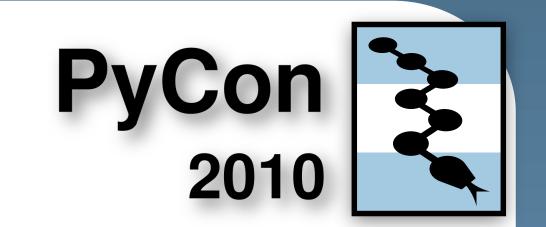


UNA NUEVA INTERFAZ DE USUARIO Y MAYORES POSIBILIDADES PARA EL SOFTWARE GPEC

M. Gaitán⁽¹⁾, M. Cismondi ⁽¹⁾ ⁽²⁾, G. Wolfmann ⁽¹⁾ ⁽³⁾

(2) IDTQ - Grupo Vinculado PLAPIQUI - CONICET. Córdoba. E-mail: mcismondi@efn.uncor.edu

(3) Laboratorio de Computación. FCEFyN – UNC. Córdoba. E-mail: gwolfmann@gmail.com



11. Galtan 1, IVI. CISMONOI 1, G. WOITMANN (1) Facultad de Ciencias Exactas Físicas y Naturales. Universidad Nacional de Córdoba. Av. Vélez Sarsfield 1611, Ciudad Universitaria. X5016GCA Córdoba. E-mail: gaitan@gmail.com

Introducción

Los equilibrios entre fases tienen un rol muy importante en la tecnología química, alcanzando una gran diversidad de aplicaciones, principalmente en procesos de separación y en novedosos procesos basados en fluidos supercríticos. Estos equilibrios pueden presentar cierta complejidad, especialmente a altas presiones, y son representados por medio de distintos tipos de diagramas de fases. El modelado cuantitativo de los equilibrios de fases se realiza principalmente, y cada vez más, utilizando ecuaciones de estado.

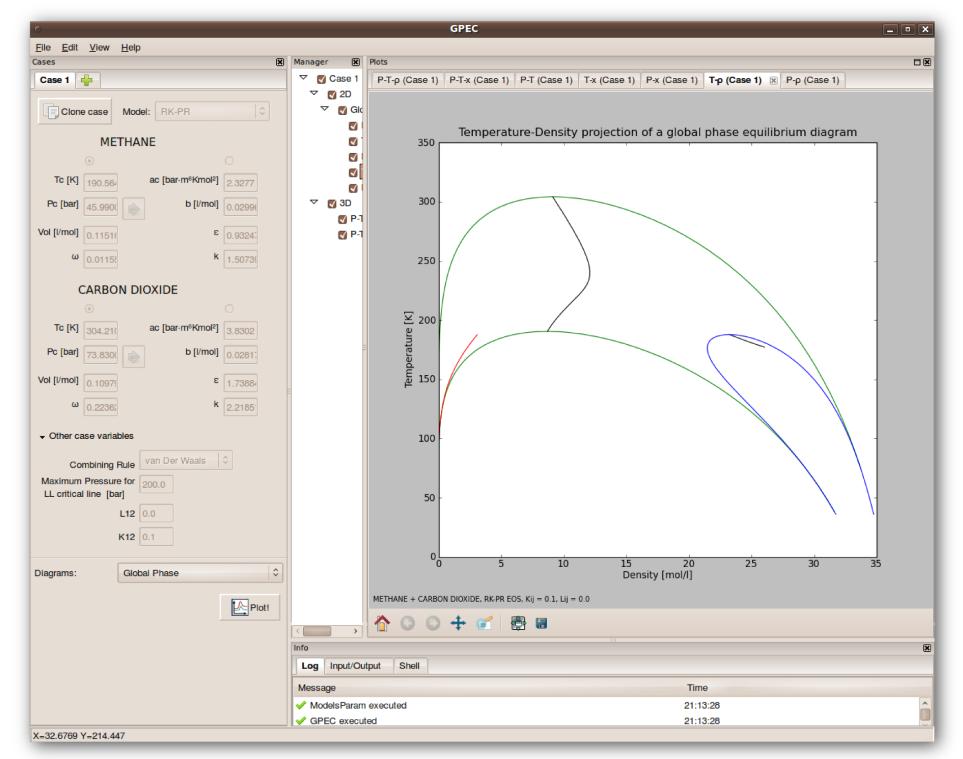
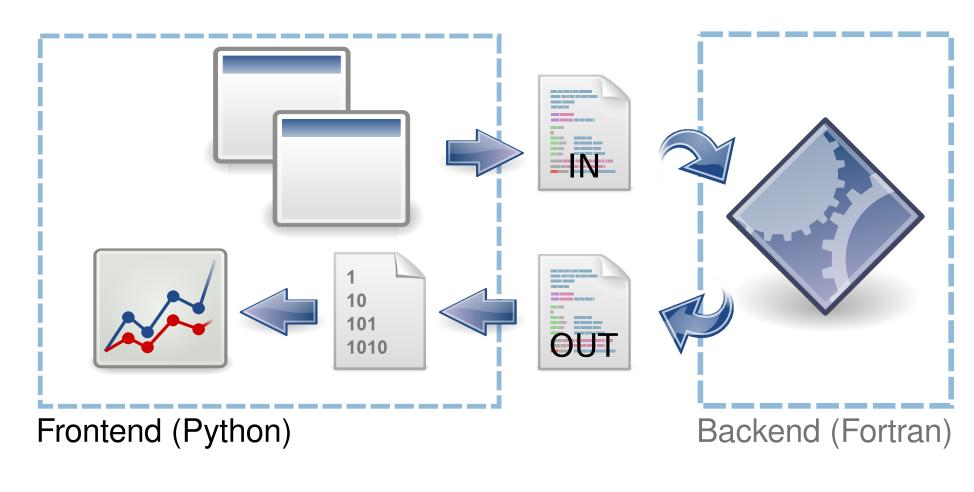


Figura 1: Pantalla principal para la definición de caso (conjunción de un sistema binario y un modelo o ecuación de estado con los correspondientes parámetros de interacción) y visualización 2-D del diagrama global Temperatura-Densidad.

Desde 2005, el desarrollo de nuevos algoritmos para la automati-zación de la generación de diagramas para sistemas binarios a partir de EOS condujo al software **GPEC** utilizado tanto a nivel educativo como de investigación y desarrollo en distintas partes del mundo. GPEC permitió por primera vez el cálculo y la visualización instantánea de diagramas globales de equilibrio entre fases.



GPEC 2010

Para incorporar funcionalidades, asegurar la mantenibilidad y mejorar la usabilidad se desarrolló un **nuevo front-end** (en versión de prueba) implementado en **Python**, basado en la biblioteca de graficación **Matplotlib** y el toolkit para interfaces gráficas **wxPython**. Los algoritmos de cálculo (el backend) se mantuvieron implementados en **Fortran**

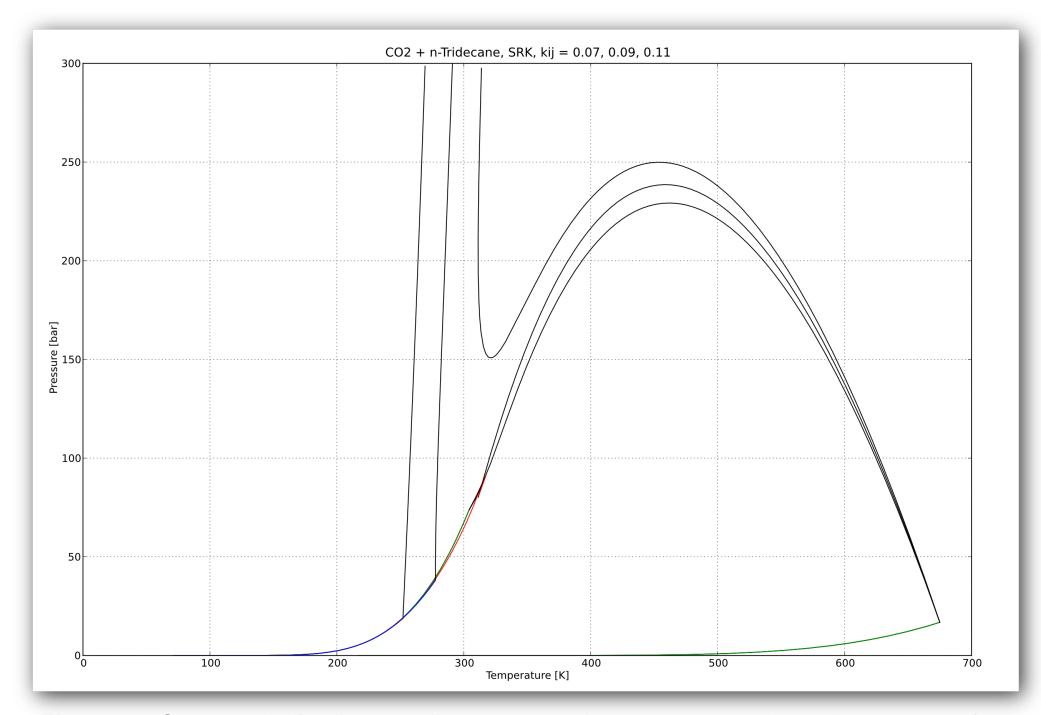
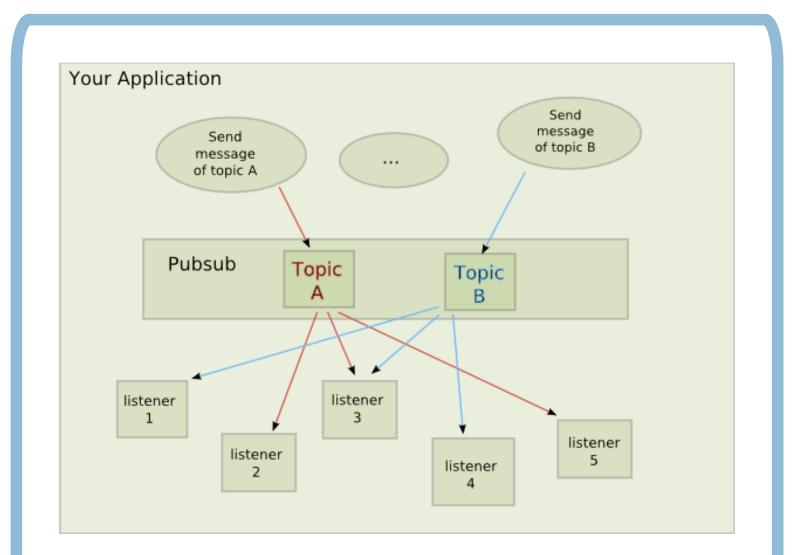


Figura 3: Superposición de tres diagramas globales que permiten observar el efecto del parámetro de interacción k12. La imágen fue exportada desde GPEC.

Novedades de la nueva versión

- Diagramas 3D P-T-z (composición) y P-T-ρ (densidad)
- Multiplataforma: corre en Windows, Linux y Mac
- Visualización simultánea de múltiples diagramas
- Barra de herramientas: zoom, desplazamiento, e historial de vistas
- Superposición de diagramas mediante drag & drop
- Gráficos con calidad de publicación exportables a múltiples formatos
- Archivos de entrada y salida de cálculo accesibles desde la interfaz
- Gestión de base de datos de compuestos simplificada
- Panel de mensajes
- Mejoras en usabilidad y ergonomía.
- Programado en Python: fácil de extender y mejorar
- Es gratuito y es Software Libre



La arquitectura de GPEC se basa en un patrón de paso de mensajes *Publisher/Subscriber* que mantiene las distintas partes del programa desacopladas aportando flexibilidad y extensibilidad.

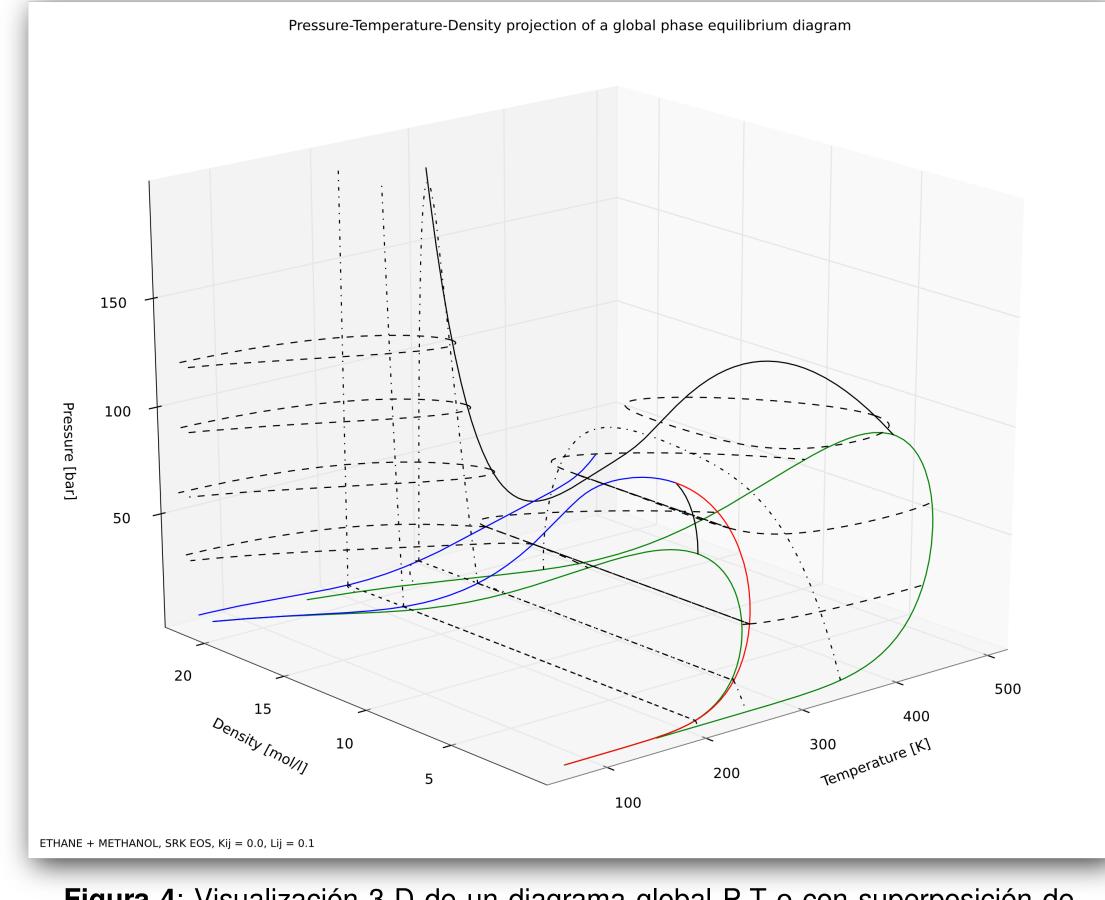


Figura 4: Visualización 3-D de un diagrama global P-T-ρ con superposición de curvas Pxy y Txy. Los gráficos 3D se pueden rotar a la perspectiva deseada.

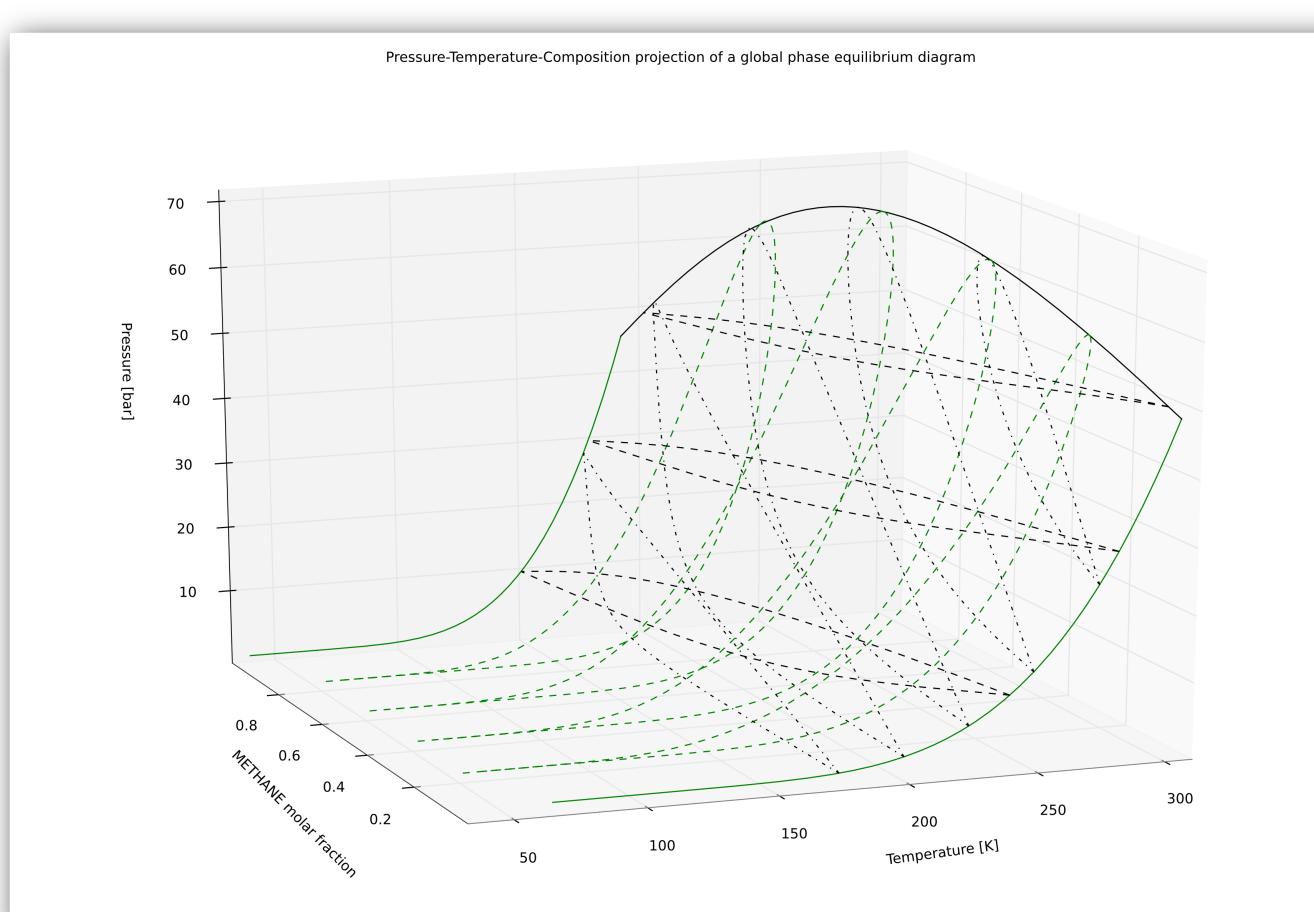


Figura 2: Visualización 3-D de un diagrama global P-T-z (comportamiento tipo I) y superposición de diagramas tipo Pxy para distintas temperaturas, Txy para distintas presiones e isopletas para distintas composiciones.

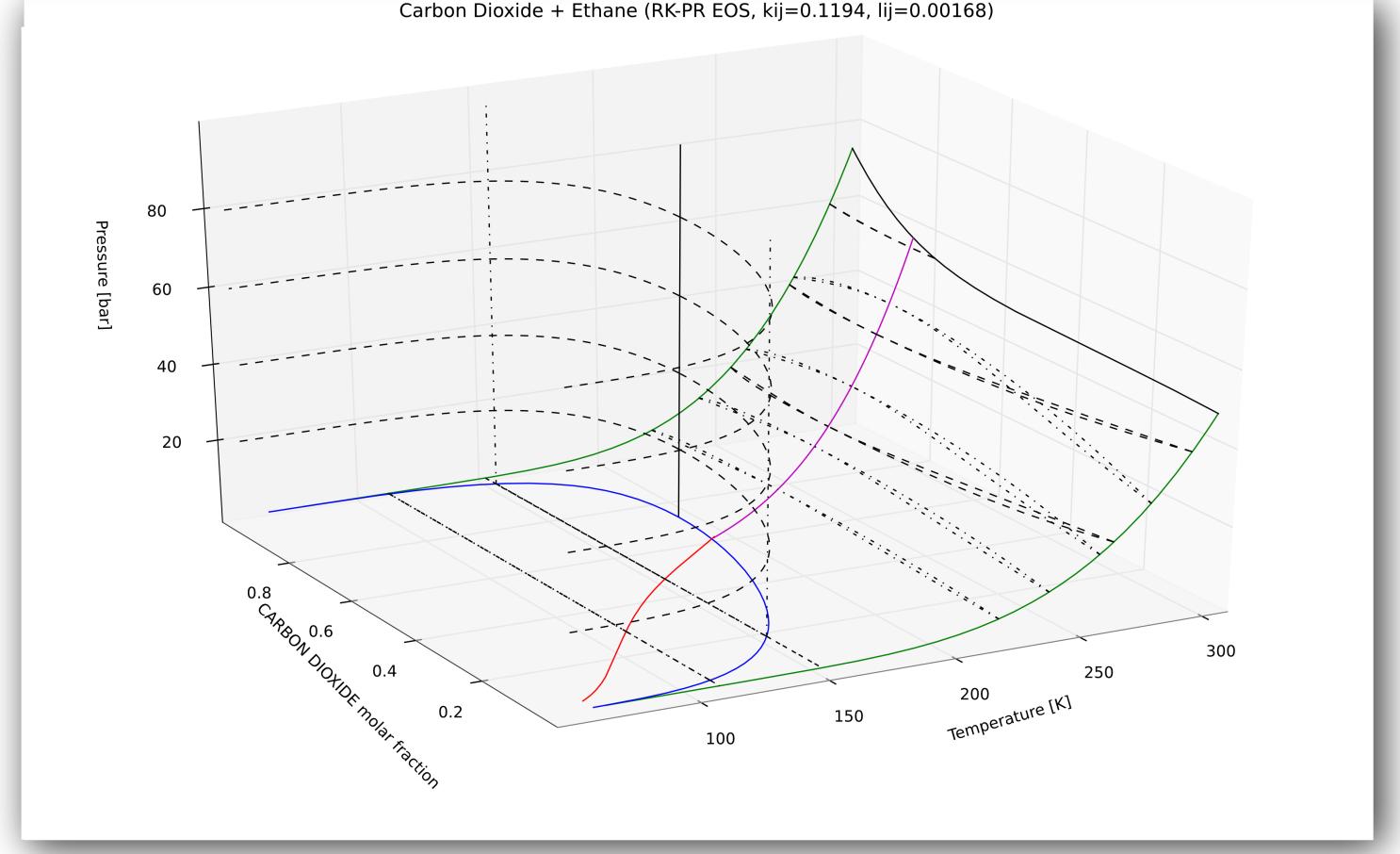


Figura 5: Visualización 3-D de un diagrama global P-T-z con superposición de curvas Pxy, Txy e isopletas.

Más información y descarga: http://gpec.efn.uncor.edu/