

Software para realizar cálculos en procesos de extracción líquido – líquido

Katia Paternina Palacio¹ Adalberto Matute Thowinson² & Alexander Baldiris de Arco³

¹ M.Sc. en Software Libre. Universidad Autónoma de Bucaramanga convenio Universidad Oberta de Catalunya (España), Docente de tiempo completo Universidad de San Buenaventura Cartagena. Correo electrónico: kpaternina@usbctg.edu.co

² M.Sc. en Ingeniería con énfasis en Sistemas de Calidad y productividad. Instituto Tecnológico de Estudios Superiores de Monterrey - TEC (Mexico), Docente de tiempo Universidad de San Buenaventura Cartagena. Correo electrónico: amatute@usbctg.edu.co

³ Ingeniero Químico. Cand. Especialista Refinación de Petróleo y Petroquímicos Básicos. Universidad de San Buenaventura Cartagena. Correo electrónico: abaldiris@hotmail.com

RESUMEN

En este artículo se describe la ruta para desarrollar e implementar un software para la realización de cálculos matemáticos y geométricos relacionados con los balances de materia del proceso de separación difusional denominado extracción líquido – líquido. Inicialmente se comenta el método tradicional de cálculo para los balances de materia basado en métodos geométricos manuales y la dificultad inherente a los mismos, los cuales causan incertidumbre en los resultados, lo que no es coherente con las herramientas tecnológicas basadas en TIC'S disponibles en la actualidad, por lo que el desarrollo de un software es una necesidad sentida en el estudio de esta operación unitaria. Para la elaboración del software, primero se establecen los cálculos de balances de materia inherentes a cada uno de los métodos de extracción con disolvente, se define el comportamiento del triángulo equilátero en el plano cartesiano en los ejes (x, y) a través de ecuaciones lineales que permitan la generación del triángulo y la ubicación de las concentraciones de los componentes y posteriormente se da paso a establecer los algoritmos que constituyen la bases del software utilizando la metodología de desarrollo ágil adoptada por la programación extrema (XP) aplicando cada una sus fases.

Palabras Claves: Extracción liquido-liquido, programación extrema (XP), diagramas triangulares, disolvext.

ABSTRACT

This article describes the path to develop and implement a software for performing mathematical and geometric calculations related to the material balances for diffusional separation process called liquid - liquid extraction. Initially in the document the traditional method for calculating the material balances based on manual geometric methods and the difficulty inherent in them is discussed, which cause uncertainty in the results, which is not consistent with the technological tools based on ICT's available at present, so the development of a software is a felt need in the study of this unit operation. For the preparation of the software, first calculate material balances inherent in establishing each of the methods of solvent extraction, the behavior of the equilateral triangle in the coordinate plane defined by the axes is set (x, y) through linear equations that allow the generation of the triangle and the location of the concentrations of the components and then gives way to establish the algorithms that form the basis of the software using the methodology adopted by agile extreme programming (XP) each applying its phases.

KEYWORDS: Liquid-liquid extraction, extreme programming (XP), triangular diagrams, disolvext.

1. INTRODUCCIÓN

La Ingeniería Química tiene como principio la aplicación de las ciencias físicas, junto con los principios de economía y relaciones humanas en campos que abarcan en forma directa a los procesos y equipos industriales en los cuales se trata la materia con el fin modificar su estado, contenido de energía o composición. Cada proceso puede ser cualquier conjunto de etapas que impliquen modificaciones de la composición química o ciertos cambios físicos en el material que se va a preparar, procesar, separar o purificar. Algunas labores de la Ingeniería Química involucran la selección de las etapas adecuadas en el orden apropiado para formular un proceso capaz de conducir a la elaboración de un producto químico, una separación o una purificación. Ya que cada una de las etapas que constituyen un proceso se encuentra sujeto a variaciones, se debe especificar las condiciones exactas bajo las cuales deben llevarse a cabo.

Una de las operaciones más frecuentes a nivel industrial es la extracción líquido-líquido o extracción con disolvente, que consiste en la separación de los constituyentes de una disolución líquida por contacto con otro líquido inmiscible que preferiblemente disuelve a uno de los constituyentes de la disolución original, dando lugar a la aparición de dos fases líquidas inmiscibles de diferentes densidades. Puesto que existen diferentes métodos para llevar a cabo el contacto entre los flujos de las disoluciones en el proceso de extracción con el fin de obtener un producto óptimo, trae como consecuencia variación en las formas de utilización del diagrama de triángulo equilátero como método gráfico seleccionado en el presente proyecto para la obtención de los cálculos en el diseño del proceso.

Debido a que en los métodos gráficos para realizar los cálculos de diseño, con frecuencia los valores numéricos se obtienen por observación y medida, estos valores, por muy cuidadosa que sea la observación y por muy grande que sea la precisión de los sentidos y de los instrumentos de precisión geométrica empleados como en los casos de los curvígrafos, reglas y lupas, vienen siempre afectados por un conjunto de errores que no en todos los casos es posible determinar, debido a varias causas de muy diversa naturaleza como lo son: deficiencias de los aparatos de observación, variación de las condiciones ambientales, defectos de los sentidos o distracciones del observador. Si se repite un cierto número de veces una observación en la que se trata de determinar el valor de una magnitud, efectuando todas las observaciones con los mismos métodos, aparatos y con el máximo esmero posible, se obtendrán en general resultados distintos en las diferentes observaciones. Se presenta así el problema de definir, partiendo de estos datos de observación, cual ha de tomarse como valor de la magnitud medida, el valor más probable, de modo que el error cometido al tomar dicho valor más probable como medida de la magnitud en cuestión sea el menor posible.

La búsqueda y utilización de métodos gráficos y ecuaciones que ayuden a la obtención de datos que permitan calcular el número de etapas, composiciones y cantidades de materia en la operación unitaria de extracción líquido – líquido que se aproximen a los atributos reales, data de 1922 cuando fue aprobada la epistemología de la Ingeniería Química que hacía parte del informe que A. D. Little presentó en 1915 al M.I.T., y muchos autores proponen metodologías para la obtención de resultados aproximados en el proceso donde cabría citar a Kurt Alders, Frank Sherwood Rowland, E Janecke, Tarasenkow y Pulsen quienes han desarrollado métodos gráficos para simplificar la obtención de respuestas

En estas circunstancias es necesario efectuar un proceso matemático que permita calcular los valores de las magnitudes de los datos obtenidos en la utilización del método gráfico sin necesidad de recurrir a la observación de gráficos para obtener resultados exactos y precisos, ya que los resultados obtenidos en la aplicación de cálculos para el diseño del proceso de extracción utilizando la observación conlleva a grandes desviaciones en las cantidades suministradas en los

flujos del proceso y datos de diseño, aumentando su presupuesto económico y disminuyendo su capacidad de operación.

3. METODOLOGÍA

El desarrollo del software se realiza utilizando la Programación Extrema (XP) que es una metodología ágil basada en cuatro principios: simplicidad, comunicación, retroalimentación y valor. Este método es típicamente atribuido a Kent Beck, Ron Jeffries y Ward Cunningham, considerados los propulsores de la XP y autores de los libros más influyentes sobre el tema, (Fernández, 2002). El objetivo de XP son grupos pequeños y medianos de construcción de software en donde los requisitos aún son muy ambiguos, cambian rápidamente o son de alto riesgo. XP busca la satisfacción del cliente tratando de mantener durante todo el tiempo su confianza en el producto. Además, sugiere que el lugar de trabajo sea una sala amplia, si es posible sin divisiones (en el centro los programadores, en la periferia los equipos individuales). Una ventaja del espacio abierto es el incremento en la comunicación y el proporcionar una agenda dinámica en el entorno de cada proyecto, (ANAYA, 2007)

A partir de los métodos numéricos, ecuaciones de balance de masa y ecuaciones de balance de componentes utilizados para la realización de cálculos inherentes a los distintos métodos de extracción con disolvente, se procede al desarrollo del software utilizando la metodología ágil adoptada aplicando cada una sus fases: Exploración, planeamiento, producción, mantenimiento y muerte.

Exploración: en esta fase, los clientes diseñan a grandes rasgos las historias del usuario que son de interés para la primera entrega del producto. El equipo de desarrollo se familiariza con las herramientas, tecnologías y prácticas que se utilizarán en el proyecto. Se prueba la tecnología y se exploran las posibilidades de la arquitectura del sistema construyendo un prototipo.

Planificación de la entrega (Release): el cliente establece la prioridad de cada historia del usuario, y correspondientemente, los programadores realizan una estimación del esfuerzo necesario de cada una de ellas. Se toman acuerdos sobre el contenido de la primera entrega y se determina un cronograma en conjunto con el cliente.

Producción: requiere de pruebas adicionales y revisiones de rendimiento antes de que el sistema sea trasladado al entorno del cliente. Al mismo tiempo, se deben tomar decisiones sobre la inclusión de nuevas características a la versión actual, debido a cambios durante esta fase. Es posible que se rebaje el tiempo que toma cada iteración, de tres a una semana. Las ideas que han sido propuestas y las sugerencias son documentadas para su posterior implementación (por ejemplo, durante la fase de mantenimiento).

Mantenimiento: mientras la primera versión se encuentra en producción, el proyecto XP debe mantener el sistema en funcionamiento al mismo tiempo que desarrolla nuevas iteraciones. Para realizar esto se requiere de tareas de soporte para el cliente.

Muerte del proyecto: es cuando el cliente no tiene más historias para ser incluidas en el sistema. Esto requiere que se satisfagan las necesidades del cliente en otros aspectos como rendimiento y confiabilidad del sistema.

La realización del proyecto es importante para los estudiantes, docentes, investigadores e ingenieros de proceso en el área de Ingeniería Química ya que favorece en el ahorro de tiempo y obtención de datos más precisos a partir de los gráficos utilizados en el método de solución de problemas

relacionados con el proceso de extracción líquido - líquido, mejorando la información necesaria para las condiciones de control del proceso, así como en el diseño de equipos para que éste se lleve a cabo.

4. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

4.1. MÉTODO DE EXTRACCIÓN CON DISOLVENTE

4.1.1 Generalidades y fundamento del proceso de extracción líquido – líquido.

El proceso de extracción líquido-líquido de sistemas binarios es de suma importancia para los procesos industriales de separación basados en la transferencia de masa; su grado de aplicabilidad se relaciona con sus costos relativos al compararla con otras operaciones de transferencia de masa, tales como la destilación y la evaporación de las cuales es una alternativa en este ámbito industrial. Razón por la cual es indispensable contar con datos confiables y verificables en los cálculos inherentes al proceso de extracción, en especial los relacionados con los balances de materia.

La extracción líquido-líquido, también se conoce como extracción con disolventes, consistente en la separación de los componentes de una solución líquida por contacto con otro líquido parcialmente insoluble con él primero, pero en donde el componente a extraer se solubiliza preferentemente. Si las sustancias que componen la solución original se distribuyen de manera distinta entre las dos fases líquidas, se puede lograr cierto grado de separación, que puede incrementarse mediante el uso de contactos múltiples. En todas las operaciones de este tipo, la solución que se va a extraer se llama alimentación y disolvente el líquido con el cual se pone en contacto la alimentación. El producto de la operación rico en disolvente se llama extracto; el líquido residual de donde se separó el soluto es el refinado. (Problemas de Ingeniería Química Ocon Tojo). En la Figura 1 se muestra un esquema de las corrientes implicadas en la operación.

La clave de un proceso eficaz y eficiente reside en la posibilidad de disponer de un disolvente adecuado. Además de no ser tóxico, es económico y fácilmente recuperable, un buen disolvente deberá ser relativamente inmiscible con los componentes de la alimentación diferentes del soluto y poseer diferente densidad, (CORTÉS, 2007).

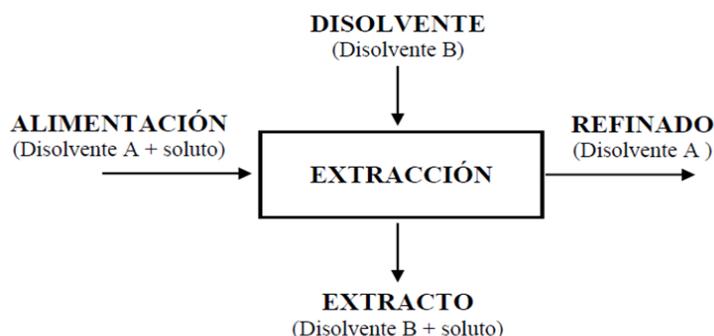


Fig. 1. Esquema idealizado de una operación de extracción líquido-líquido.

Fuente: Universidad Autónoma de Madrid. Área de Ing. Química. Extracción líquido – líquido

4.1.2 Equilibrio en el proceso de extracción líquido – líquido

En los cálculos de control del proceso, así como en el diseño de una operación de extracción líquido-líquido suele considerarse que el refinado y el extracto se encuentran en equilibrio. Los datos de equilibrio que deben considerarse serán como mínimo los correspondientes a un sistema ternario (dos disolventes y un soluto), con los disolventes inmiscibles o parcialmente inmiscibles entre sí.

Las formas habituales de recoger los datos de equilibrio en sistemas ternarios son los diagramas triangulares. En la Figura 2 se muestra un diagrama triangular equilátero. Los vértices del triángulo representan compuestos puros, un punto sobre un lado correspondería a una mezcla binaria y un punto en el interior del triángulo representaría una mezcla ternaria. La composición de una mezcla puede determinarse por lectura directa en el diagrama, tal como muestra la Figura 2. La concentración de los componentes en el diagrama se muestra como fracción molar o fracción másica.

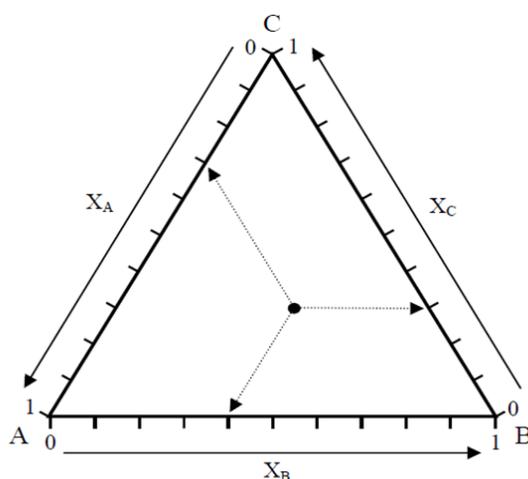


Fig. 2. Diagrama de equilibrio ternario: diagrama triangular equilátero.

Fuente: Universidad Autónoma de Madrid. Área de Ing. Química. Extracción líquido – líquido

La representación de los sistemas ternarios, dado su comportamiento físico-químico, puede dar origen a varias fases, en tal situación, los diagramas triangulares líquido-líquido presentan la denominada curva binodal o de solubilidad (Figura 3). Una mezcla representada por un punto situado por encima de la curva binodal estará constituida por una sola fase. Por el contrario, a una mezcla situada por debajo de la curva binodal le corresponden dos fases en equilibrio que se encuentran ligadas por una recta de reparto. Esta recta pasa por el punto mezcla y sus extremos sobre la curva binodal indican la concentración de las dos fases en equilibrio (Figura 3).

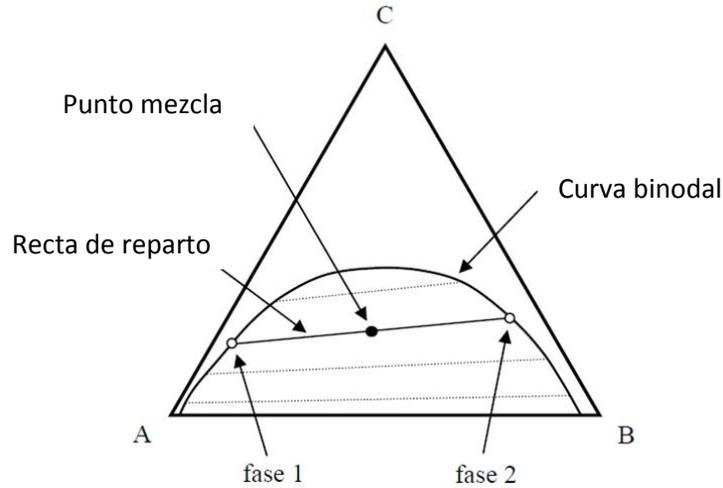


Fig. 3. Diagrama de equilibrio ternario para un sistema líquido-líquido.

Fuente: Universidad Autónoma de Madrid. Área de Ing. Química. Extracción líquido – líquido.

4.1.3 Cálculo de operaciones de extracción.

Los balances de materia de los procesos de extracción pueden calcularse sobre un diagrama ternario tal como se ha descrito, de acuerdo a la siguiente descripción: Sea F una corriente de alimentación, constituida por una disolución de un soluto C en un disolvente A, y una corriente de disolvente S, constituida por disolvente B puro. Ambas corrientes pueden ubicarse sobre el diagrama ternario tal como se indica en la Figura 4. En el equipo de extracción líquido-líquido, F y S son mezcladas para obtener una mezcla bifásica. El punto mezcla, M, es la suma de F y S, es decir, es combinación lineal de ellas, por lo que se encontrará situado sobre la recta que une F y S. Para situar el punto M bastará con resolver el balance de materia y calcular su composición. Una vez alcanzado el equilibrio, la composición de las corrientes de refinado, R, y extracto, E, obtenidas vendrá dado por los extremos de la recta de reparto en la curva binodal que pasa por el punto mezcla.

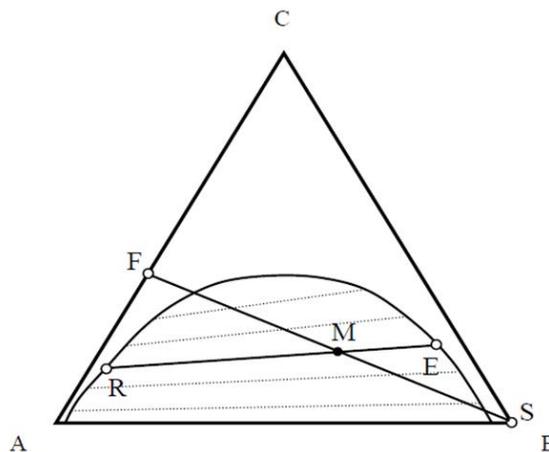


Fig. 4. Empleo de diagramas ternarios para el cálculo de operaciones de extracción

Fuente: Universidad Autónoma de Madrid. Área de Ing. Química. Extracción líquido – líquido

En una sola etapa de extracción no se logra la separación deseada, por lo que el refinado puede someterse a sucesivas etapas de extracción. Si las siguientes etapas de extracción se realizan con disolvente puro el procedimiento de cálculo sobre el diagrama ternario es idéntico al ya descrito. Así, por ejemplo, en una segunda etapa de extracción, el punto mezcla obedecería a la combinación lineal de R y S.

4.1.4 Contacto sencillo discontinuo

Una etapa, es un grupo de aparatos mecánicos en el interior del cual la solución que es objeto de extracción y un disolvente inmiscible se mezclan íntimamente para permitir que se acerquen al equilibrio y donde posteriormente se sedimenta la mezcla o se divide en dos fases líquidas inmiscibles, que son extraídas por separado. El esquema de flujo correspondiente a una etapa en contacto sencillo es el indicado en la Figura 5, donde la F es la cantidad de alimentación a tratar, B_1 la cantidad de disolvente, y x_f , x y y las concentraciones de la alimentación, refinado y extractor respectivamente, referidas al componente C o soluto, (OCON, 1978)

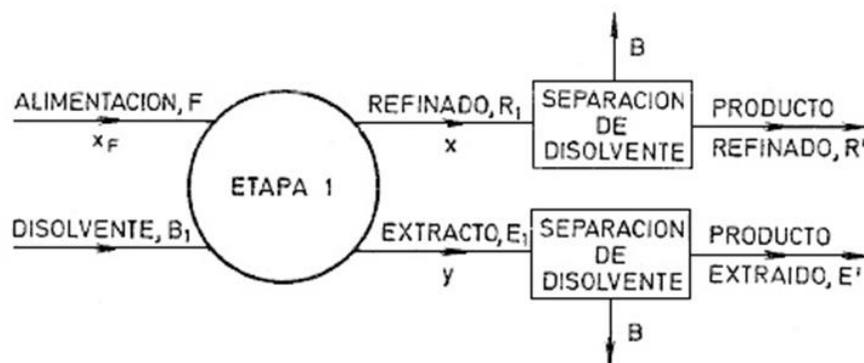


Fig. 5. Esquema de flujo en contacto sencillo

Fuente: Libro Problemas de Ingeniería Química, Tomo II. Extracción líquido-líquido.

Sobre el diagrama triangular las composiciones están representadas en los puntos mostrados en la Figura 6, donde la alimentación se muestra en el punto F, el disolvente en el punto B, la composición global de la mezcla al punto M, extracto en el punto E1, refinado en el punto R1, producto extraído en el punto E'1 y producto refinado por R'1. Las cantidades de cada uno de los puntos expuestos se calculan por aplicación de balance de materia.

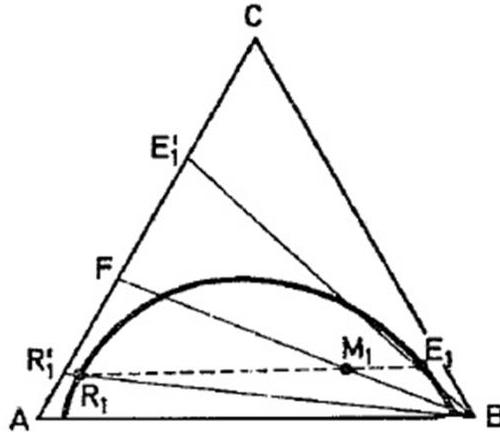


Fig. 6. Diagrama triangular en contacto sencillo

Fuente: OCÓN GARCÍA, Joaquín. Problemas de Ingeniería Química, Tomo II. Extracción líquido-líquido

4.1.5 Contacto múltiple en corriente directa

Este método de extracción consiste en la repetición del proceso para una sola etapa en contacto sencillo. Esquemáticamente se representa mediante el diagrama de flujo que se muestra en la Figura 7, donde el refinado procedente de la primera etapa R_1 , se pone nuevamente en contacto con un nuevo disolvente en la segunda etapa B_2 , separándose nuevo extracto y refinado; volviendo a poner en contacto este refinado con un nuevo disolvente en la tercera etapa, y así sucesivamente hasta completar el número de etapas necesarias para obtener los niveles de concentración deseados.

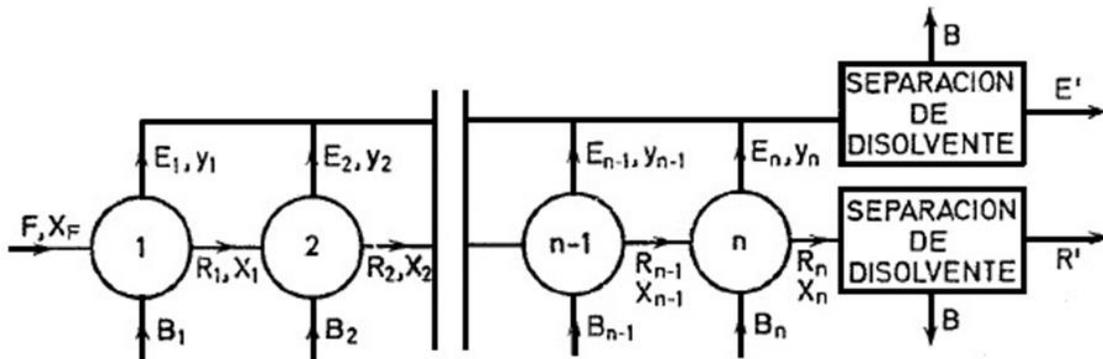


Fig. 7. Esquema de flujo en contacto múltiple en corriente directa

Fuente: OCÓN GARCÍA, Joaquín. Problemas de Ingeniería Química, Tomo II. Extracción líquido-líquido.

En el diagrama triangular de la Figura 8, se muestra la representación geométrica de las distintas etapas que se hace de modo análogo que para una etapa, siendo aplicables las ecuaciones que se deducen para el contacto sencillo.

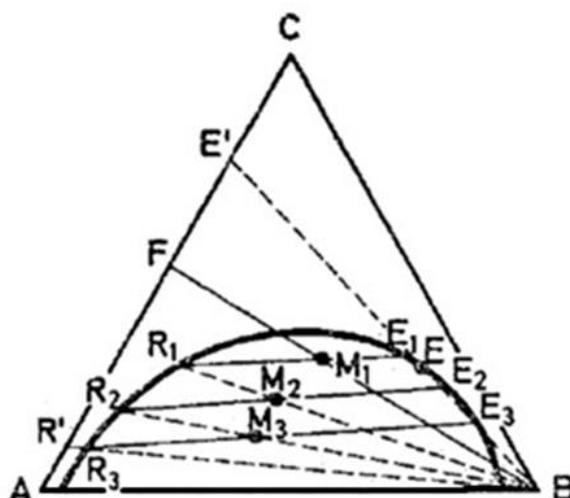


Fig. 8. Diagrama triangular en contacto múltiple en corriente directa

Fuente: OCÓN GARCÍA, Joaquín. Problemas de Ingeniería Química, Tomo II. Extracción líquido-líquido

4.1.6 Contacto múltiple en contracorriente

Es el diagrama de flujo utilizado para este sistema de extracción que se muestra en la Figura 9, donde la alimentación y el disolvente entran por los extremos opuestos del sistema extractor, de tal forma, que la alimentación se pone en contacto en la primera etapa con el disolvente ya concentrado en soluto, mientras que los refinados procedentes de cada etapa se trata con disolvente cada vez menos concentrado de soluto, (OCÓN, 1978). Esta modalidad de contacto permite que la cantidad de disolvente a emplear sea menor que el método de extracción directa.

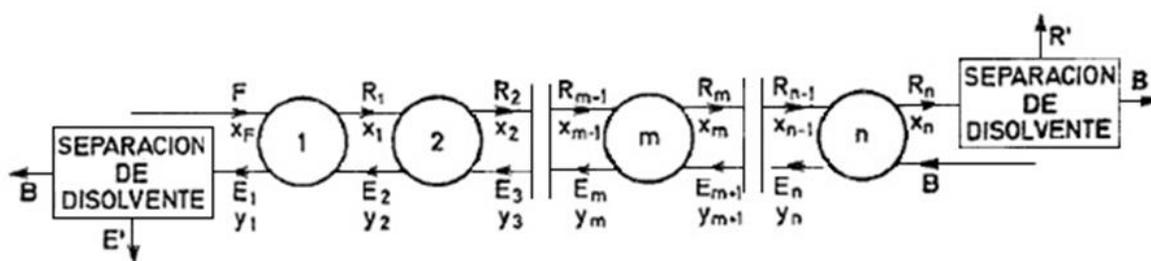


Fig. 9. Esquema de flujo en contacto múltiple en contracorriente

Fuente: OCÓN GARCÍA, Joaquín. Problemas de Ingeniería Química, Tomo II. Extracción líquido-líquido

En el diagrama triangular de la Figura 10, se muestra la representación de las distintas etapas que se llevan a cabo en este proceso de extracción, a diferencia de los métodos anteriores, este cuenta con un nuevo punto P denominado polo, que nos indica que las rectas que unen F con E1 y Rn con B han de tener un punto de operación común.

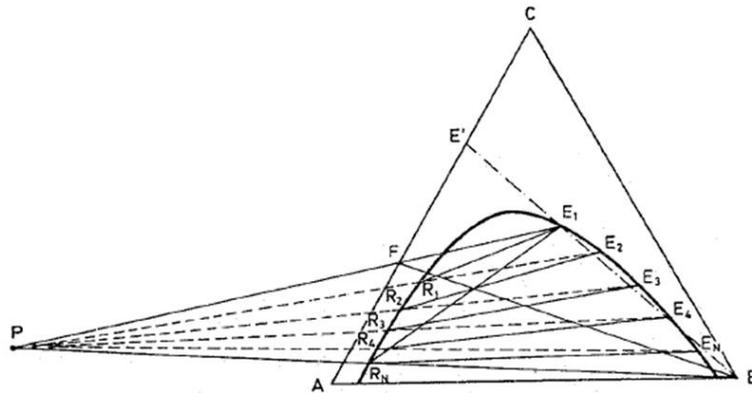


Fig. 10. Diagrama triangular en contacto múltiple en contracorriente

Fuente: OCÓN GARCÍA, Joaquín. Problemas de Ingeniería Química, Tomo II. Extracción líquido-líquido

4.1.7 Contacto múltiple en contracorriente con reflujo

El esquema general de flujo para este tipo de extracción se indica en la Figura 11, que además de mejorar la eficiencia del proceso anterior en relación al grado de pureza obtenido, tiene la particularidad que la alimentación F entra en un punto intermedio entre las etapas.

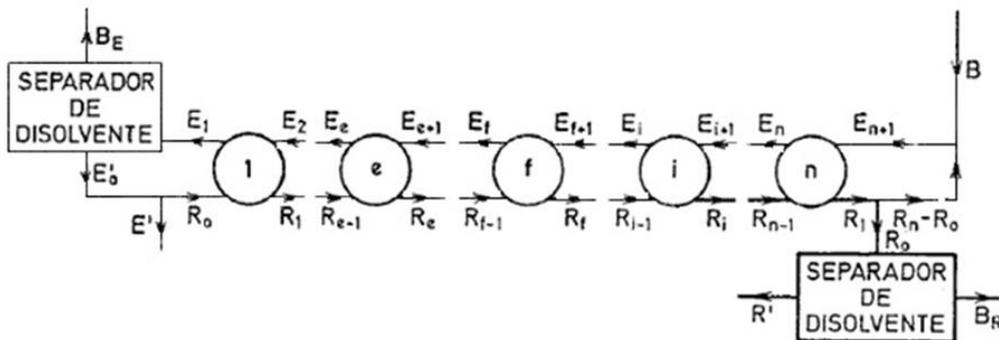


Fig. 11. Esquema de flujo en contracorriente con reflujo

Fuente: OCÓN GARCÍA, Joaquín. Problemas de Ingeniería Química, Tomo II. Extracción líquido-líquido

Sobre el diagrama triangular las composiciones están representadas en los puntos mostrados en la Figura 12.

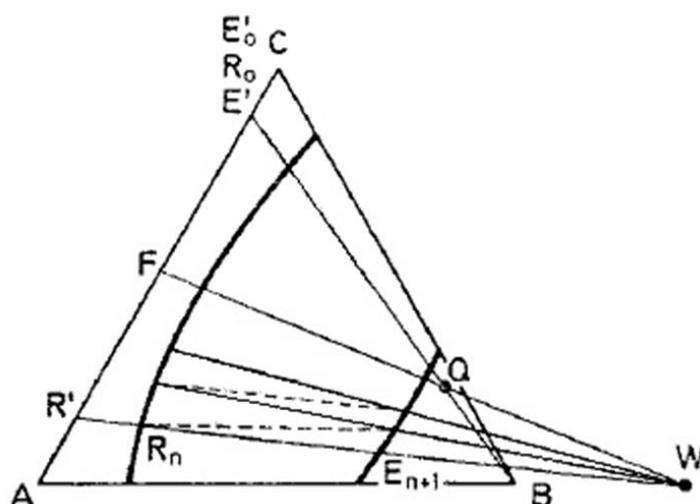


Fig. 12. Diagrama triangular en contracorriente con reflujo

Fuente: OCÓN GARCÍA, Joaquín. Problemas de Ingeniería Química, Tomo II. Extracción líquido-líquido

4.2. DISEÑO Y DESARROLLO DEL SOFTWARE

Como se indica en la metodología, el desarrollo del software se lleva a cabo aplicando las fases de la Programación Extrema (XP) que es una metodología ágil utilizada en la Ingeniería de Software. Las pruebas de la aplicación se realizan tomando como referencia los ejercicios del libro “Problemas de Ingeniería Química, Tomo II. Extracción líquido-líquido”

4.2.1. Fase de la exploración: se plantean a grandes rasgos las historias de usuario que son de interés para la primera entrega del producto. Al mismo tiempo se familiariza con las herramientas, tecnologías y prácticas que se utilizó en el proyecto.

Las historias de usuarios representan una breve descripción del comportamiento del sistema, emplean terminología del cliente sin lenguaje técnico, se realiza una por cada característica principal del sistema, se utilizan para hacer estimaciones de tiempo y para el plan de lanzamientos, se reemplaza un gran documento de requisitos y se preside la creación de las pruebas de aceptación, (LETELIER, Patricio, & PENADÉS, Maria Carmen, 2006).

Las historias plasmadas fueron: 1) Introducción a los cálculos, 2) Cálculos de métodos de extracción en contacto sencillo, 3) Cálculos de métodos de extracción en contacto múltiple en corriente directa, 4) Cálculos de métodos de extracción en múltiple en contracorriente

Un ejemplo de estas historias se puede observar en la siguiente tabla:

Cuadro 1: Historia de usuario: Cálculos de Métodos de Extracción en Contacto Sencillo

Historia de usuario	
Número: 2	Usuario: Docente de la asignatura operaciones unitarias 3
Nombre historia: Cálculos de métodos de extracción en contacto sencillo	
Prioridad en negocio: Alta	Riesgo en desarrollo: Alta
Puntos estimados: 3	Iteración asignada: 1
Programador responsable: Alexander Baldiris De Arco	
Descripción: El usuario ingresara un número mínimo de datos para realizar los cálculos pertinentes al método de contacto sencillo dentro del diagrama de flujo representativo a este proceso y tendrá la posibilidad de exportar e importar los datos correspondientes a las concentraciones de la curva binodal. Los resultados de los cálculos serán mostrados en el diagrama de flujo y las concentraciones calculadas a través del triángulo equilátero, además el usuario tiene la opción de imprimir estos resultados en físico.	
Observaciones:	

Con las historias del usuario ya culminadas se procedió a dar continuidad a la selección de herramientas tecnológicas. La aplicación desarrollada es de escritorio para sistemas operativos de Microsoft Windows superiores a la versión XP, se utilizó como lenguaje de programación Java - JDK 1.6.0_31, ya que proporciona una exactitud en sus procesos matemáticos además que está disponible para los desarrolladores con una documentación completa, y para el despliegue del triángulo se utilizó como herramienta el software Graph 4.4 (Build 532) - Generador de gráficos en el plano cartesiano. Otras herramientas utilizadas fueron: NetBeans IDE 7.1.1 (Build 201203091344) - Entorno de desarrollo integrado; Adobe Photoshop CS5 - Editor de imágenes; JUG Release 1.6 - Generador de UML para Java; Launch4j 3.0.2 – Cross Platform Java Application Wrapper.

4.2.2. Fase de planeamiento: las historias del usuario se priorizaron según el número de historias, el tiempo estimado para cada iteración fue de 3 semanas como se visualiza en el siguiente cronograma.

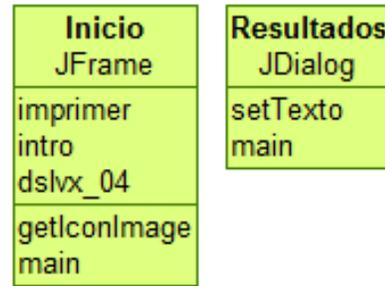
ACTIVIDAD	FECHA INICIAL	FECHA FINAL
Fase de planeamiento (Iteración 1)	01/03/2012	25/03/2012
Fase de planeamiento (Iteración 2)	26/03/2012	22/04/2012
Fase de planeamiento (Iteración 3)	23/04/2012	14/05/2012
Fase de planeamiento (Iteración 4)	15/05/2012	03/06/2012
Fase de planeamiento (Iteración 5)	04/06/2012	24/06/2012
Fase de planeamiento y mantenimiento	01/03/2012	27/06/2012

El resultado para la primera historia se describe a continuación en las figuras.

Cuadro 2. Iteración 1

Tarea de Ingeniería	
Número tarea: 1	Historia de usuario (Nro. y Nombre): 1
Nombre tarea: Iteración 1	
Tipo de tarea : Desarrollo	Puntos estimados: 3
Fecha inicio: 01 de Marzo de 2012	Fecha fin: 25 de Marzo de 2012
Programador responsable: Alexander Baldiris De Arco	
Descripción: En esta tarea se procederá a realizar el diseño del entorno gráfico del <i>software</i> y validaciones de datos requeridos para la realización de cálculos inherentes a los de extracción con disolvente.	

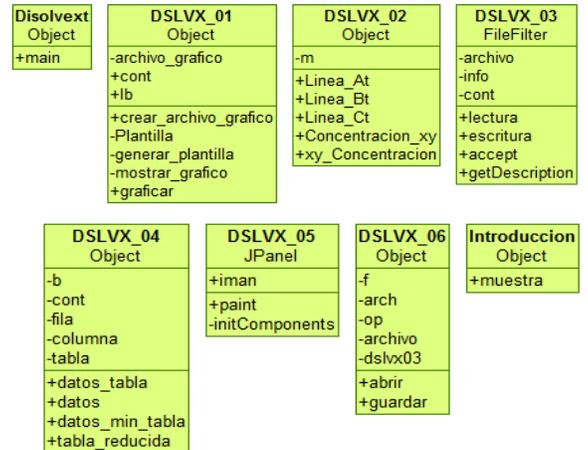
Fig. 13. Clases desarrolladas en la iteración 1.



Cuadro 3. Iteración 2

Tarea de Ingeniería	
Número tarea: 2	Historia de usuario (Nro. y Nombre): 1
Nombre tarea: Iteración 2	
Tipo de tarea : Desarrollo	Puntos estimados: 3
Fecha inicio: 26 de Marzo de 2012	Fecha fin: 22 de Abril de 2012
Programador responsable: Alexander Baldiris De Arco	
Descripción: Se desarrollarán las clases comunes que cada método, donde se incluyen la generación de documento para el <i>software</i> Graph, guardar archivos, abrir archivos, conversor de plano cartesiano a diagrama de concentración y formatos de impresión.	

Fig. 14. Clases desarrolladas en la iteración 2



Cuadro 4. Prueba de aceptación 001

Caso de prueba de aceptación	
Código: 001	Historia de usuario (Nro. y Nombre): 1
Nombre: Aceptación de iteración 1 y 2	
Descripción: Se procede a verificar si las interfaces gráficas del usuario mostrados por el programa cumplen con lo requerido por el cliente.	
Condiciones de ejecución: Ninguna	
Entrada / Pasos de ejecución: Manipulación del entorno grafico del <i>software</i> por usuarios que desconocen el tema.	
Resultado esperado: Que el usuario tenga una buena apreciación del entorno gráfico del programa a pesar de no tener conocimientos previos del tema, además que tenga la facilidad de manejarlo sin ningún tipo duda que no tenga que ver con el método de extracción utilizado.	
Evaluación de la prueba: Bueno, el entorno es intuitivo y agradable. Solo se necesita de un conocimiento básico del método a utilizar.	

Resultados de la prueba de aceptación 001: Las interfaces gráficas del software se visualizan en las siguientes figuras:

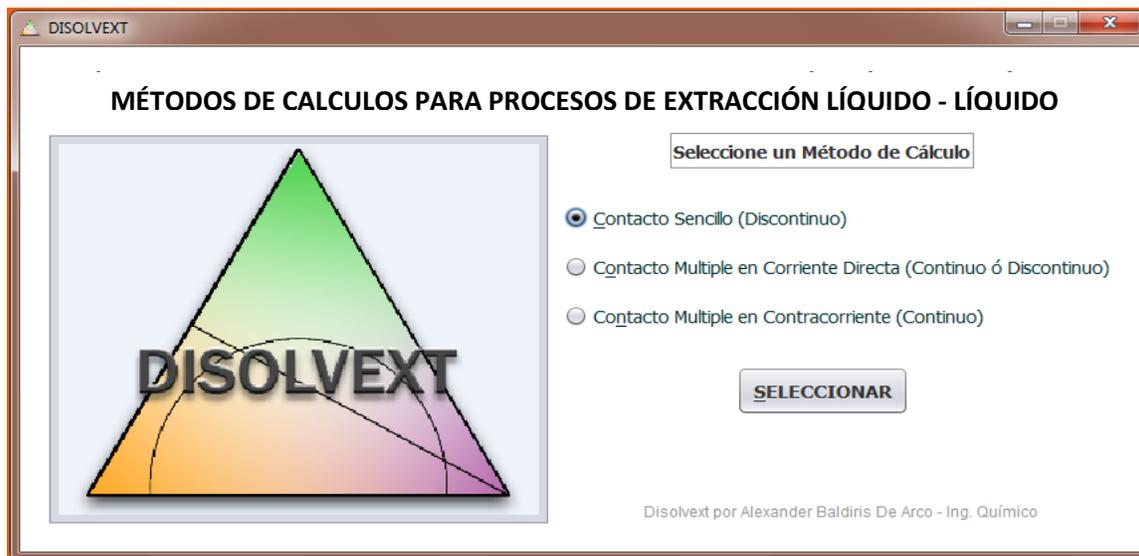


Fig.15. Pantalla de inicio

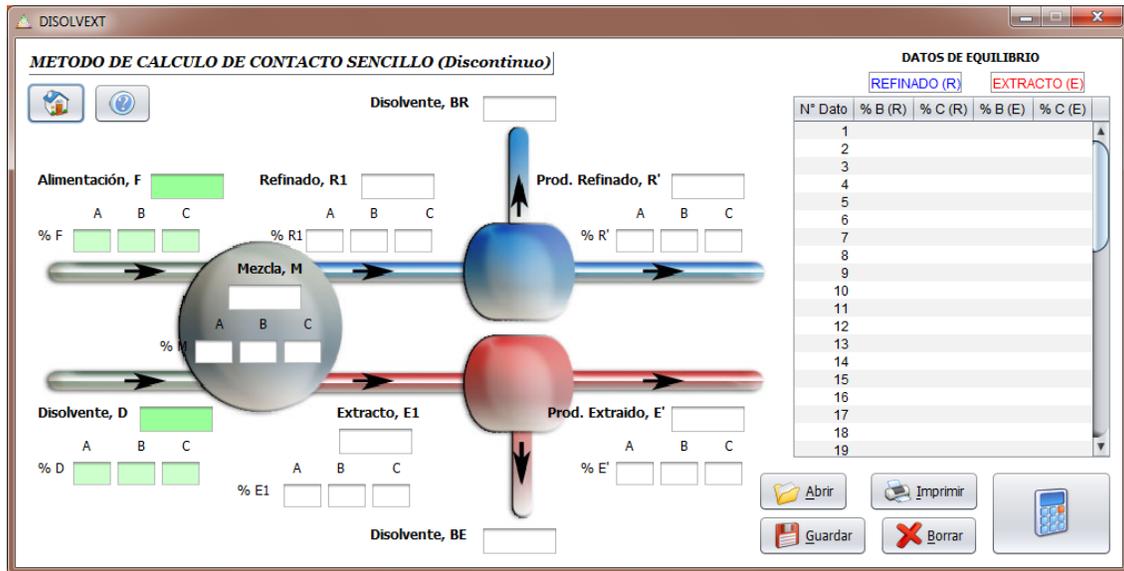


Fig. 16. Pantalla del método de contacto sencillo.

Los íconos de los botones Home, Ayuda, Abrir, Imprimir, Guardar, Borrar y Calcular mostradas en las pantallas de inicio de cada uno de los métodos, fueron obtenidos a través de la página web Deviantart en la url <http://tpdkcasimir.deviantart.com/gallery/#/df7y8h> el día 28 de Marzo de 2012, y cuyo autor de los íconos es TPKDCasimir.

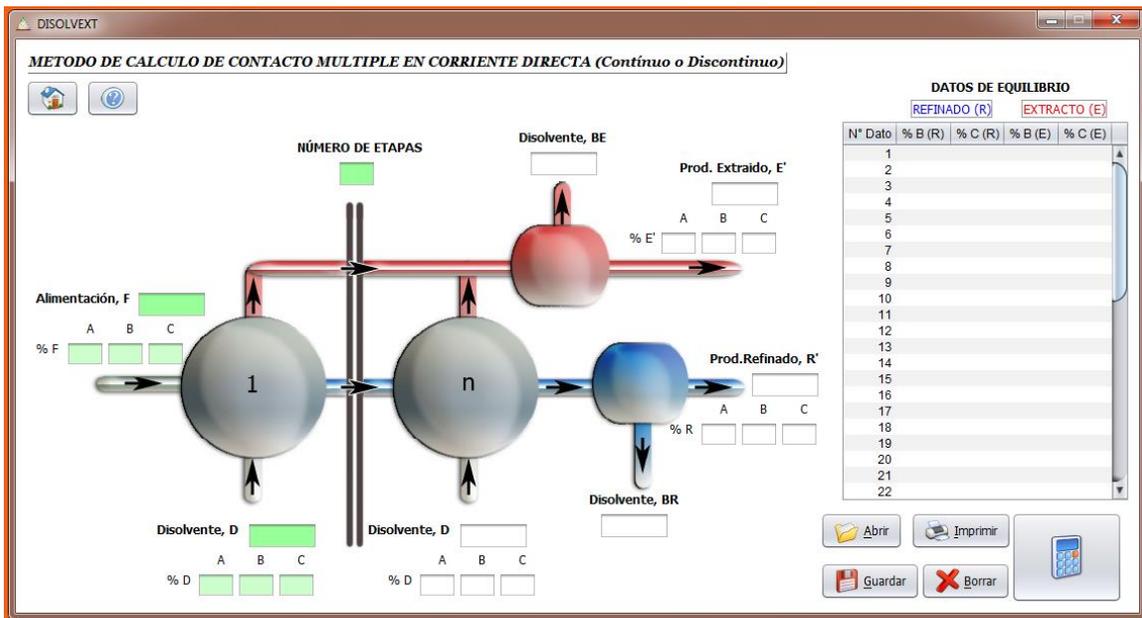


Fig. 17. Pantalla del método de contacto múltiple en corriente directa

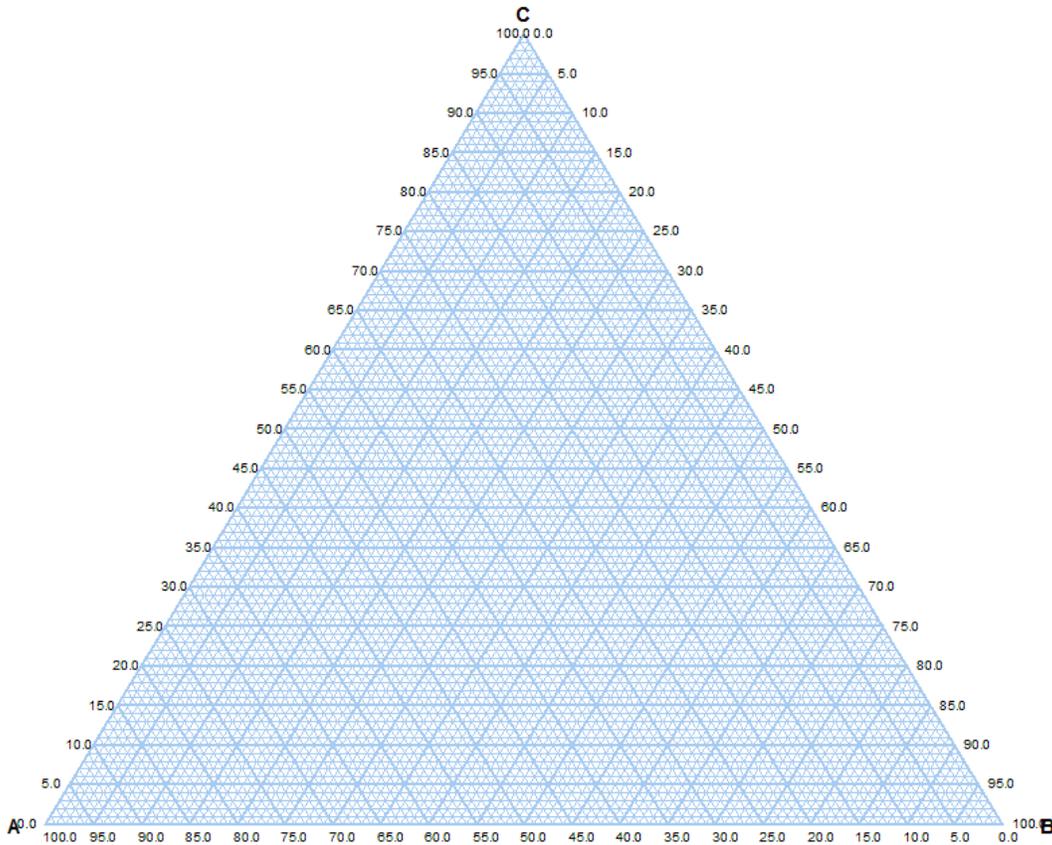


Fig. 18. Pantalla de Resultados en el diagrama del triángulo equilátero.

Cuadro 5. Iteración 3

Tarea de Ingeniería	
Número tarea: 3	Historia de usuario (Nro. y Nombre): 2
Nombre tarea: iteración 3	
Tipo de tarea : Desarrollo	Puntos estimados: 3
Fecha inicio: 23 de Abril de 2012	Fecha fin: 14 de Mayo de 2012
Programador responsable: Alexander Baldiris De Arco	
Descripción:	
Se desarrollará la clase pertinente al método de contacto sencillo, que contenga las formulas y métodos para la obtención de resultados del método de extracción.	

La evaluación de la prueba de aceptación para esta iteración determinó que los valores de los resultados y gráficas generadas por el software presentan una diferencia máxima del 0,9% con respecto a los valores y las gráficas presentadas por cada uno de los problemas planteados por la bibliografía consultadas. Siendo este porcentaje de error tolerable para el programa, además que no se tiene certeza si los valores y diagramas mostrados en la bibliografía consultada son de gran exactitud, ya que solo se toman como referencia.

Cuadro 6. Iteración 4

Tarea de ingeniería	
Número tarea: 4	Historia de usuario (Nro. y Nombre): 3
Nombre tarea:	
Iteración 4	
Tipo de tarea :	Puntos estimados:
Desarrollo	3
Fecha inicio:	Fecha fin:
15 de Marzo de 2012	3 de Junio de 2012
Programador responsable:	
Alexander Baldiris De Arco	
Descripción:	
Se desarrollará la clase pertinente al método de contacto múltiple en corriente directa, que contenga las formulas y métodos para la obtención de resultados del método de extracción	

Evaluación de la prueba de aceptación iteración 4: Los valores de los resultados y gráficas generadas por el software presentan una diferencia máxima del 5,2% con respecto a los valores y las gráficas presentadas por cada uno de los problemas planteados por la bibliografía consultadas. Siendo este porcentaje de error tolerable para el programa, además que no se tiene certeza si los valores y diagramas mostrados en la bibliografía consultada son de gran exactitud, ya que solo se toman como referencia.

Cuadro 7. Iteración 5

Tarea de ingeniería	
Número tarea: 5	Historia de usuario (Nro. y Nombre): 4
Nombre tarea:	
Iteración 4	
Tipo de tarea :	Puntos estimados: 3
Desarrollo	
Fecha inicio: 4 de Marzo de 2012	Fecha fin: 24 de Junio de 2012
Programador responsable:	
Alexander Baldiris De Arco	
Descripción:	
Se desarrollará la clase pertinente al método de contacto múltiple en contracorriente, que contenga las formulas y métodos para la obtención de resultados del método de extracción	

Evaluación de la prueba de aceptación: Los valores de los resultados y graficas generadas por el software presentan una diferencia máxima del 0,5% con respecto a los valores y las gráficas presentadas por cada uno de los problemas planteados por la bibliografía consultadas. Siendo este porcentaje de error tolerable para el programa, además que no se tiene certeza si los valores y diagramas mostrados en la bibliografía consultada son de gran exactitud, ya que solo se toman como referencia.

4.2.3. Fase de producción: en esta fase se procedió a realizar pruebas en los diferentes métodos de extracción con disolvente, introduciendo valores fuera de los rangos establecidos por la teoría, además de introducir valores no representativos de las concentraciones para la generación de curvas binodales con el fin de registrar ciertos comportamientos y cálculos anormales que puedan afectar el buen funcionamiento del software.

4.2.4 Fase de mantenimiento: teniendo en cuenta las anomalías presentadas en la fase de producción, se procedió a corregir ciertos errores que pueden presentarse durante el uso de la aplicación, además que se realizó una revisión exhaustiva al código fuente con el fin de aumentar el buen desempeño y rendimiento del producto a entregar.

4.2.5 Fase de muerte: una vez comprobado todo el código el buen rendimiento y la confiabilidad del software, se ha comprobado el cumplimiento de las historias del usuario. Se puede afirmar que el proyecto esta culminado y no necesita más cambios en su estructura, se procedió a compilarlo en una presentación más amigable para el usuario final.

4.2.6 Análisis general de los resultados: a partir de las pruebas de aceptación realizadas en cada una de las iteraciones para el desarrollo del *software* DISOLVEXT, se realizaron los cuadros 8 y 9 donde se comparan los resultados numéricos obtenidos en la bibliografía y los resultados calculados por el programa para cada uno de los métodos de extracción, con el fin de tener una medida cuantitativa de la diferencia porcentual entre los resultados, el cual se calcula a partir de la ecuación 1.

$$\text{Porcentaje de diferencia (\% Dif.)} = \frac{|\text{VT} - \text{VD}|}{|\text{VT}|} * 100 \quad \text{Ec. 1}$$

VT = Valor teórico proporcionado por la bibliografía

VD = Valor generado por el programa DISOLVEXT

Debido a que se está comparando valores obtenidos en la bibliografía a través del método de observación contra los valores obtenidos a través de métodos matemáticos para cada uno de los métodos de extracción con disolvente, se puede estimar un promedio de la diferencia porcentual máxima del 10% en los resultados de cada método para lograr la aceptación final del programa, dónde el promedio de la diferencia es calculado mediante la ecuación 2.

$$\text{Promedio de \%Dif.} = \frac{\sum_{i=1}^n \%Dif_i}{n} \quad \text{Ec. 2}$$

Cuadro 8. Resultados para el método de contacto sencillo

Problema	Calcular	Resultados		% Dif.
		Bibliografía	DISOLVEXT	
7.5	Las cantidades mínima y máxima de agua a emplear	Composición refinado: 28,3%	Composición refinado: 28,31%	0,04
		Cantidad mínima de agua a emplear = 6 kg	Cantidad mínima de agua a emplear = 5,94 kg	1,00
		Composición extracto: 0,5%	Composición extracto: 0,35%	30,00
		Cantidad máxima de agua a emplear = 5900 kg	Cantidad máxima de agua a emplear = 8304,15 kg	40,75
7.6	a) Las composiciones de extracto y refinado.	Composición de ácido acético en el extracto = 17,8%	Composición de ácido acético en el extracto = 18,16%	2,02
		Composición de ácido acético en el refinado = 4,8%	Composición de ácido acético en el refinado = 4,52%	5,83
	b) Los pesos del extracto y refinado.	Cantidad de extracto = 135,3 kg	Cantidad de extracto = 146,92Kg	7,91
		Cantidad de refinado = 84,7 kg	Cantidad de refinado = 73,07Kg	13,73
	c) Las composiciones del producto extraído y refinado.	Composición de ácido acético en el producto extraído = 93%	Composición de ácido acético en el producto extraído = 95,9%	3,12
		Composición de ácido acético en el producto Refinado = 4,6%	Composición de ácido acético en el producto refinado = 4,57%	0,65
	d) Los pesos del producto extraído y refinado	Cantidad de producto extraído = 28,6 kg	Cantidad de producto extraído = 27,83 kg	2,69
		Cantidad de producto refinado = 71,4 kg	Cantidad de producto refinado = 72,16 kg	1,06

Cuadro 9. Resultados para el método de contacto múltiple en corriente directa

Problema	Calcular	Resultados		% Dif.
		Bibliografía	DISOLVEXT	
7.9	a) La cantidad y composición del extracto y refinado en cada una de las etapas.	Etapa 1: (%C) Extracto = 28%	Etapa 1: (%C) Extracto = 28,07%	0,25
		Etapa 1: (%C) Refinado = 11,3%	Etapa 1: (%C) Refinado = 11,07%	2,04
		Etapa 1: Cantidad de extracto = 78,1 kg	Etapa 1: Cantidad de extracto = 78,75 kg	0,83
		Etapa 1: Cantidad de refinado = 71,9 kg	Etapa 1: Cantidad de refinado = 71,25 kg	0,90
		Etapa 2: (%C) Extracto = 10%	Etapa 2: (%C) Extracto = 9,6%	4,00
		Etapa 2: (%C) Refinado = 3,1%	Etapa 2: (%C) Refinado = 3,08%	0,65
		Etapa 2: Cantidad de extracto = 64,5 kg	Etapa 2: Cantidad de extracto = 63,63 kg	1,35
		Etapa 2: Cantidad de refinado = 57,4 kg	Etapa 2: Cantidad de refinado = 57,61 kg	0,37
		Etapa 3: (%C) Extracto = 2,3%	Etapa 3: (%C) Extracto = 2,41%	4,78
		Etapa 3: (%C) Refinado = 0,8%	Etapa 3: (%C) Refinado = 0,77%	3,75
	Etapa 3: Cantidad de extracto = 60,2 kg	Etapa 3: Cantidad de extracto = 57,55 kg	4,40	
	Etapa 3: Cantidad de refinado = 47,2 kg	Etapa 3: Cantidad de refinado = 50 kg	5,93	
	b) La cantidad y composición del producto extraído y del producto refinado	(%C) Producto extraído = 54%	(%C) Producto extraído = 56,46%	4,54
		(%C) Producto refinado = 0,9%	(%C) Producto refinado = 0,81%	10,00
Cantidad de producto extraído = 55,3 kg		Cantidad de producto extraído = 52,43 kg	5,19	
Cantidad de producto refinado = 44,8 kg		Cantidad de producto refinado = 47,56 kg	6,16	
7.11	El número de etapas si la cantidad de agua a emplear es de 100Kg y se emplea la misma cantidad en cada una de las etapas	Tanteo 1: (%C) Producto refinado = 6,2%	Tanteo 1: (%C) Producto refinado = 6,26%	0,97
		Tanteo 2: (%C) Producto refinado = 2,02%	Tanteo 2: (%C) Producto refinado = 0,82%	59,41

Cuadro 10. Resultados para el método de contacto múltiple en contracorriente

Problema	Calcular	Resultados		% Dif.
		Bibliografía	DISOLVEXT	
7.17	El número de etapas teóricas necesarias para efectuar la separación indicada	2 etapas	2 etapas	0
7.18	a) Cantidad mínima de Clorobenceno a emplear.	1150 kg	1147,81 kg	0,19
	b) Número de etapas teóricas si se emplean 1500 kg de clorobenceno.	3 etapas	3 etapas.	0
	c) La cantidad de extracto y refinado que salen del sistema	La cantidad de extracto es de 2300 kg	La cantidad de extracto es de 2300,63 kg	0,03
La cantidad de refinado es de 700 kg.		La cantidad de refinado es de 699,36 kg.	0,1	

$$\text{Promedio \%Dif contacto sencillo} = \frac{108,8\%}{12} = 9,06\%$$

$$\text{Promedio \%Dif Contacto múltiple corriente directa} = \frac{115,51\%}{18} = \mathbf{6,42\%}$$

$$\text{Promedio \%Dif Contacto múltiple en contracorriente} = \frac{0,31\%}{5} = \mathbf{0,061\%}$$

$$\text{Promedio \%Dif Estimada} = \frac{15,55\%}{3} = \mathbf{5,18\%}$$

5. CONSIDERACIONES Y CONCLUSIONES

La elaboración de un software para los cálculos inherentes en los métodos de extracción con disolvente, es un proceso que conjuga la utilización de herramientas computacionales y conocimientos en matemáticas avanzadas, geometría, métodos numéricos y balance de materia. Herramientas y conocimientos muy importantes para un ingeniero químico como lo son los conceptos ingenieriles en el ámbito de la operación unitaria sobre extracción líquido – líquido y la utilización de programas de ordenadores.

La selección de las ecuaciones para los cálculos inherentes en los distintos métodos de extracción con disolvente, se realizó a partir de un análisis minucioso de la congruencia que tenían los resultados de estas ecuaciones con los datos experimentales mostrados, a través de diferentes problemas propuestos en las referencias consultadas. Los datos de los resultados obtenidos por el software a través de los diferentes problemas propuestos en las referencias, tienen un promedio de diferencia porcentual aproximada del 5,2% dependiendo del caso y método a resolver, lo cual lo hace fiable y aceptable dentro de los parámetros de diferencia establecidos. Teniendo en cuenta que los problemas propuestos en las referencias solo se tomaron como un comparativo ya que se desconoce el margen de error que estos presentan y el método de observación que se utilizó para dar con las respuestas a comparar.

El tiempo necesario para la generación de gráficos y mostrar los resultados a los diferentes problemas planteados de los distintos métodos para el cálculo de extracción con disolvente realizados con el software, no se pudieron comparar con el tiempo mínimo requerido para que un estudiante resolviera el problema más sencillo del método de extracción con disolvente, ya que al software solo le toma menos de 5 segundos después de haberle ingresado los datos para resolver el problema, y a un estudiante que tenga destreza en el manejo del diagrama del triángulo equilátero le llevaría un promedio de 5 segundos para ubicar un punto dentro del diagrama del triángulo equilátero.

DISOLVEXT permite el cumplimiento del propósito primordial de este proyecto que es brindar una herramienta computacional innovadora que permite a los estudiantes, docentes y profesionales de Ingeniería Química y áreas afines al tema, fortalecer el estudio y la investigación de la operación unitaria de extracción con disolvente, sin preocuparse por el tiempo demandado para dar solución a problemas referentes a los distintos métodos de extracción líquido – líquido planteados a nivel industrial.

Por último, cabe resaltar que el software es muy intuitivo y puede ser usado en versiones de sistemas operativos superiores a Microsoft Windows XP, de fácil instalación y consumo mínimo de recursos del sistema operativo.

REFERENCIAS

ANAYA VILLEGAS, Adrián. A propósito de programación extrema XP (Extreme Programming). [En línea] <http://www.monografias.com/trabajos51/programacion-extrema/programacion-extrema.shtml> [Consultado 01/04/2012]

AGILE ALLIANCE. [En línea] <<http://www.agilealliance.org/>> [Consultado 03/02/2012]

ASPEN HYSYS, Simulation Basis.
<http://www.ualberta.ca/CMENG/che312/F06ChE416/HysysDocs/AspenHYSYSSimulationBasis.pdf> [Consultado 15/09/2011]

AZPROCEDE. [En Línea] < http://www.azprocede.fr/index_spa.html > [Consultado 16/09/2011]

CEBALLOS, Francisco Javier. Java2: Interfaces gráficas y aplicaciones para internet, 2a Edición. México D.F: Alfaomega Ra-Ma, 2006. 569p. ISBN 970-15-1180-8

CHAPRA, Steven C., CANALE, Raymond P. Métodos numéricos para ingenieros, 5ª Edición. McGraw Hill, 958p. ISBN 970-10-6114-4

CHEMSEP. [En Línea] <<http://www.chemsep.org/book/index.html>> [Consultado 14/09/2011]

CICLO DE VIDA DE UN PROYECTO XP. [En línea]
<<http://oness.sourceforge.net/proyecto/html/ch05s02.html>> [Consultado 10/12/2011]

CORTÉS RAMOS, Juan Hernando. Estudio del equilibrio líquido-líquido de sistemas ternarios formados por: Parafina+Aromático+N-Formilmorfolina y mezcla de disolventes que incluye a N-Formilmorfolina. Antecedentes. Cholula, Puebla, México. [En Línea] http://catarina.udlap.mx/u_dl_a/tales/documentos/lpro/cortes_r_jh/indice.html [Consultado 14/09/2011]

DEITEL, Paul J. Como programar en Java, Quinta Edición. México: Pearson Education. 2004 1268p. ISBN 970-26-0518-0

EJEMPLO DE DESARROLLO SOFTWARE UTILIZANDO LA METODOLOGÍA XP. Universidad Politécnica de Valencia.
[En Línea] < <http://users.dsic.upv.es/asignaturas/facultad/lisi/ejemploxp/index.html> > [Consultado 01/04/2012]

FERNANDEZ, Gerardo. Introducción a Extreme Programming. [En línea]
<http://www.um.edu.ar/catedras/claroline/backends/download.php?url=L01ldG9kb3NfQWdpbGVzL1Byb2dyYW1hY2lvbl9FeHRyZW1hLVhQLnBkZg%3D%3D&cidReset=true&cidReq=II0162004>
[Consultado 01/04/2012]

FOUST, Alan S. Principios de operaciones unitarias, Segunda Edición. México: Compañía Editorial Continental. 2006 752 p. ISBN 968-26-0776-0

GROSSMAN S., Stanley I. Algebra Lineal, Sexta Edición. México D.F.: McGraw Hill. 2008 762p. ISBN 970-10-6517-4

LETELIER, Patricio y PENADÉS, M^a Carmen, Metodologías ágiles para el desarrollo de software: Extreme Programming (XP), Universidad Politécnica de Valencia. [En Línea] <<http://www.willydev.net/descargas/masyxp.pdf>> [Consultado 13/04/12]

MANIFESTO FOR AGILE SOFTWARE DEVELOPMENT. [En Línea] <<http://www.agilemanifesto.org>> [Consultado 14/11/2011]

MC CABE, Warren L. Operaciones unitarias en Ingeniería Química, Cuarta edición. Madrid, ESPAÑA: McGraw Hill, 1191 1112p. ISBN 84-481-1918-5

OCÓN GARCÍA, Joaquín. Problemas de Ingeniería Química, Tomo II.

PRESSMAN, Roger S. Ingeniería del Software: Un enfoque práctico, 5^a Edición. McGraw Hill, 958p. ISBN 970-10-5473-3

SEVILLA, Miguel J. Teoría de errores de observación, Instituto de astronomía y geodesia. Universidad Complutense - Facultad de Ciencias Matemáticas. Madrid, España.

SOMMERVILLE, Ian. Ingeniería del software, Séptima Edición. Madrid, España: Pearson Education. 2005 687p. ISBN 84-7829-074-5

TREYBAL, Robert E. Extracción en fase líquida. México D.F.: Unión Tipográfica Editorial Hispanoamericana. 1968 729p.

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE MADRID. Extracción líquido – líquido. [En línea] <http://www.uam.es/personal_pdi/ciencias/mgilarra/experimentacionIQII/ExtraccLiqLiq2006.pdf> [Consultado 27/09/2011]

ZUNINO, Miguel. Ingeniería Química. Notas sobre su origen y evolución. <http://www.aiqu.org.uy/historia/Evolucion.htm> > [Consultado 25/09/2011]