

3 REVISIÓN BIBLIOGRÁFICA

3.1 El Equilibrio Líquido-Vapor de Mezclas Binarias

3.1.1 Definición y Principios Termodinámicos

El equilibrio líquido-vapor (ELV) ocurre cuando no se presentan cambios con respecto al tiempo de la temperatura y presión total de la mezcla, y las fugacidades parciales de los componentes puros son iguales en todo el sistema.

El ELV se expresa de la siguiente forma:

$$\hat{f}_{iV} = \hat{f}_{iL} \quad \text{Ec. (1)}$$

Y en términos de coeficientes de fugacidad queda representado por la ecuación:

$$y_i \hat{\phi}_{iV} P = x_i \hat{\phi}_{iL} P \quad \text{Ec. (2)}$$

Para esta expresión, es necesario conocer los coeficientes de fugacidad. La manera de conocerlos es por medio de ecuaciones de estado (EOS), dentro de las cuales las más conocidas y utilizadas son: la Ley de Gases Ideales, la ecuación de Peng-Robinson y la de Redlich-Kwong-Soave. Para el caso de la fase líquida, es más complicado encontrar alguna ecuación que prediga un coeficiente de fugacidad que represente con exactitud el comportamiento de las mezclas; por lo que frecuentemente se recurre a la predicción por medio de los coeficientes de actividad. En este caso, la ecuación de equilibrio se expresa de la siguiente manera:

$$y_i \hat{\phi}_{iV} P = x_i \gamma_i f_{iL} \quad \text{Ec. (3)}$$

Los coeficientes de actividad se conocen por medio de ecuaciones de predicción dentro de las cuales se pueden nombrar: Margules, Van Laar, UNIQUAC y NRTL.

Es importante mencionar que también existe otra medida de análisis del ELV, y ésta es por medio del coeficiente de distribución vapor-líquido, también llamado razón de equilibrio líquido-vapor. Este es la razón de las fracciones molares de una especie presente en dos fases en el equilibrio y se expresa por medio de la ecuación (4).

$$K_i = \frac{y_i}{x_i} = \frac{\hat{\phi}_{iL}}{\hat{\phi}_{iV}} \quad \text{Ec. (4)}$$

Este último término simplifica mucho las ecuaciones termodinámicas y facilita su resolución. Más información sobre estos términos se puede encontrar en literatura específica del ramo como en Walas, Wark, Smith y Van Ness, Perry, Elliot, entre otros.

3.1.2 Ley de Raoult y Tipos de Mezclas Binarias

La ley de Raoult es una simplificación de la ecuación (3), donde se idealiza el comportamiento del vapor poniendo $\hat{\phi}_i = 1$ y del líquido poniendo $\gamma_i = 1$. Esta ecuación funciona bien en la región del gas ideal y cuando los líquidos son ideales. Como en la mayoría de los casos, los líquidos no son ideales se realizó una modificación a la ley de Raoult donde se toma en consideración el coeficiente de actividad.

$$y_i P = x_i P_i^{sat} \quad \text{Ec. (5) Ley de Raoult}$$

$$y_i P = x_i \gamma_i P_i^{sat} \quad \text{Ec. (6) Ley de Raoult Modificada}$$

Existen varios tipos de mezclas binarias según su comportamiento. La ley de Raoult describe a la mezcla ideal (Fig. 3.1) y la ley de Raoult modificada (Fig. 3.2), describe a la mezcla ideal desviada de la idealidad en los líquidos. Las mezclas no ideales presentan desviaciones en ambas fases, líquida y gaseosa, dentro de las cuales las más comunes son

Información consultada en Walas y Smith & Van Ness.

los azeótropos. Los azeótropos presentan una inflexión donde ambas curvas se tocan en algún punto; estos exhiben un máximo o un mínimo en isotermas o isobáras. Con base en esto, se dan las dos clasificaciones restantes: mezcla no ideal con máximo azeotrópico en isotermas (Fig. 3.3) y mezcla no ideal con mínimo azeotrópico en isotermas (Fig. 3.4).

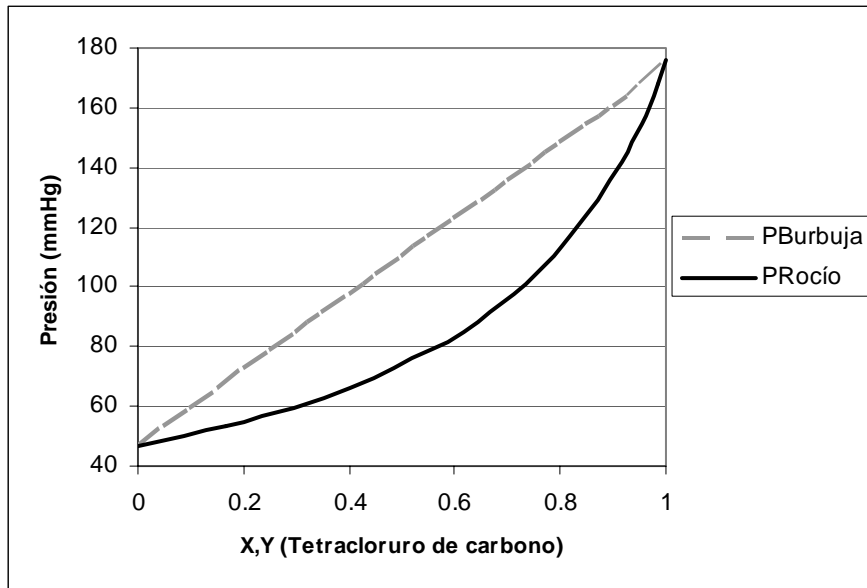


Figura 3.1 Mezcla Tetracloruro de carbono-Tolueno @ 40°C. Mezcla ideal. *

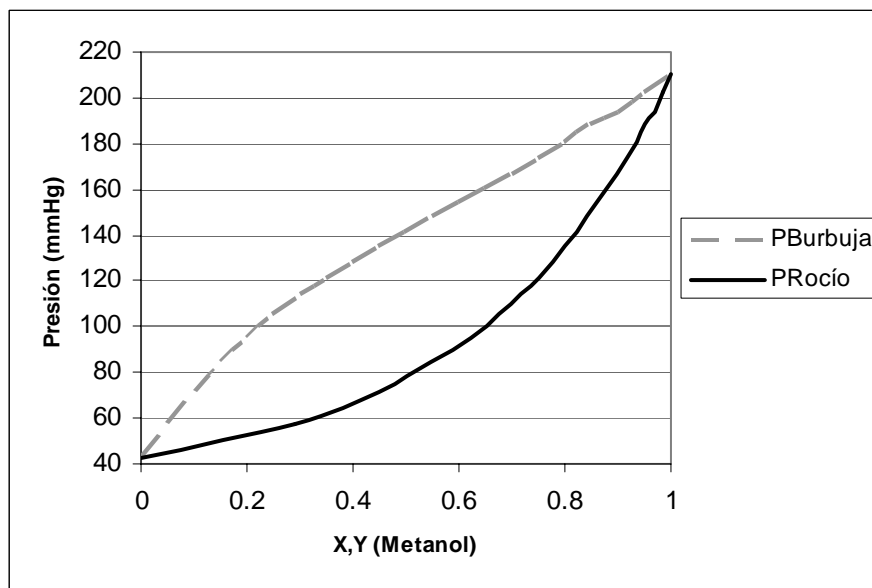


Figura 3.2 Mezcla Metanol-Agua @ 35°C. Mezcla desviada de la ley de Raoult en la fase líquida. *

* Datos experimentales tomados de Ohe.

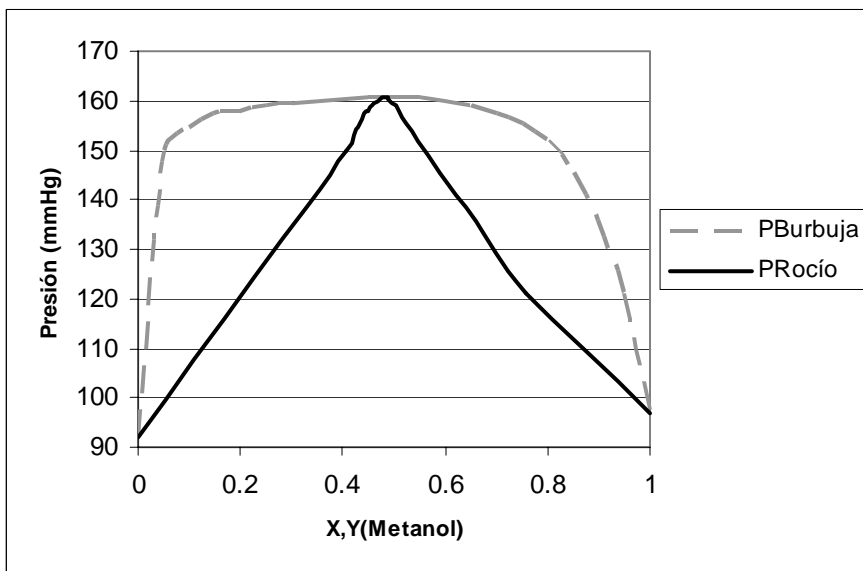


Figura 3.3 Mezcla Metanol-Tetracloruro de carbono @ 20°C. Mezcla no ideal con máximo azeotrópico en isotermas.*

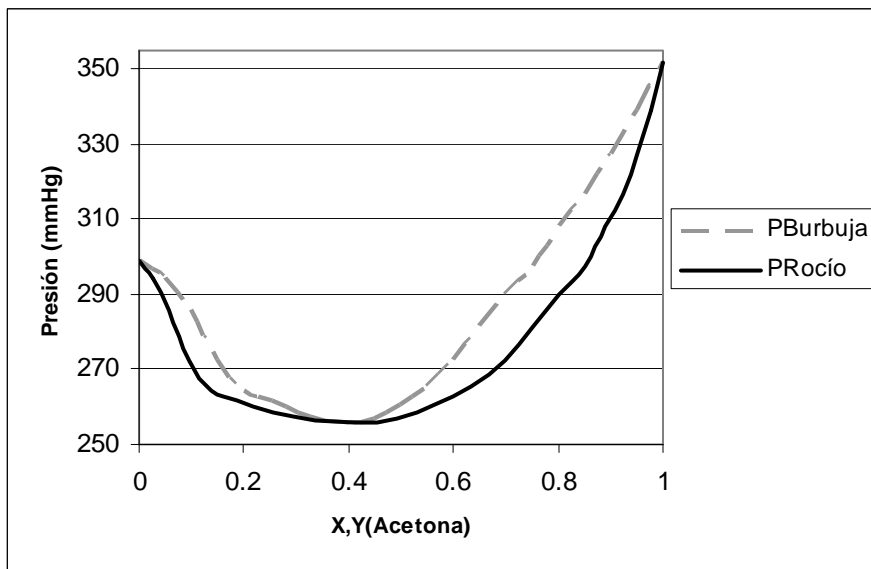


Figura 3.4 Mezcla Acetona-Cloroformo @ 35.2°C. Mezcla no ideal con mínimo azeotrópico en isotermas.*

* Datos experimentales tomados de Ohe.

3.1.3 Punto de Rocío y de Burbuja

El punto de burbuja es la temperatura y presión a las cuales una mezcla líquida comienza a hervir mientras que el punto de condensación o de rocío es la temperatura y presión a las que la mezcla del vapor comienza a condensar.

Existen diversos algoritmos para calcular estos puntos a través de la elaboración de rutinas con algún lenguaje de programación (Fortran, C++, VBA) y así poder graficar las curvas de equilibrio. Estos algoritmos se pueden encontrar en la literatura como en Walas.

3.2 Visual Basic for Applications

3.2.1 Ventajas de Programación con Visual Basic for Applications

Microsoft Visual Basic para aplicaciones (VBA) es el mando a distancia de Microsoft Excel 2000. Evidentemente, puede usar Excel sin haber usado nunca VBA, pero el <<mando a distancia>> de VBA puede conseguir que el uso de Excel se realice de una manera más adecuada y puede aprovechar opciones a las que no tiene acceso a través de los controles estándar del <<panel principal>>. (Jacobson, R., 2002)

La manera en que se comunican ambos lenguajes es por medio de *Macros* y sirven para darle a Excel una serie de tareas pre-programadas en VBA que lo vuelven más dinámico y versátil. Ejemplos de estas tareas son el guardado automático del archivo que se está utilizando con el fin de poder recuperarlo en caso de una falla eléctrica, las opciones de inserción de texto o imágenes provenientes de otro programa, así como todas las funciones automáticas de Excel. La conexión entre estos programas (Excel y VBA), le da la opción al usuario de programar tareas que le permitan automatizar diferentes actividades

dentro de Excel, que de otra manera, serían muy largas y tediosas; por ejemplo el manejo de bases de datos muy extensas o la automatización de hojas de cálculo con mucha información.

Visual Basic para aplicaciones, es una versión especial de Visual Basic que se encuentra incluida en cualquier aplicación de Office, como es el caso de Excel. Jacobson explica en su libro que, a diferencia de la versión independiente de Visual Basic, una macro de VBA no se puede ejecutar independientemente de su aplicación principal. VBA, aunque no tiene ningún vínculo con los elementos internos de su aplicación anfitriona, necesita de ella para poder ejecutar tareas programadas. La aplicación anfitriona, en este caso Excel, es manipulada por VBA por medio de un grupo especial de comandos que se conocen como biblioteca de objetos. Según Webb, los objetos son las herramientas de construcción de la interfaz de Excel, dentro de las cuales se incluyen aspectos visibles, como las hojas de cálculo, y los conceptos invisibles, como la configuración de la hoja. Webb también comenta en su libro que estos objetos agrupan diferentes características de la aplicación en jerarquías que son más entendibles que cualquier otro lenguaje de programación conteniendo miles de instrucciones y comandos.



Figura 3.5 VBA se comunica con la biblioteca de objetos de Excel (Tomada de Jacobson, R. 2002).

Además de los objetos existentes en Excel, VBA proporciona la facultad al usuario de crear sus propios objetos como lo son botones, barras de menú, etiquetas, cuadros de diálogo y “scrolls” (barras de desplazamiento), con el fin optimizar y personalizar su hoja de cálculo. Es posible también, asociar tareas programadas a estos objetos con el propósito de ejecutarlas de manera más rápida y de proporcionar una interfaz más amigable de utilizar.

3.2.2 Excel y VBA como Leguajes de Programación del Software Educativo (SELV)

Es propósito de este trabajo hacer que el software realizado, esté disponible a los estudiantes de Ingeniería Química para que sirva como herramienta de estudio. Por este motivo se buscó un lenguaje de programación que pudiera ser de fácil acceso y que no hubiera necesidad de una infraestructura especial para poder utilizar el software. Excel y VBA están disponibles a todo el público y se encuentran instalados en casi la totalidad de las computadoras que pudieran llegar a ser utilizadas con este propósito. Esto brinda la posibilidad de que el software educativo pueda llegar a más estudiantes y se convierta en un recurso valioso de estudio.

Por otra parte, Excel es un programa poderoso con la capacidad de manejar bases de datos muy extensas, como las que se utilizan en este proyecto. VBA es un lenguaje de programación que ya se encuentra disponible dentro de Office y tiene muy buena comunicación con Excel, brindando una gran ventaja que cualquier otro lenguaje sería incapaz de ofrecer. Además, VBA es un lenguaje muy sencillo de utilizar y fácil de comprender que, aunque no sea muy poderoso ni presente tantas opciones de programación (por ejemplo Visual C++), posee lo necesario para programar una interfaz amigable al usuario.