

6 ANÁLISIS Y DISCUSIÓN DE RESULTADOS

6.1 Análisis de las Superficies 3-D

Las superficies 3-D realizadas son el instrumento principal para la enseñanza del ELV dentro del programa SELV. Son un instrumento valioso y una aportación importante ya que permiten al estudiante visualizar todo el comportamiento de una mezcla hasta el punto crítico a lo largo de sus diferentes composiciones, además de lograr que se entienda que los diagramas 2-D son una proyección de la superficie 3-D de la que provienen. Esto da una idea completa del comportamiento en el ELV y sirve para entender la base teórica de donde proviene. También, expone de manera clara la relación que existe entre los conceptos termodinámicos que generaron a los diagramas 3-D y entre el comportamiento físico de las mezclas binarias. Permite entender la dependencia que hay entre las condiciones de presión y temperatura y las propiedades termodinámicas como lo son la entalpía y la entropía.

Cada superficie, enseña al estudiante a identificar la región de burbuja y de rocío, así como la de envolvente crítica (sólo en el caso de la mezcla Metano-Butano) y es posible estudiar los efectos de cambios de presión y temperatura en el ELV, que de otra manera, sería complicado entender con el diagrama 2-D correspondiente.

En las figuras 6.1, 6.2, 6.3 y 6.4, se presentan los diagramas PTxy de cada mezcla que se estudió; estos diagramas son útiles para explicar los diferentes tipos de mezclas ya que ejemplifican cada una de ellas: mezcla ideal que sigue la Ley de Raoult, mezcla desviada de la Ley de Raoult en la fase líquida y dos mezclas azeotrópicas, una mezcla con mínimo azeotrópico en isotermas y otra con máximo azeotrópico en isotermas. La figura 6.5 brinda información adicional debido a que se encuentra la envolvente crítica presente. La envolvente crítica en la superficie 3-D, es útil para comprender el efecto de presión y temperatura de ésta en el ELV.

Las figuras 6.3 y 6.4 son ejemplo de mezclas azeotrópicas en el diagrama PTxy. A través de ellas, es posible ver el efecto azeotrópico en 3-D, visualizar el punto de inflexión azeotrópico y su evolución de isoterma en isoterma hasta la vecindad del punto crítico de la mezcla.

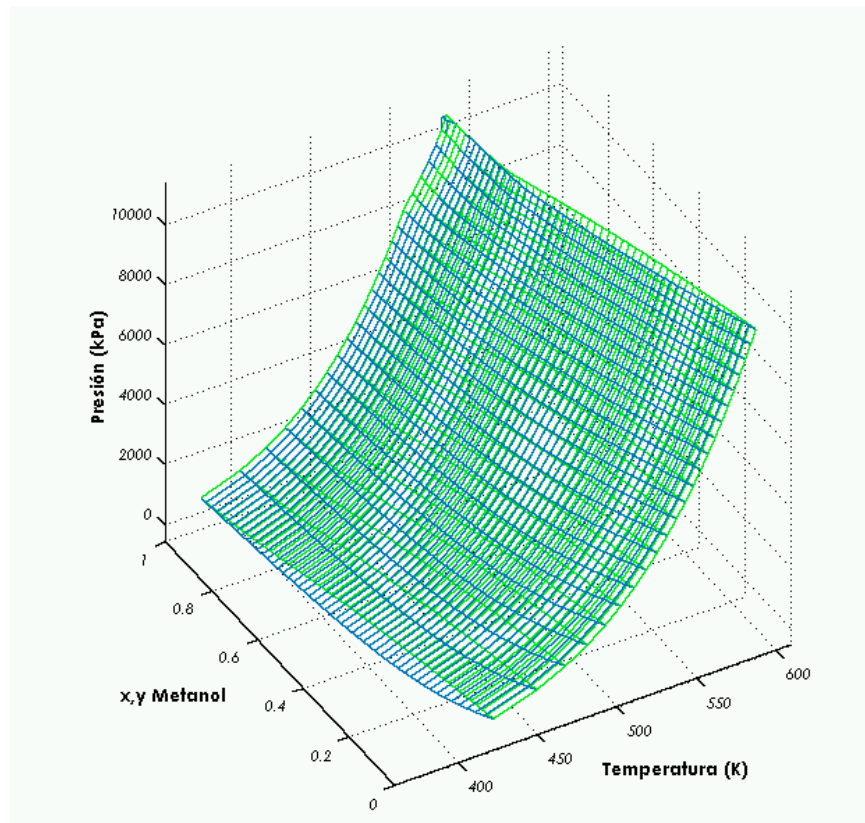


Figura 6.1 Diagrama PTxy de la mezcla Metanol-Agua. Mezcla desviada de la Ley de Raoult en la fase líquida.

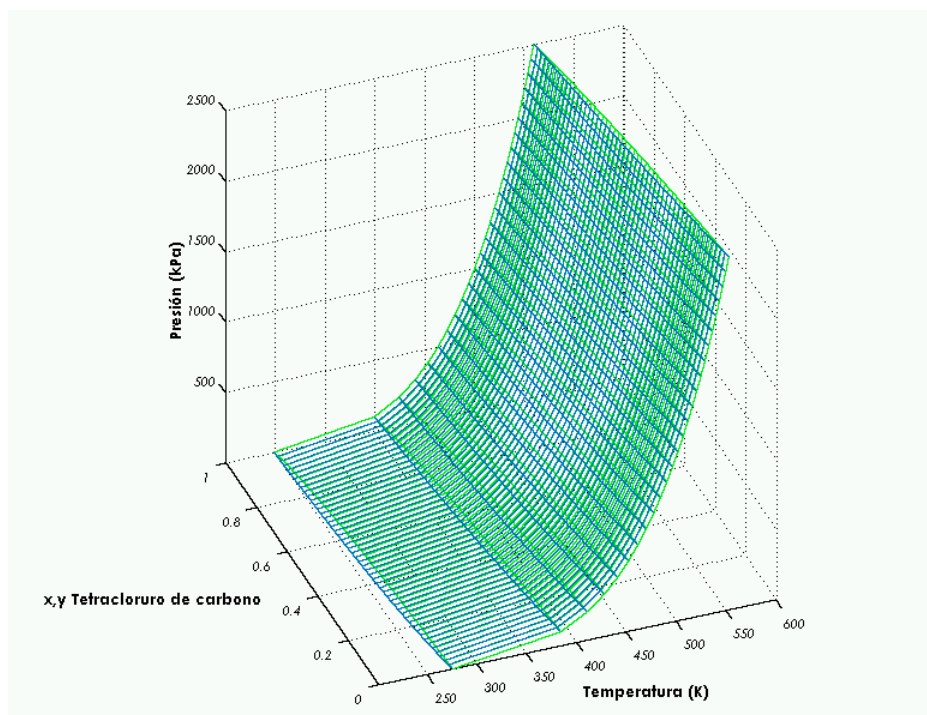


Figura 6.2 Diagrama PTxy de la mezcla Tetracloruro de carbono-Tolueno. Mezcla que sigue la Ley de Raoult.

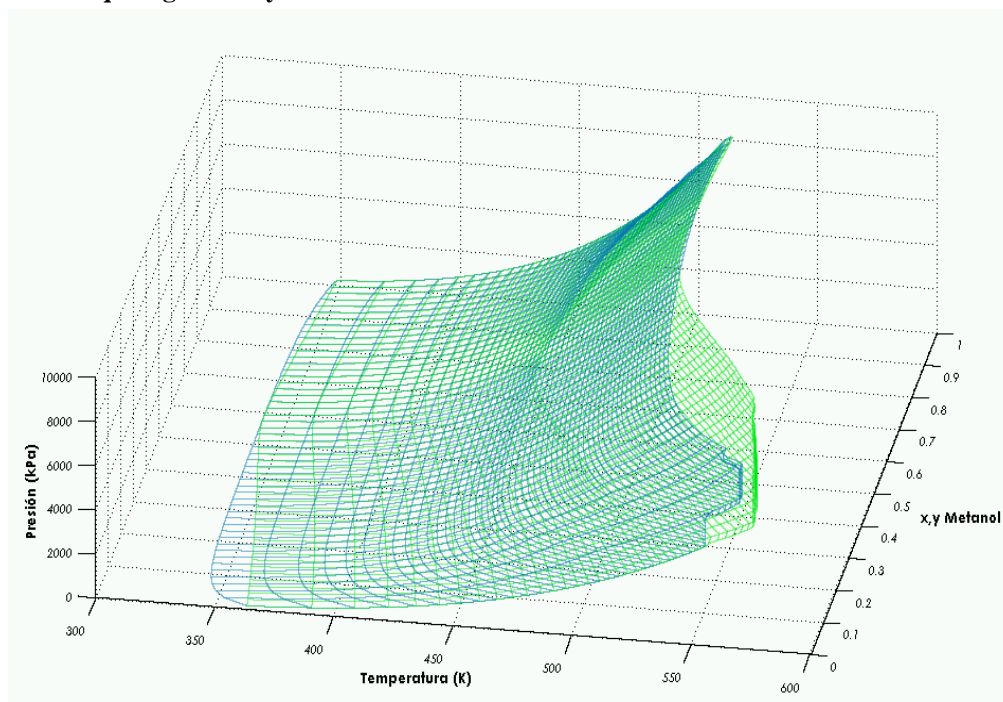


Figura 6.3 Diagrama PTxy de la mezcla Metanol-Tetracloruro de carbono. Mezcla con máximo azeotrópico en isotermas.

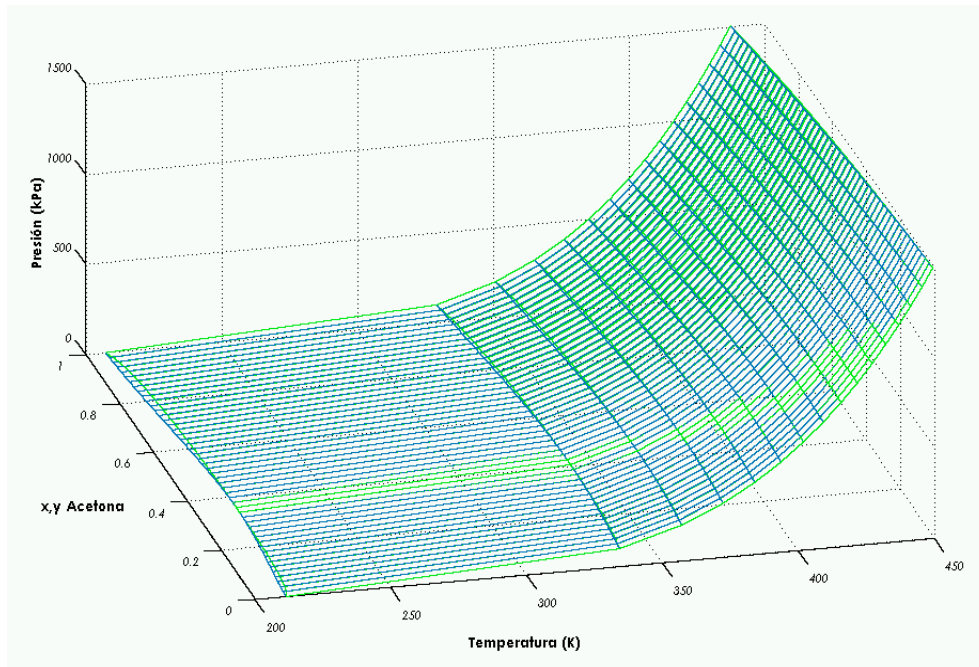


Figura 6.4 Diagrama PTxy de la mezcla Acetona-Cloroformo.
Mezcla con mínimo azeotrópico en isotermas.

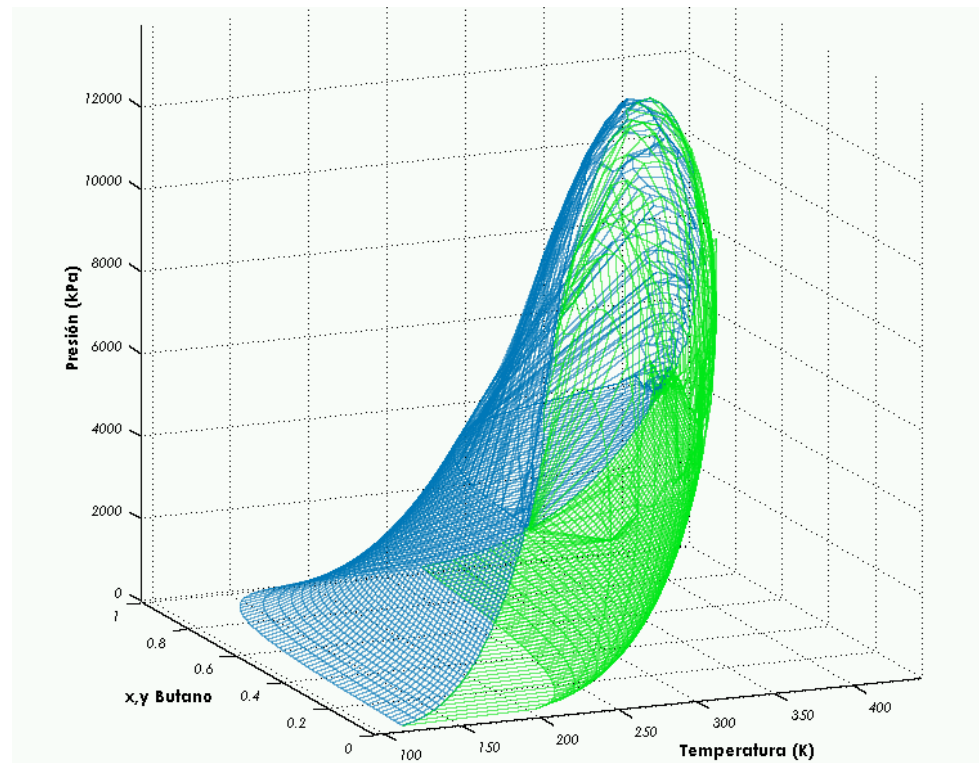


Figura 6.5 Diagrama PTxy de la mezcla Metano-Butano.
Mezcla con envolvente crítica.

Se desarrollaron las superficies PHxy (Fig. 6.6), TSxy (Fig. 6.7), PVxy (Fig. 6.8), UVxy (Fig. 6.9) y HSxy (Fig. 6.10) para cada mezcla estudiada y están disponibles para su uso en el programa SELV. Por medio de estas superficies, es posible obtener información sobre estas propiedades termodinámicas en el ELV y queda claro al estudiante que, sin importar el tipo de mezcla que se esté estudiando (ideales, desviadas en fase líquida o azeotrópicas), los diagramas tanto en 2-D como en 3-D, serán muy parecidos; por ejemplo, el comportamiento azeotrópico de una mezcla no estará presente en ninguno de estos diagramas, sólo en los diagramas PTxy. En el Apéndice B se pueden consultar todas las superficies 3-D generadas.

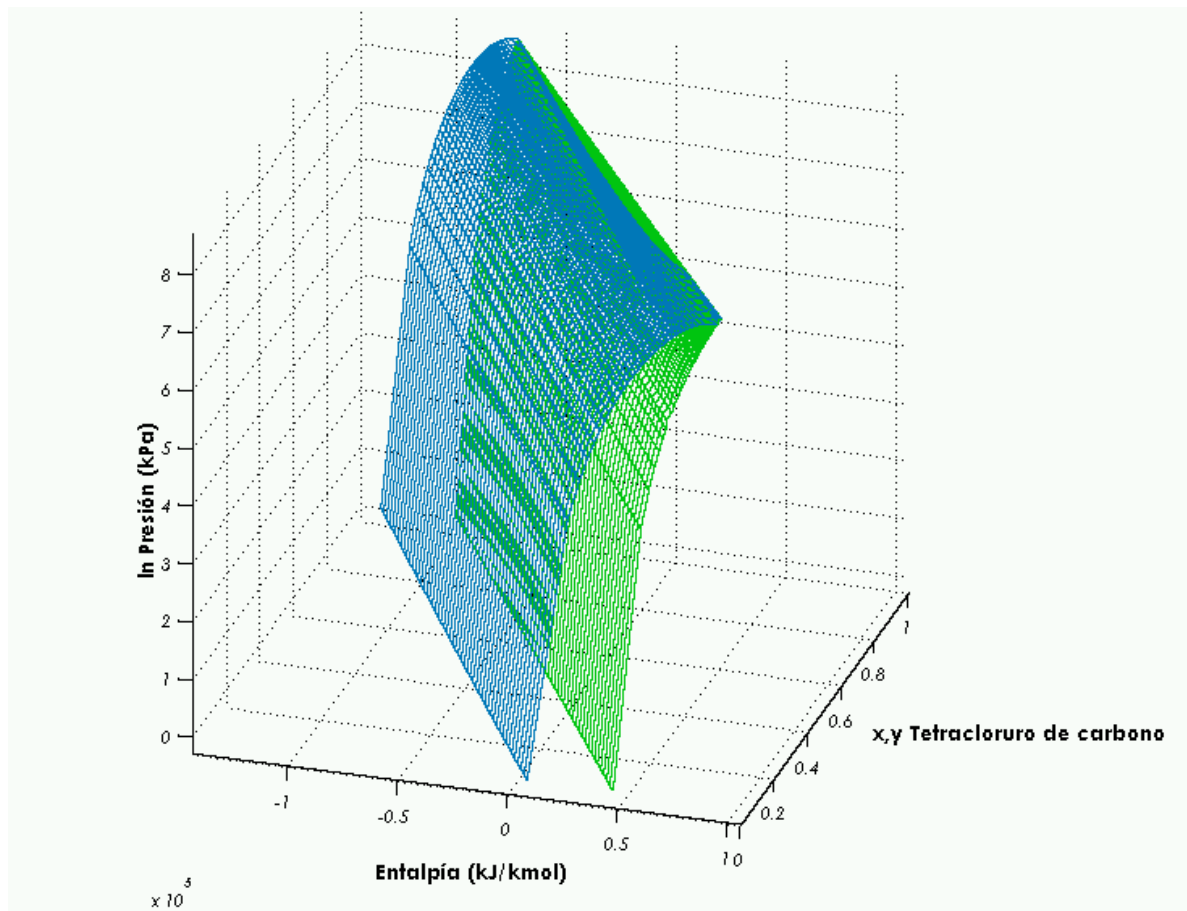


Figura 6.6 Diagrama PHxy de la mezcla Tetracloruro de carbono-Tolueno.

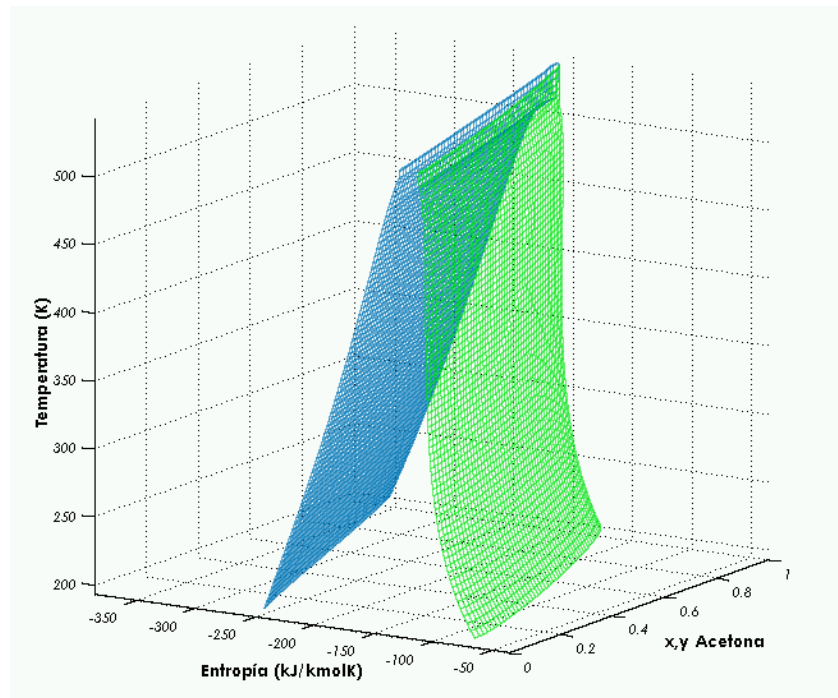


Figura 6.7 Diagrama TSxy de la mezcla Acetona-Cloroformo.

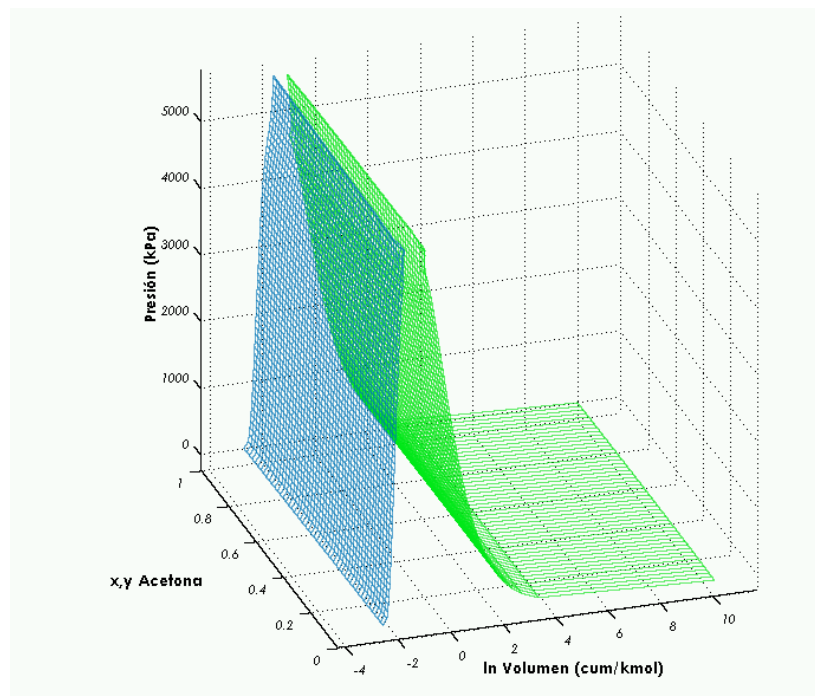


Figura 6.8 Diagrama PVxy de la mezcla Acetona-Cloroformo.

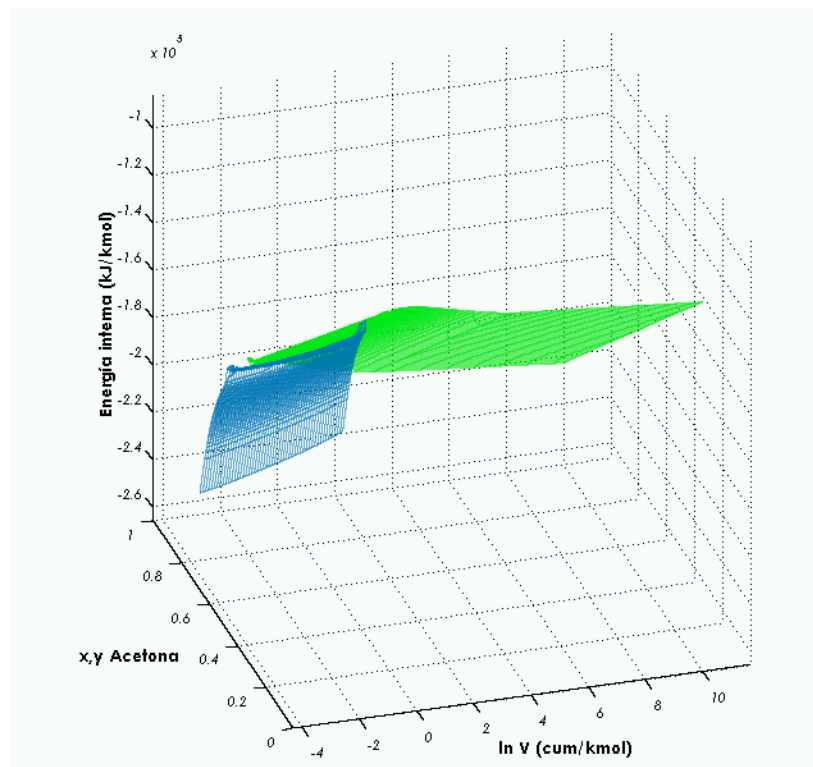


Figura 6.9 Diagrama UVxy de la mezcla Tetracloruro de carbono-Tolueno.

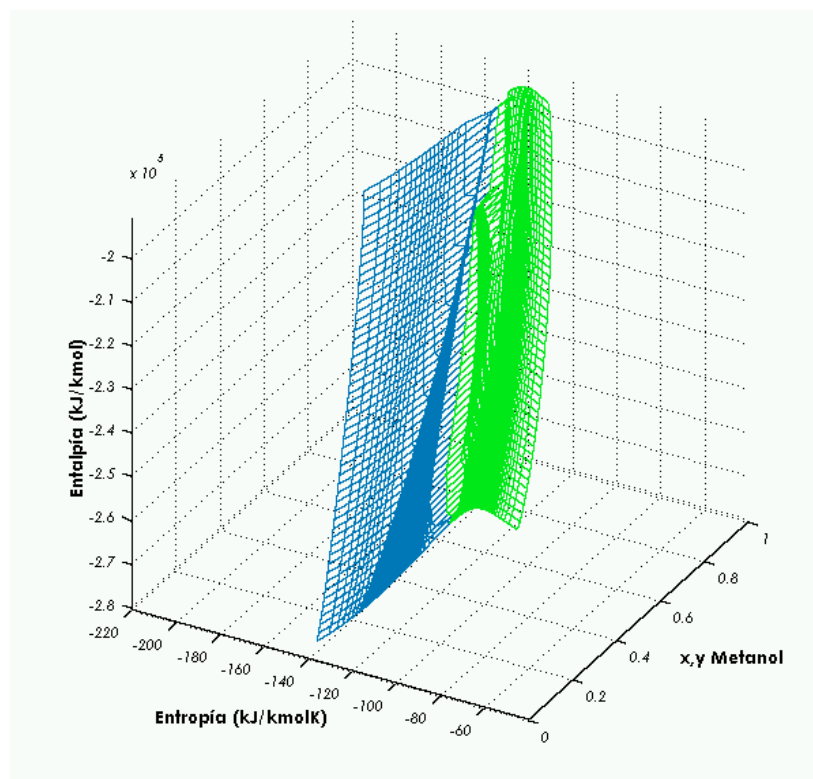


Figura 6.10 Diagrama HSxy de la mezcla Metanol-Agua.

6.2 Problemas de Simulación y Graficación

Al simular los valores que conformarían las bases de datos correspondientes a cada superficie 3-D, se presentaron problemas de simulación con los que se tuvo que lidiar a lo largo del trabajo. El primer problema que se encontró fue que, debido a problemas de convergencia de los métodos numéricos, el simulador de procesos Aspen fue incapaz de calcular todos los valores correspondientes a cada composición deseada. Las bases simuladas resultaron tener regiones en las cuales se carecía de valores y era imposible seguir la secuencia de los datos. Esto repercutió en la graficación debido a que Matlab sólo puede graficar matrices completas. Se tuvo que recurrir a diferentes métodos para completar dichas bases de datos y poder graficar las superficies 3-D. El diagrama TPxy de la mezcla Metano-Butano (Figs. 6.11 y 6.12), fue imposible de graficar debido a que la base de datos correspondiente resultó estar demasiado incompleta y ninguno de los criterios utilizados para completarlas funcionó para lograr una superficie aceptable.

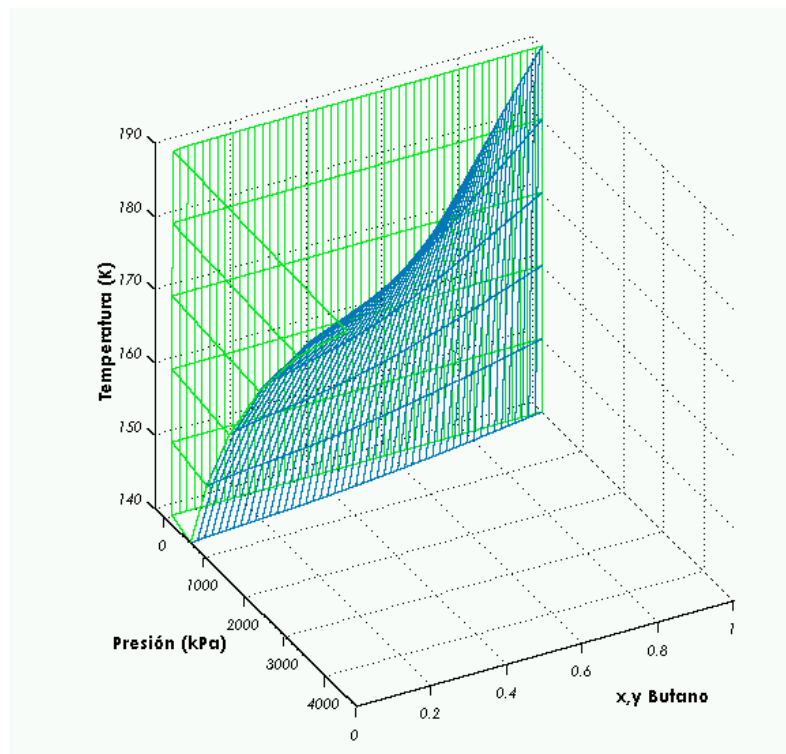


Figura 6.11 Diagrama TPxy de la mezcla Metano-Butano graficado hasta donde la base genérica estuvo completa.

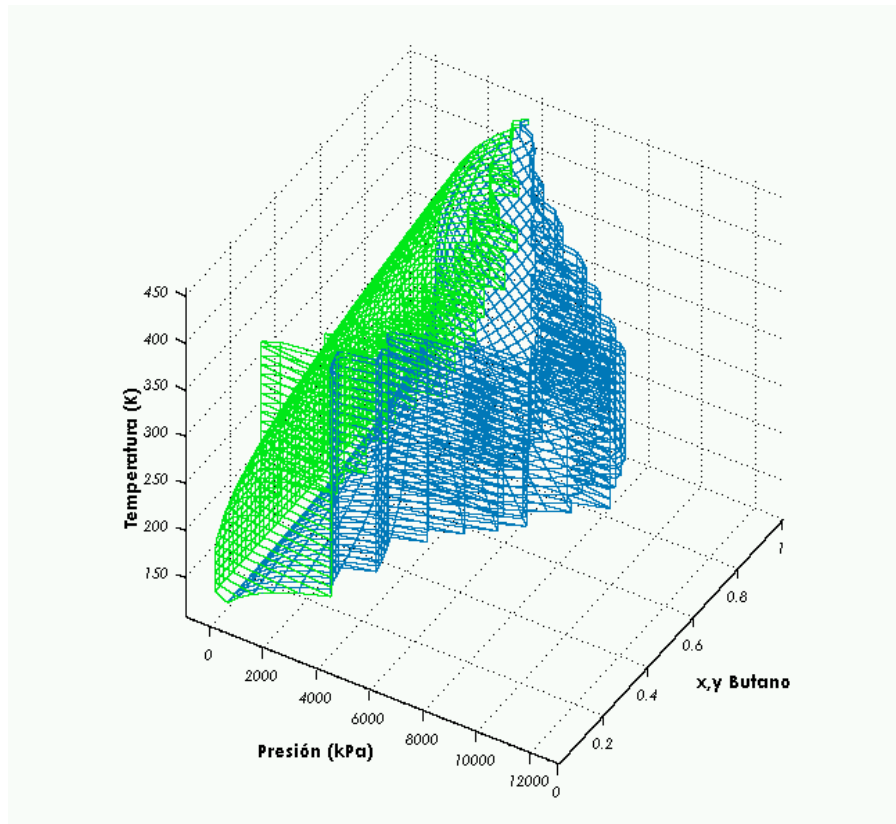


Figura 6.12 Diagrama TPxy de la Mezcla Metano-Butano donde se muestra que fue imposible completar la base de datos para lograr una figura que luciera bien.

Otro problema con el que se encontró al analizar los datos obtenidos de la simulación, fue que hubo varios valores que eran incorrectos, dado que eran de alrededor de tres órdenes de magnitud del valor anterior en la secuencia. Esto llevó a la conclusión de que esa región de valores de la base de datos no era confiable y se tuvo que borrar y completar con alguno de los criterios utilizados y referidos en la parte de metodología del presente escrito.

La simulación de la envolvente crítica resultó ser el mayor problema de todos debido a que fue imposible empatar los valores obtenidos de esta simulación con la secuencia de los valores obtenidos en el análisis genérico de la misma mezcla. Esto ocasionó que se tuvieran que graficar ambas superficies, genérica y envolvente, juntas para poder determinar cuál de las dos era más confiable. Se encontró que las envolventes de todas las

mezclas menos una, la mezcla de Metano-Butano, no eran confiables para ser utilizadas en la generación de las superficies. Esto fue debido a que el valor más alto de la envolvente correspondiente, era mucho menor al valor más alto de la parte genérica de la misma, siendo que esto es incongruente en la tendencia de la superficie ya que la envolvente crítica se debe presentar aún más arriba que la parte genérica.

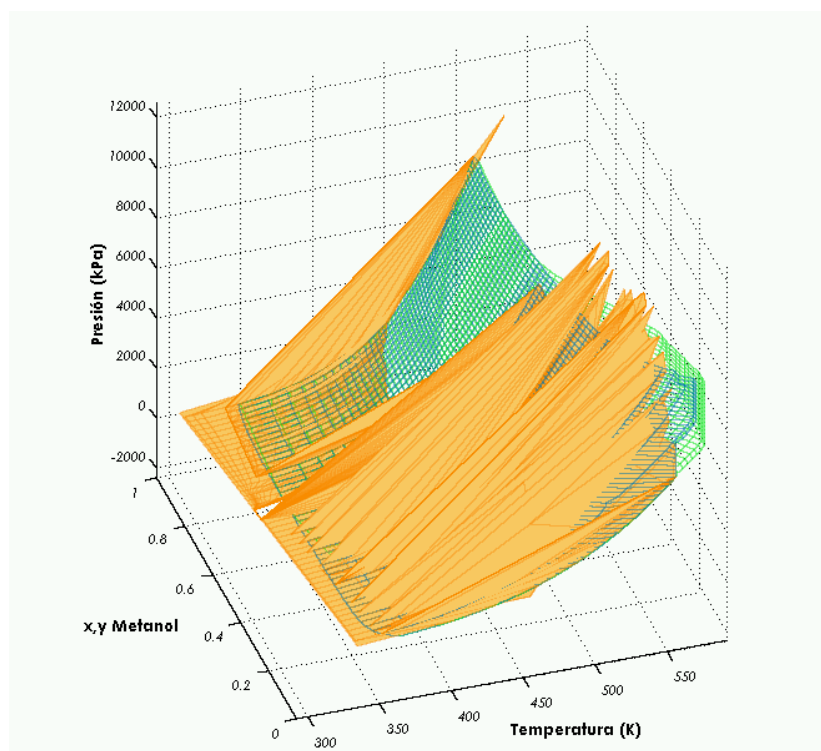


Figura 6.13 Diagrama PTxy de la mezcla Metanol-Tetracloruro de carbono con envolvente mostrando que fue imposible juntar satisfactoriamente ambas gráficas.

La superficie de la mezcla Metano-Butano fue la única donde se logró añadir la envolvente crítica pero presentó un pequeño problema: al hacer la simulación de la envolvente, se encontró que es imposible seleccionar cuáles y cuántos puntos se desean simular, resultando en una gráfica donde, al llegar a la región de la envolvente crítica, se pierde la cuadrícula y se presenta un enredo de líneas que hacen a la superficie lucir menos atractiva. En la figura 6.5, se puede apreciar la apariencia final de esta superficie.

Finalmente, se encontró que algunos de los criterios de selección de mezclas a estudiar en el trabajo de tesis no fueron del todo correctos ya que las regiones de burbuja y rocío de algunas de las superficies resultaron estar muy juntas entre sí, haciendo que fuera más difícil percibir la diferencia entre ambas regiones. Esto se debió a que no se tomó en cuenta la proximidad entre los puntos triples y críticos de los compuestos puros que conforman la mezcla correspondiente.

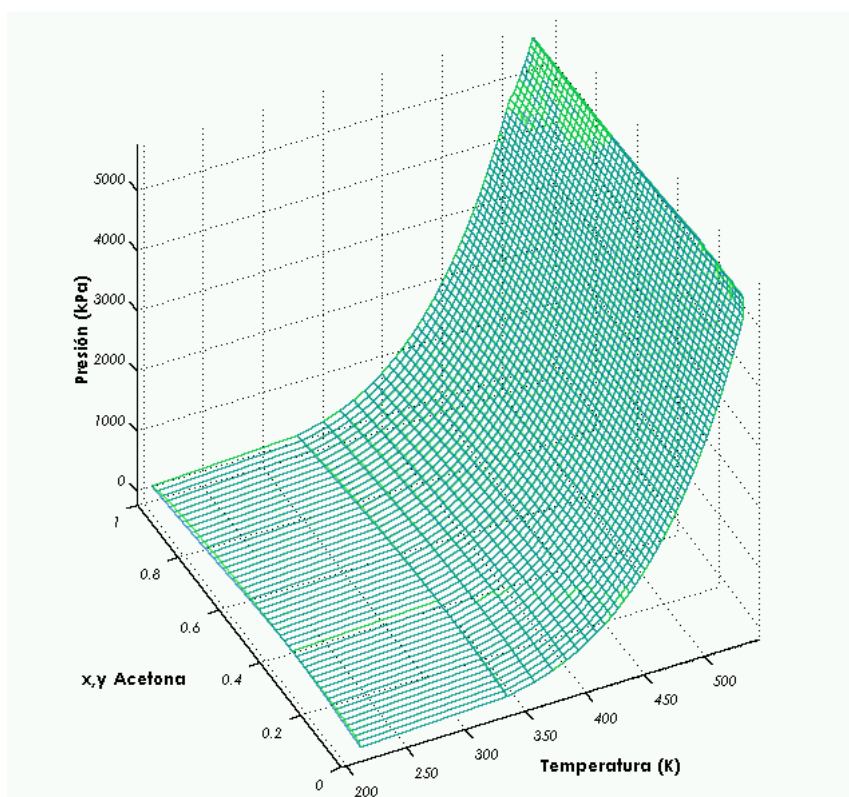


Figura 6.14 Diagrama PTxy de la mezcla Acetona – cloroformo.

6.3 Objetivos, Alcances y Resultados de la Interfaz

El programa SELV, es un intento más en la búsqueda de herramientas de aprendizaje de diferentes conceptos de termodinámica que no son tan obvios en su entendimiento. Este programa fue realizado a lo largo de este proyecto con el objetivo de que los estudiantes de ingeniería química cuenten con un instrumento de aprendizaje que les brinde algo más tangible para su entendimiento acerca del equilibrio líquido-vapor (ELV) que solamente la exposición del tema por el maestro. Se busca que los estudiantes, a través del uso del programa, sean capaces de identificar y entender el punto de rocío y de burbuja, que comprendan lo que es la envolvente crítica de las mezclas binarias en el ELV y su comportamiento, tengan la habilidad de relacionar los conceptos termodinámicos derivados del ELV con los gráficos tanto 2-D como 3-D, y posean una idea clara de los efectos de cambios de presión y temperatura en el ELV. Además, tendrán nociones de cómo se debe hacer una validación de un método de predicción de propiedades para identificar el método con mayor exactitud para la mezcla con la que estén trabajando.

Por el momento, este programa tiene la capacidad de servir como un complemento en el aprendizaje y puede ser utilizado ya sea para dar asesorías de la clase teórica correspondiente al tema, o como una herramienta expositiva para el maestro. El maestro ya no tiene que recurrir a dibujar bosquejos de las superficies en el pizarrón sino que puede mostrar las gráficas y las animaciones, dando algo más tangible y claro de entender a los alumnos. El programa tiene el potencial de llegar a ser un tutorial y ser capaz de exponer el tema por sí solo, teniendo a un asesor como respaldo, siendo el caso de que el proyecto se continúe y sus alcances se expandan.

Se mostró el programa a diez estudiantes de ingeniería química de la Universidad de las Américas que ya cursaron la materia, con el fin de conocer la aceptación que puede tener el programa en dado caso de ser ofrecido a la comunidad estudiantil como recurso educativo, se encontró que la aceptación es muy alta y todos ellos afirmaron que el software presenta un gran potencial y de ser utilizado en las clases, les ayudaría a

comprender el tema de forma más clara. Dentro de sus opiniones, se obtuvieron muchas sugerencias de posibles mejoras al programa, mismas que son expuestas como recomendaciones en este escrito, para ser tomadas en cuenta en futuros proyectos de tesis. Cabe aclarar que esta demostración del programa, se realizó con el carácter de cualitativo y no de cuantitativo, por lo que no se pretendió en ningún momento hacer un análisis estadístico de la aceptación del programa en la comunidad estudiantil sino que se deseaban conocer opiniones objetivas a cerca del programa y que fueran externas a los realizadores del mismo.

Es necesario evaluar la efectividad del software como instrumento educativo y realizar estudios del nivel de aprendizaje con el programa, comparados contra el aprendizaje a través de las clases convencionales y realizar un análisis estadístico de los resultados, con el propósito de conocer hasta qué punto es viable el uso del software. Este estudio no estaba dentro de los alcances de este trabajo pero es recomendable su realización. Más acerca de este estudio se encuentra referido en la parte de recomendaciones de este escrito.

6.4 Problemas de Programación con VBA

A lo largo del desarrollo del Software Educativo de Equilibrio Líquido-Vapor (SELV), se encontraron diferentes problemas de programación. Aunque el lenguaje VBA es un lenguaje muy sencillo de utilizar y las instrucciones son claras, el lenguaje presentó algunas deficiencias. El manejo de títulos para los gráficos 2-D fue tedioso y complicado, ya que era necesario que se mostraran los títulos y leyendas para los diferentes gráficos posibles de generar con el programa. Se recurrió a la utilización de etiquetas pre-diseñadas y concatenación de celdas para este efecto. Otro problema fue que no se pueden comunicar los objetos insertados de Excel con los objetos de VBA, esto es, los “User Forms” de VBA no se pueden utilizar para mandar llamar botones o etiquetas creados en Excel.

También, presentó un reto lograr la creación de barras de menú de opciones que permanecieran habilitadas cada vez que se iniciara el programa ya que la configuración de las barras de menú de Excel permanecen en la computadora donde se encuentra instalado y no se guardan con el programa al ser finalizado. Finalmente, se encontró una instrucción de VBA que es capaz de realizar esta función.

A pesar de que se encontraron otras dificultades durante la programación del software, ninguna fue imposible de solucionar. VBA, es un lenguaje práctico para programar y es posible realizar una infinidad de tareas, se encontró que el mayor reto en la elaboración de la interfaz fue el aprendizaje y familiarización del lenguaje de programación.