

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

M. Gaitán<sup>(1)</sup>, M. Cismondi<sup>(1,2)</sup>, G. Wolfmann<sup>(1,3)</sup>

(1) Facultad de Ciencias Exactas Físicas y Naturales. Universidad Nacional de Córdoba.  
Av. Vélez Sarsfield 1611, Ciudad Universitaria. X5016GCA Córdoba.

(2) IDTQ - Grupo Vinculado PLAPIQUI – CONICET. Córdoba.

E-mail: [mcismondi@efn.uncor.edu](mailto:mcismondi@efn.uncor.edu)

(3) Laboratorio de Computación. FCEfYN – UNC. Córdoba.

E-mail: [gwolfmann@gmail.com](mailto:gwolfmann@gmail.com)

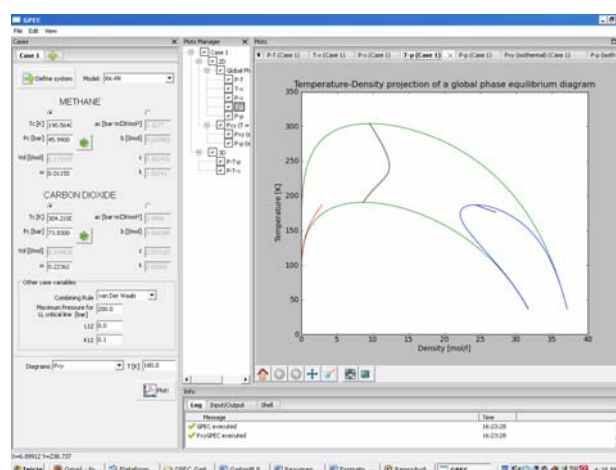
### INTRODUCCIÓN

Los equilibrios entre fases tienen un rol muy importante en la tecnología química, alcanzando una gran diversidad de aplicaciones, principalmente en procesos de separación de la industria química, petroquímica y el sector de hidrocarburos, pero también en novedosos procesos basados en fluidos supercríticos, que han alcanzado un gran desarrollo en las últimas décadas. 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.

Ya sea a nivel educativo o de investigación y desarrollo, es de gran importancia contar con programas de software que permitan tanto un uso eficiente y automatizado de estos modelos, como una representación gráfica directa y flexible de los diagramas calculados. Durante los últimos cinco años, el desarrollo de nuevos algoritmos para la automatización de la generación de diagramas para sistemas binarios a partir de ecuaciones de estado condujo al software GPEC [1-5]. A diferencia de otros programas preexistentes, GPEC permitió por primera vez el cálculo y la visualización instantánea de diagramas globales de equilibrio entre fases (aquellos conformados por líneas univariantes) sin intervención del usuario ni conocimiento previo del tipo de comportamiento a calcular. Asimismo, GPEC construye diagramas Pxy, Txy o isopléticos completos, conteniendo segmentos o regiones que en otros casos no llegan a identificarse.

Luego de algunos años de empleo de GPEC por diferentes tipos de usuarios en todo el mundo, y especialmente de la experiencia acumulada en el PLAPIQUI y el Grupo IDTQ a partir de una evolución del proyecto que excedió lo planificado inicialmente, se volvió necesario el diseño de una nueva interfaz para la interacción con el usuario y la graficación de diagramas.

En este trabajo se presenta un primer "release" del nuevo GPEC cuyo "front-end" está desarrollado en lenguaje Python y ha sido concebido en función del posible crecimiento futuro del software. Entre otras novedades respecto a la versión anterior, se destacan el diseño multiplataforma (Windows, Linux, Mac), la posibilidad de comparar en un mismo gráfico los diagramas correspondientes a distintos casos (que pueden diferir por ejemplo en parámetros de interacción o incluso corresponder a distintos sistemas) y la graficación 3D, ya sea del espacio P-T-z (composición) o P-T-p (densidad). Se prevé a futuro incorporar nuevos modelos, así como también la posibilidad graficar sets de puntos experimentales junto a los diagramas calculados, y un módulo de ajuste de parámetros.



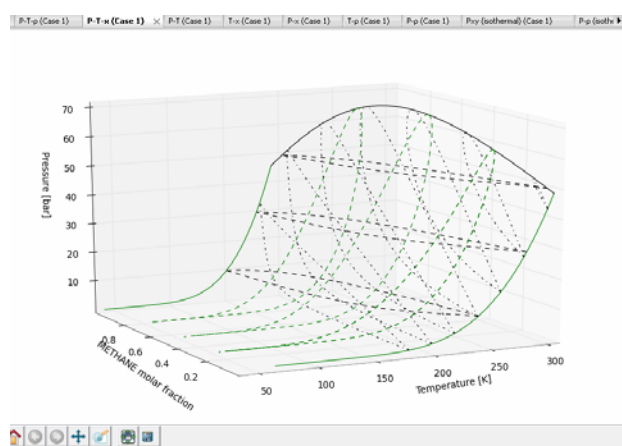
**Figura 1** Pantalla principal para la definición de caso (conjunción de un sistema binario y un modelo o ecuación de estado con los correspondientes parámetros de interacción) y visualización 2-D del diagrama global, en este caso Temperatura-Densidad.

## MÉTODOS

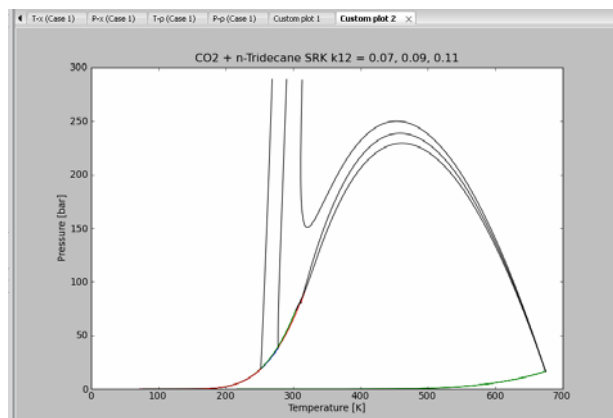
El nuevo front-end desarrollado para el software GPEC está desarrollado en lenguaje Python, basado principalmente en la biblioteca para graficación Matplotlib[6], y el toolkit para interfaces gráficas de usuario wxPython. Esta combinación de tecnologías permite un software íntegramente basado en Software Libre, capaz de ejecutarse en sistemas Windows, Linux o Mac y heredero de las ventajas de un lenguaje simple, potente y elegante.

El desarrollo de este trabajo ha sido enmarcado en el uso de *metodologías ágiles de desarrollo de software*, que sumado a las características de Python configuran una alta capacidad de adaptación al cambio e incorporación de requerimientos y un rápido prototipado de funcionalidades. Más aún, se ha utilizado una arquitectura basada en paso de mensajes (patrón publisher / subscriber o "pub/sub") que mantiene un acoplamiento bajo entre las distintas partes del programa, permitiendo flexibilidad y extensibilidad.

El nuevo front-end interactúa con los ejecutables que implementan los algoritmos de cálculo numérico (desarrollados en Fortran) de la misma manera que su versión precedente. Es decir, se ha respetado la interfaz de comunicación existente basada en archivos de texto plano. A través de un análisis sintáctico (parsing) de los archivos de salida, los datos numéricos se convierten a vectores de punto flotante manipulables en Python y graficables con Matplotlib. Además de producir gráficos con calidad de publicación exportables a múltiples formatos, esta biblioteca permite realizar gráficos en 3D, funcionalidad aprovechada en esta nueva versión como la más significativa mejora.



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



**Figura 3** Visualización 2-D (P-T) de tres diagramas globales, que permiten observar el efecto del parámetro de interacción  $k_{12}$ .

Por último, un aspecto especialmente estudiado ha sido la usabilidad y ergonomía del programa. El objetivo ha sido clarificar la interfaz para que su uso sea intuitivo manteniendo accesible toda la información y soportando a su vez múltiples casos en la misma sesión de trabajo. Esto permite comparar y/o superponer los resultados y acceder a los datos numéricos cuando es necesario.

## CONCLUSIONES

Una nueva interfaz de usuario o front-end ha sido desarrollada para el software GPEC, ya utilizado en todo el mundo –en la versión previa– para la generación y visualización de diagramas de fases de sistemas binarios a partir de ecuaciones de estado.

En el desarrollo de la nueva versión, que aprovecha las ventajas del lenguaje Python y las librerías y toolkits disponibles, se destacan entre otras características novedosas la visualización de diagramas 3-D y la superposición de diagramas correspondientes a casos diferentes para poder ser comparados visualmente.

## REFERENCIAS

- [1] M. Cismonti, Nuñez, D. N., Zabaloy, M. S., Brignole, E. A., Michelsen, M. L., Mollerup, J. M., GPEC: A Program for Global Phase Equilibrium Calculations in Binary Systems., in: EQUIFASE 2006: VII Iberoamerican Conference on Phase Equilibria and Fluid Properties for Process Design, Morelia, Michoacán, México., 2006.
- [2] M. Cismonti, M.L. Michelsen, Global phase equilibrium calculations: Critical lines, critical end points and liquid-liquid-vapour equilibrium in binary mixtures, *Journal of Supercritical Fluids*, 39 (2007) 287-295.
- [3] M. Cismonti, M. Michelsen, Automated calculation of complete Pxy and Txy diagrams for binary systems, *Fluid Phase Equilibria*, 259 (2007) 228-234.
- [4] M. Cismonti, Michelsen, M. L., Zabaloy, M.S., AUTOMATED GENERATION OF PHASE DIAGRAMS FOR SUPERCRITICAL FLUIDS FROM EQUATIONS OF STATE, in: 11th European Meeting on Supercritical Fluids, Barcelona, 2008.
- [5] M. Cismonti, M.L. Michelsen, M.S. Zabaloy, Automated generation of phase diagrams for binary systems with azeotropic behavior, *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 47 (2008) 9728-9743.
- [6] J. Hunter, F. Pérez, P. Greenfield, A. Straw, S. van der Walt, *Practical Scientific Computing in Python*.