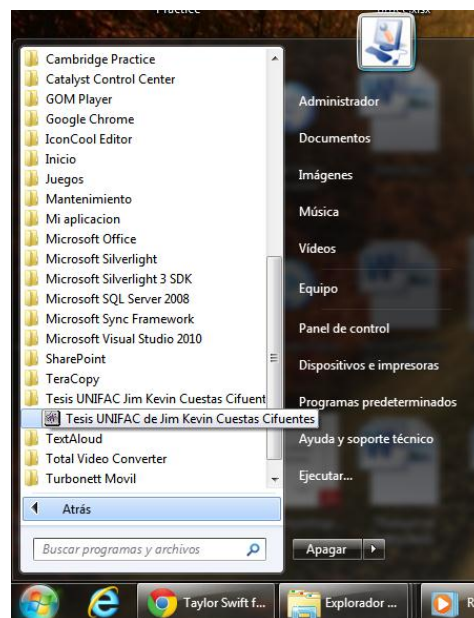


Figura 13. Acceso directo desde el escritorio a la aplicación



Fuente: elaboración propia.

Figura 14. Acceso directo desde el menú de inicio a la aplicación



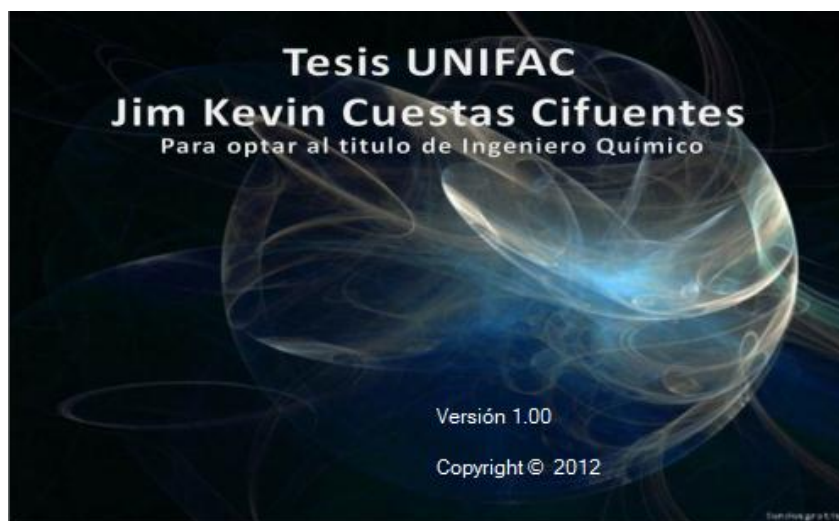
Fuente: elaboración propia.

## 8. MÓDULO DE INICIO

### 8.1. Pantallas de inicio

Al iniciar la aplicación aparecerá la pantalla de inicio mostrada en la figura 15. Luego de unos segundos se abrirá la ventana principal del programa mostrada en la figura 16.

Figura 15. Pantalla de inicio de la aplicación



Fuente: elaboración propia.

Figura 16. **Ventana principal de la aplicación**



Fuente: elaboración propia.

## 8.2. Partes de la ventana principal de la aplicación

La aplicación está compuesta por tres barras: la de título que se muestra en la figura 17; la de menú que se muestra en la figura 16 y la de íconos, la cual se muestra en la figura 17.

En la barra de título de la figura 17 aparece el ícono de la aplicación, el nombre de la aplicación y los tres botones de minimizar, maximizar y cerrar.

Figura 17. **Barra de título**

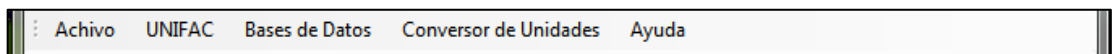


Fuente: elaboración propia.

### 8.2.1. Barra de menú

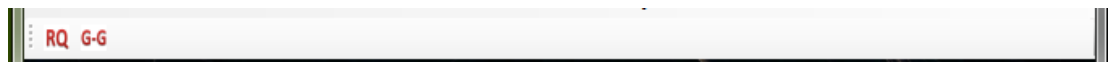
La barra de menú que se muestra en la figura 18 es en la que se encuentran todos los menús de la aplicación. En el menú Archivo, únicamente se observa la opción cerrar, que sirve para cerrar toda la aplicación como se observa en la figura 20

Figura 18. Barra de menú



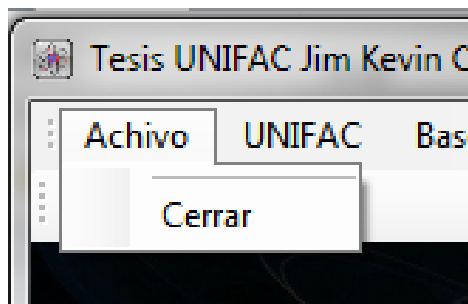
Fuente: elaboración propia.

Figura 19. Barra de iconos



Fuente: elaboración propia.

Figura 20. Menú archivo

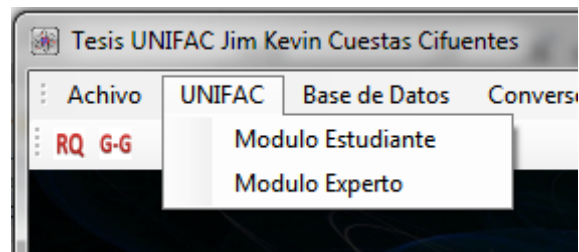


Fuente: elaboración propia.

El menú UNIFAC que se muestra en la figura 21, despliega dos opciones. Con la primera se tiene acceso al Módulo Estudiante, y con la segunda al Módulo Experto, que son los dos módulos principales en los que se basa toda la aplicación.

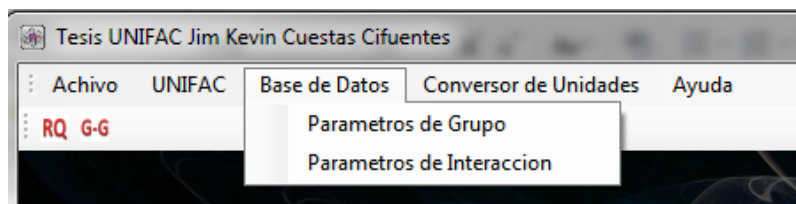
El menú: Base de Datos, que se muestra en la figura 22 despliega dos opciones. Con la primera opción se puede tener acceso a la base de datos de parámetros de grupo que es una de las dos base de datos que utiliza el método UNIFAC para calcular los coeficientes de actividad. La segunda opción de este menú permite consultar la base de datos de parámetros de interacción entre grupos.

Figura 21. **Menú UNIFAC**



Fuente: elaboración propia.

Figura 22. **Menú base de datos**

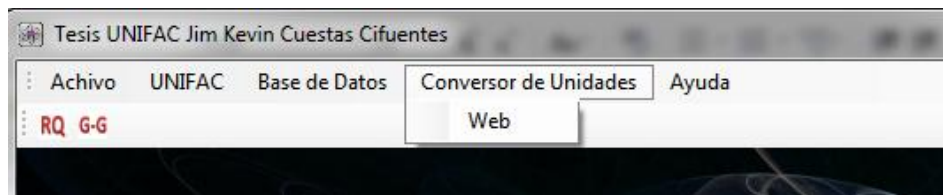


Fuente: elaboración propia.

El menú Conversor de Unidades que se muestra en la figura 23, despliega únicamente una opción. Esta opción denominada Web, delegará un buscador de Internet propio de la aplicación donde se pueden consultar páginas web de conversores de unidades.

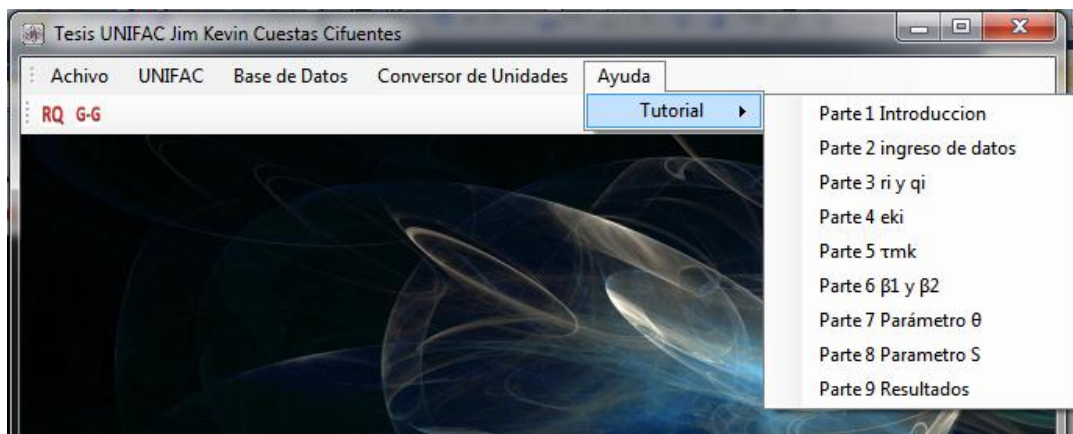
El menú ayuda que se muestra en la figura 24, despliega la opción tutorial la cual despliega un submenú donde se tiene acceso a cada una de las partes del tutorial de la aplicación.

Figura 23. **Menú conversor de unidades**



Fuente: elaboración propia.

Figura 24. **Menú ayuda**



Fuente: elaboración propia.

### 8.2.2. Barra de iconos

La barra de íconos que se muestra en la figura 19, cuenta únicamente con dos íconos, con los cuales se puede tener acceso a las dos partes de la base de datos. Con el botón que se observa en la figura 25, se tiene acceso a la base de datos de parámetros de grupo. Con el botón de la figura 26, se puede tener acceso a la base de datos de parámetros de interacción entre grupo.

Figura 25. **Botón base de parámetros de grupo**



Fuente: elaboración propia.

Figura 26. **Botón base de parámetros de interacción**



Fuente: elaboración propia.

## 9. MÓDULO ESTUDIANTE

### 9.1. Inicio del Módulo Estudiante

Como se indicó en el capítulo anterior, para ingresar al Módulo Estudiante se debe ir al menú UNIFAC y seleccionar la opción Módulo Estudiante. Éste está diseñado con el fin de introducir al usuario de la aplicación al uso de la aplicación, para darle una introducción al uso del método UNIFAC para el cálculo de coeficientes de actividad.

El Módulo Estudiante se diseñó con una interface simple, de modo que sea amigable para el usuario que inicia el uso de la aplicación. Como se mostrará más adelante, el módulo cuenta únicamente con 18 tipos de grupos funcionales para el cálculo de coeficientes de actividad con las cuales se pueden calcular los coeficientes de actividad, de las moléculas, comúnmente usadas en la Ingeniería Química.

En cada uno de los pasos del módulo se encuentra el tutorial, en el cual se explica cómo utilizar la aplicación y cómo el programa calcula los coeficientes de actividad.



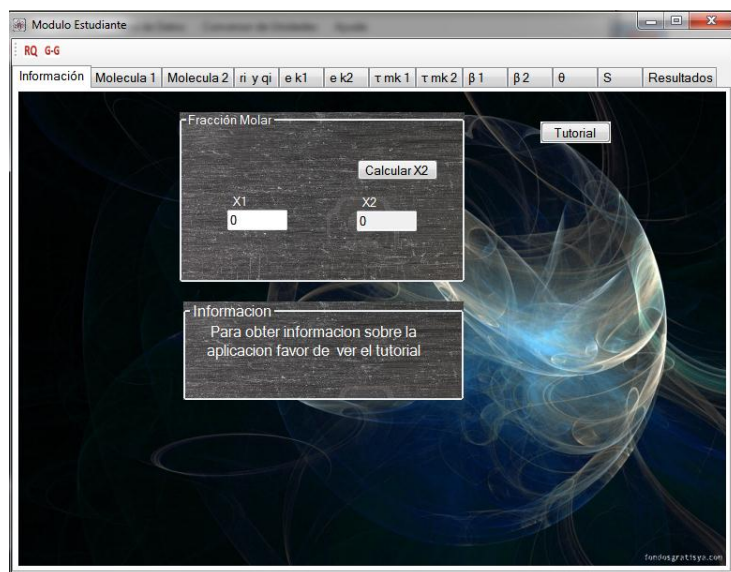
## 9.2. Pestañas del Módulo Estudiante

El Módulo Estudiante cuenta con una serie de pestañas en las que se dividen cada uno de los pasos para el cálculo de coeficientes de actividad; esas pestañas se describen en las siguientes secciones.

### 9.2.1. Pestaña introducción

En la figura 27 se muestra la ventana de inicio del Módulo Estudiante en la pestaña de introducción, es la que se encuentra visible al iniciar este módulo. En los cuadros de texto se introduce en  $X_1$  la primera fracción molar y en  $X_2$  aparecerá el valor complementario al dar clic en el botón Calcular  $X_2$ . Además, en el botón tutorial se encuentra la explicación de los pasos que se deben seguir en esa pestaña.

Figura 27. Pestaña introducción



Fuente: elaboración propia.

### 9.2.2. Pestaña molécula 1

En la figura 28 se muestra el Módulo Estudiante en la pestaña titulada Molécula 1, en esta pestaña se introduce la cantidad de cada uno de los grupos funcionales presentes en la molécula o especie 1. Las cantidades de cada una de las especies se introducen en cada cuadro de texto dependiendo de la especie que sea; como se ve en la figura 28. En el botón tutorial de la figura 28 se abre la ventana de la segunda parte del tutorial donde hay una explicación de los pasos a seguir en esta pestaña.

Figura 28. Pestaña molécula 1

Modulo Estudiante

RQ 6-6

Información Molécula 1 Molécula 2 ri y qi e k1 e k2  $\tau$  mk 1  $\tau$  mk 2  $\beta$  1  $\beta$  2  $\theta$  S Resultados

llene en los cuadros de texto con la cantidad de grupos funcionales que posee la molecula. Luego pase a la pestaña "Molecula 2"

1 Alcano	2 Alqueno	3 Aromatico	5 Alcohol	7 Agua
CH3 0	CH2=CH 0	ACH 0	-OH 0	H2O 0
CH2 0	CH=CH 0	AC 0		
CH 0	CH2=C 0	4 Aromatico	6 Metanol	8 Fenol
C 0	CH=C 0	ACCH3 0	CH3OH 0	ACOH 0
	C=C 0	ACCH2 0		
		ACCH 0		

Tutorial

Información

Información

fondosgratisyo.com

Fuente: elaboración propia.

### 9.2.3. Pestaña molécula 2

En la figura 29 se muestra el Módulo Estudiante en la pestaña titulada Molécula. En esta pestaña se introduce la cantidad de cada uno de los grupos funcionales presentes en la molécula o especie. Esta pestaña es muy similar a la anterior, con la diferencia que en ésta se introducen los valores con base en molécula 2. Las cantidades de cada una de las especies se introducen en cada cuadro de texto dependiendo de la especie que sea, como se ve en la figura 29. En el botón tutorial de la figura 29 se abre la ventana del tutorial donde hay una explicación de los pasos a seguir en esta pestaña.

Figura 29. Pestaña molécula 2

Modulo Estudiante

RQ G-G

Información Molécula 1 Molécula 2 ri y qi e k1 e k2 τ mk 1 τ mk 2 β 1 β 2 θ S Resultados

llene en los cuadros de texto con la cantidad de grupos funcionales que posee la molécula, Luego pasar a la pestaña "ri y qi".

1 Alcano CH3 0 CH2 0 CH 0 C 0	2 Alqueno CH2=CH 0 CH=CH 0 CH2=C 0 CH=C 0 C=C 0	3 Aromatico ACH 0 AC 0	4 Aromatico ACCH3 0 ACCH2 0 ACCH 0	5 Alcohol - OH 0	6 Metanol CH3OH 0	7 Agua H2O 0	8 Fenol ACOH 0
---	--	------------------------------	---	---------------------	----------------------	-----------------	-------------------

Tutorial

Información  
Información

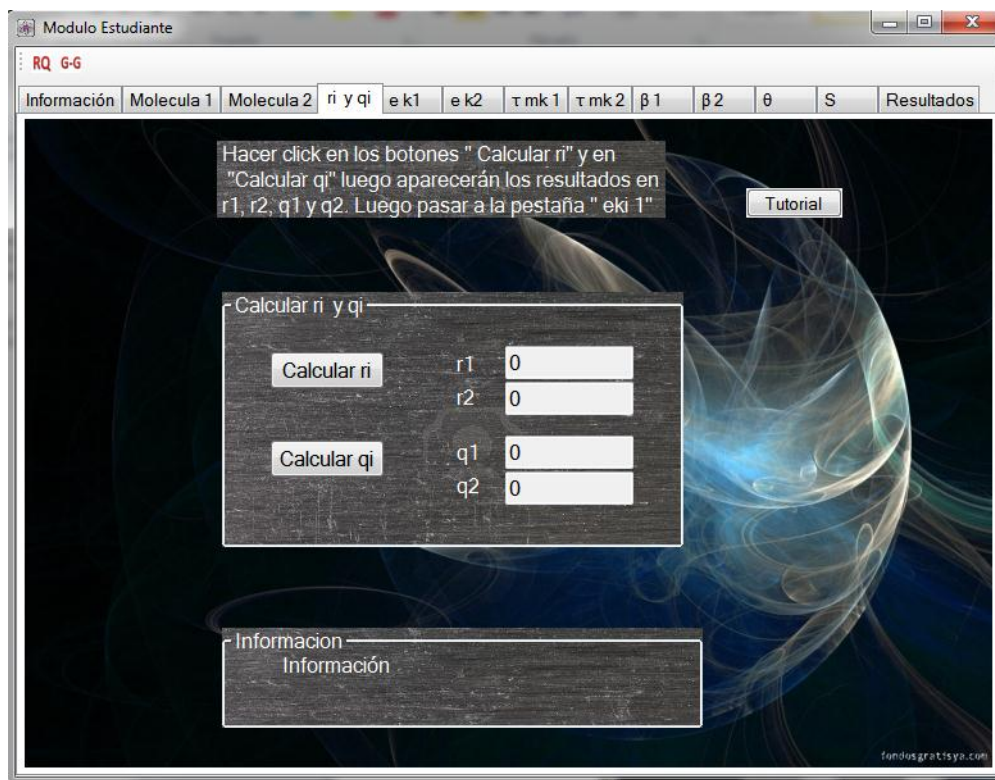
fondosgratisya.com

Fuente: elaboración propia.

### 9.2.4. Pestaña ri y qi

En la figura 30 se muestra el Módulo Estudiante en la pestaña titulada ri y qi. En esta pestaña se calculan los valores de los parámetros  $r_i$  y  $q_i$  al dar clic en los botones Calcular  $r_i$  y en Calcular  $q_i$ . Los valores correspondientes al cálculo de  $r_i$  aparecerán en los cuadros de texto r1 y r2 y los valores de  $q_i$  aparecerán en los cuadros de texto q1 y q2. En el botón tutorial de la figura 30 se abre la ventana del tutorial donde hay una explicación de los pasos a seguir en esta pestaña.

Figura 30. Pestaña ri y qi

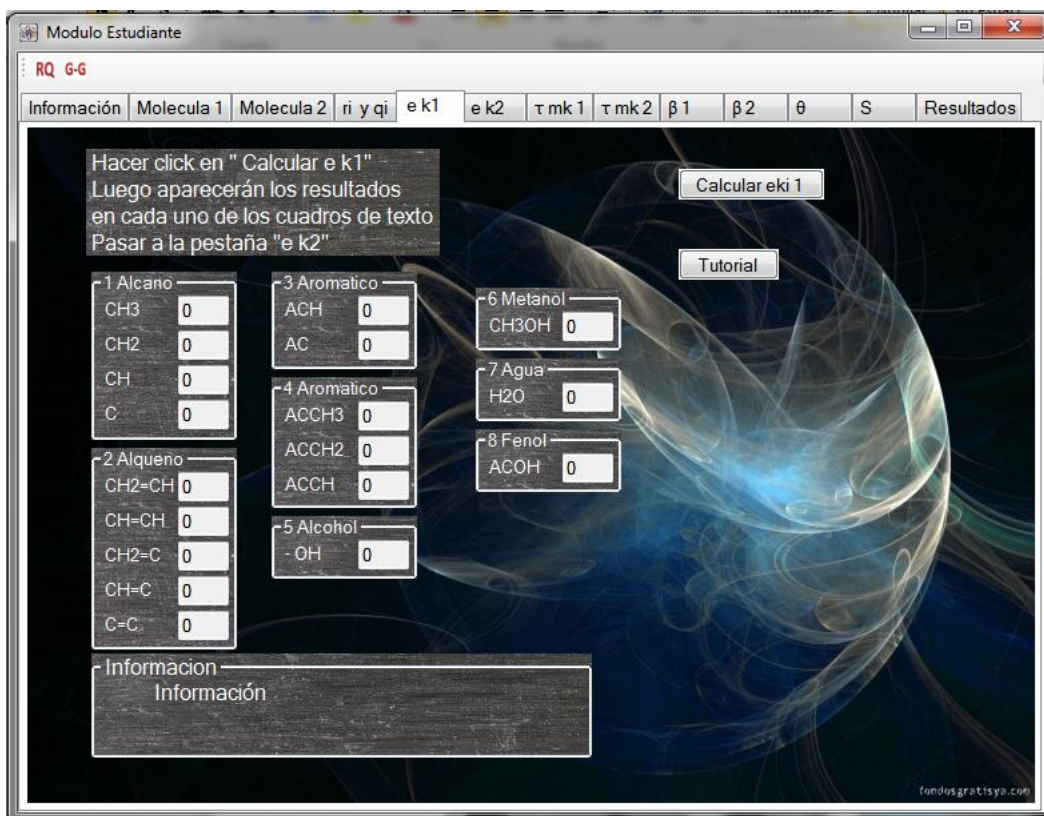


Fuente: elaboración propia.

### 9.2.5. Pestaña e k1

En la figura 31 se muestra el Módulo Estudiante en la pestaña titulada e k1. en esta pestaña se calculan los valores de los parámetro eki para la molécula 1 al dar clic en el botón calcular e k1. Los valores correspondientes al cálculo de eki aparecerán en los cuadros de texto de la figura 31. En el botón tutorial de la figura 31 se abre la ventana del tutorial donde hay una explicación de los pasos a seguir en esta pestaña.

Figura 31. Pestaña e k1

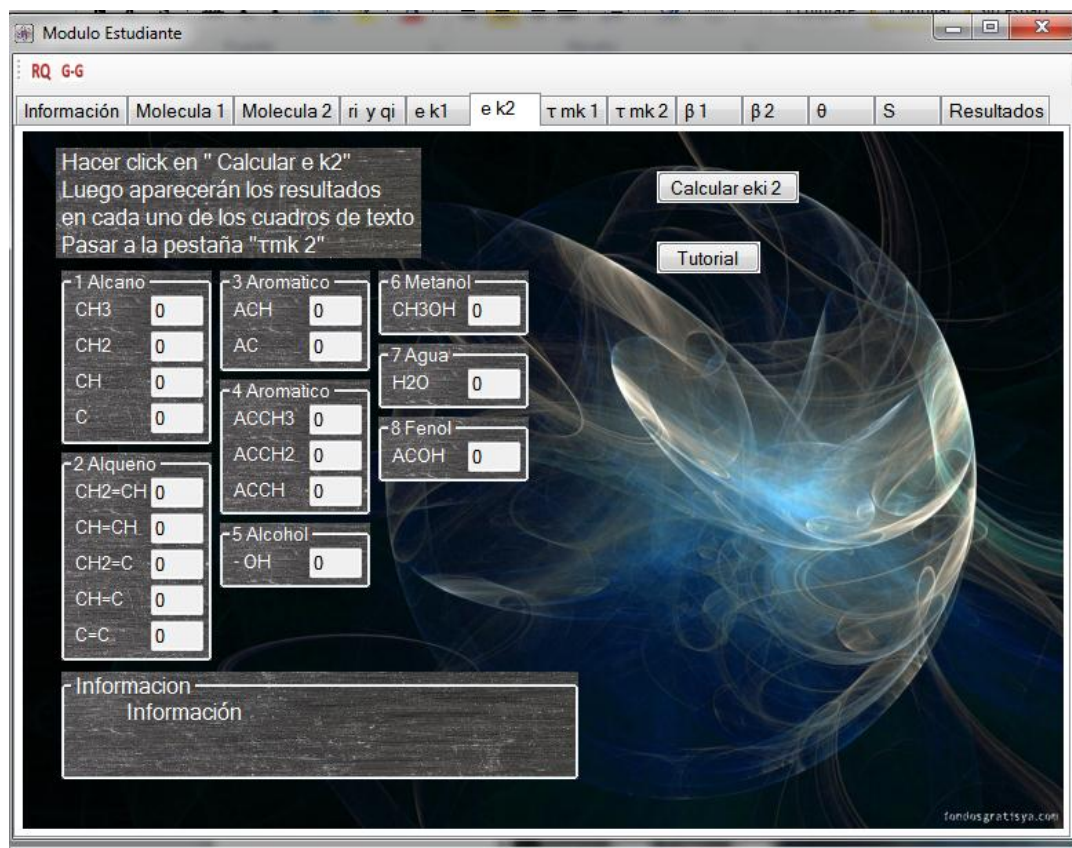


Fuente: elaboración propia.

### 9.2.6. Pestaña e k2

En la figura 32 se muestra el Módulo Estudiante en la pestaña titulada e k2. En esta pestaña se calcula los valores de los parámetro eki para la molécula 2 al dar clic en el botón calcular e k2. Esta pestaña es muy similar a la anterior, con la única diferencia de que los valores calculados son para la molécula 2. Los valores correspondientes al cálculo de eki aparecerán en los cuadros de texto de la figura 32. En el botón tutorial de la figura 32 se abre la ventana del tutorial donde hay una explicación de los pasos a seguir en esta pestaña.

Figura 32. Pestaña e k2

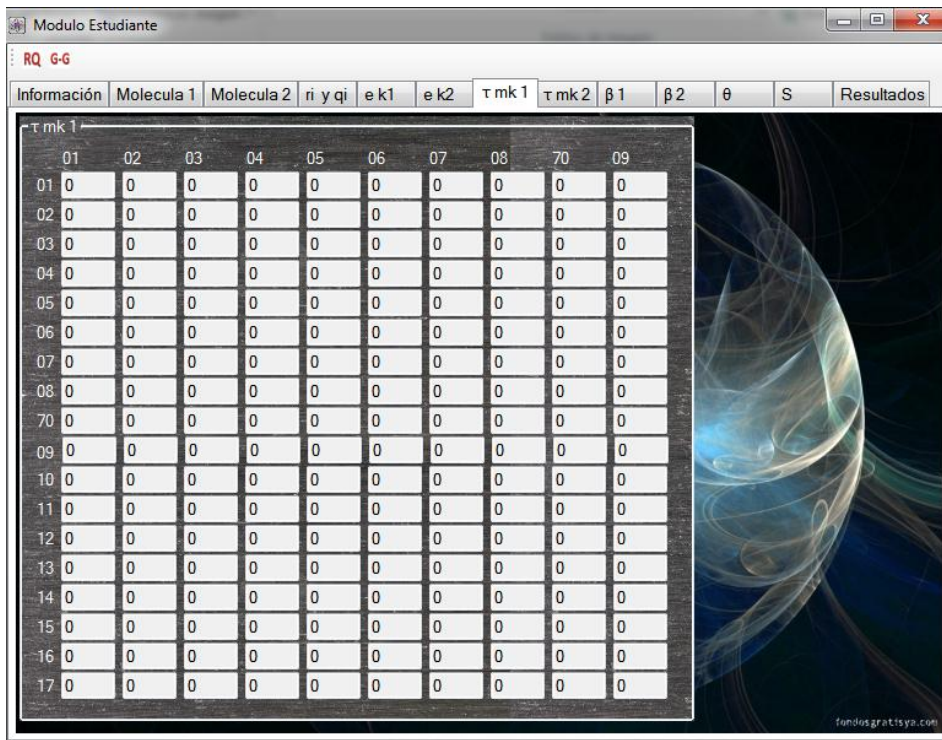


Fuente: elaboración propia.

### 9.2.7. Pestañas $\tau_{mk1}$ y $\tau_{mk2}$

En la figura 33 se muestra el Módulo Estudiante en la pestaña titulada  $\tau_{mk1}$  y en la figura 34 la pestaña titulada  $\tau_{mk2}$ . En esta pestaña se calcula los valores de los parámetros  $\tau_{mk}$ , de acuerdo a la base de datos de parámetros de interacción. En esta pestaña, antes de calcular los valores de  $\tau_{mk}$ , se debe establecer la temperatura a la que se encuentra el sistema, indicándola en grados Kelvin. Los valores correspondientes al cálculo de  $\tau_{mk}$  aparecerán en los cuadros de texto de las pestañas de las figura 33 y 34. En el botón tutorial de la figura 34 se abre la ventana del tutorial donde hay una explicación de los pasos a seguir en esta pestaña.

Figura 33. Pestaña  $\tau_{mk1}$



Fuente: elaboración propia.

Figura 34. Pestaña  $\tau_{mk} 2$

The screenshot shows a software window titled "Modulo Estudiante" with a sub-tab "RQ G-G". The interface includes a menu bar with options: "Información", "Molecula 1", "Molecula 2", "ri y qi", "e k1", "e k2", " $\tau_{mk} 1$ ", " $\tau_{mk} 2$ ", " $\beta 1$ ", " $\beta 2$ ", " $\theta$ ", "S", and "Resultados".

The main area contains a table with 17 rows (01-17) and 8 columns (10-17). All cells in the table contain the value "0".

To the right of the table, there is a text area with the following instructions:
   
"Introduzca la temperatura en grados kelvin. Luego haga click en "Calcular  $\tau_{mk}$ ".
   
Luego pasar a la pestaña " $\beta 1$ ".
   
Below this text are two buttons: "Calcular  $\tau_{mk}$ " and "Tutorial".
   
Further down is a label "Temperatura" followed by a text input field containing the value "273".
   
At the bottom right, there is a box labeled "Información" containing the text "Información".
   
A small watermark "fondosgratisya.com" is visible in the bottom right corner of the application window.

Fuente: elaboración propia.



### 9.2.8. Pestañas $\beta 1$ y $\beta 2$

- En la figura 35 se muestra la pestaña titulada  $\beta 1$ .
- En la figura 36 se muestra la pestaña titulada  $\beta 2$ .
- En la pestaña  $\beta 1$  se calculan los valores de los parámetros  $\beta$  para la molécula 1 al dar clic en Calcular  $\beta 1$ .
- En la pestaña  $\beta 2$  se calculan los valores de los parámetros  $\beta$  para la molécula 2 al dar clic en calcular  $\beta 2$ .

Figura 35. Pestaña  $\beta 1$

Modulo Estudiante

RQ G-6

Información Molécula 1 Molécula 2  $r_i$  y  $q_i$   $e_{k1}$   $e_{k2}$   $\tau_{mk1}$   $\tau_{mk2}$   $\beta 1$   $\beta 2$   $\theta$  S Resultados

Hacer click en " Calcular  $\beta 1$ "  
Luego aparecerán los resultados  
en cada uno de los cuadros de texto  
Pasar a la pestaña " $\beta 2$ "

Calcular  $\beta 1$

Tutorial

1 Alcano  
CH3 0  
CH2 0  
CH 0  
C 0

2 Alqueno  
CH2=CH 0  
CH=CH 0  
CH2=C 0  
CH=C 0  
C-C 0

3 Aromatico  
ACH 0  
AC 0

4 Aromatico  
ACCH3 0  
ACCH2 0  
ACCH 0

5 Alcohol  
-OH 0

6 Metanol  
CH3OH 0

7 Agua  
H2O 0

8 Fenol  
ACOH 0

Información  
Información

fondosgratisya.com

Fuente: elaboración propia.

Figura 36. Pestaña  $\beta 2$

Modulo Estudiante

RQ G-6

Información Molecula 1 Molecula 2 ri y qi e k1 e k2 tau mk 1 tau mk 2 beta 1 beta 2 theta S Resultados

Hacer click en " Calcular  $\beta 2$ "  
Luego aparecerán los resultados  
en cada uno de los cuadros de texto  
Pasar a la pestaña " $\theta$ "

Calcular  $\beta 2$

Tutorial

1 Alcano  
CH3 0  
CH2 0  
CH 0  
C 0

2 Alqueno  
CH2=CH 0  
CH=CH 0  
CH2=C 0  
CH=C 0  
C=C 0

3 Aromatico  
ACH 0  
AC 0

4 Aromatico  
ACCH3 0  
ACCH2 0  
ACCH 0

5 Alcohol  
-OH 0

6 Metanol  
CH3OH 0

7 Agua  
H2O 0

8 Fenol  
ACOH 0

Información  
Información

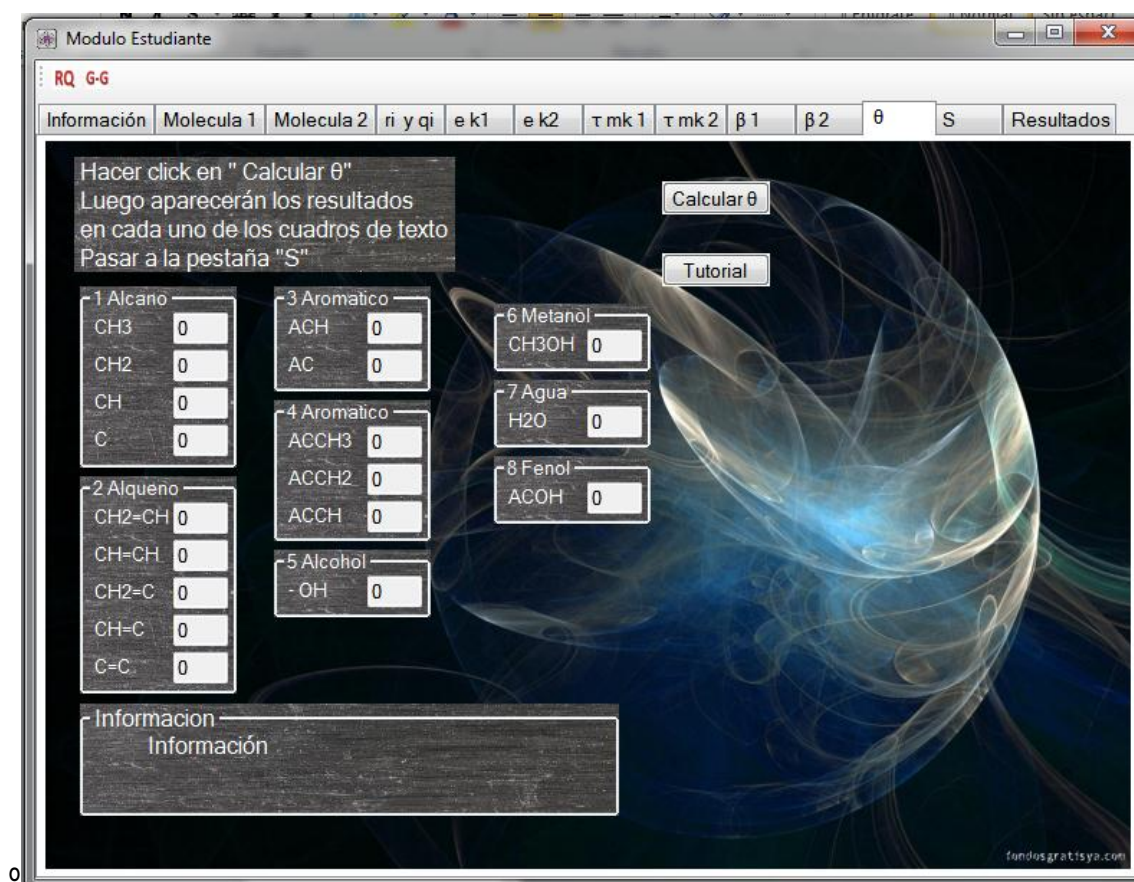
fondosgratisya.com

Fuente: elaboración propia.

### 9.2.9. Pestañas $\theta$

En la figura 37 se muestra el Módulo Estudiante en la pestaña titulada  $\theta$ . En esta pestaña se calcula los valores de los parámetros  $\theta$  con base en los datos anteriormente calculados. Los valores de  $\theta$  son calculados al presionar el botón calcular  $\theta$ . En el botón Tutorial de la figura 37 se abre la ventana del tutorial donde hay una explicación de los pasos a seguir en esta pestaña.

Figura 37. Pestaña  $\theta$



Fuente: elaboración propia.

### 9.2.10. Pestañas S

En la figura 38 se muestra el Módulo Estudiante en la pestaña titulada S. En esta pestaña se calcula los valores de los parámetros S con base en los datos anteriormente calculados. Los valores de  $\theta$  son calculados al presionar el botón Calcular S. En el botón tutorial de la figura 38 se abre la ventana del tutorial donde hay una explicación de los pasos a seguir en esta pestaña.

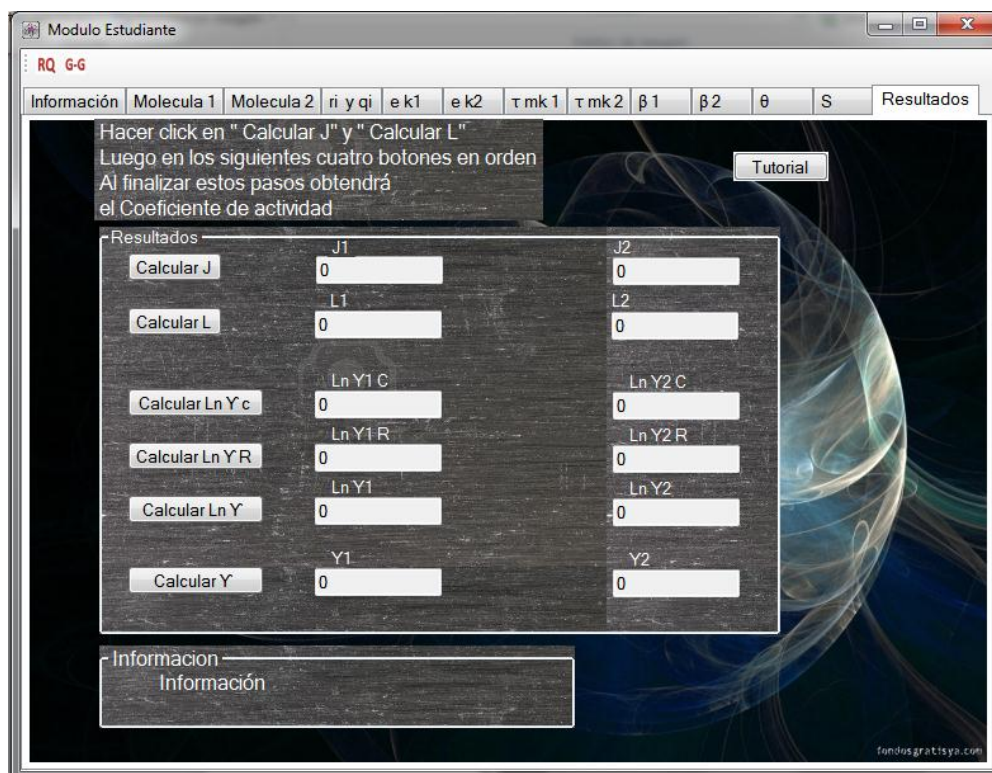
Figura 38. Pestaña S

Fuente: elaboración propia.

### 9.2.11. Pestañas resultados

En la figura 39 se muestra el Módulo Estudiante en la pestaña titulada resultados, la cual es la última de las pestañas de este módulo y es la pestaña donde se obtiene el resultado de los valores de los coeficientes de actividad. Esta pestaña como se observa en la figura 39 cuenta con una serie de botones los cuales deberán ser presionados en forma descendente para obtener el valor de los coeficientes de actividad. Además, como todas las demás pestañas, ésta cuenta con un botón de tutorial del cual se abre la ventana del último de los tutoriales.

Figura 39. Pestaña resultados



Fuente: elaboración propia.

En la figura 40 se muestra el botón donde se calcula el parámetro J y muestra los resultados de los valores calculados en los cuadros de textos J1 y J2. En la figura 41 se muestra el botón para calcular el parámetro L y se muestran los resultados de este cálculo en los cuadros de texto L1 y L2.

Figura 40. **Botón parámetro J**



Fuente: elaboración propia.

Figura 41. **Botón parámetro L**



Fuente: elaboración propia.

Como se expuso en capítulos anteriores, el método UNIFAC se divide en dos partes, la primera combinatoria que se calcula por el botón que se muestra en la figura 42. La segunda es la parte residual que se calcula por medio del botón que se observa en la figura 43.

Figura 42. **Parte combinatoria del método UNIFAC**



Fuente: elaboración propia.

Figura 43 **Parte residual del método UNIFAC**



Fuente: elaboración propia.

Los últimos dos botones son, el de las dos partes de la ecuación del método unificado sumadas y el resultado del coeficiente de actividad. Ambos se muestran en la figura 44.

Figura 44 **Últimos dos botones de la pestaña**



Fuente: elaboración propia.

## 10. MÓDULO EXPERTO

### 10.1. Inicio del Módulo Experto

Como se indicó en uno de los capítulos anteriores para ingresar al Módulo Experto se debe ir al menú UNIFAC y seleccionar la opción Módulo Experto. Este módulo está diseñado para los usuarios con una mayor relación con el uso de la aplicación y para los usuarios con un conocimiento más extenso sobre el método UNIFAC. Además, este módulo es el más versátil de los dos, ya que se puede calcular una cantidad mucho mayor de tipos de moléculas.

El Módulo Estudiante se diseñó con una interface versátil de modo que sea adaptable a las necesidades del usuario experimentado en el uso del método UNIFAC. Como se mostrará más adelante, el módulo cuenta con 108 tipos de grupos funcionales para el cálculo de coeficientes de actividad con las cuales se pueden calcular los coeficientes de actividad de una amplia variedad de moléculas usadas en la Ingeniería Química.

El Módulo Experto por la versatilidad que tiene, es el módulo que requiere más recursos del equipo para funcionar adecuadamente, por lo que los requisitos fueron medidos con base en este módulo. Si un equipo con la aplicación instalada tarda largos períodos de tiempo en calcular los coeficientes de actividad es debido al que el equipo no cumple con los requisitos mínimos para operar este módulo.



## **10.2. Pestañas del Módulo Experto**

El Módulo Estudiante cuenta con una serie de pestañas en las que se dividen cada uno de los pasos para el cálculo de coeficientes de actividad estas pestañas se describen en las siguientes secciones.

### **10.2.1. Pestaña instrucciones**

En la figura 45 se muestra la ventana de inicio del Módulo Estudiante en la pestaña de introducción, que es la que se encuentra visible al iniciar este módulo. En los cuadros de texto se introduce en X1 la primera fracción molar y en X2 el valor complementario de la fracción molar. Además se debe introducir la temperatura en grados Kelvin en el cuadro de texto temperatura. Esta pestaña cuenta con un cuadro de instrucciones para ir guiando al usuario el cálculo de coeficientes de actividad por este módulo.

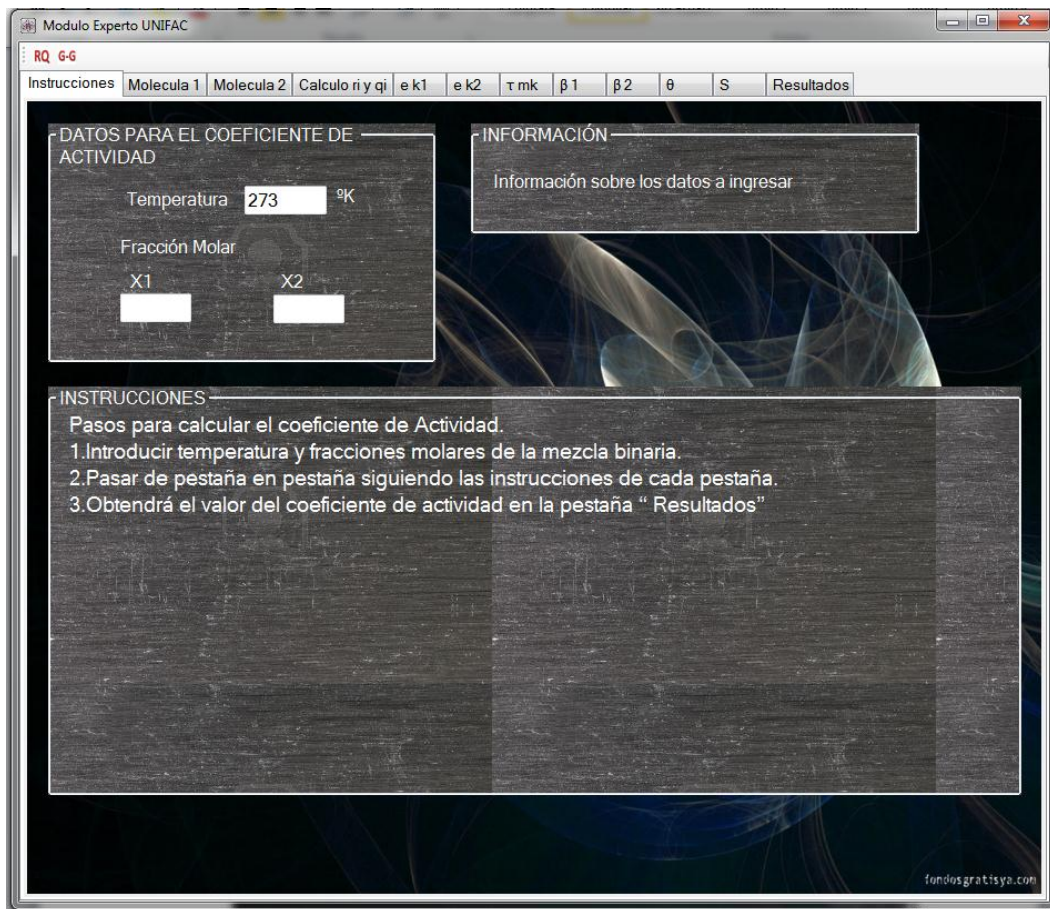
### **10.2.2. Pestaña molécula 1**

En la figura 46 se muestra la pestaña molécula 1 del Módulo Experto, la cual es similar a la pestaña molécula 1 del Módulo Estudiante, con la variación que en este módulo los 108 grupos funcionales están distribuidos en grupos, para facilitar el manejo por parte del usuario de los diferentes grupos funcionales. En esta pestaña se deben introducir los grupos funcionales presentes en la molécula que se denomina como molécula 1.

### 10.2.3. Pestaña molécula 2

En la figura 47 se muestra la pestaña molécula 2 del Módulo Experto la cual es similar a la pestaña molécula 2 del Módulo Estudiante con la variación que en éste, los 108 grupos funcionales están distribuidos en grupos para facilitar el manejo por parte del usuario de los diferentes grupos funcionales. A diferencia de la pestaña titulada molécula 1, en ésta se introducen las cantidades de cada uno de los grupos funcionales de la molécula 2.

Figura 45. Pestaña instrucciones



Fuente: elaboración propia.

Figura 46. Pestaña molécula 1

Modulo Experto UNIFAC

RQ G-6

Instrucciones Molécula 1 Molécula 2 Calculo ri y qi e k1 e k2 τ mk β 1 β 2 θ S Resultados

llene en los cuadros de texto con la cantidad de grupos funcionales que posee la molecula, Luego pase a la pestaña "Molécula 2"

Información  
Información

Grupos Funcionales

- Grupos del 1 - 10
- Grupos del 11 - 20
- Grupos del 21 - 30
- Grupos del 31 - 42
- Grupos del 43 - 50

Grupos del 1 al 10

1 Alcano	CH3	0	3 Aromatico	ACH	0	7 Agua	H2O	0
	CH2	0		AC	0			
	CH	0	4 Aromatico	ACCH3	0	8 Fenol	ACOH	0
	C	0		ACCH2	0			
2 Alqueno	CH2=CH	0		ACCH	0	9 Cetonas	CH3CO	0
	CH=CH	0					CH2CO	0
	CH2=C	0	5 Alcohol	-OH	0	10 Aldehído	HC=O	0
	CH=C	0						
	C=C	0	6 Metanol	CH3OH	0			

Fuente: elaboración propia.

Figura 47. Pestaña molécula 2

Modulo Experto UNIFAC

RQ G-6

Instrucciones Molécula 1 Molécula 2 Calculo ri y qi e k1 e k2 τ mk β 1 β 2 θ S Resultados

llene en los cuadros de texto con la cantidad de grupos funcionales que posee la molecula, Luego pase a la pestaña "Calculo ri y qi"

Información  
Información

Grupos Funcionales

- Grupos del 1 - 10
- Grupos del 11 - 20
- Grupos del 21 - 30
- Grupos del 31 - 42
- Grupos del 43 - 50

Grupos del 1 al 10

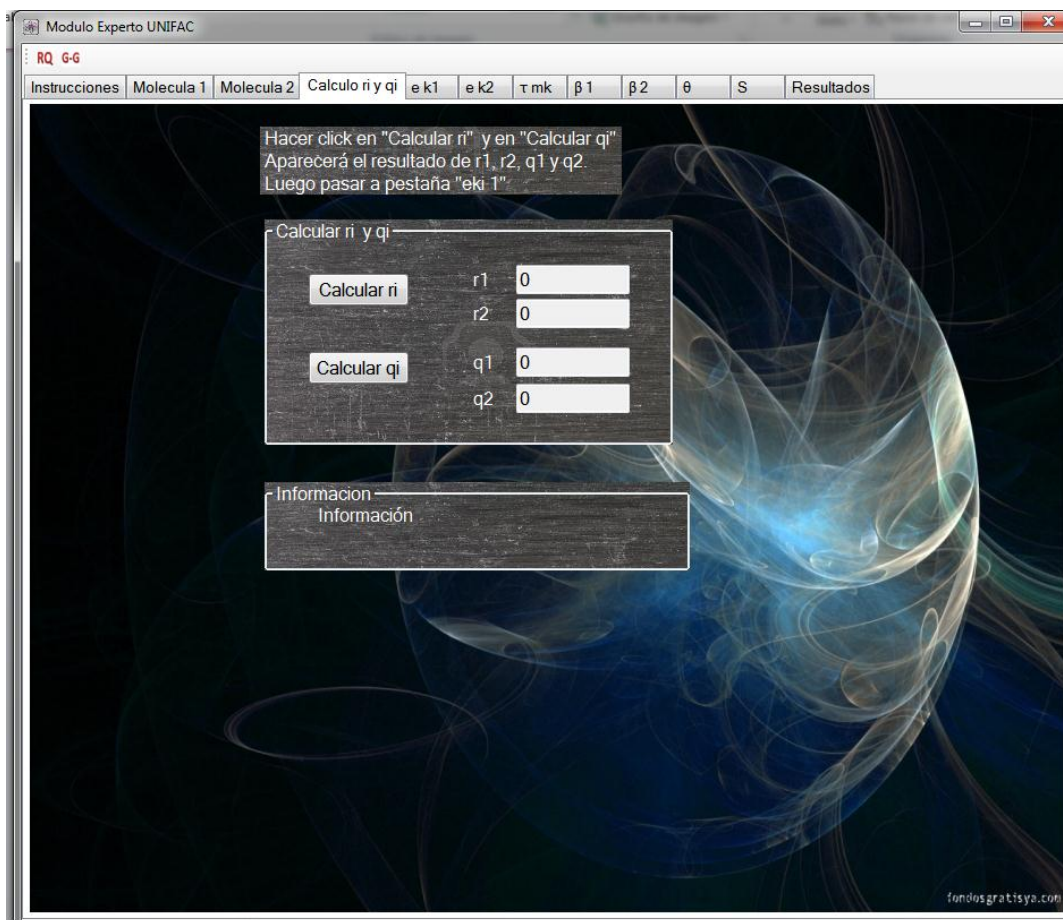
1 Alcano	CH3	0	3 Aromatico	ACH	0	7 Agua	H2O	0
	CH2	0		AC	0			
	CH	0	4 Aromatico	ACCH3	0	8 Fenol	ACOH	0
	C	0		ACCH2	0			
2 Alqueno	CH2=CH	0		ACCH	0	9 Cetonas	CH3CO	0
	CH=CH	0					CH2CO	0
	CH2=C	0	5 Alcohol	-OH	0	10 Aldehído	HC=O	0
	CH=C	0						
	C=C	0	6 Metanol	CH3OH	0			

Fuente: elaboración propia.

#### 10.2.4. Pestaña ri y qi

En la Figura 48 se muestra el Módulo Experto en la pestaña titulada Cálculo ri y qi en esta pestaña se calcula los valores de los parámetro  $r_i$  y  $q_i$  al dar clic en los botones calcular ri y en calcular qi. Los valores correspondientes al cálculo de  $r_i$  aparecerán en los cuadros de texto r1 y r2 y los valores de  $q_i$  aparecerán en los cuadros de texto q1 y q2.

Figura 48. Pestaña ri y qi

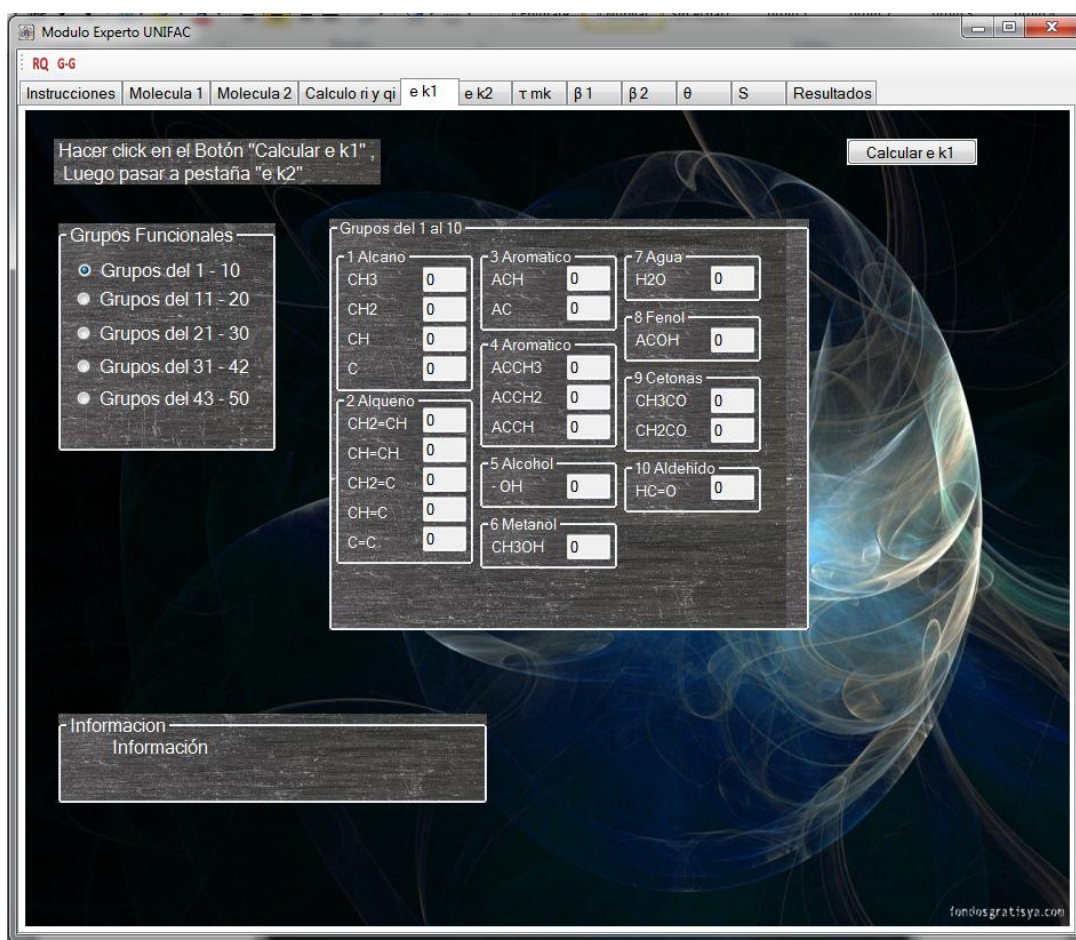


Fuente: elaboración propia.

### 10.2.5. Pestaña e k1

En la figura 49 se muestra el Módulo Experto en la pestaña titulada e k1 en esta pestaña se calcula los valores de los parámetro eki para la molécula 1 al dar clic en el botón calcular e k1. Los valores correspondientes al cálculo de eki aparecerán en los cuadros de texto de la figura 47.

Figura 49. Pestaña e k1



Fuente: elaboración propia.

## 10.2.6. Pestaña e k2

En la figura 50 se muestra el Módulo Experto en la pestaña titulada e k2 en esta pestaña se calcula los valores de los parámetro eki para la molécula 2 al dar clic en el botón Calcular e k2. Esta pestaña es muy similar a la anterior, con la única diferencia de que los valores calculados son para la molécula 2. Los valores correspondientes al cálculo de eki aparecerán en los cuadros de texto de la figura 48.

Figura 50. Pestaña e k2

The screenshot displays the 'Modulo Experto UNIFAC' software interface. The window title is 'Modulo Experto UNIFAC'. The main menu includes 'Instrucciones', 'Molecula 1', 'Molecula 2', 'Calculo ri y qi', 'e k1', 'e k2', 'τ mk', 'β 1', 'β 2', 'θ', 'S', and 'Resultados'. The 'e k2' tab is active. A text box at the top left reads: 'Hacer click en el Botón "Calcular e k2", Luego pasar a pestaña "τ mk"'. A 'Calcular e k2' button is located at the top right. The main area contains a grid of input fields for functional groups, each with a numerical value (all are 0). The groups are organized as follows:

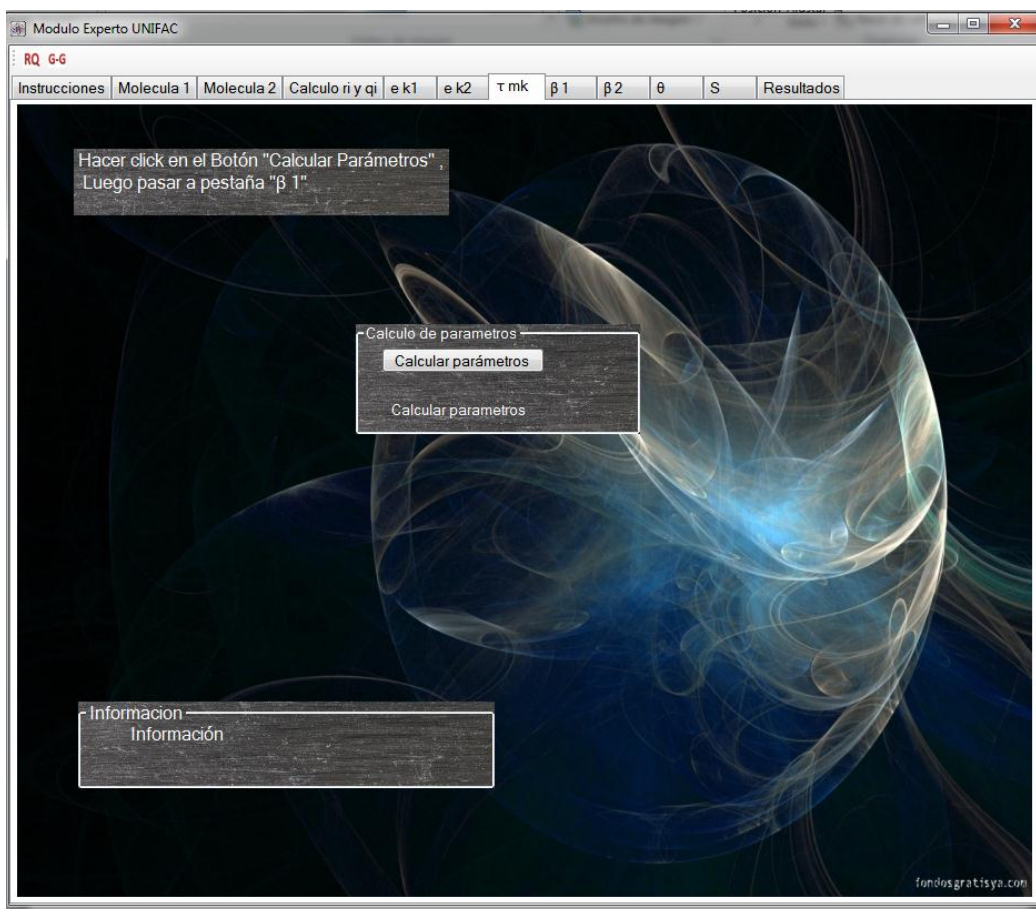
- Grupos Funcionales**
  - Grupos del 1 - 10
  - Grupos del 11 - 20
  - Grupos del 21 - 30
  - Grupos del 31 - 42
  - Grupos del 43 - 50
- Grupos del 1 al 10**
  - 1 Alcano**
    - CH3: 0
    - CH2: 0
    - CH: 0
    - C: 0
  - 2 Alqueno**
    - CH2=CH: 0
    - CH=CH: 0
    - CH2=C: 0
    - CH=C: 0
    - C=C: 0
  - 3 Aromatico**
    - ACH: 0
    - AC: 0
  - 4 Aromatico**
    - ACCH3: 0
    - ACCH2: 0
    - ACCH: 0
  - 5 Alcohol**
    - OH: 0
  - 6 Metanol**
    - CH3OH: 0
  - 7 Agua**
    - H2O: 0
  - 8 Fenol**
    - ACOH: 0
  - 9 Cetonas**
    - CH3CO: 0
    - CH2CO: 0
  - 10 Aldehido**
    - HC=O: 0
- Información**
  - Información

Fuente: elaboración propia.

### 10.2.7. Pestañas $\tau$ mk

En la figura 51 se muestra el Módulo Experto en la pestaña titulada  $\tau$  mk en esta pestaña se calcula los valores de los parámetro  $\tau$  mk con base en la base de datos de parámetros de interacción internamente dentro del programa. En esta pestaña únicamente hay que hacer clic en el botón Calcular parámetros y la aplicación automáticamente determinara los valores de los parámetros  $\tau$  mk.

Figura 51. Pestaña  $\tau$  mk

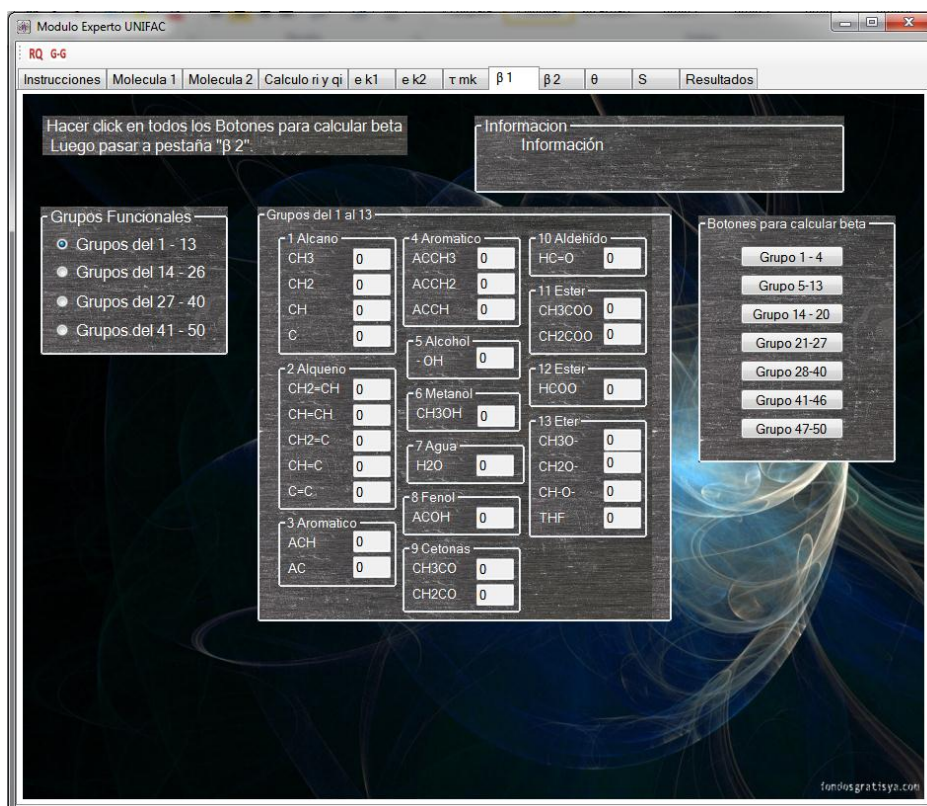


Fuente: elaboración propia.

### 10.2.8. Pestañas $\beta 1$ y $\beta 2$

En la figura 52 se muestra el Módulo Experto en la pestaña  $\beta 1$  en esta pestañas los botones para el cálculo de los parámetros están divididos en 7 para facilitar el manejo de los datos internos de la aplicación y para agilizar el proceso de cálculo de los parámetros. Los resultados se muestran en los cuadros de textos que se encuentran agrupados para mantener un orden. En la figura 53 se muestra la pestaña titulada  $\beta 2$ . Esta es muy similar a la pestaña  $\beta 1$  con la diferencia que ésta calculará valores de  $\beta$  para la molécula 2 al dar clic en calcular  $\beta 2$ .

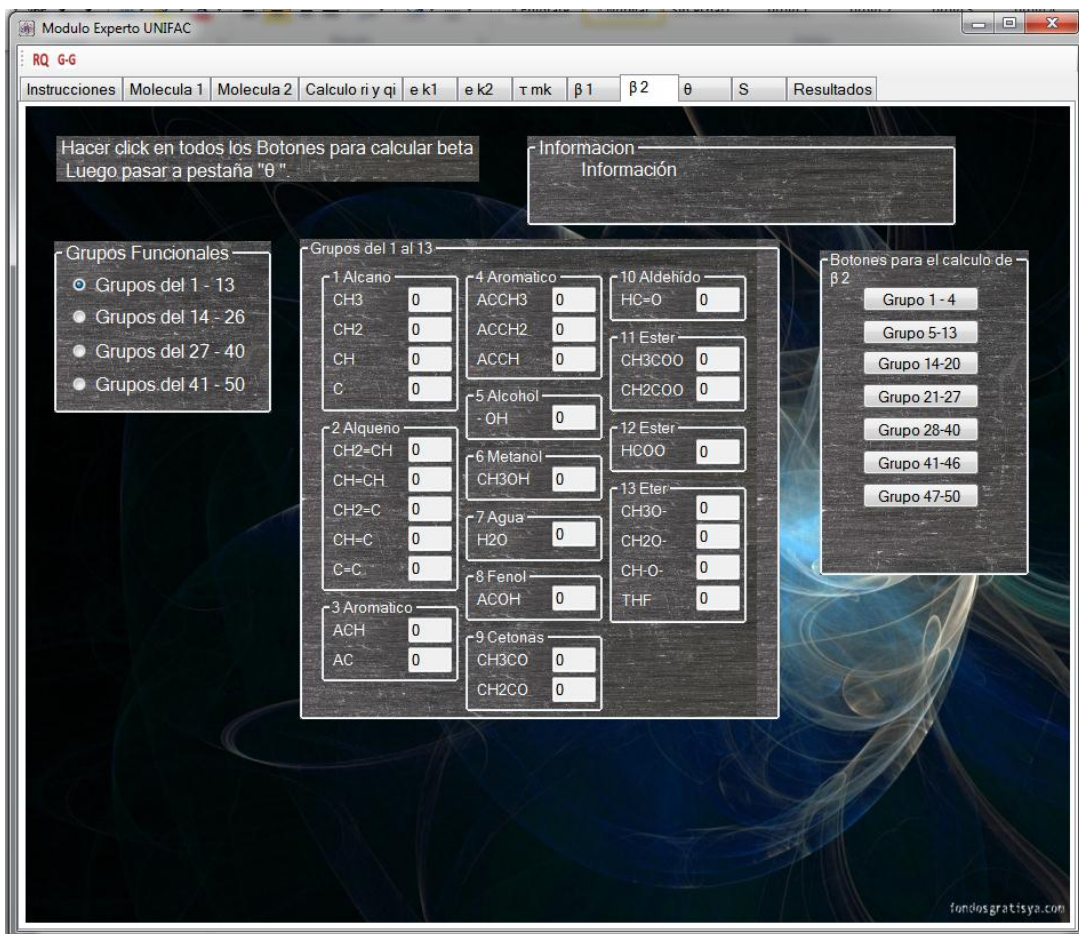
Figura 52. Pestaña  $\beta 1$



Fuente: elaboración propia.



Figura 53. Pestaña  $\beta 2$

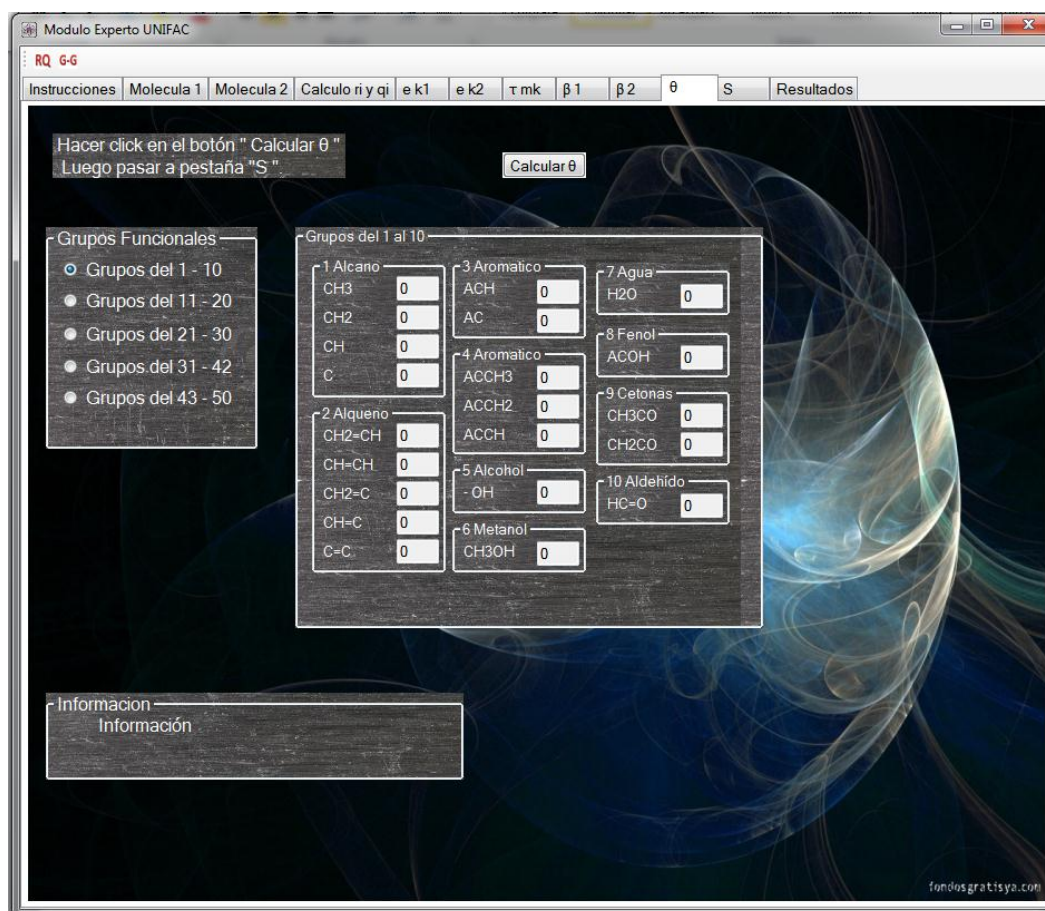


Fuente: elaboración propia.

### 10.2.9. Pestañas $\theta$

En la figura 54 se muestra el Módulo Experto en la pestaña  $\theta$  en esta pestaña se calcula los valores de los parámetros  $\theta$  con base en los datos anteriormente calculados. Los valores de  $\theta$  son calculados al presionar el botón calcular  $\theta$ . Para poder observar los diferentes resultados se puede cambiar los grupos que observando activando los otros botones del grupo de botones titulados grupos funcionales.

Figura 54. Pestaña  $\theta$

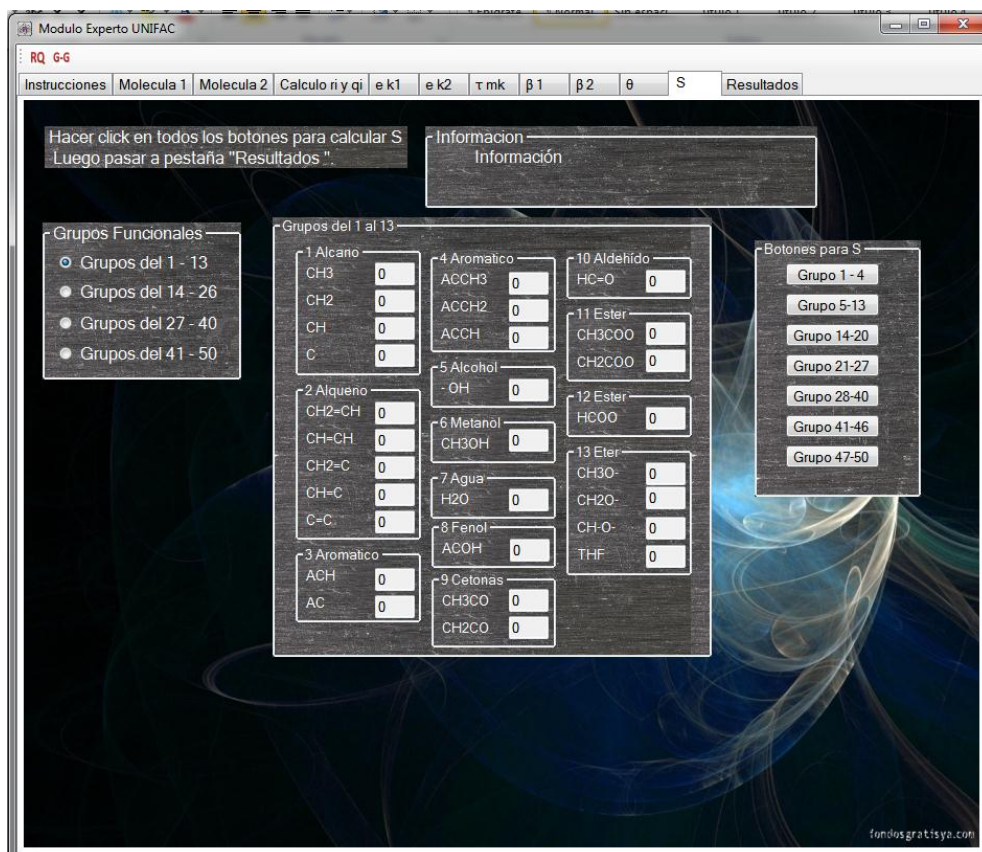


Fuente: elaboración propia.

### 10.2.10. Pestañas S

En la figura 55 se muestra el Módulo Experto en la pestaña titulada S en esta pestaña se calcula los valores de los parámetros S con base en los datos anteriormente calculados. Los valores de  $\theta$  son calculados al presionar el botón calcular S. Los botones para calcular los parámetros S se encuentran en el recuadro titulado botones para S. Para cambiar los grupos que se observan se deben seleccionar o activar el botón deseado entre los botones del recuadro titulado grupos funcionales.

Figura 55. Pestaña S

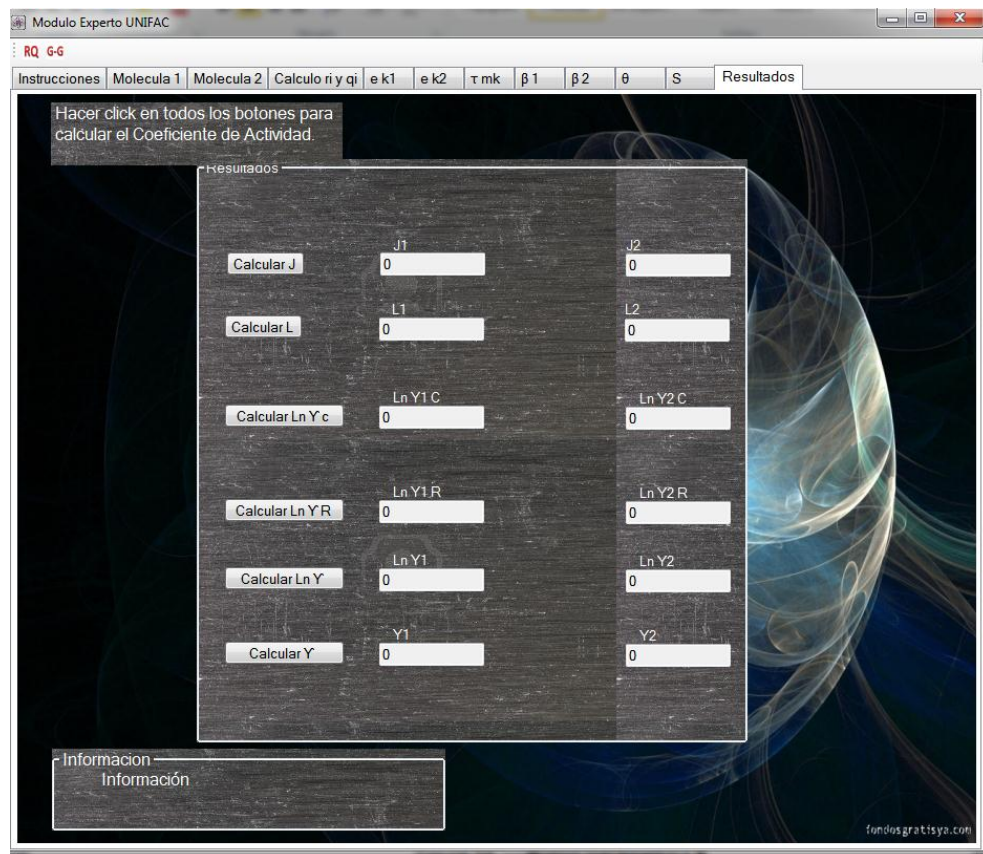


Fuente: elaboración propia.

### 10.2.11. Pestañas resultados

En la figura 56 se muestra el Módulo Experto en la pestaña titulada resultados la cual es la última de las pestañas de este módulo y es la pestaña donde se obtiene el resultado de los valores de los coeficientes de actividad. Esta pestaña, como se observa en la figura 54, cuenta con una serie de botones los cuales deberán ser presionados en forma descendente para obtener el valor de los coeficientes de actividad. Algunos botones podrán tardar algunos segundos en dar el resultado debido a la complejidad del método.

Figura 56. Pestaña resultados



Fuente: elaboración propia.

En la figura 57 se muestra el botón donde se calcula el parámetro J y muestra los resultados de los valores calculados en los cuadros de textos J1 y J2. En la figura 58 se muestra el botón para calcular el parámetro L y se muestran los resultados de este cálculo en los cuadros de texto L1 y L2.

Figura 57. **Botón parámetro J**



Fuente: elaboración propia.

Figura 58. **Botón parámetro L**



Fuente: elaboración propia.

Como se expuso en capítulos anteriores, el método UNIFAC se divide en dos partes: la primera combinatoria que se calcula por el botón que se muestra en la figura 59. La segunda es la parte residual que se calcula por medio del botón que se observa en la figura 60.

Figura 59. **Parte combinatoria del método UNIFAC**



Fuente: elaboración propia.

Figura 60 **Parte residual del método UNIFAC**



Fuente: elaboración propia.

Los últimos dos botones son: el de las dos partes de la ecuación del método unificado sumadas y el resultado del coeficiente de actividad. Ambos se muestran en la figura 61.

Figura 61 **Últimos dos botones de la pestaña resultado**



Fuente: elaboración propia.



## **11. BASE DE DATOS**

### **11.1. Inicio de base de datos**

Como se indicó en capítulos anteriores, el método UNIFAC se apoya de una base de datos dividida en dos partes: una de parámetros de grupo y otra de parámetros de interacción. Los valores de esta base de datos se encuentran ingresados en la base de datos interna de la aplicación. Se puede consultar la base de datos desde los Módulos Estudiante y Experto o desde la ventana de inicio de la aplicación. Como se observa en la figura 62 se puede tener acceso a la base de datos desde el menú base de datos de la ventana principal.

La primera parte de la base de datos contiene parámetros de grupo. Éstos son los volúmenes y áreas superficiales de los grupos funcionales. Los cuales al ser sumados se obtienen los volúmenes y áreas superficiales de las moléculas completas. La segunda parte de la base de datos contiene parámetros de interacción. Éstos consideran la influencia debida a la interacción entre los diferentes grupos funcionales en la mezcla.

### **11.2. Base de datos de parámetros de grupo**

Al ingresar a la base de datos de parámetros de grupos por cualquiera de las formas disponibles aparecerá la ventana que se observa en la figura 63, en la cual hay un botón de siguiente y en las sucesivas imágenes que aparecerán habrá un botón de para regresar a la diapositiva anterior.

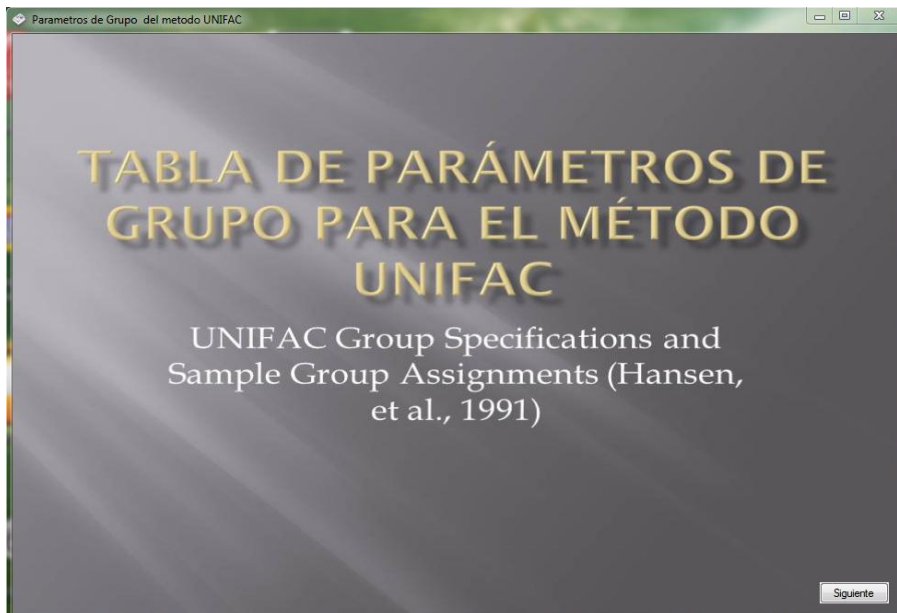


Figura 62 **Menú base de datos**



Fuente: elaboración propia.

Figura 63 **Base da datos de parámetros de grupo del método UNIFAC**

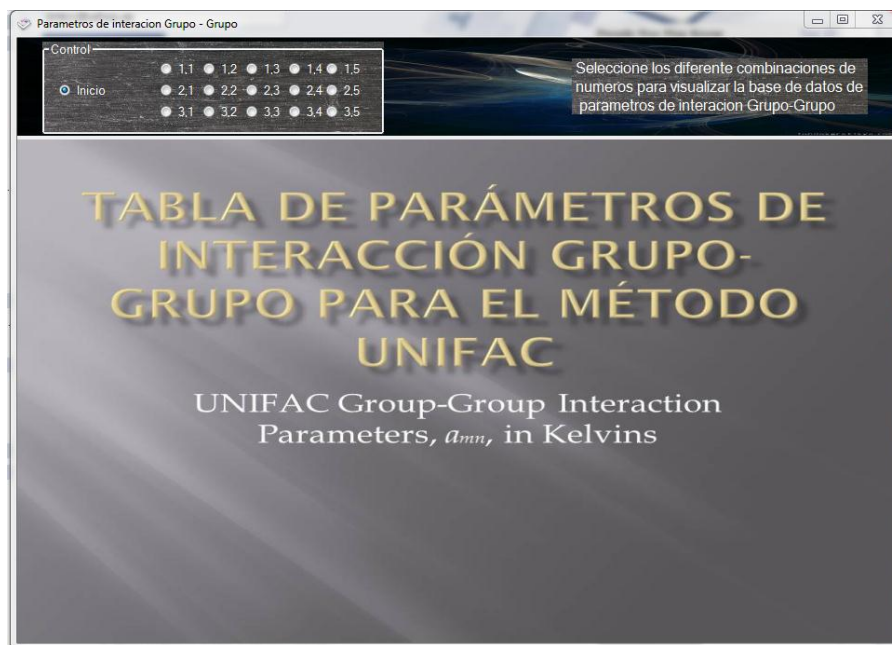


Fuente: elaboración propia.

### 11.3. Base de datos de parámetros de interacción

En la figura 64 se muestra la base de datos de parámetros de interacción, la cual es una de las dos partes de la base de datos del método UNIFAC. Para poder consultar la base se debe de elegir uno los botones le recuadro Control.

Figura 64 Base da datos de parámetros de interacción



Fuente: elaboración propia.



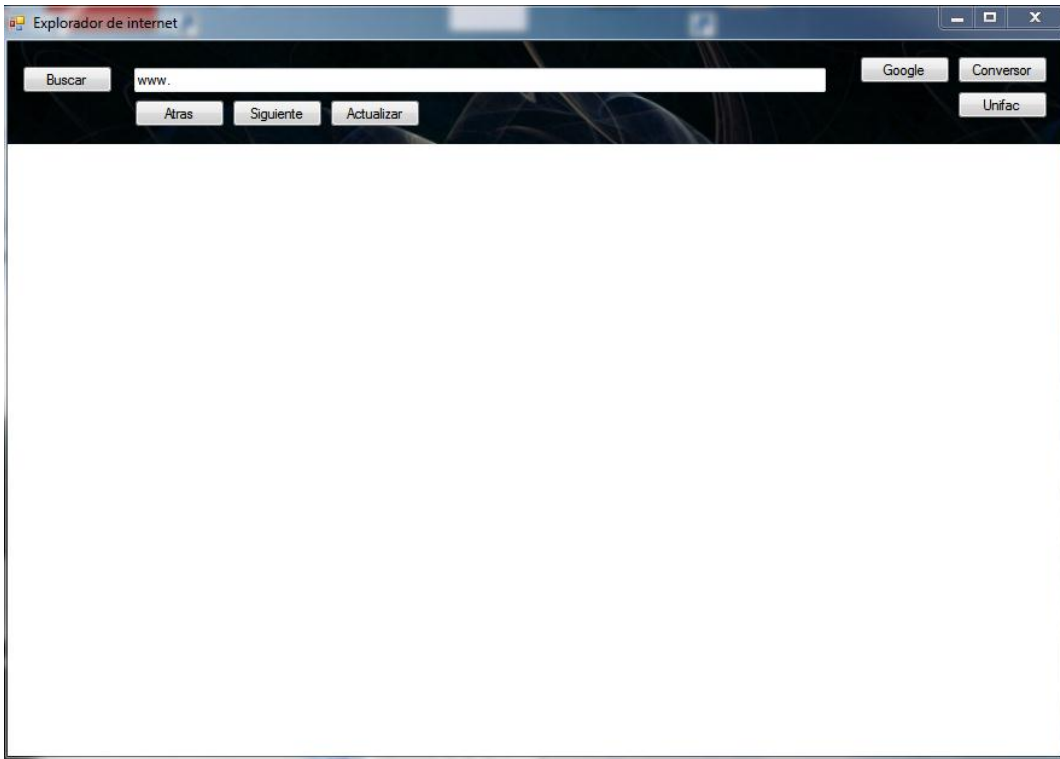
## **12. EXPLORADOR DE INTERNET Y CONVERTOR DE UNIDADES**

### **12.1. Inicio de explorador de Internet**

Con el fin de aumentar la versatilidad del programa en el menú conversor de unidades se encuentra la opción web, en la cual se puede tener acceso a un explorador de Internet el donde se puede consultar páginas de conversión de unidades, así como otras páginas en línea relacionadas con el método UNIFAC. Este explorador se diseñó con el fin de que sea similar a los exploradores e Internet más común, para que sea de fácil uso para el usuario.

En la figura 65 se muestra el explorador de Internet que se despliega al seleccionar la opción web. Con el botón conversor se despliega una página en línea donde se puede hacer conversiones de unidades. Con el botón UNIFAC se carga una página en línea donde se da una explicación del método UNIFAC.

Figura 65 Explorador de internet



Fuente: elaboración propia.

## 13. TUTORIAL

### 13.1. Inicio tutoriales

La aplicación cuenta con un tutorial que describe el método de uso de la aplicación para el cálculo de coeficientes de actividad. Este tutorial se puede tener acceso desde el Módulo Experto o desde el menú ayuda en la opción tutorial en el cual se encuentran las 9 partes del tutorial. El tutorial se enfoca tanto en cómo resolver un problema de cálculo de coeficientes de actividad de una mezcla líquida binaria a ciertas condiciones, como en el uso y manejo de la aplicación. En la Figura 66 se observa que los tutoriales cuentan con botones de atrás y siguiente para ir avanzando y retrocediendo en los tutoriales.

Figura 66 Ejemplo de uno de los tutoriales

Descomponer la molécula

C1=CC=CC=C1

Fuente: <http://en.wikipedia.org/wiki/File:Benzene-2D-full.svg>

No.	Main Group.	Subgroup	R <sub>k</sub> (vol)	Q <sub>k</sub> (SA)	
6	ACH	"ACH"	ACH(9)	0.5313	0.400

Atras Siguiente

Fuente: elaboración propia.



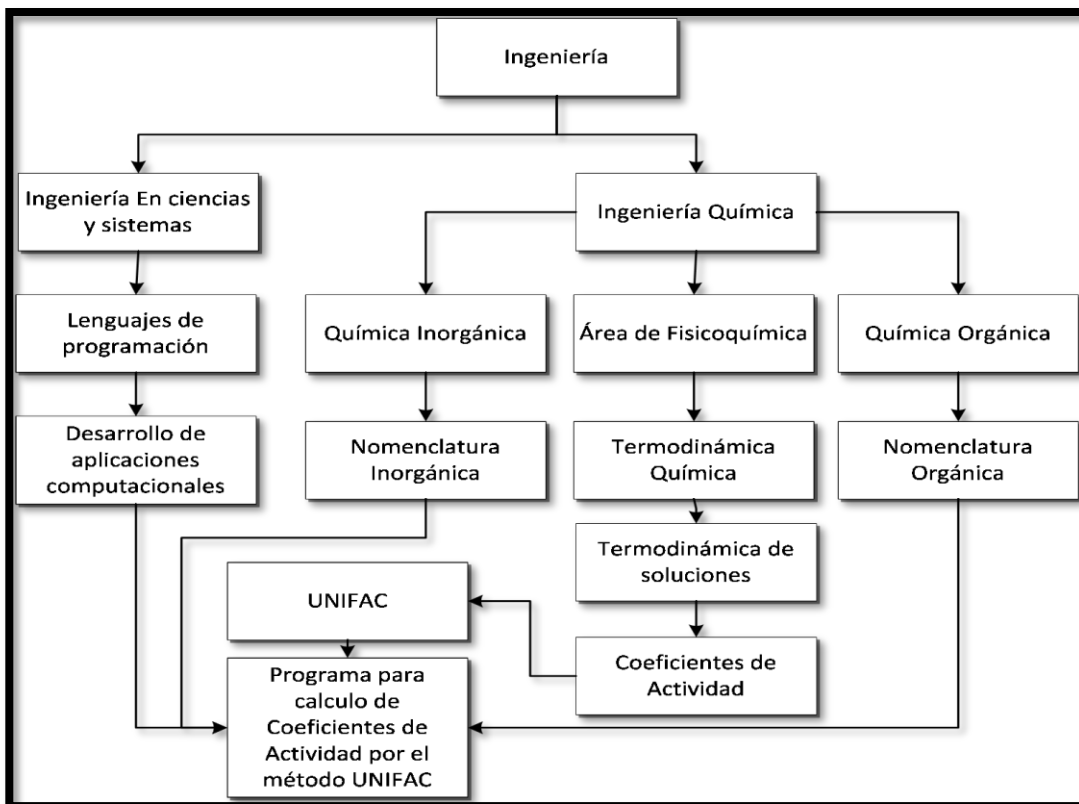
## **14. MAPA MENTAL Y DIAGRAMA DE FLUJO**

### **14.1. Mapa mental**

Esta aplicación, por la temática que trata, abarca muchas ramas de la ingeniería. Todas éstas se trabajaron en conjunto para poder diseñar y crear la aplicación. Para desarrollar la aplicación se utilizaron conocimientos de programación pertenecientes a la carrera de ingeniería en Ciencias y Sistemas. Se utilizaron también, conocimientos de química orgánica e inorgánica como de termodinámica química que son ramas de la Ingeniería Química. En la figura 67 se muestra todas las ramas de la ingeniería involucradas en la carrera.



Figura 67 Mapa mental

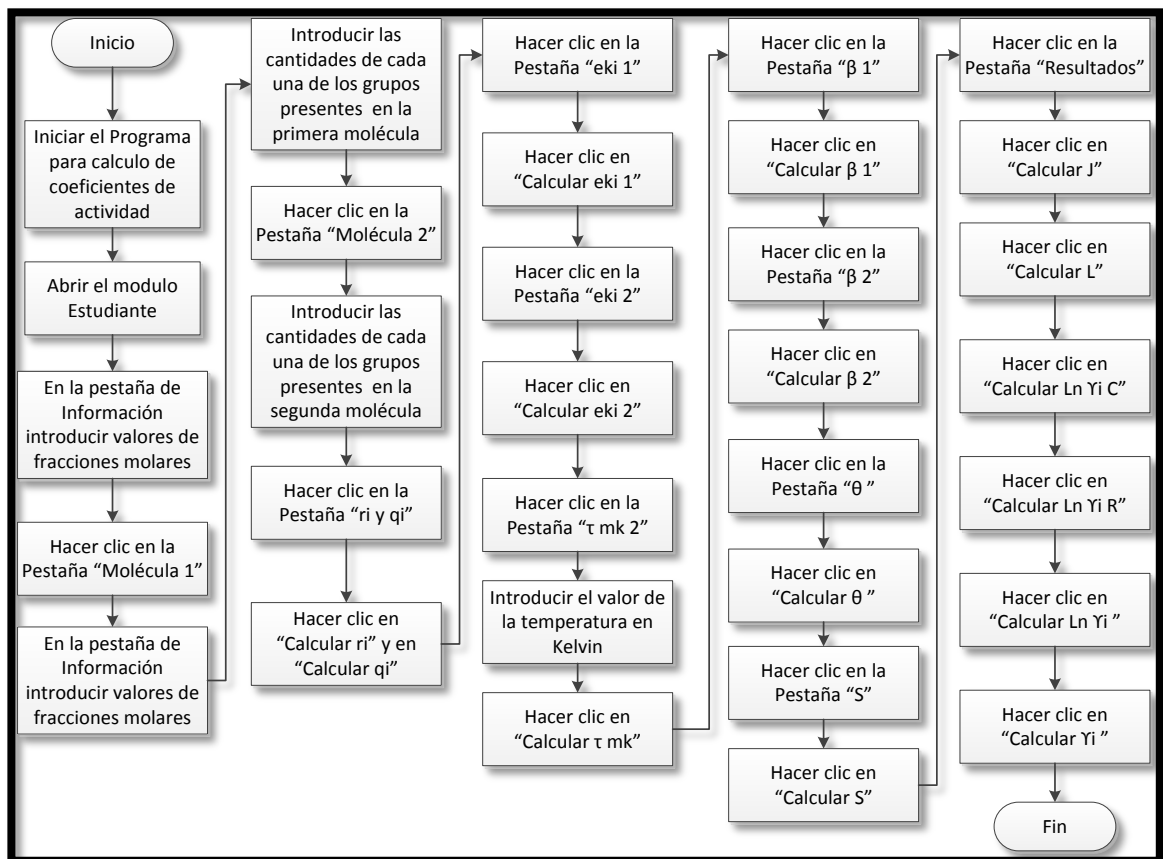


Fuente: elaboración propia.

## 14.2. Diagrama de flujo

Un diagrama de flujo es un método para representar de forma gráfica y ordenada un conjunto de pasos que se realizan en un proceso. Se creó un diagrama de flujo de los pasos a seguir para el cálculo de coeficientes de actividad con el Módulo Estudiante de la aplicación desarrollada. En la figura 68 se muestra el diagrama de flujo descrito anteriormente.

Figura 68 Diagrama de flujo



Fuente: elaboración propia.



## **15. METODOLOGÍA**

### **15.1. Delimitación de campo de estudio**

El trabajo de graduación es parte del campo de estudio de ingeniería en la rama denominada Ingeniería Química en la línea de estudio de la termodinámica, para el curso de Termodinámica 4 en el cálculo de propiedades de mezcla, en el cálculo específico de coeficientes de actividad por el método UNIFAC.

### **15.2. Recursos humanos disponibles**

Entre los recursos humanos que se requerirán para el desarrollo de este trabajo de graduación son:

- Estudiante de Ingeniería Química que realizará el trabajo de graduación:  
Jim Kevin Cuestas Cifuentes
- Asesor: Ing. Jorge Emilio Godínez Lemus

### **15.3. Recursos materiales disponibles**

El equipo y materiales necesarios para la realización de este trabajo de graduación son:

- Equipo de cómputo para la programación
- Paquete de programas Microsoft Office 2010
- Programa Visual Studio 2010
- Libros de consulta
- Hojas de papel bond
- Calculadora
- Tesis de consulta
- Internet

### **15.4. Técnica cualitativa o cuantitativa**

Para la programación se usará la técnica de programación modular que consiste en dividir un programa en módulos. El objetivo de esta técnica es sub dividir un problema en problemas más pequeños, para facilitar su resolución.

Otra técnica de programación que se utilizará es la programación orientada a los objetos, la cual usa objetos y sus interacciones, para diseñar aplicaciones y programas informáticos.

### **15.5. Recolección y ordenamiento de la información**

Los datos e información que se utilizará para el desarrollo de la aplicación, se recopilarán de bibliografía especializada para Ingeniería Química.

## 16. INTERPRETACIÓN DE RESULTADOS

### 16.1. Aplicación del Módulo Estudiante

La aplicación se diseñó con fines pedagógicos como profesionales. La aplicación puede ser usada como una herramienta adicional para la enseñanza de una manera más interactiva y amena del cálculo de coeficientes de actividad por el método UNIFAC. Los estudiantes que estén aprendiendo sobre el uso y cálculo de coeficientes de actividad podrán utilizar el Módulo Estudiante, para corroborar sus resultados de problemas relacionados con la temática.

El Módulo Estudiante podrá ser aplicado para enseñanza a distancia o autodidáctica, dado que el usuario podrá aprender a calcular coeficientes de actividad y a manejar la aplicación sin necesidad de un tutor, dado que el Módulo Estudiante cuenta con un tutorial para el aprendizaje de ello.

El Módulo Estudiante podrá ser utilizado para el cálculo de coeficientes de actividad entre mezclas de alcanos, alquenos, aromáticos, alcoholes, fenoles y agua. El Módulo Estudiante está diseñado únicamente para calcular coeficientes de actividad de mezclas líquidas binarias de los compuestos anteriormente mencionados.

Debido a que la aplicación utiliza el método UNIFAC, para el cálculo de coeficientes de actividad, éste considera aspectos como las interacciones entre grupos funcionales y el efecto de la temperatura en los coeficientes de actividad.

## 16.2. Aplicación del Módulo Experto

Como se mencionó anteriormente, entre los fines con los que se diseñó la aplicación es que ésta tenga aplicación profesional. La aplicación puede ser usada como una herramienta adicional para cálculos profesionales debido a la versatilidad y confiabilidad del Módulo Experto, lo que permite ser utilizada con seguridad en cualquier tipo de cálculo relacionado con el cálculo de coeficientes de actividad.

El Módulo Experto podrá ser utilizado por estudiantes con experiencia en el uso del método UNIFAC, para el cálculo de coeficientes de actividad en diferentes investigaciones.

El Módulo Experto podrá ser utilizado para el cálculo de coeficientes de actividad entre mezclas de alcanos, alquenos, aromáticos, alcoholes, fenoles, agua, aldehídos, esteres, éteres, aminas, anilinas, ácidos carboxílicos, alquinos, entre otros. El Módulo Experto está diseñado únicamente para calcular coeficientes de actividad de mezclas líquidas binarias.

## CONCLUSIONES

1. Realización de una base de datos que se divide en dos partes: una para parámetros de grupo y la otra para parámetros de interacción entre grupos del método UNIFAC, las cuales se utilizaron como base para el desarrollo de la aplicación.
2. Construcción de una aplicación dividida en dos módulos: estudiante y experto, que facilita el proceso de enseñanza del cálculo de coeficientes de actividad de mezclas binarias por medio de la interfaz de programación Microsoft Visual Studio 2010.
3. Desarrolló de un tutorial para el aprendizaje del proceso de cálculo de coeficientes de actividad por el método UNIFAC y para el uso de la aplicación, el cual se distribuyó en el Módulo Estudiante.
4. Diseño y elaboración de mapas conceptuales y diagramas de flujo, para la orientación del estudiante de Ingeniería Química, en el aprendizaje del cálculo de coeficientes de actividad por el método UNIFAC.





## RECOMENDACIONES

1. Es importante el conocimiento previo de Química Orgánica, Química Inorgánica y Termodinámica, para poder hacer un uso efectivo de la aplicación por parte del usuario.
2. Es importante el manejo del sistema operativo de Windows para hacer un uso eficiente de la aplicación.
3. Poner énfasis en el uso del tutorial incluido en la aplicación, especialmente para los usuarios que utilizan el programa por primera vez, para usarlo de manera adecuada.
4. Verificar que el equipo donde se instale la aplicación cumpla con los requisitos de software y hardware, para tener un buen desempeño de la aplicación al obtener los resultados en cortos tiempos.
5. Elaborar una aplicación para graficar diagramas de equilibrio líquido-vapor, con base en los coeficientes de actividad calculados en esta aplicación por el método UNIFAC.
6. Actualizar periódicamente la aplicación para implementar las variaciones en el método y en la base de datos de la aplicación, para que se disponga de una mejora continua del conocimiento tecnológico y práctico, orientado a la innovación pedagógica.
7. Realizar constantes investigaciones, para la mejora continua de las técnicas educativas y mejorar el aprendizaje de los estudiantes, consecuentemente innovar en los campos de la Ingeniería Química.



## BIBLIOGRAFÍA

1. BALZHISER, Richard. *Termodinámica química para ingenieros*. Mexico: Prentice Hall, 1980. 733 p.
2. DÍAZ, Andrés. *Adaptación de un programa de computadora para el cálculo de coeficientes de actividad haciendo uso del método UNIFAC*. Trabajo de graduación de Ing. Química, Universidad de San Carlos de Guatemala, Facultad de Ingeniería, 1981. 60 p.
3. HERNÁNDEZ, Edgar. *Adaptación de programas de computación para el equilibrio líquido-vapor con los modelos NRTL y UNIFAC y simulación de una torre de destilación*. Trabajo de graduación de Ing. Química, Universidad de San Carlos de Guatemala, Facultad de Ingeniería, 1989. 227 p.
4. KRESTOVNIKOV, A. N. *Termodinámica química*. Moscú, URSS: Mir, 1980. 287 p.
5. MOORE, Andrew. *Visual studio 2010 ALL IN ONE for dummies*. Estados Unidos: McGraw-Hill, 2003. 509 p.
6. PERRY, Robert H. *Perry's Chemical Engineers' Handbook*. 8a ed. Estados Unidos: Wiley, 2010. 916 p.
7. POLING, Bruce; PRAUSNITZ, John; O'CONNELL, John. *Las propiedades de los gases y los líquidos*. 5a ed. Estados Unidos: McGraw-Hill, 2004. 708 p.

8. PRAUSNITZ, John; LICHTENTHALER, Rüdiger; DE AZEVEDO, Edmundo. *Termodinámica molecular de los equilibrios de fases*. 3a ed. España: Prentice-Hall, 2000. 708 p.
9. SANDLER, Stanley. *Termodinámica para químicos e ingenieros químicos*. México: Interamericana, 1980. 540 p.
10. SMITH, J.M; VAN NESS, H.C. *Introducción a la termodinámica en ingeniería química*. 6a ed. México: McGraw-Hill, 2003. p.453.
11. VIDAL, Jean. *Thermodynamics application in chemical engineering and the petroleum industry*. Paris: Technio, 2003. 495 p.

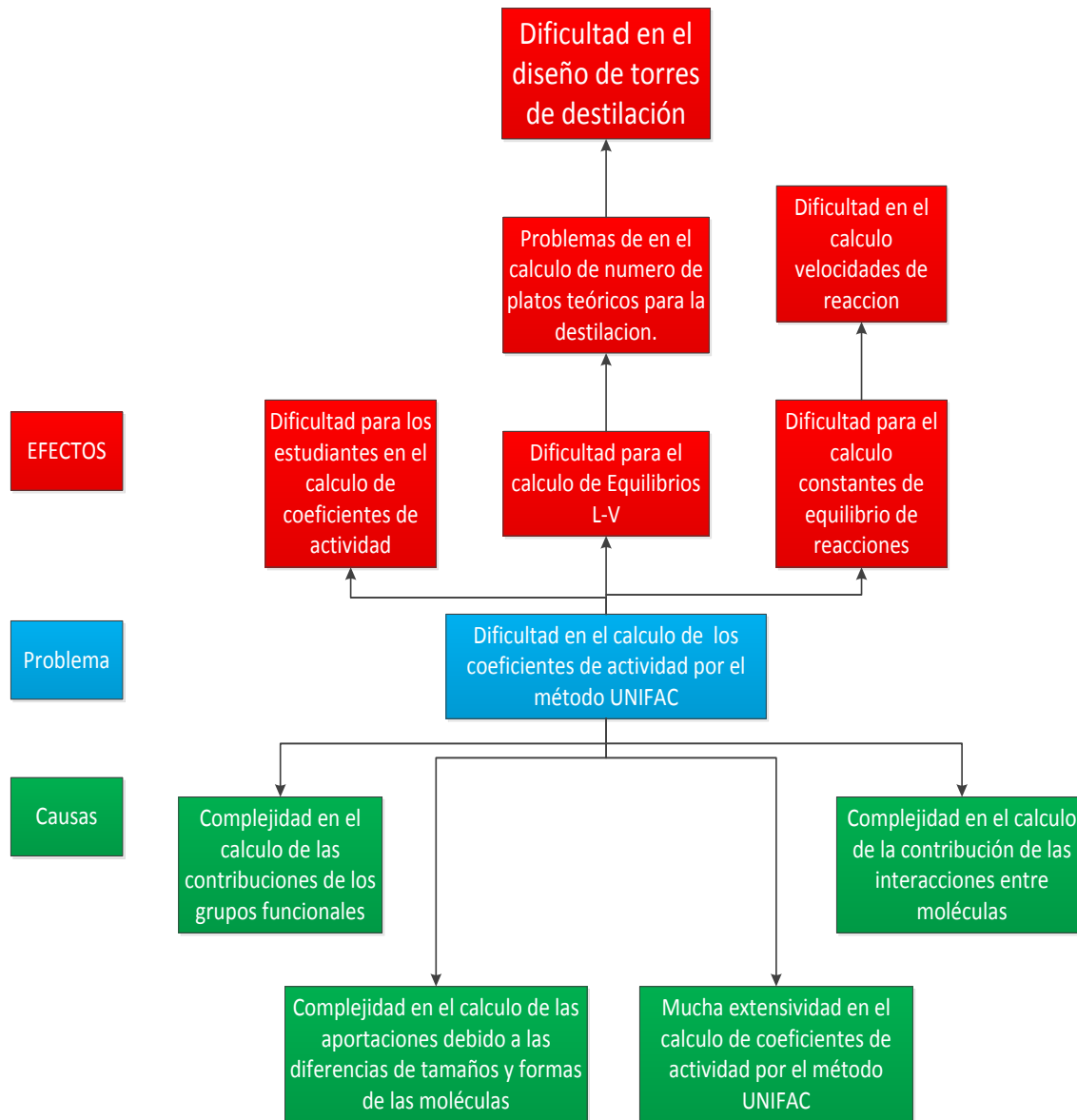
## APÉNDICES

**Apéndice 1. Tabla de requisitos académicos para la realización del presente trabajo de graduación**

Código	Curso	Razón
354	Química 3	Prerrequisito
356	química 4	Prerrequisito
362	Análisis Cualitativo	Prerrequisito
358	Química Orgánica 1	Temas relacionados
360	Química Orgánica 2	Temas relacionados
410	Balance de masa y energía	Prerrequisito
412	Flujo de fluidos	Prerrequisito
414	Transferencia de calor	Prerrequisito
416	transferencia de masa	Temas relacionados
90	Programación de computadoras	Temas relacionados
101	Matemática Básica 1	Temas relacionados
103	Matemática Básica 2	Temas relacionados
107	Matemática intermedia 1	Prerrequisito
114	Matemática intermedia 3	Prerrequisito
380	Fisicoquímica 1	Prerrequisito
382	Fisicoquímica 2	Prerrequisito
394	Termodinámica 3	Prerrequisito
396	Termodinámica 4	Temas relacionados

Fuente: elaboración propia.

## Apéndice 2. Árbol del problema para el trabajo de graduación.



Fuente: elaboración propia