



**BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA**

---

---

**Facultad Ciencias de la Computación**

Modelación del Grado de Endurecimiento de Resinas Fenólicas

**Tesis para obtener el título de:**

Licenciada en Ciencias de la Computación

**Presenta:**

Lorena Sánchez López

**Asesores de Tesis:**

Carlos Zamora Lima

Juana Deisy Santamaría Juárez

**Noviembre 2018**

## **Dedicatoria**

### **A mis padres**

Felicitas López y Pablo Sánchez por su paciencia, amor y esfuerzo que me han dado todos los días.

### **A mis hermanos**

Placido, Luminosa, María, José, Raymundo, Cristina y mis hermanos que hoy ya no se encuentran conmigo Filemón, Pablo.

## **Agradecimientos**

### **A mi familia**

Por su apoyo incondicional.

### **A mis asesores de tesis**

**Mtro. Carlos Zamora y Mtra. Deysi Santamaría**

Por su paciencia y el tiempo dedicado a la elaboración en este proyecto.

### **A Maestros y Amigos**

Quienes me brindaron sus conocimientos, amistad y su apoyo para seguir adelante en mi carrera profesional.

# Contenido

<b>CAPÍTULO I. INTRODUCCIÓN .....</b>	<b>1</b>
1.1 RESUMEN.....	1
1.2 ANTECEDENTES DEL PROYECTO.....	2
1.3 OBJETIVOS GENERALES Y ESPECÍFICOS DEL PROYECTO.....	4
<b>CAPÍTULO II. MARCO TEÓRICO .....</b>	<b>5</b>
2.1 RESINAS FENÓLICAS .....	5
2.2 ESPECTROSCOPIA DE INFRARROJO (FTIR-ATR).....	10
2.4 SPECTRUM ONE.....	12
2.4.1 Área de la banda de absorción mediante el software Spectrum One .....	12
2.5 MATLAB.....	16
<b>CAPÍTULO III. INTEGRACIÓN NUMÉRICA .....</b>	<b>17</b>
3.1 INTRODUCCIÓN .....	17
3.2 DEFINICIONES.....	18
3.2.1 Notación Sigma.....	18
3.2.2 Particiones de un intervalo .....	19
3.2.3 Área.....	19
3.2.4 Suma superiores e inferiores [23].....	21
3.3 APROXIMACIÓN NUMÉRICA.....	22
3.4 MÉTODOS DE APROXIMACIÓN NUMÉRICA.....	22
3.4.1 Sumas de Riemann.....	23
3.4.2 Métodos de Simpson [23] .....	25
3.4.2.1 Método de Simpson 1/3.....	25
3.4.3.2 Método de Simpson 1/3 compuesta .....	27
3.4.3.3 Método de Simpson 3/8.....	28
3.4.3.4 Método de Simpson 3/8 compuesta .....	29
<b>CAPÍTULO IV. APLICACIÓN DE ESCRITORIO.....</b>	<b>35</b>
4.1 INSTALACIÓN DEL PROGRAMA.....	37
4.2 COMO USAR EL PROGRAMA .....	42
<b>CAPÍTULO V. CONCLUSIONES.....</b>	<b>45</b>
<b>REFERENCIAS .....</b>	<b>46</b>
<b>APÉNDICES .....</b>	<b>49</b>
APÉNDICE A .....	49
APÉNDICE B.....	54
APÉNDICE C.....	62
APÉNDICE D .....	63
APÉNDICE E.....	65

# CAPÍTULO I. INTRODUCCIÓN

## 1.1 Resumen.

En la industria química son muy utilizadas las resinas fenólicas como materia prima para la producción de adhesivos, recubrimientos y pinturas, una desventaja del uso de estas materias primas es controlar la polimerización (entrecruzamiento de las moléculas) el cual está directamente relacionado con el grado de curado o endurecimiento, limitando sus propiedades térmicas y mecánicas. Por lo anterior es importante determinar el grado de endurecimiento de una resina para establecer su correcto almacenamiento antes de ser utilizada en el proceso de producción y proponer las proporciones adecuadas para preparar las mezclas en la formulación de un producto.

El grado de endurecimiento es un parámetro que se tiene que controlar debido a que de este depende la aplicación industrial de la resina. Modelar el grado de endurecimiento de una resina permitirá correlacionar este parámetro con sus propiedades físicas y químicas obtenidas experimentalmente y así establecer las condiciones de producción.

Las técnicas de análisis como la microdureza y termogravimetría para la determinación del grado de endurecimiento de las resinas son costosas. Una desventaja del uso de estas técnicas de caracterización es la falta de disponibilidad de estándares certificados, alto tiempo de trabajo experimental en el laboratorio y la exposición del analista a ambientes tóxicos. En la química analítica se encuentra disponible la técnica de espectrofotometría de infrarrojo (FTIR), la cual es una técnica analítica que permite obtener información inmediata de los grupos químicos que reaccionan durante el endurecimiento de la resina, los datos generados por esta técnica pueden ser utilizados para el modelado del endurecimiento de resinas.

## 1.2 Antecedentes del Proyecto.

Diversos autores han investigado nuevas metodologías para la caracterización del proceso de endurecimiento de resinas fenólicas por su amplio uso en la industria química (pinturas, recubrimientos, materiales cerámicos, ablativos).

La caracterización de estas resinas fenólicas es costosa, requiere de equipos especializados y alta demanda en el tiempo de caracterización. Uno de los parámetros más importantes a caracterizar de la resina fenólica es el grado de endurecimiento ya que de este depende sus propiedades térmicas y mecánicas. En la tabla 1 se presentan algunas investigaciones relacionadas con el trabajo de investigación a desarrollar.

**Tabla 1.** Antecedentes de investigación.

<b>Título del Artículo</b>	<b>Autores</b>	<b>Resultados</b>
Computational and Experimental Study of Phenolic Resins: Thermal–Mechanical Properties and the Role of Hydrogen Bonding. [1]	Joshua D. Monk, Eric W. Bucholz, Tane Boghuzian, Shantanu Deshpande, Jay Schieber, Charles W. Bauschlicher, Jr., and John W. Lawson, 2015.	<ul style="list-style-type: none"><li>• Utilizaron la simulación dinámica molecular para calcular el grado de entrecruzamiento de resinas novolac (endurecimiento).</li><li>• Paquete de software LAMMPS (Simulador Paralelo Masivo Atómico/Molecular a Gran Escala).</li></ul>
Atomistic molecular dynamics study of cross-linked phenolic resins. [2]	Atsushi Izumi, Toshio Nakao and Mitsuhiro Shibayama, 2012.	<ul style="list-style-type: none"><li>• Utilizaron la simulación dinámica molecular para determinar las</li></ul>

		<p>propiedades mecánicas de una resina novolac curada.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Paquete de software J-OCTA 1.3 y COGNAC 6.1.3.</li> </ul>
<p>Effect of microwave-assisted curing on bamboo glue strength: Bonded by thermosetting phenolic resin. [3]</p>	<p>Yu Zheng, Zehui Jiang, Zhengjun Sun, Haiqing Ren, 2014.</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Las propiedades térmicas y mecánicas de materiales de bambú mejoraron al ser tratados con resina fenólica a diferentes grados de curado.</li> </ul>
<p>Large-scale molecular dynamics simulation of crosslinked phenolic resins using pseudo-reaction model. [4]</p>	<p>Yasuyuki Shudo, Atsushi Izumi, Katsumi Hagita, Toshio Nakao, Mitsuhiro Shibayama, 2016.</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Simularon la estructura de red de resinas fenólicas reticuladas utilizando una simulación dinámica molecular.</li> <li>• Paquete de software J-OCTA y LAMMPS</li> </ul>

### 1.3 Objetivos Generales y Específicos del Proyecto.

#### General

- ✓ Modelar matemáticamente el comportamiento de la dureza de una resina fenólica tipo resol y realizar la simulación en Matlab de dicho parámetro.

#### Específicos.

- ✓ Obtener los espectros de infrarrojo en un espectrofotómetro de infrarrojo de la resina fenólica, endurecida a las temperaturas de 50°C, 100°C, 150°C, 160°C, 170°C, 180°C, 190°C, 200°C, 250 °C.
- ✓ Realizar el análisis cuantitativo de las áreas de absorción de endurecimiento de la resina fenólica en el software Spectrum One (Grupos funcionales).
- ✓ Generar una base de datos en Excel de espectros de infrarrojo de cada muestra.
- ✓ Generar los parámetros en el software Matlab para la modelación.
- ✓ Generar las tablas de grado de endurecimiento de las resinas fenólicas.
- ✓ Modelar los niveles de endurecimiento (Gráficas).
- ✓ Comparación de los grados de endurecimiento de la resina fenólica obtenidos mediante la modelación por los métodos: Sumas de Riemann, Regla de Simpson  $\frac{1}{3}$  Compuesta, Reglas de Simpson  $\frac{3}{8}$  Compuesta.
- ✓ Diseñar una aplicación de escritorio para el cálculo del grado de endurecimiento.

## CAPÍTULO II. MARCO TEÓRICO

### 2.1 Resinas Fenólicas

Es una resina sintética termoestable, tiene una consistencia pastosa, pegajosa y puede ser transparente o translúcida, está formada por fenol y formaldehído. [5]



**Figura 1.** Resina Fenólica. Fuente propia.

El fenol es un sólido cristalino a temperatura ambiente, el cual tiene un punto de fusión a 43°C y un punto de ebullición a 182 °C. El formaldehído es un líquido incoloro, es inflamable y tiene un olor fuerte.

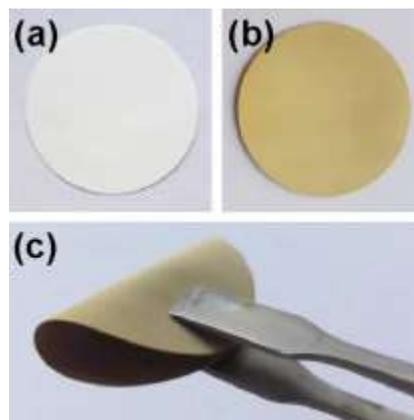
Las resinas fenólicas presentan diferentes propiedades:

- ✓ Excelentes características eléctricas
- ✓ Resistencia a temperaturas elevadas
- ✓ Resistencia al choque
- ✓ Resistencia a la abrasión
- ✓ Buena resistencia al ataque químico, de forma general, a los disolventes orgánicos
- ✓ Excelente adhesión a otras resinas

Entre sus aplicaciones podemos encontrar:

- ✓ Aeroespacial: Componentes de misiles, alas, fuselajes, etc.
- ✓ Aplicaciones domésticas: Interruptores, asas, etc.
- ✓ Automoción: Piezas ligeras para sustituir metales, frenos, pinturas, etc.
- ✓ Construcción: Espumas aislantes, techos, chapas para forrar paredes, pinturas, etc.
- ✓ Vestimenta: Botones, ropa tratada, etc.
- ✓ Eléctrico: Cuadro conexiones, recubrimientos, etc.
- ✓ Muebles: Puertas imitación madera, pantallas de lámparas, etc.
- ✓ Médico: Rellenos dentales, implantes ortopédicos, etc.
- ✓ Recreo: Raquetas tenis, barcas, etc.
- ✓ Herramientas: Papel de lija, etc.

Actualmente las resinas fenólicas además de ser ampliamente utilizadas en la industria química, son investigadas por varios autores por sus características ya mencionadas. De acuerdo a Qianqian Lan *et al* reportan la síntesis de membranas para el proceso de ultrafiltración a partir del uso de resina fenólica como relleno en sustratos macroporosos (material que tiene poros de un tamaño mayor que 50 nanómetros). [6]



**Figura 2.** Fotos ópticas de la membrana PVDF prístina (a) y llena de fenólica membranas después del tratamiento ácido (b, c).

Son utilizadas para la fabricación de materiales con alta resistencia a la llama, de acuerdo a Yaxi Chen el al estudiaron el efecto del  $ZrB_2$  (dióxido de zirconio) al modificar con este

compuesto a la resina fenólica se mejoraran las propiedades del material al someterla a una flama de oxiacetileno.



**Figura 3.** Photograph of the oxyacetylene ablation process.

Debido al desarrollo de la industria aeroespacial, los científicos han enfocado sus investigaciones en el diseño y fabricación de nuevos materiales especializados, mejorando las propiedades químicas, mecánicas y térmicas con el objetivo de hacerlos resistentes ante diferentes condiciones supercríticas (presión y temperatura superiores a su punto crítico), mejorar la resistencia al impacto a la oxidación (corrosión). Lograr lo anterior requiere el diseño de materiales con estructuras de peso ligero sin comprometer su desempeño mecánico. Los materiales pueden ser fabricados por diferentes procesos como el laminado para aplicaciones finales o para el reprocesamiento a través de termo-formado o moldeo por compresión. Dentro de los materiales utilizados para la industria aeroespacial se encuentran los materiales cerámicos avanzados, las fibras de carbón/grafito y una amplia variedad de resinas termoestables como la resina fenólica. [7] , los poliuretanos, resina epoxi y polidimetilsiloxanos [8].

Los materiales a base de carbón grafitizable son utilizados en varias aplicaciones como disipadores de calor, en la producción de piezas para pistones y camisas de cilindros para motores, componentes de misiles, alas y fuselajes. Sin embargo una de las desventajas de la grafitización de materiales poliméricos son la alta porosidad, la fácil oxidación y que son susceptibles a ser atacados por algunos disolventes orgánicos provocando un ablandamiento, ensanchamiento y reducción de la temperatura de transición vítrea (Tg). Es por eso que los mecanismos de oxidación de los materiales de carbón han sido investigados [9] . Una

opción para mantener o mejorar las características de los materiales de carbón es el uso de resinas fenólicas.

La resina fenólica pertenece a la familia de los termoestables, posee excelentes propiedades, tales como, alta estabilidad térmica, alta dureza y es utilizada como retardante al fuego [10], como aislamiento térmico, recubrimiento, adhesivo y material abrasivo [11]. Las resinas fenólicas se obtienen por la policondensación del fenol y formaldehído y las condiciones de operación, principalmente el pH y la temperatura, tienen un gran efecto sobre las propiedades del prepolímero [12]. El prepolímero (resina) obtendrá sus propiedades de acuerdo a la relación molar del fenol:formaldehído .

El problema a resolver al utilizar materiales de carbón y resinas fenólicas en la fabricación de materiales es establecer las características de los materiales precursores y controlar las condiciones de fabricación, como la humedad la cual influye en la tasa de oxidación de los materiales de carbón. La reacción entre el vapor de agua y el carbono a temperaturas por debajo de 773 K se considera insignificante. Uno de los procesos de bajo costo considerados para la fabricación de materiales de carbón es la impregnación y pirólisis de una resina fenólica [9] . El comportamiento de oxidación del carbón no grafitizable, como el coque a base de resina fenólica, ha sido objeto de investigaciones en aire seco. Chang y Rhee han estudiado el carbón basado en resina fenólica, tratado térmicamente a temperaturas que oscilan entre 1273 y 2673 K. Los resultados indican que la tasa de oxidación disminuye al aumentar la temperatura del tratamiento térmico [13].

La resistencia química y las propiedades termo-mecánicas del material fabricado dependen de la interacción de la resina con las fases del carbón, el tipo de termoformado y el tratamiento térmico de curado. Diversos trabajos indican la síntesis y caracterización de láminas de grafito/resina fenólica, de acuerdo a los resultados obtenidos los materiales presentan buenas propiedades como materiales ablativos [14].

Una gran desventaja que presentan las resinas fenólicas es que para poder producir algún material se tiene que controlar el grado de polimerización o curado el cual está relacionado con el **Grado de Endurecimiento**.

El curado de las resinas consiste en el aumento del tamaño de sus moléculas a través de procesos de alargamiento, ramificación y entrecruzamiento de las cadenas hidrocarbonadas para formar una red tridimensional de elevado peso molecular. [15]

Para poder lograr el aumento de tamaño de las moléculas de la resina fenólica tenemos que calentar la muestra a una cierta temperatura por un cierto tiempo.

El curado de las resinas termoestables es una de las etapas más importantes en el desarrollo de las propiedades de las resinas fenólicas, de esto dependerá su uso en la industria.

La fórmula para poder obtener el porcentaje de endurecimiento es la siguiente:

$$D = \left( 1 - \frac{\left( \frac{\text{Área OH}}{\text{Área C} = \text{C}} \right)_{\text{curada}}}{\left( \frac{\text{Área OH}}{\text{Área C} = \text{C}} \right)_{\text{no curada}}} \right) \times 100$$

Donde  $D$  es el grado de endurecimiento en porcentaje

$\text{Área OH}$  está en el rango de 3700 a 3400  $\text{cm}^{-1}$

$\text{Área C}=\text{C}$  está en el rango de 1500 a 1400  $\text{cm}^{-1}$

Diversos autores han utilizado esta fórmula para calcular el grado de entrecruzamiento en sus experimentos de resinas fenólicas modificadas por lo que puede ser utilizada.

Por otra parte la Facultad de Ingeniería Química ofrece dentro de sus servicios externos a la industria la caracterización de resinas (grado de endurecimiento, composición, viscosidad, etc). La metodología empleada consta de varios pasos experimentales lo que impide entregar los resultados en tiempo y forma. Por lo anterior se requiere el uso de nuevas tecnologías para la caracterización de estos materiales.

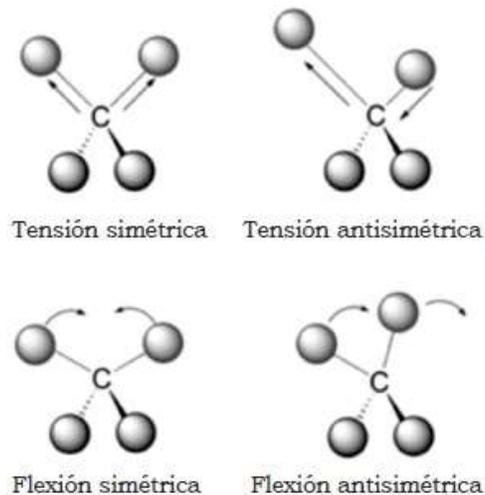
## 2.2 Espectroscopia de infrarrojo (FTIR-ATR)

La espectroscopia de infrarrojo es una técnica de análisis, para obtener información acerca de los procesos de absorción (absorbancia) y emisión (transmitancia) sobre las moléculas que se encuentran en la materia.

La espectroscopia de infrarrojo se fundamenta en la absorción de la radiación IR por las moléculas dando como resultado la vibración de los átomos de la molécula. Una molécula absorberá la energía de un haz de luz infrarroja cuando dicha energía incidente sea igual a la necesaria para que se dé una transición vibracional de la molécula. Es decir, la molécula comienza a vibrar de una determinada manera gracias a la energía que se le suministra mediante luz infrarroja.

El primer espectro de vibraciones moleculares fue observado en 1881 por Abney y Festing quienes prepararon emulsiones fotográficas sensibles al infrarrojo cercano y fotografiaron el espectro de absorción de 48 líquidos orgánicos. Encontraron bandas características en estos espectros, las cuales asociaron con la presencia de hidrógeno en las moléculas estudiadas. En 1892, Julius obtuvo el espectro infrarrojo de 20 compuestos orgánicos, encontrando que todos los compuestos que contienen metilo ( $-\text{CH}_3$ ) exhiben una banda de absorción de  $3.45 \mu\text{m}$  y llegó a la conclusión de que la absorción de ‘ondas caloríficas’ se debe a movimientos intramoleculares [16].

Existen dos categorías básicas de vibraciones: de tensión y de flexión. Las vibraciones de tensión son cambios en la distancia interatómica a lo largo del eje del enlace entre dos átomos. Las vibraciones de flexión están originadas por cambios en el ángulo que forman dos enlaces. En la siguiente figura se representan los diferentes tipos de vibraciones moleculares.



**Figura 4.** Tipo de vibraciones.

Cada molécula presenta un espectro IR característico (huella dactilar), debido a que todas tienen algunas vibraciones que, al activarse, provocan la absorción de una determinada longitud de onda en la zona del espectro electromagnético correspondiente al infrarrojo.

La región IR del espectro se encuentra entre  $12800-10\text{ cm}^{-1}$ . Tanto desde el punto de vista de las aplicaciones como de los aparatos se puede dividir en tres zonas:

- IR cercano (NIR) en  $12800-4000\text{ cm}^{-1}$
- IR medio (MIR) en  $4000-400\text{ cm}^{-1}$
- IR lejano (FIR) en  $400-10\text{ cm}^{-1}$

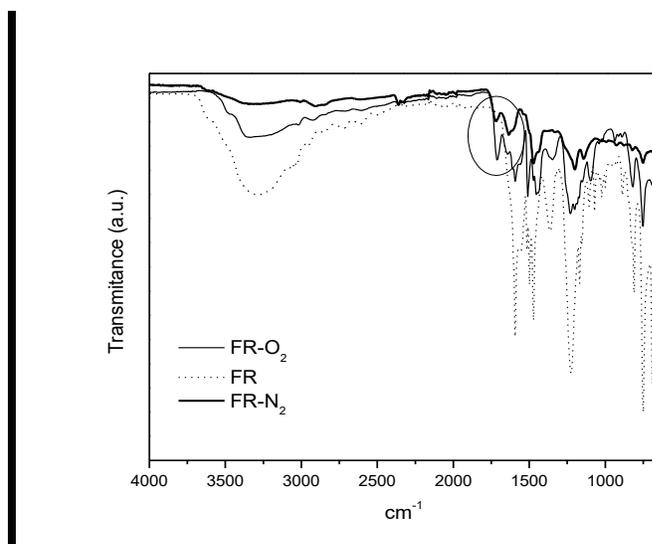
El IR medio es donde se dan la mayoría de las aplicaciones analíticas tradicionales, por lo anterior también es conocido como el infrarrojo de los compuestos orgánicos.

Una de las grandes ventajas de la espectroscopia IR es su versatilidad, ya que permite estudiar prácticamente cualquier muestra independientemente del estado en que se encuentre: líquidos, disoluciones, pastas, polvos, fibras, films, gases o superficies etc.

## 2.4 Spectrum ONE

Una plataforma de software única incorpora todas las funciones requeridas para análisis de infrarrojos; control de instrumentos, manipulación y análisis de datos, y utilidades de informes flexibles.

Con este software podremos obtener los espectros de infrarrojo (Figura 5), así como calcular las áreas de interés de las bandas características de las muestras de las resinas fenólicas endurecidas a diferentes temperaturas con el objetivo de poder obtener el grado de endurecimiento. [17]



**Figura 5.** Espectro de infrarrojo. Fuente propia.

### 2.4.1 Área de la banda de absorción mediante el software Spectrum One

Basándonos en el manual del Espectrofotómetro de infrarrojo existen tres métodos para poder obtener el área de las bandas de absorción:

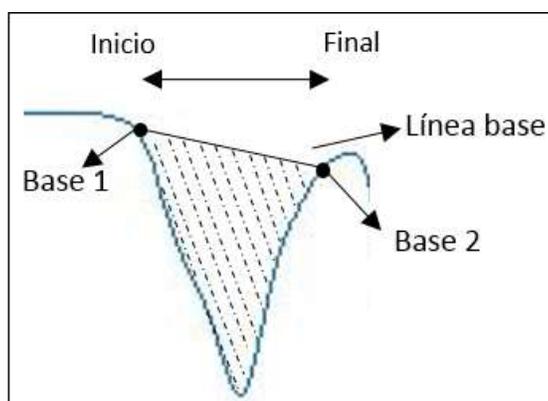
- El pico de las áreas relativas a una línea base, entre dos puntos de referencia, o entre otros dos puntos en el espectro.

- Alturas máximas desde un pico máximo a una línea base o a cero absorbancia.
- La altura máxima en la región seleccionada.

### Parámetros para calcular las áreas

- **Parámetros del área**

Un área se define por una línea marcada inicial y final y 2 puntos base, como se muestra en la siguiente figura:



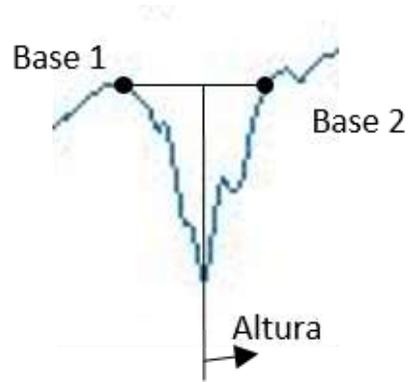
**Figura 6.** Parámetros del Área, Fuente propia.

El área total es el área entre el espectro de cero absorbancia o el 100% transmitancia que se encuentra dentro de los límites de la barra marcada.

El área correcta es el área entre el espectro y la línea base.

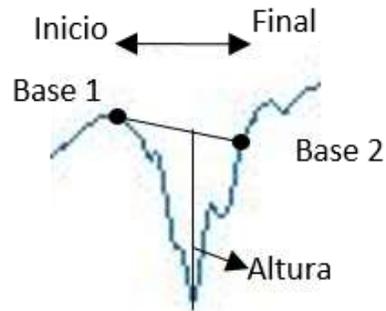
- **Parámetros para la altura**

La altura es definida por el inicio y el fin del valor de las abscisas y 2 puntos base.



**Figura 7.** Parámetros para la altura, Fuente propia.

La altura total es la altura desde la curva a la absorbancia cero. La altura correcta es la altura desde la curva a la línea base.

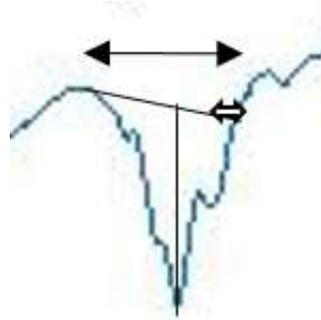


**Figura 8.** Altura de la curva, Fuente propia.

- **Mover área y marcadores con el mouse**

Mover un punto base:

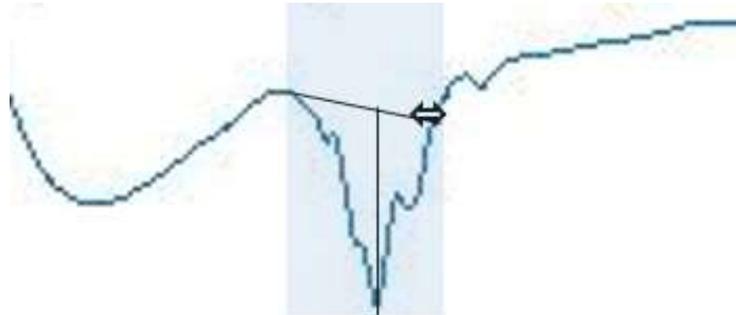
Arrastre la base a su nueva posición



**Figura 9.** Fuente propia.

Cambiar los valores de inicio y fin

1. Dar doble clic sobre la base marcada



**Figura 10.** Cambio de valores, Fuente propia

2. Arrastre los lados de las áreas sombreadas a sus nuevas posiciones, o mueva el área sombreada arrastrando desde su centro
3. Doble clic en el área sombreada nuevamente cuando haya terminado de editarlo

Una desventaja de este software es que al seleccionar con el mouse nuestras líneas base, ya que nuestro pulso no es exacto podemos tomar menos puntos o más puntos de los que necesitamos, y esto afectaría nuestros cálculos.

## 2.5 Matlab

MATLAB proviene de “MATrix LABoratory” (Laboratorio Matricial). MATLAB fue escrito originalmente para proporcionar un acceso sencillo al software matricial desarrollado por los proyectos LINPACK y EISPACK, que juntos representan lo más avanzado en programas de cálculo matricial. También es un sistema interactivo cuyo elemento básico de datos es una matriz que no requiere dimensionamiento, esto permite resolver muchos problemas numéricos en una fracción del tiempo que llevaría hacerlo en lenguajes como C, BASIC o FORTRAN.

MATLAB ha evolucionado en los últimos años a partir de la colaboración de muchos usuarios.

MATLAB ofrece un entorno interactivo sencillo mediante una ventana en la que podemos introducir órdenes en modo texto y en la que aparecen los resultados. Los gráficos se muestran en ventanas independientes.

En la industria, MATLAB se utiliza para investigación y para resolver problemas prácticos de ingeniería y matemáticas, con aplicaciones de control y procesamiento de señales.

Entre sus aplicaciones podemos encontrar, las GUI (también conocidas como interfaces gráficas de usuario o interfaces de usuario) permiten un control sencillo de las aplicaciones de software, lo cual elimina la necesidad de aprender un lenguaje y escribir comandos a fin de ejecutar una aplicación.

Por lo general, la GUI incluye controles tales como menús, barras de herramientas, botones y controles deslizantes. Muchos productos de MATLAB, como Curve Fitting Toolbox, Signal Processing Toolbox y Control System Toolbox, incluyen apps con interfaces de usuario personalizadas. También es posible crear apps personalizadas propias, incluidas las interfaces de usuario correspondientes, para que otras personas las utilicen [18].

Utilizaremos este software para realizar todos los cálculos necesarios y realizar la aplicación de escritorio para obtener las áreas de interés, las gráficas del espectro de infrarrojo, implementar la fórmula del grado de endurecimiento.

## CAPÍTULO III. INTEGRACIÓN NUMÉRICA

### 3.1 Introducción

Uno de los problemas que el cálculo integral trata de resolver es calcular el área de una figura plana delimitada por rectas por irregulares que sean.

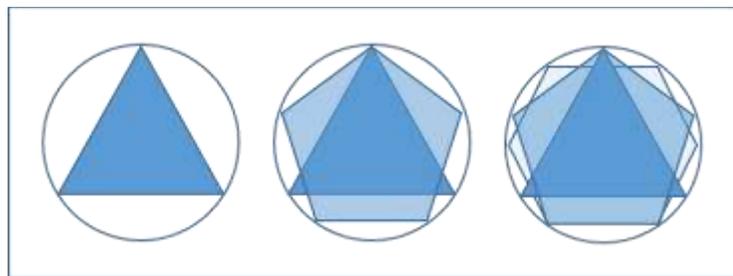
¿Cómo surge la Integración Numérica?

Surge por dos motivos fundamentalmente:

- La dificultad o imposibilidad en el cálculo de una primitiva,
- La función a integrar sólo se conoce por una tabla de valores.

Se atribuye a Eudoxo (390-337 a. C.) la invención del “método de exhaustión”, una técnica para calcular el área de una región aproximándola por una sucesión de polígonos. La cual consiste en lo siguiente:

“Dada una región cuya área quiere determinarse, se inscribe en ella una región poligonal que se aproxime a la dada y cuya área sea de fácil cálculo. Luego se elige otra región poligonal que dé una aproximación mejor y se continúa el proceso tomando polígonos con mayor número de lados cada vez, teniendo a llenar la región dada” [19].



**Figura 11.** Método de exhaustión, Fuente propia.

Arquímedes de Siracusa (287-212 a. de C.) perfeccionó este método y, entre otros resultados, calculó el área de un segmento de parábola y el volumen de un segmento de paraboloides, así como el área y el volumen de una esfera.

Un gran logro del cálculo fue reemplazar estos procedimientos especiales y restringidos por un método general. Fue hasta el siglo XVII donde el cálculo integral tuvo un gran impulso gracias Isaac Newton (1642-1727) y Gottfried Leibniz (1646-1716) [20].

En este capítulo veremos algunos métodos de integración que ocuparemos para poder resolver el problema del “Grado de Endurecimiento de Resinas Fenólicas”.

## 3.2 Definiciones

### 3.2.1 Notación Sigma

Para calcular áreas e integrales con frecuencia se usa sumas y lo denotamos con la letra griega  $\Sigma$  (sigma mayúscula), en lo que se llama notación de sumatoria o notación sigma [21].

**Definición:** Sea  $a_m, a_{m+1}, a_{m+2}, \dots, a_n$  son números reales y  $m, n$  son números enteros tales que  $m \leq n$ , tenemos:

$$\sum_{i=m}^n a_i = a_m + a_{m+1} + a_{m+2} + \dots + a_n$$

donde  $i$  es el índice de la suma,  $a_i$  es el  $i$ -ésimo término de la suma y  $m, n$  son los límites inferior y superior de la suma.

**Ejemplos:**

$$\sum_{i=1}^5 i = 1 + 2 + 3 + 4 + 5$$

$$\sum_{k=1}^n \frac{1}{k} = 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{3} + \dots + \frac{1}{n}$$

$$\sum_{i=1}^n f(x_i) \Delta x = f(x_1)\Delta x + f(x_2)\Delta x + \dots + f(x_n)\Delta x$$

### Propiedades

Si  $c$  es una constante y si no depende de  $i$ , entonces

$$\sum_{i=m}^n c a_i = c \sum_{i=m}^n a_i$$

$$\sum_{i=m}^n (a_i - b_i) = \sum_{i=m}^n a_i - \sum_{i=m}^n b_i$$

$$\sum_{i=m}^n (a_i + b_i) = \sum_{i=m}^n a_i + \sum_{i=m}^n b_i$$

### 3.2.2 Particiones de un intervalo

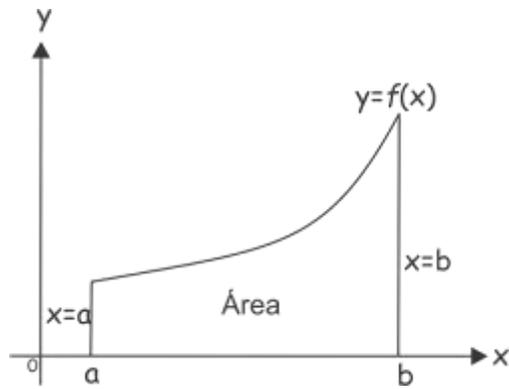
**Definición:** Se llama partición de un intervalo cerrado  $[a, b]$  a cualquier conjunto finito de puntos  $P = \{x_0, x_1, x_2, \dots, x_n\}$  tales que  $a = x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_n = b$  [20]. Una partición divide al intervalo como unión de intervalos más pequeños, es decir:

$$[a, b] = [a, x_1] \cup [x_1, x_2] \cup \dots \cup [x_{n-2}, x_{n-1}] \cup [x_{n-1}, b] = \bigcup_{i=1}^n [x_{i-1}, x_i]$$

La longitud de estos subintervalos se denomina incremento de  $x_i$ , se representa por  $\Delta x_{i-1} = [x_i - x_{i-1}]$  para  $i \in \{1, 2, \dots, n\}$ .

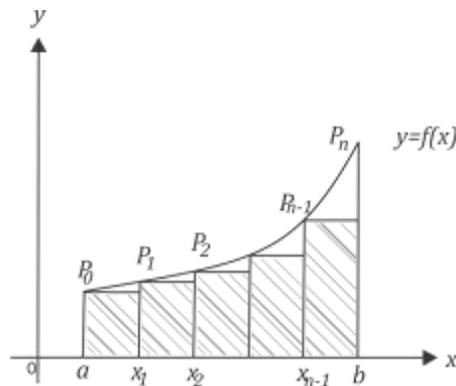
### 3.2.3 Área

**Definición:** Sea  $f$  una función no negativa y acotada en un intervalo cerrado  $[a, b]$ , el área bajo la curva es el área de la región limitada por la gráfica de la función  $f$ , el eje  $x$ , y las rectas  $x = a, x = b$ , como la siguiente figura: [12]



**Figura 12.** Área bajo la curva, Fuente propia.

Dividimos el intervalo  $[a, b]$  en  $n$  partes iguales que será  $\Delta x = (b - a)/n$  mediante rectas que pasan por los extremos  $x = a, x = b$  y los puntos intermedios que se enumeran como  $x_1, x_2, \dots, x_n$ , como se muestra en la figura:



**Figura 13.:** Área bajo la curva  $y = f(x)$  dividiendo el intervalo  $[a, b]$  en rectángulos, Fuente propia.

Por ejemplo de la figura anterior aproximamos el rectángulo sombreado  $aP_0P_1x_1$ , que tiene como base  $ax_1$  el área del rectángulo será:

$$f(a) * (x_1 - a) = f(a) * \Delta x$$

donde la altura del rectángulo  $aP_0$  es el valor de  $f$  en  $x=a$  y la base es  $x_1 - a = \Delta x$ , entonces el rectángulo tendrá como área:

$$f(x) * \Delta x$$

### 3.2.4 Suma superiores e inferiores [23]

**Definición:** Sea  $f: [a, b] \rightarrow R$  una función acotada y  $P \in \mathcal{P}[a, b]$ . En cada subintervalo  $[x_{i-1}, x_i]$ , considemos el inferior y el superior de  $f$  en el:

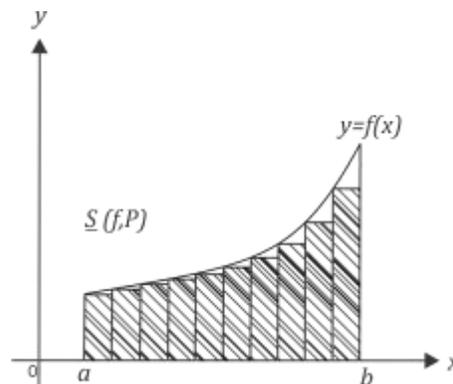
$$m_i = \inf\{f(x) : x \in [x_{i-1}, x_i]\}$$

$$M_i = \sup\{f(x) : x \in [x_{i-1}, x_i]\}$$

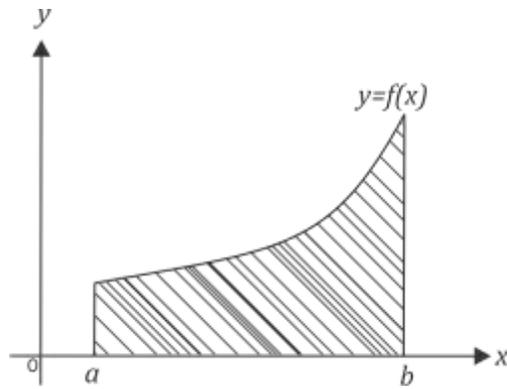
Llamaremos suma inferior de  $f$  para la partición  $P$  al valor  $\underline{S}(f, P) = \sum_{i=1}^n m_i \Delta x_i$

Llamaremos suma superior de  $f$  para la partición  $P$  al valor  $\bar{S}(f, P) = \sum_{i=1}^n M_i \Delta x_i$

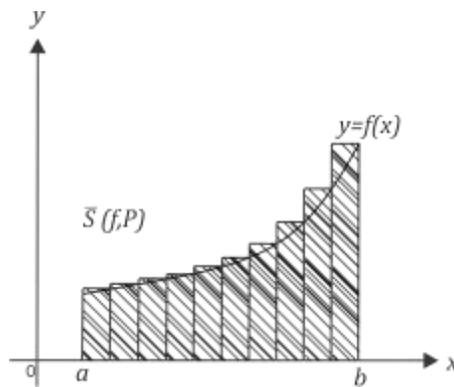
Si la función es positiva, gráficamente las sumas inferiores significan que un valor menor al área que encierra la función, y las sumas superiores dan un valor mayor al área que encierra la función, como lo muestran las siguientes figuras:



**Figura 14.** Área menor a la de la función  $y = f(x)$ , Fuente propia.



**Figura 15.** Area de la función  $y = f(x)$ , Fuente propia.



**Figura 16.** Área superior a la de la función  $y = f(x)$ , Fuente propia.

### 3.3 Aproximación Numérica

**Definición:** Procedimiento mediante el cual se obtiene, casi siempre de manera aproximada, la solución de ciertos problemas realizando cálculos aritméticos y lógicos. [24]

Tal procedimiento consiste de una lista finita de instrucciones precisas que especifican una secuencia de operaciones algebraicas y lógicas, que producen o bien una aproximación de la solución del problema.

### 3.4 Métodos de Aproximación Numérica

Dado que no contamos con una función definida y solo tenemos los datos de absorbancia obtenidos del espectrofotómetro, utilizaremos los métodos de Sumas de Riemann, Método de Simpson 1/3, Método de Simpson 3/8, para aproximar las áreas bajo las curvas.

El error de la aproximación, que depende del método que se utilice y de qué tan fino sean los subintervalos, puede llegar a ser tan pequeño que es posible obtener un resultado idéntico a la solución analítica en las primeras cifras decimales.

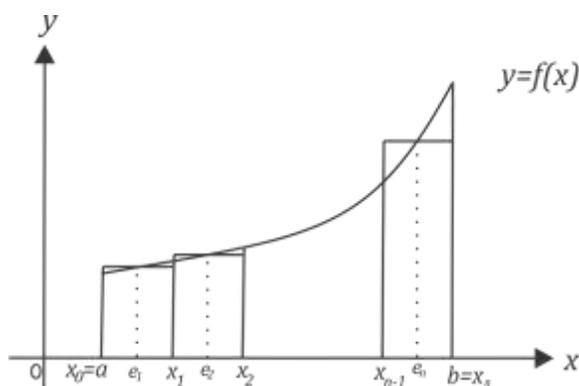
### 3.4.1 Sumas de Riemann

**Bernhard Riemann** (1826- 1866), en un artículo publicado en 1854 define por primera vez el concepto de integral de Riemann y se inicia la teoría de funciones de una variable real.

Este tipo de integral se define como la suma finita de áreas de rectángulos. Estos se definen en base a una partición de un intervalo  $[a, b]$  donde se quiere calcular la integral, como altura de los rectángulos hay varias opciones, el máximo o mínimo de la función en el subintervalo, el promedio del valores máximos y mínimos o cogiendo el valor de la función en los extremos del mismo. Al aumentar el número de rectángulos la suma de sus áreas aproxima mejor el área de la integral.

**Definición:** Sea  $f: [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ ,  $P = \{x_0, x_1, x_2, \dots, x_n\}$  una partición cualquiera del intervalo, elegimos un conjunto de la forma  $E = \{e_1, e_2, \dots, e_n\}$  tal que  $e_i \in [x_{i-1}, x_i]$ , para todo  $i = 1, 2, \dots, n$ . [20]. Se llama **Suma de Riemann** de la función  $f$  para la partición  $P$  y el conjunto  $E$  como:

$$S(f, P, E) = \sum_{i=1}^n f(e_i) \Delta x_i$$



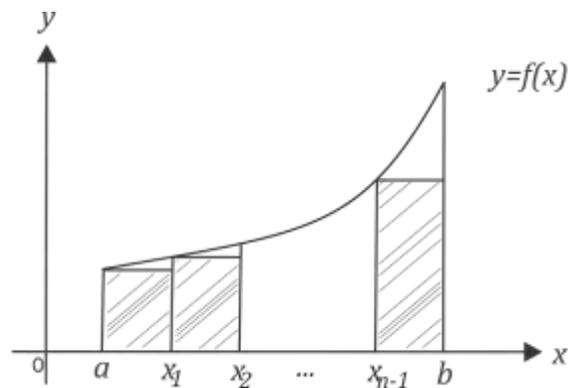
**Figura 17.** Fuente propia.

$f$  es una función no negativa en el intervalo  $[a, b]$ , cada rectángulo con base  $\Delta x_i$  y la altura  $f(e_i)$ .

**Observación:** La suma de Riemann evidentemente depende de los puntos  $e_i$  elegidos.

En una suma de Riemann izquierda aproximamos el área con rectángulos, donde la altura de cada rectángulo es igual al valor de la función en el extremo izquierdo de su base.

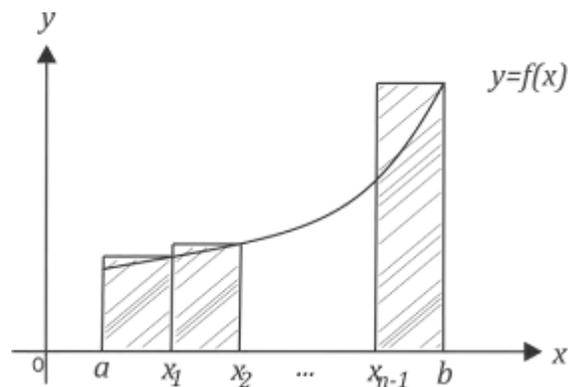
$$\sum_{i=1}^n f(x_{i-1})\Delta x_i$$



**Figura 18.** Sumas de Riemann Izquierda, Fuente propia.

En una suma de Riemann derecha la altura de cada rectángulo es igual al valor de la función en el extremo derecho de su base.

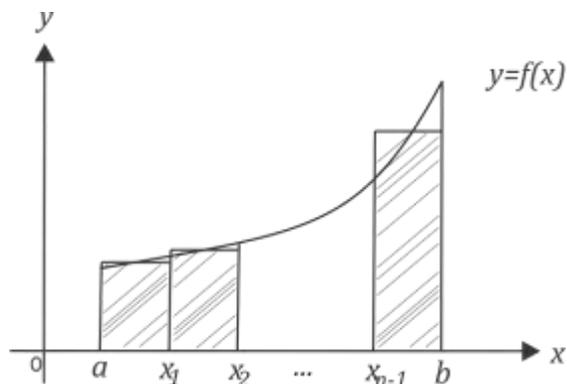
$$\sum_{i=1}^n f(x_i)\Delta x_i$$



**Figura 19.** Suma de Riemann Derecha, Fuente propia.

En una suma de **Riemann de punto medio** la altura de cada rectángulo es igual al valor de la función en el punto medio de su base.

$$\sum_{i=1}^n f\left(\frac{x_i + x_{i-1}}{2}\right) \Delta x_i$$



**Figura 20.** Suma de Riemann Punto medio, Fuente propia.

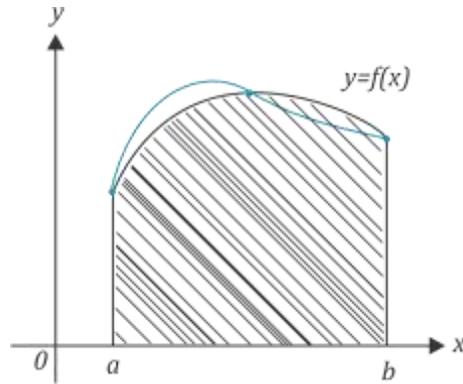
Esta última fórmula es la que utilizaremos para tener una mejor aproximación del área bajo nuestras curvas de los intervalos del -OH y -C=C-.

### 3.4.2 Métodos de Simpson [23]

#### 3.4.2.1 Método de Simpson 1/3

La regla o método de Simpson es nombrada así en honor a **Thomas Simpson**.

El método de Simpson aproxima el área bajo la curva de  $f(x)$  mediante una parábola como se muestra en la figura:



**Figura 21.** Método de Simpson 1/3 simple, Fuente propia.

El Método de Simpson es un método de Newton-Cotes a los que se basan en integrar, en lugar de la función dada  $f(x)$ , un polinomio de interpolación de segundo grado que aproxime a  $f(x)$  en  $[a; b]$ .

$$\int_a^b f(x) dx \approx \int_a^b f_2(x) dx$$

Entonces dada la función  $f_2(x)$  en el intervalo  $[a; b]$ , tomaremos como tercer punto para la interpolación, el punto medio de dicho intervalo, es decir:  $m = a + b/2$  que tendrá un anchura  $h = f(m) = b - a/2$ , tenemos que nuestra parábola pasaría por estos puntos  $((a, f(a)), (m, f(m)), (b, f(b)))$ , expresados a través de la interpolación polinómica de Lagrange tenemos que:

$$f_2(x) \approx f(a) \frac{(x-m)(x-b)}{(a-m)(a-b)} + f(m) \frac{(x-a)(x-b)}{(m-a)(m-b)} + f(b) \frac{(x-a)(x-m)}{(b-a)(b-m)}$$

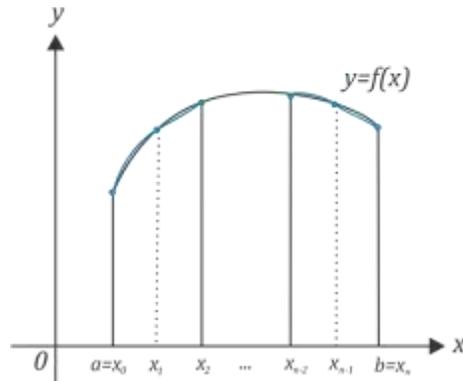
Después de realizar los debidos procedimientos algebraicos, obtenemos que

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{h}{3} [f(a) + 4f(m) + f(b)]$$

Esta aproximación se le denomina “forma simple” debido a que solo utiliza un polinomio.

### 3.4.3.2 Método de Simpson 1/3 compuesta

Para poder tener una mejor aproximación del método de Simpson de 1/3, se puede dividir el intervalo  $[a, b]$ , en  $n$  subintervalos iguales como se muestra en la siguiente figura:



**Figura 22.** Método de Simpson 1/3 compuesta, Fuente propia.

Aplicaremos en cada uno de los subintervalos la ecuación del método simple, para que finalmente se haga la suma de los resultados obtenidos, y obtener el área total de nuestra curva.

Entonces a partir de la ecuación:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{3}[f(a) + 4f(m) + f(b)]$$

Aplicando esta expresión con una mayor cantidad de puntos intermedios, puede definirse la variante “compuesta” del método, donde se utilizan  $N$  puntos que corresponden a  $n = N - 1$  subintervalos, la cual requiere que el número de subintervalos sea un número par.

Entonces si partimos el intervalo  $[a, b]$  en  $n$  subintervalos con la misma anchura  $h = b - a/n$ , obtenemos la partición  $\{x_0, x_1, x_2, \dots, x_n\}$ , asignamos los extremos como  $x_0 = a$  y  $x_n = b$ , la integral la podemos representar como:

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx + \int_{x_2}^{x_4} f(x)dx + \dots + \int_{x_{n-2}}^{x_n} f(x)dx$$

Sustituyendo la regla de Simpson en cada  $f(x)$  tenemos:

$$\frac{h}{3}[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)] + \frac{h}{3}[f(x_2) + 4f(x_3) + f(x_4)] + \dots$$

$$+ \frac{h}{3}[f(x_{n-2}) + 4f(x_{n-1}) + f(x_n)]$$

Agrupando términos obtenemos:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{3}[f(x_0) + 4 \sum_{i=1}^{\frac{n}{2}} f(x_{2i-1}) + 2 \sum_{j=1}^{(\frac{n}{2})-1} f(x_{2j}) + f(x_n)]$$

Donde las sumas nos representan:

- Suma de todos los números en la posición impar

$$\sum_{i=1}^{n/2} f(x_{2i-1})$$

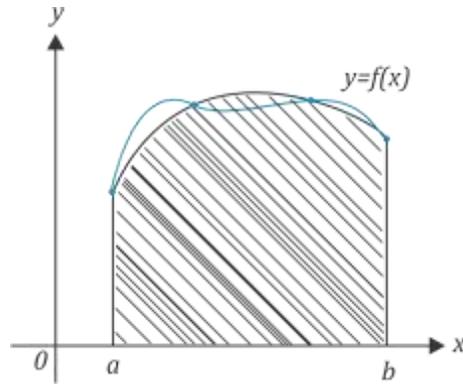
- Suma de todos los números en la posición par

$$\sum_{j=1}^{(\frac{n}{2})-1} f(x_{2j})$$

Aplicaremos la fórmula de Método de Simpson 1/3 compuesta, para tener una aproximación de las áreas bajo la curva de los intervalos de -OH y -C=C-.

### 3.4.3.3 Método de Simpson 3/8

Simpson 3/8, que consiste en tomar el área bajo una ecuación cúbica que une cuatro puntos, como se muestra en la siguiente figura:



**Figura 23.** Método de Simpson 3/8 simple, Fuente propia.

De una manera muy similar al método de Simpson 1/3, necesitamos un polinomio de interpolación de tercer orden que aproxime la función  $f(x)$  en el intervalo  $[a, b]$ :

$$\int_a^b f(x) dx \approx \int_a^b f_3(x) dx$$

Sustituyendo el polinomio de tercer orden y realizando las operaciones algebraicas correspondientes, obtendremos:

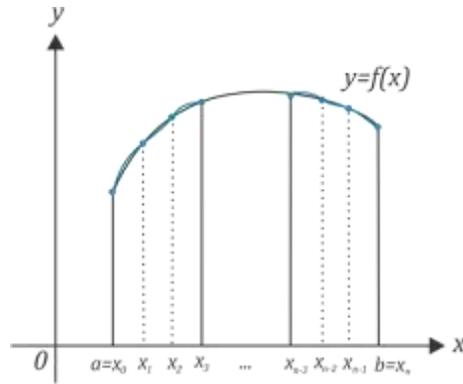
$$\int_a^b f(x) dx \cong \frac{3h}{8} [f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)]$$

Donde  $h = (b - a)/3$ ,

A este método se le conoce como método de Simpson 3/8 simple.

#### 3.4.3.4 Método de Simpson 3/8 compuesta

Igual que los métodos anteriores, Simpson 3/8 se puede dividir en subintervalos, aplicar Simpson 3/8 simple en cada subintervalo y al final sumar cada uno de ellos para tener un área más exacta de nuestra función  $f(x)$ .



**Figura24.** Método de Simpson 3/8 compuesta, Fuente propia.

Dada la expresión del método Simpson 3/8 simple

$$\int_a^b f(x) dx \cong \frac{3h}{8} [f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)]$$

Dividimos la función  $f(x)$  en el intervalo  $[a, b]$ , en  $n$  subintervalos, donde  $n$  tiene que ser múltiplo de 3, cada subintervalo tendrá una anchura de  $h = (b - a)/n$ , en cada subintervalo sustituimos el método 3/8 simple, haciendo las operaciones correspondientes tenemos:

$$\int_a^b f(x) dx \cong \frac{3h}{8} \left[ f(x_0) + 3 \sum_{i=1}^{n-2} f(x_i) + 3 \sum_{i=2}^{n-1} f(x_i) + 2 \sum_{i=3}^{n-3} f(x_i) + f(x_n) \right]$$

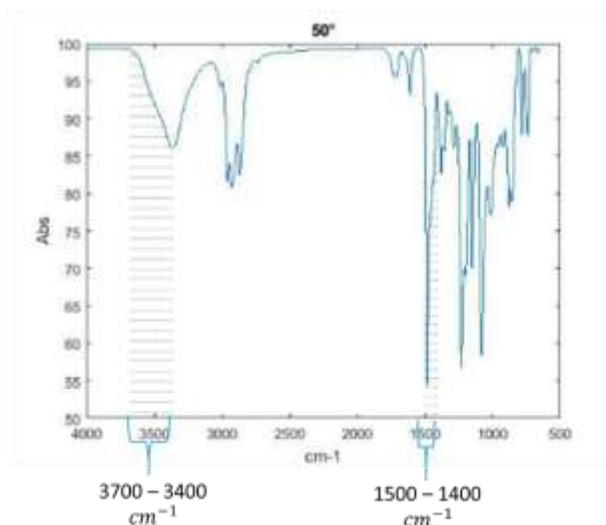
Donde  $i = i + 3$ .

Aplicaremos la fórmula de Método de Simpson 3/8 compuesta, para tener una aproximación de las áreas bajo la curva de los intervalos de -OH y -C=C-.

### 3.5 Aplicación de los Métodos Numéricos

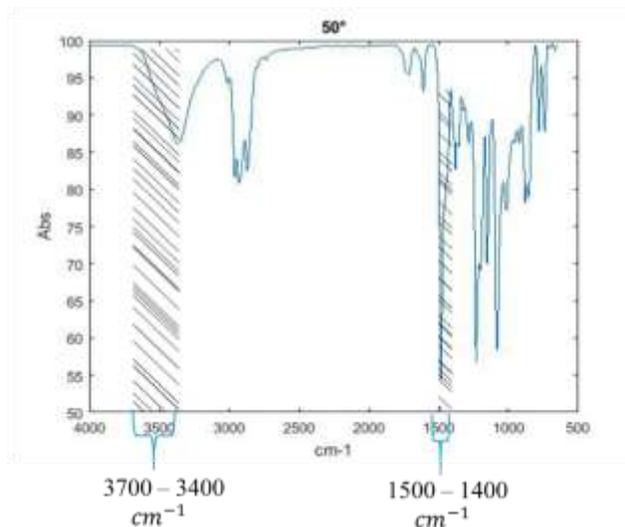
Aplicaremos estos 3 métodos a nuestro problema principal que es encontrar el grado de endurecimiento de una resina fenólica, tenemos que seguir los siguientes pasos:

1. Dado el espectro de infrarrojo de la resina fenólica debemos calcular el área bajo la curva del intervalo  $3700 - 3400 \text{ cm}^{-1}$  que corresponde al grupo de  $-OH$ , como se muestra en la figura 25.
2. Dado el espectro de infrarrojo de la resina fenólica debemos calcular el área bajo la curva del intervalo  $1500-1400 \text{ cm}^{-1}$  que corresponde al grupo de  $-C = C -$ , como se muestra en la figura 25.



**Figura 25.** Área bajo la curva del espectro de infrarrojo de resina fenólica, intervalo  $3700-3400 \text{ cm}^{-1}$  y  $1500-1400 \text{ cm}^{-1}$ , Fuente propia.

3. Dado el espectro de infrarrojo de la resina fenólica debemos calcular el área dada del punto más alto del intervalo  $3700 - 3400 \text{ cm}^{-1}$  que corresponde al grupo de  $-OH$  como se muestra en la figura 26.
4. Dado el espectro de infrarrojo de la resina fenólica debemos calcular el área dada del punto más alto del intervalo  $1500-1400 \text{ cm}^{-1}$  que corresponde al grupo de  $-C = C -$  como se muestra en la figura 26.



**Figura 26.** Área dado el punto más alto del espectro de infrarrojo de resina fenólica, intervalo  $3700-3400\text{ cm}^{-1}$  y  $1500-1400\text{ cm}^{-1}$ , Fuente propia.

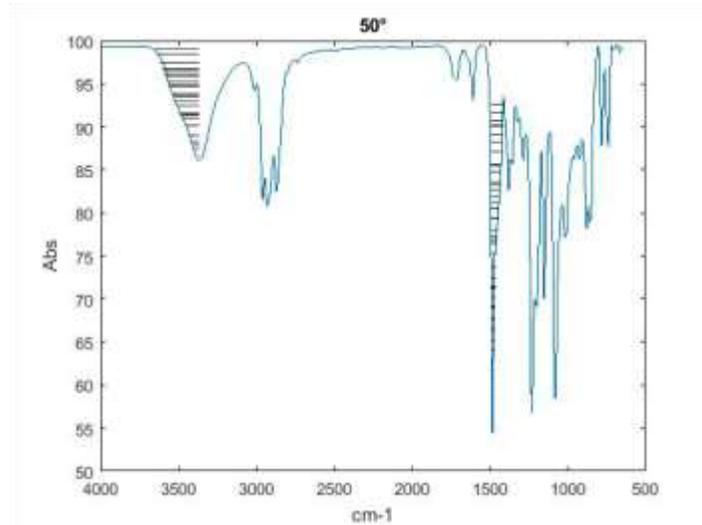
5. Para cada método implementado debemos saber el número de subintervalos en el que se va a dividir los intervalos del  $-OH$  y  $-C=C-$  tanto para la resina fenólica base y la resina fenólica curada, tendremos en cuenta la siguiente tabla:

**Tabla 2.** Datos para obtener las áreas del  $-OH$  y  $-C=C-$ .

	Sumas de Riemann		Simpson 1/3		Simpson 3/8	
	-OH	-C=C-	-OH	-C=C-	-OH	-C=C-
<b>a</b>	3700	1500	3700	1500	3700	1500
<b>b</b>	3400	1400	3400	1400	3400	1400
<b>n =  b - a </b>	300	100	300	100	300	99
<b><math>\Delta x = ( b - a )/n</math></b>	1	1	1	1	1	1

**Observación:** en el método de **Simpson 3/8** en el intervalo de  $-C=C-$  observamos que  $n=99$  esto dado que el método nos pide que  $n$  sea múltiplo de 3, por ello aplicamos  $n = |(b - a) - 1|$ .

6. Calcular la diferencia del área del punto más alto y el área bajo la curva de los intervalos -OH y -C=C-, para obtener las áreas de interés como se muestran en la figura 27.



**Figura 27.** Área de interés del espectro de infrarrojo de resina fenólica, intervalo 3700-3400  $\text{cm}^{-1}$  y 1500-1400  $\text{cm}^{-1}$ , Fuente propia.

7. Las áreas obtenidas, las sustituiremos en la fórmula del grado de endurecimiento vista en el marco teórico y obtendremos el porcentaje de dicha resina fenólica.

#### **Formula grado de endurecimiento**

$$D = \left( 1 - \frac{\left( \text{Área OH} / \text{Área C} = \text{C} \right)_{\text{curada}}}{\left( \text{Área OH} / \text{Área C} = \text{C} \right)_{\text{no curada}}} \right) \times 100$$

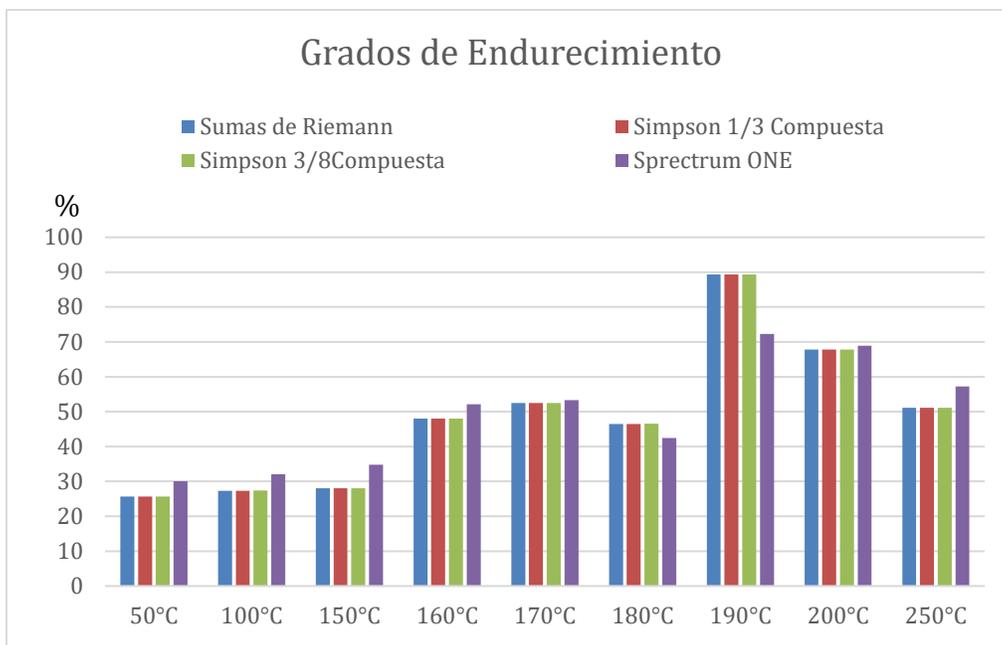
Siguiendo todos los pasos anteriores y aplicándolos a la resina fenólica No curada (temperatura ambiente 25 °C) y la resina fenólica curada (puede obtenerse de las muestras que mandan de la industria o de las muestras sintetizadas en laboratorio), obtendremos los siguientes resultados:

**Tabla 3.** Resultados del grado de endurecimiento

°C	Riemann (%)	Simpson 1/3 (%)	Simpson 3/8 (%)	Spectrum ONE (%)
<b>50</b>	25.618037	25.618318	25.674238	30
<b>100</b>	27.302923	27.303254	27.353248	32.0911
<b>150</b>	28.020368	28.020675	28.076024	34.8191
<b>160</b>	48.047387	48.047344	48.021269	52.1123
<b>170</b>	52.494434	52.494423	52.5112	53.2918
<b>180</b>	46.441511	46.441615	46.542813	42.4711
<b>190</b>	89.359878	89.359925	89.373439	72.3240
<b>200</b>	67.83959	67.839269	67.856125	68.9390
<b>250</b>	51.084287	51.082736	51.102317	57.2110

En la **Tabla 3** se observa en base a los resultados obtenidos que los tres procedimientos matemáticos implementados en el software Matlab son parecidos, en comparación con los resultados de experimentales obtenidos en el software Spectrum ONE del espectrofotómetro de infrarrojo. De los tres métodos propuestos el que más se acerca a los resultados experimentales obtenidos de laboratorio es el método de Simpson 3/8.

En la siguiente gráfica podemos concluir que el mejor rango para evaluar el grado de endurecimiento de una resina a base de fenol formaldehído es de 50°C a 190 °C, lo anterior debido que a 200°C y 250 °C la resina fenólica se degrada (se carboniza) y con esto se pierde los grupos orgánicos que se detectan por espectroscopia de infrarrojo.

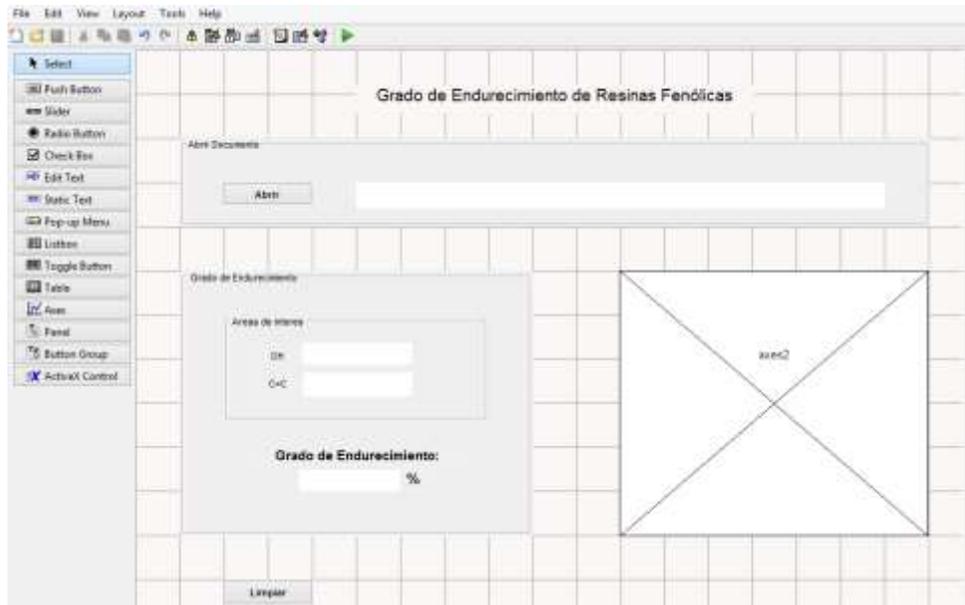


**Grafica 1.** Grados de endurecimiento

## CAPÍTULO IV. APLICACIÓN DE ESCRITORIO

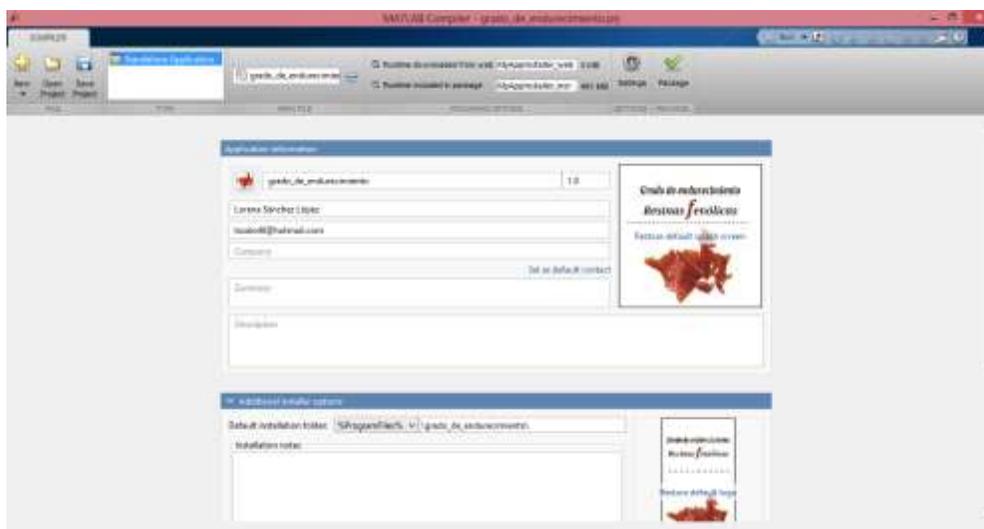
**GUIDE** (Graphical User Interfase Development Environment) es una de las herramientas que se extiende por completo el soporte de MATLAB, diseñadas para crear **GUIs** (Graphical User Interfaces) donde puedes realizar la interfaz de un sistema con solo seleccionar, tirar, arrastrar y personalizar propiedades. Una vez que los controles están en posición se editan las funciones de llamada (Callback) de cada uno de ellos, escribiendo el código de MATLAB que se ejecutará cuando la opción sea utilizada.

Aplicando esta herramienta de **Matlab** se realizó una aplicación de escritorio donde nos mostrara el grado de endurecimiento de una resina fenólica, el espectro de infrarrojo, las áreas de interés (-OH y -C=C-).



**Figura 28.** Interfaz GUI “Grado de endurecimiento de una resina fenólica”, Fuente propia.

Una vez realizada la interfaz y realizarlas funciones correspondientes, aplicaremos “Application Compiler”, herramienta que nos ayudara a generar la aplicación de escritorio con las características correspondientes (iconos, derechos de autor, archivos complementarios, etc).



**Figura 29.** Generador de aplicaciones, Fuente propia.

Nos generará una carpeta con el nombre de nuestra aplicación donde podremos encontrar las siguientes carpetas:

- ***for\_redistriburion*** Carpeta que contiene el archivo que instala la aplicación Grado de Endurecimiento de Resinas Fenolicas.exe.
- ***for\_redistribution\_file\_only*** Carpeta que contiene el archivo ejecutable de la aplicación para el usuario que tengan instalado Matlab o Matlab Runtime.
- ***for\_testing***: Carpeta que contiene todos los artefactos creados por mcc, como binarios y JAR, encabezado y archivos de origen para un objetivo específico. Utilice estos archivos para probar la instalación.
- ***PackagingLog.txt***: Archivo de registro generado por MATLAB Compiler.

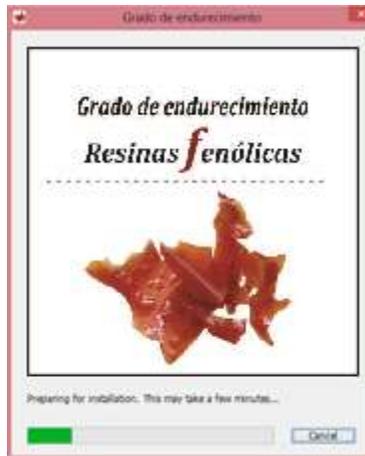
#### 4.1 Instalación del programa

De las carpetas generadas por “Application Compiler”, instalaremos el ejecutable que se encuentra en la carpeta “for\_redistribution”.



**Figura 30.** Icono de instalación del programa “Grado de endurecimiento”, Fuente propia.

Esperaremos a que abra y nos mostrara la siguiente ventana, donde se estará preparando para la instalación.



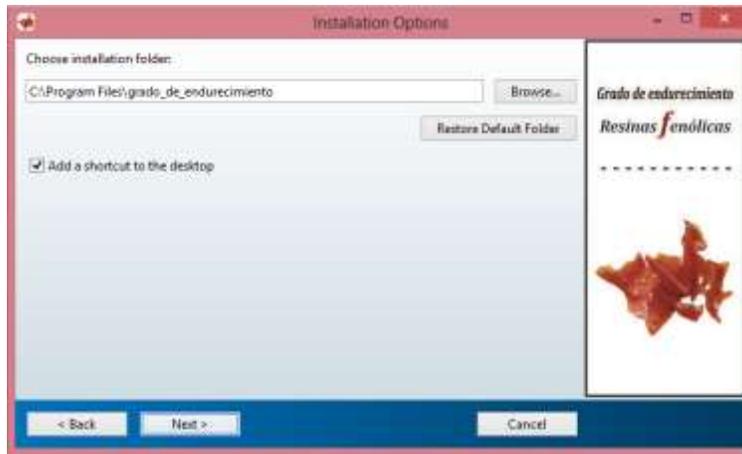
**Figura 31.** Preparando para la instalación, Fuente propia.

Primera ventana, donde muestra nombre y versión del programa, nombre de quien lo creo, y correo electrónico, daremos clic en el botón “Next”



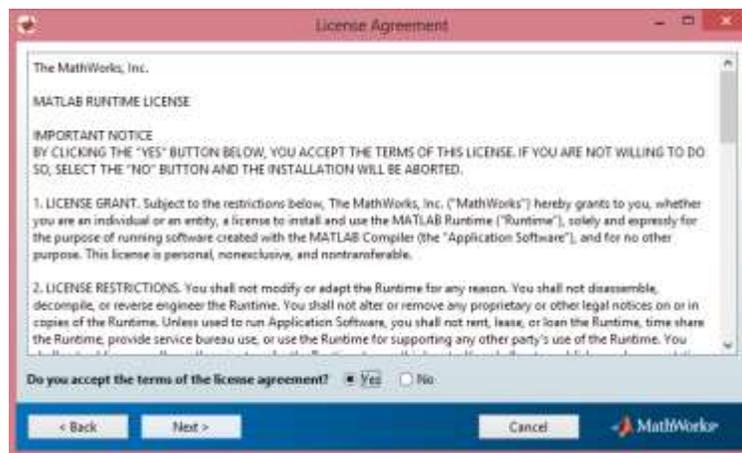
**Figura 32.** Información del sistema, Fuente propia.

Siguiente ventana, escogeremos la ruta donde queremos que se instala el programa y habilitaremos la opción de que nos cree un icono en el escritorio, y daremos clic en el botón “Next”.



**Figura 33.** Opciones de instalación, Fuente propia.

En la siguiente ventana mostrara el acuerdo de la licencia, donde nos indica que se instalara Matlab Runtime, para que pueda compilar nuestra aplicación y la podamos ocupar sin ningún problema, elegiremos la opción “yes” y daremos clic en el botón “Next”.



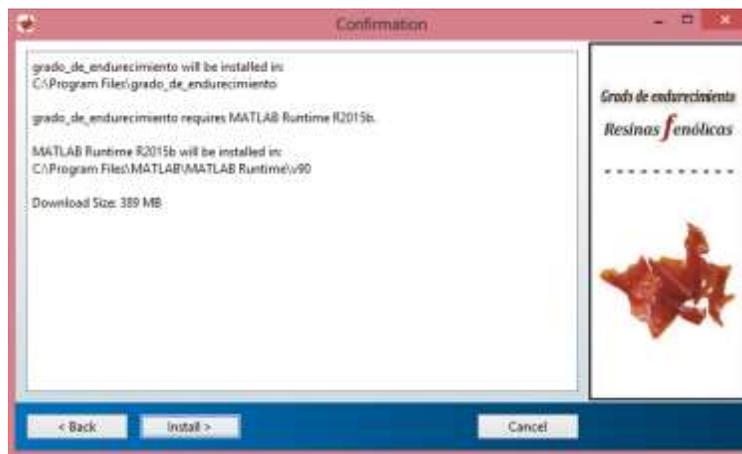
**Figura 34.** Acuerdo de licencia, Fuente propia.

En la siguiente ventana nos pedirá la ruta donde se instalara “Matlab Runtime”, que es el requerimiento que leímos en la ventana anterior, le daremos clic en el boton “Next”.



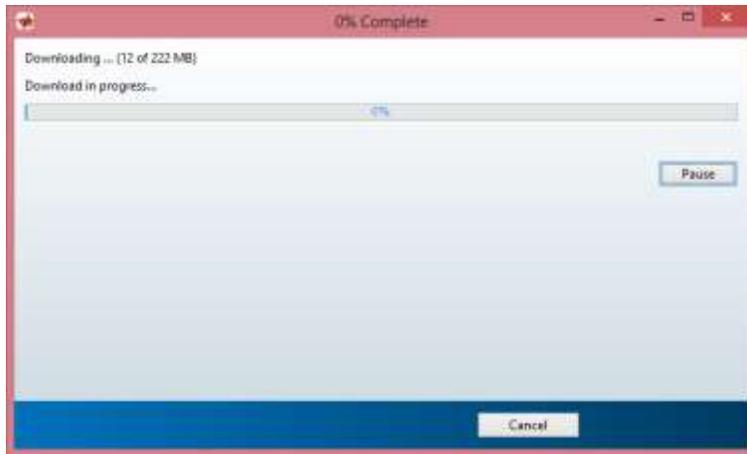
**Figura 35.** Requerimiento de software, Fuente propia.

En esta ventana solo tendremos que confirmar la ruta donde se va a instalar nuestra aplicación y solo le daremos clic en “Install”.



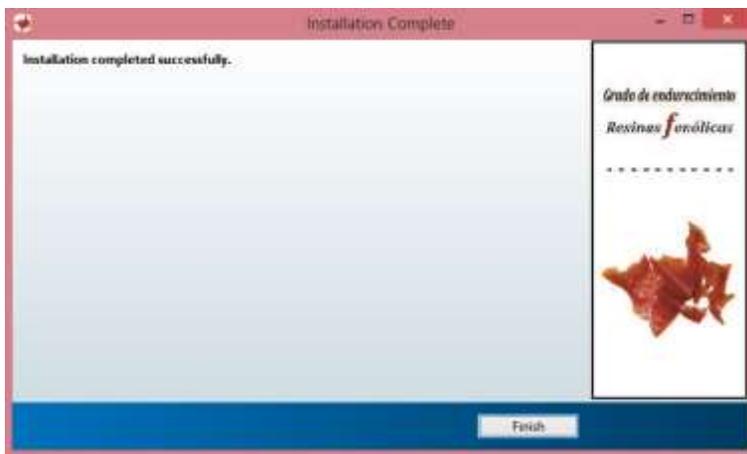
**Figura 36.** Confirmación de archivos para instalación, Fuente propia.

En la siguiente ventana esperaremos a que descargue e instale los archivos necesarios para nuestra aplicación, puede tardar varios minutos en esta parte.



**Figura 37.** Instalación del programa, Fuente propia.

Cuando haya acabado de instalarse nuestro programa solo le daremos clic en el botón “Finish”.



**Figura 38.** Instalación completa, Fuente propia.

En el escritorio de nuestra computadora podemos encontrar el icono de acceso directo, para poder abrir el programa solo le daremos doble clic.



**Figura 39.** Icono de acceso directo “grado de endurecimiento”, Fuente propia.

## 4.2 Como usar el programa

Primero tenemos que ejecutar (dar doble clic) al icono del acceso directo de nuestro programa creado en el escritorio, mostrara la siguiente ventana.



**Figura 40.** Cargando programa, Fuente propia.

Cuando el programa cargue completamente mostrara la siguiente ventana.



**Figura 41.** Programa “Grado de endurecimiento”, Fuente propia.

Solo necesitamos el archivo en Excel que contiene los datos obtenidos por el espectrofotómetro.

El cual debe de tener las siguientes características:

- Formato .xlsx
- Título de las columnas, columna A “cm-1” y columna B “Abs”.
- Datos de análisis de la resina fenólica, columna A los cm-1 que va de 4000 – 350, Columna B los datos de Absorbancia.

	A	B	C
1	cm-1	Abs	
2	4000	99.425368	
3	3999	99.423732	
4	3998	99.424504	
5	3997	99.426876	
6	3996	99.428996	
7	3995	99.429485	
8	3994	99.428143	
9	3993	99.425763	
10	3992	99.423188	
11	3991	99.420664	
12	3990	99.417959	
13	3989	99.414964	
14	3988	99.412094	
15	3987	99.410035	
16	3986	99.409143	
17	3985	99.40914	
18	3984	99.409336	
19	3983	99.409187	
20	3982	99.408648	

**Figura 42.** Archivo del espectrofotómetro, Fuente propia.

Daremos clic en el **Botón Abrir** el cual abrirá una venta donde nos mostrara los archivos que tenemos en nuestra computadora y seleccionaremos el archivo de nuestra resina fenólica que vamos a analizar, esperaremos a que el sistema procese los datos y nos mostrara los resultados que nos interesa.



**Figura 43.** Resultado del análisis, Fuente propia.

Si existiera algún problema con el archivo, por ejemplo que no tenga los títulos en las columnas correspondientes o los datos estén de manera incorrecta, el programa mostrara una venta de error.



**Figura 44.** Error en el archivo. Fuente propia.

Tendremos que verificar nuestro archivo en Excel y corregirlo.

Si queremos saber el grado de endurecimiento de otra resina fenólica, daremos clic en el botón limpiar y volveremos a realizar el procedimiento anterior.

## CAPÍTULO V. CONCLUSIONES

Con los datos obtenidos con la técnica de FTIR se pudo modelar matemáticamente el grado de endurecimiento de la resina fenólica curada a temperatura de 50°C, 100°C, 150°C, 160°C, 170°C, 180°C, 190°C, 200°C, 250°C, simulando los espectros de infrarrojo experimentales en Matlab.

Con los métodos numéricos se obtuvieron cálculos más exactos de los que normalmente se obtiene del método experimental de laboratorio Spectrum One.

Se generó la tabla del grado de endurecimiento de la resina fenólica en base al análisis de los métodos de Sumas de Riemann, Regla de Simpson  $\frac{1}{3}$  Compuesta, Reglas de Simpson  $\frac{3}{8}$  Compuesta.

De acuerdo a los resultados obtenidos se generó una gráfica de los niveles de endurecimiento que permitirá identificar de manera inmediata el curado de una resina fenólica.

Se diseñó una aplicación de escritorio para poder obtener el grado de endurecimiento de una resina, así como observar el espectro de infrarrojo y saber las áreas de interés.

El programa desarrollado ayudará a los responsables del área de servicios a la industria de la Facultad de Ingeniería Químicas a realizar el cálculo del grado de endurecimiento de resinas fenólicas en menor tiempo, además de la disminución de costos.

La facultad de Ingeniería Química podrá ofrecer el servicio a diferentes empresas que utilizan resinas fenólicas en su proceso con la certeza de que los resultados emitidos tienen bajos porcentajes de error.

En trabajos futuros se planea realizar una investigación para poder obtener otras características de los espectros de infrarrojo con ayuda de los métodos numéricos.

Este análisis teórico permitió determinar el rango adecuado para evaluar el grado de endurecimiento de una resina a base de fenol formaldehído para poder emitir la evaluación el grado de endurecimiento de este tipo de resinas utilizadas en este servicio.

## REFERENCIAS

1. Joshua M, Eric W., Tane B, Shantanu D, Jay S, Charles W. y John W. (2015). Computational and Experimental Study of Phenolic Resins: Thermal–Mechanical Properties and the Role of Hydrogen Bonding. *Macromolecules*, volumen (48) issue (20), pag. 7670–7680, doi: 10.1021/acs.macromol.5b01183.
2. Atsushi I., Toshio N. y Mitsuhiro S. (2012). Atomistic molecular dynamics study of cross-linked phenolic resins. *Soft Matter*, Issue (19), pag. 5283-5292, doi: 10.1039/c2sm25067e.
3. Yu Z., Zehui J., Zhengjun S. y Haiqing R. (2014). Effect of microwave-assisted curing on bamboo glue strength: Bonded by thermosetting phenolic resin. *Construction and Building Materials*, volumen (68), pag. 320-325, doi: 10.1016/j.conbuildmat.2014.07.014.
4. Yasuyuki S., Atsushi I., Katsumi H., Toshio N. y Mitsuhiro S. (2016). Large-scale molecular dynamics simulation of crosslinked phenolic. *Polymer*, volumen (103), pag. 261-276, doi: 10.1016/j.polymer.2016.09.069.
5. Xavier J. (1993). Estudio de la eficiencia de sistema químicos de iniciación del curado de resinas de poliéster insaturado (Tesis Doctoral), Universidad Politécnica de Catalunya, Barcelona.
6. Qianqian Lan, Nina Yan. Yong Wan. (2017). *Tight ultrafiltration membranes of mesoporous phenolic resin filled in macroporous substrates*. *Journal of Membrane Science*, volumen (533), pag. 96-102, ScienceDirect.
7. Chin-Lung Chiang, Chen-Chi M. Ma, Dai-Lin Wu, Hsu-Chiang Kuan. (2003). Preparation, characterization, and properties of novolac-type phenolic/SiO<sub>2</sub> hybrid organic–inorganic nanocomposite materials by sol–gel method, volumen (41), pag. 905-913, *Journal of Polymer Science: Part A: Polymer Chemistry*. doi: 10.1002/pola.10624.

8. Shan Li, Hao Li, Zheng Li, Heng Zhou, Ying Guo, Fenghua Chen, Tong Zhao. (2017). Polysiloxane modified phenolic resin with co-continuous structure, volumen (120), issue (30), pag. 217-222. *Polymer*, doi: 10.1016/j.polymer.2017.05.063.
9. Bertrana, G. Chollona, J. Dentzer, R. Gadiou, S. Fouquet, M-A Dourges, F. Rebillat. (2017). Oxidation behavior at moderate temperature under dry and wet air of phenolic resin-derived carbon, *Thermochimica Acta*, volume (649), issue (10), pag. 13-21, doi: 10.1016/j.tca.2016.12.013.
10. Y. Zhang, S. Shen, Y. Liu, (2013). The effect of titanium incorporation on the thermal stability of phenol-formaldehyde resin and its carbonization microstructure. *Polymer Degradation and Stability*, volumen (98), issue (2), pag. 514-518, 10.1016/j.polymdegradstab.2012.12.006, Elsevier.
11. Y. Chen, C. Hong, P. Chen. (2013). The effects of zirconium diboride particles on the ablation performance of carbon-phenolic composites under an oxyacetylene flame, *RSC Advances*, Issue (3), pag. 13734-13739.
12. G. Odian, (1991). *Principles of polymerization*, 3rd Ed. John Wiley & Sons, New York.
13. H.W. Chang, S.K. Rhee. (1978). Oxidation of carbon derived from phenolic resin, *Carbon* volumen (16), issue (1), pag. 17-20. doi: 10.1016/0008-6223(78)90109-4
14. Baidehish Sahoo, Ravikant Kumar, Jomy Joseph, Abhishek Sharma, Jinu Paul. (2017). Preparation of aluminium 6063-graphite surface composites by an electrical resistance heat assisted pressing technique. *Surface & Coatings Technology* 309, pag. 563-572.
15. Flores L. Artemio. (2015). Elaboración de un material de fricción con alta resistencia al corte utilizando resina fenol formaldehído e impregnada en telas de fibra de vidrio. Tesis para obtener el título de profesional de ingeniero químico, Universidad nacional de Callao. Perú.
16. Guillermo Barraza-Garza, Laura A. de la Rosa, Alejandro Martínez-Martínez, Hiram Castillo-Michel, Marine Cotte, Emilio Alvarez-Parrilla. (2013). La microespectroscopía de infrarrojo con transformada de Fourier (FTIRM) en el estudio

de sistemas biológicos, Revista latinoamericana de química, volumen (41), num (3), issn 0370-5943.

17. Benemérita universidad autónoma de puebla, Laboratorio de Ingeniería Química, Laboratorio de análisis instrumental, Manual de uso del equipo espectrofotometro Ft-IR. Código de control LAI-MEQ\_01.
18. Holly Moore. (2007). Matlab para ingenieros, Pearson Educación, México.
19. Ton M. Apostol, (2006). Calculus: Cálculo con funciones con una variable, con una introducción al álgebra lineal, Volumen 1, 3, Editorial Reverté.
20. Angoa, Juan. Contreras, Agustín. Ibarra, Manuel. Linares, Raúl. López María. Martínez, Armando. (2015). Construcción de la integral, Calculo Integral, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla. 91-96, ISBN: 978-607-487-831-8.
21. Larson Ron, Hostetler Robert, Edwards Bruce. (2016). Integración. Calculo con geometría analítica, volumen 1, octava edición, pag 259-260. McGraw-Hill.
22. Stewart James. (2015). Calculo Trascendentes Tempranas, cuarta edición, Math.
23. Steven C. Chapra, Raymond P. Canale, “Diferenciación e integración numérica”, Métodos Numéricos para Ingenieros, pag 631-632, México, McGraw-Hill Interamericana.
24. Seminario Vázquez Ricardo. Métodos numéricos para ingenieros. ISBN: 978-84-692-1422-0.

## Apéndices

### Apéndice A

#### Código del programa

```
function varargout = grado_de_endurecimiento_de_resinas_fenolicas(varargin)

gui_Singleton = 1;
gui_State = struct('gui_Name',    mfilename, ...
                  'gui_Singleton', gui_Singleton, ...
                  'gui_OpeningFcn',
                  @grado_de_endurecimiento_de_resinas_fenolicas_OpeningFcn, ...
                  'gui_OutputFcn',
                  @grado_de_endurecimiento_de_resinas_fenolicas_OutputFcn, ...
                  'gui_LayoutFcn', [], ...
                  'gui_Callback', []);
if nargin && ischar(varargin{1})
    gui_State.gui_Callback = str2func(varargin{1});
end

if nargout
    [varargout{1:nargout}] = gui_mainfcn(gui_State, varargin{:});
else
    gui_mainfcn(gui_State, varargin{:});
end
% End initialization code - DO NOT EDIT

end
% --- Executes just before grado_de_endurecimiento_de_resinas_fenolicas is made visible.
function grado_de_endurecimiento_de_resinas_fenolicas_OpeningFcn(hObject, eventdata,
handles, varargin)
% This function has no output args, see OutputFcn.
% hObject    handle to figure
% eventdata  reserved - to be defined in a future version of MATLAB
% handles    structure with handles and user data (see GUIDATA)
% varargin   command line arguments to grado_de_endurecimiento_de_resinas_fenolicas
(see VARARGIN)

% Choose default command line output for grado_de_endurecimiento_de_resinas_fenolicas
handles.output = hObject;

% Update handles structure
guidata(hObject, handles);
```

```

% UIWAIT makes grado_de_endurecimiento_de_resinas_fenolicas wait for user response
(see UIRESUME)
% uiwait(handles.figure1);
end

% --- Outputs from this function are returned to the command line.
function varargout = grado_de_endurecimiento_de_resinas_fenolicas_OutputFcn(hObject,
eventdata, handles)
% varargout cell array for returning output args (see VARARGOUT);
% hObject handle to figure
% eventdata reserved - to be defined in a future version of MATLAB
% handles structure with handles and user data (see GUIDATA)

% Get default command line output from handles structure
varargout{1} = handles.output;
end

% --- Executes on button press in ABRIR.
function ABRIR_Callback(hObject, eventdata, handles)
% hObject handle to ABRIR (see GCBO)
% eventdata reserved - to be defined in a future version of MATLAB
% handles structure with handles and user data (see GUIDATA)

[filename, pathname] = uigetfile('*.*xlsx', 'Select a MATLAB code file');
fullpathname=strcat(pathname,filename);
[w,txt,row]=xlsread(fullfile(pathname, filename),'A1:A1');
[q,txt1,row1]=xlsread(fullfile(pathname, filename),'B1:B1');
cm='cm-1';
ab='Abs';
ft=strcmp(txt,cm);
ft1=strcmp(txt1,ab);
if ft==1 && ft1==1
    Simpson38(filename,pathname,hObject, eventdata, handles)
else
    f = errordlg('Verifique el Archivo Excel','Error');
end

end

function Simpson38(filename, pathname,hObject, eventdata, handles)
fullpathname=strcat(pathname,filename);
x=xlsread('resinabase.xlsx','A:A');
y=xlsread('resinabase.xlsx','B:B');
xx=xlsread(fullfile(pathname, filename),'A:A');
yy=xlsread(fullfile(pathname, filename),'B:B');
plot(xx,yy),xlabel('cm-1'),ylabel('Abs');
ha=gca;

```

```

set(ha,'xdir','reverse');
set(handles.text7,'String',fullpathname);

%RECINA NO CURADA -OH
b=find(x==3400);
encuentra en que posicion esta 3400 601
a=find(x==3700);
n=(b-a);
h=(b-a)/n;
[maximo]=max(y(a:b));
p=find(y==maximo);
f1=0;f2=0;f3=0;con1=0;
for i=a+1:3:b-2
    f1=f1+y(i);
    con1=con1+1;
end
for i=a+2:3:b-1
    f2=f2+y(i);
    con1=con1+1;
end
for i=a+3:3:b-3
    f3=f3+y(i);
    con1=con1+1;
end
con1;
sumaOHpm=y(p)*(b-a);
sumaOH=((3*h)/8)*(y(a)+3*f1+3*f2+2*f3+y(b));
areaOH=sumaOHpm-sumaOH;

```

```

%RESINA NO CURADA -C=C-
b1=find(x==1400);
a1=find(x==1500);
b2=b1-1;
n1=(b2-a1);
h1=(b2-a1)/n1;
[maximo]=max(y(a1:b2));
p=find(y==maximo);
f1=0;f2=0;f3=0;con=0;
for i=a1+1:3:b2-2
    f1=f1+y(i);
    con=con+1;
end
for i=a1+2:3:b2-1
    f2=f2+y(i);
    con=con+1;
end

```

```

for i=a1+3:3:b2-3
    f3=f3+y(i);
    con=con+1;
end
con;
sumaCpm=y(p)*(b2-a1);
sumaC=((3*h1)/8)*(y(a1)+3*f1+3*f2+2*f3+y(b2));
areaC=sumaCpm-sumaC;

%RECINA CURADA -OH
[maximo]=max(yy(a:b));
p=find(yy==maximo);
f1=0;f2=0;f3=0;

for i=a+1:3:b-2
    f1=f1+yy(i);
end
for i=a+2:3:b-1
    f2=f2+yy(i);
end
for i=a+3:3:b-3
    f3=f3+yy(i);
end
sumaOHpm=yy(p)*(b-a);
sumaOH=((3*h)/8)*(yy(a)+3*f1+3*f2+2*f3+yy(b));
areaOHcurada=sumaOHpm-sumaOH;
set(handles.text10,'String',areaOHcurada);

%RESINA CURADA -C=C-
[maximo]=max(yy(a1:b1));
p=find(yy==maximo);
f1=0;f2=0;f3=0;
for i=a1+1:3:b2-2
    f1=f1+yy(i);
end
for i=a1+2:3:b2-1
    f2=f2+yy(i);
end
for i=a1+3:3:b2-3
    f3=f3+yy(i);
end
sumaCpm=yy(p)*(b2-a1);
sumaC=((3*h1)/8)*(yy(a1)+3*f1+3*f2+2*f3+yy(b2));
areaCcurada=sumaCpm-sumaC;
set(handles.text11,'String',areaCcurada);

```

```

%FORMULA GRADO DE ENDURECIMIENTO
DH=(1-((areaOHcurada/areaCcurada)/(areaOH/areaC)))*100;
set(handles.text8,'String',DH);
end

% --- Executes on button press in Nuevo.
function Nuevo_Callback(hObject, eventdata, handles)
% hObject    handle to Nuevo (see GCBO)
% eventdata  reserved - to be defined in a future version of MATLAB
% handles    structure with handles and user data (see GUIDATA)
set(handles.text7,'String','')
set(handles.text8,'String','')
set(handles.text10,'String','')
set(handles.text11,'String','')
cla(handles.axes2,'reset');
end

```

## Apéndice B

Códigos de las funciones sobre los métodos numéricos

### Sumas de Riemann

```
function Riemann(filename, pathname,hObject, eventdata, handles)
fullpathname=strcat(pathname,filename);
x=xlsread('resinabase.xlsx','A:A');
y=xlsread('resinabase.xlsx','B:B');
xx=xlsread(fullfile(pathname, filename),'A:A');
yy=xlsread(fullfile(pathname, filename),'B:B');
plot(xx,yy),xlabel('cm-1'),ylabel('Abs');
ha=gca;
set(ha,'xdir','reverse');
set(handles.text7,'String',fullpathname);
```

```
%RECINA NO CURADA -OH
a=find(x==3700);
b=find(x==3400);
suma=0;
sumap=0
[maximo]=max(y(a:b));
p=find(y==maximo);
n=b-a;
Dx=(b-a)/n;

for i=a:Dx:b
    suma=suma+(((y(i)+y(i+1))/2)*Dx);
end
sumap=y(p)*(b-a);
areaOH=sumap-suma;

%RESINA NO CURADA-C=C-
b1=find(x==1400);
a1=find(x==1500);
n1=b1-a1;
Dx1=(b1-a1)/n1;
sumaC=0;
sumapC=0;
[maximo]=max(y(a1:b1));
q1=find(y==maximo);
for j=a1:Dx1:b1
    sumaC=sumaC+(((y(j)+y(j+1))/2)*Dx1);
end
```

```
sumapC=y(q1)*(b1-a1);  
areaC=sumapC-sumaC;
```

```
%RECINA CURADA -OH  
suma1=0;  
sumap1=0  
[maximo]=max(yy(a:b));  
p=find(yy==maximo);  
for i=a:Dx1:b  
    suma1=suma1+(((yy(i)+yy(i+1))/2)*Dx1);  
end  
sumap1=yy(p)*(b-a);  
areaOH1=sumap1-suma1;  
set(handles.text10,'String',areaOH1);
```

```
%RESINA CUARADA -C=C-  
sumaC1=0;  
sumapC1=0;  
[maximo]=max(yy(a1:b1));  
q=find(yy==maximo);  
for j=a1:Dx1:b1  
    sumaC1=sumaC1+(((yy(j)+yy(j+1))/2)*Dx1);  
end  
sumapC1=yy(q)*(b1-a1);  
areaC1=sumapC1-sumaC1;  
set(handles.text11,'String',areaC1);
```

```
%FORMULA GRADO DE ENDURECIMIENTO  
DH=(1-((areaOH1/areaC1)/(areaOH/areaC)))*100;  
set(handles.text8,'String',DH);  
end
```

### Simpson 1/3

```
function Simpson(filename, pathname,hObject, eventdata, handles)
fullpathname=strcat(pathname,filename);
x=xlsread('resinabase.xlsx','A:A');
y=xlsread('resinabase.xlsx','B:B');
xx=xlsread(fullfile(pathname, filename),'A:A');
yy=xlsread(fullfile(pathname, filename),'B:B');
plot(xx,yy),xlabel('cm-1'),ylabel('Abs');
ha=gca;
set(ha,'xdir','reverse');
set(handles.text7,'String',fullpathname);

%RECINA NO CURADA -OH
b=find(x==3400);
a=find(x==3700);
n=b-a;
h=(b-a)/n;
con=0;
sumapares=0;
sumaimpares=0;
areacurva=y(a)+y(b);
[maximo]=max(y(a:b));
p=find(y==maximo);
for i=a:h:b
    red=rem(con,2);
    if red==0 && i~=a && i~=b
        sumapares=sumapares+y(i);
    end
    if red~=0 && i~=a && i~=b
        sumaimpares=sumaimpares+y(i);
    end
    con=con+1;
end
sumaOHpm=y(p)*(b-a);
areacurvaOH=(h/3)*(areacurva+(4*sumaimpares)+(2*sumapares));
areaOH=sumaOHpm-areacurvaOH;

%RESINAS NO CURADA -C=C-
b1=find(x==1400);
a1=find(x==1500);
n1=b1-a1;
h1=(b1-a1)/n1;
con=0;
sumapares1=0;
sumaimpares1=0;
areacurva1=y(a1)+y(b1);
```

```

[maximo]=max(y(a1:b1));
p=find(y==maximo);
for i=a1:h1:b1
    res=rem(con,2);
    if res==0 && i~=a1 && i~=b1
        sumapares1=sumapares1+y(i);
    end
    if res~=0 && i~=a1 && i~=b1
        sumaimpares1=sumaimpares1+y(i);
    end
    con=con+1;
end
sumaCpm=y(p)*(b1-a1);
areacurvaC=(h1/3)*(areacurva1+(4*sumaimpares1)+(2*sumapares1));
areaC=sumaCpm-areacurvaC;

```

```

%RECINA CURADA -OH

```

```

b=find(xx==3400);
a=find(xx==3700);
con=0;
sumapares=0;
sumaimpares=0;
areacurva=yy(a)+yy(b);
[maximo]=max(yy(a:b));
p=find(yy==maximo);
for i=a:h:b
    res=rem(con,2);
    if res==0 && i~=a && i~=b
        sumapares=sumapares+yy(i);
    end
    if res~=0 && i~=a && i~=b
        sumaimpares=sumaimpares+yy(i);
    end
    con=con+1;
end
sumaOHpm=yy(p)*(b-a);
areacurvaOH=(h/3)*(areacurva+(4*sumaimpares)+(2*sumapares));
areaOHcurada=sumaOHpm-areacurvaOH;
set(handles.text10,'String',areaOHcurada);

```

```

%RESINA CURADA -C=C-

```

```

b1=find(xx==1400);
a1=find(xx==1500);
con=0;
sumapares1=0;
sumaimpares1=0;
areacurva1=yy(a1)+yy(b1);

```

```

[maximo]=max(yy(a1:b1));
p=find(yy==maximo);
for i=a1:h1:b1
    res=rem(con,2);
    if res==0 && i~=a1 && i~=b1
        sumapares1=sumapares1+yy(i);
    end
    if res~=0 && i~=a1 && i~=b1
        sumaimpares1=sumaimpares1+yy(i);
    end
    con=con+1;
end
sumaCpm=yy(p)*(b1-a1);
areacurvaC=(h1/3)*(areacurva1+(4*sumaimpares1)+(2*sumapares1));
areaCcurada=sumaCpm-areacurvaC;
set(handles.text11,'String',areaCcurada);

%FORMULA GRADO DE ENDURECIMIENTO
DH=(1-((areaOHcurada/areaCcurada)/(areaOH/areaC)))*100;
set(handles.text8,'String',DH);
end

```

### Simpson 3/8

```
function Simpson38(filename, pathname,hObject, eventdata, handles)
fullpathname=strcat(pathname,filename);
x=xlsread('resinabase.xlsx','A:A');
y=xlsread('resinabase.xlsx','B:B');
xx=xlsread(fullfile(pathname, filename),'A:A');
yy=xlsread(fullfile(pathname, filename),'B:B');
plot(xx,yy),xlabel('cm-1'),ylabel('Abs');
ha=gca;
set(ha,'xdir','reverse');
set(handles.text7,'String',fullpathname);

%RECINA NO CURADA -OH
b=find(x==3400);
encuentra en que posision esta 3400 601
a=find(x==3700);
n=(b-a);
h=(b-a)/n;
[maximo]=max(y(a:b));
p=find(y==maximo);
f1=0;f2=0;f3=0;con1=0;
for i=a+1:3:b-2
    f1=f1+y(i);
    con1=con1+1;
end
for i=a+2:3:b-1
    f2=f2+y(i);
    con1=con1+1;
end
for i=a+3:3:b-3
    f3=f3+y(i);
    con1=con1+1;
end
con1;
sumaOHpm=y(p)*(b-a);
sumaOH=((3*h)/8)*(y(a)+3*f1+3*f2+2*f3+y(b));
areaOH=sumaOHpm-sumaOH;

%RESINA NO CURADA -C=C-
b1=find(x==1400);
a1=find(x==1500);
b2=b1-1;
n1=(b2-a1);
h1=(b2-a1)/n1;
[maximo]=max(y(a1:b2));
```

```

p=find(y==maximo);
f1=0;f2=0;f3=0;con=0;
for i=a1+1:3:b2-2
    f1=f1+y(i);
    con=con+1;
end
for i=a1+2:3:b2-1
    f2=f2+y(i);
    con=con+1;
end
for i=a1+3:3:b2-3
    f3=f3+y(i);
    con=con+1;
end
con;
sumaCpm=y(p)*(b2-a1);
sumaC=((3*h1)/8)*(y(a1)+3*f1+3*f2+2*f3+y(b2));
areaC=sumaCpm-sumaC;

```

```

%RECINA CURADA -OH

```

```

[maximo]=max(yy(a:b));
p=find(yy==maximo);
f1=0;f2=0;f3=0;

for i=a+1:3:b-2
    f1=f1+yy(i);
end
for i=a+2:3:b-1
    f2=f2+yy(i);
end
for i=a+3:3:b-3
    f3=f3+yy(i);
end
sumaOHpm=yy(p)*(b-a);
sumaOH=((3*h)/8)*(yy(a)+3*f1+3*f2+2*f3+yy(b));
areaOHcurada=sumaOHpm-sumaOH;
set(handles.text10,'String',areaOHcurada);

```

```

%RESINA CURADA -C=C-

```

```

[maximo]=max(yy(a1:b1));
p=find(yy==maximo);
f1=0;f2=0;f3=0;
for i=a1+1:3:b2-2
    f1=f1+yy(i);
end
for i=a1+2:3:b2-1
    f2=f2+yy(i);

```

```

end
for i=a1+3:3:b2-3
    f3=f3+yy(i);
end
sumaCpm=yy(p)*(b2-a1);
sumaC=((3*h1)/8)*(yy(a1)+3*f1+3*f2+2*f3+yy(b2));
areaCcurada=sumaCpm-sumaC;
set(handles.text11,'String',areaCcurada);

%FORMULA GRADO DE ENDURECIMIENTO
DH=(1-((areaOHcurada/areaCcurada)/(areaOH/areaC)))*100;
set(handles.text8,'String',DH);
end

```

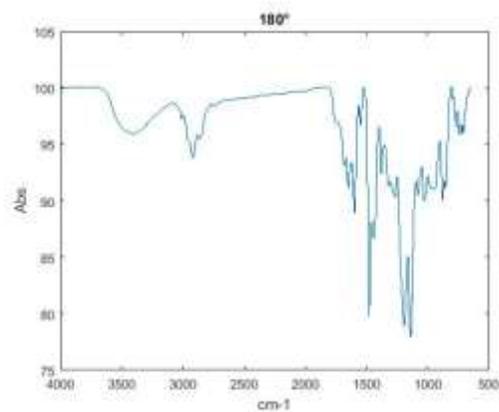
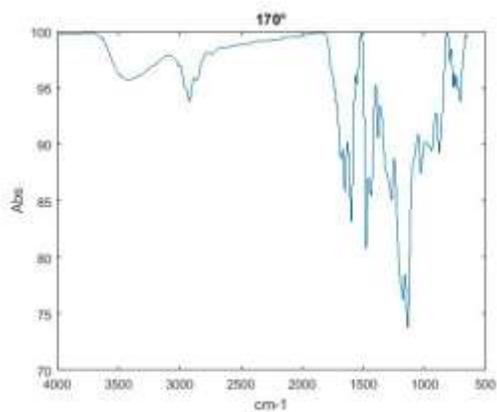
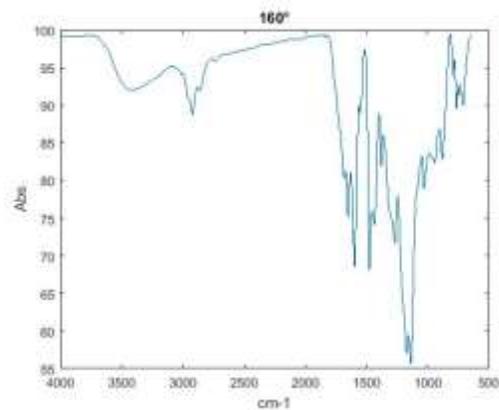
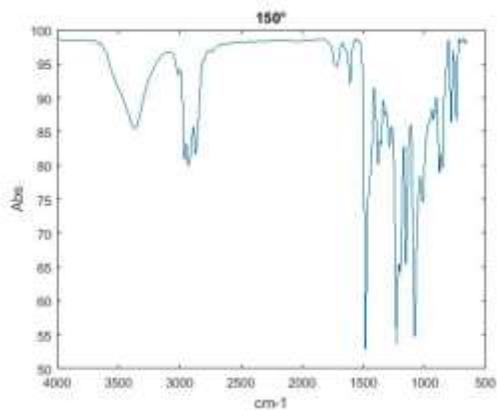
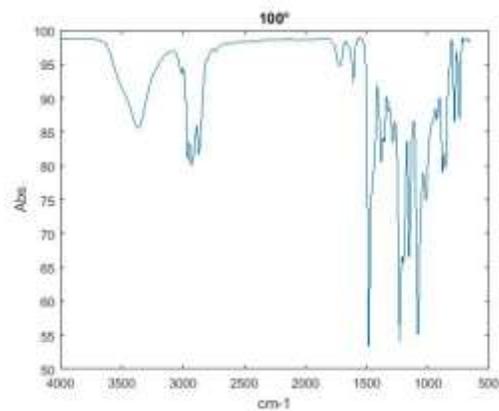
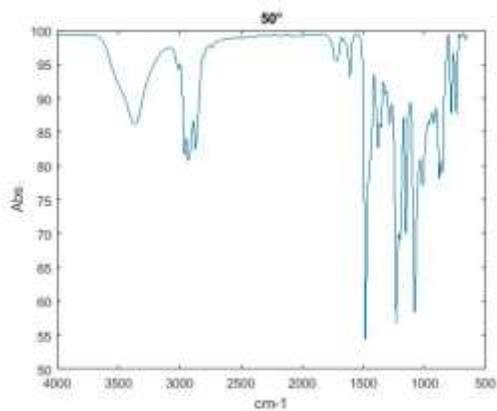
## Apéndice C

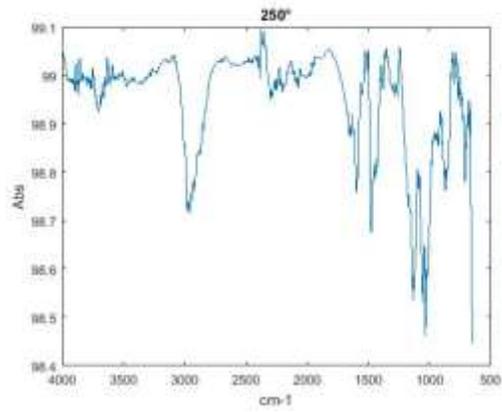
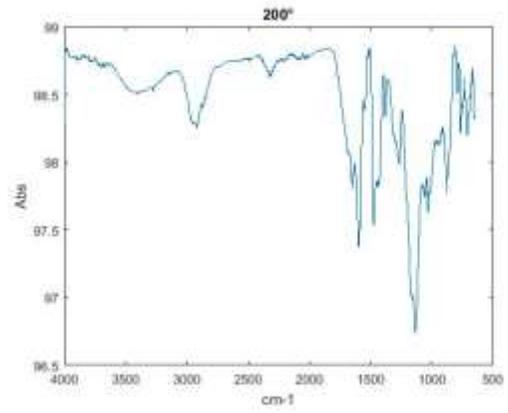
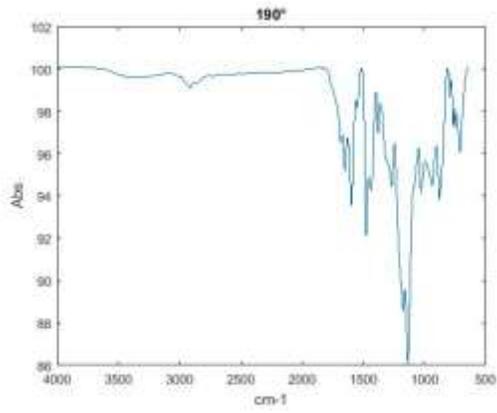
Hoja de Excel con los datos obtenidos del espectrofotómetro

cm-1	abs	
4000	99.739386	
3999	99.739755	
3998	99.739908	
3997	99.739612	
3996	99.739246	
3995	99.739013	
3994	99.738508	
3993	99.737139	
3992	99.734841	
3991	99.732421	
3990	99.731075	
3989	99.731421	
3988	99.733076	
3987	99.734934	
3986	99.73602	
3985	99.736045	
3984	99.73529	
3983	99.7343	
3982	99.733586	
3981	99.733227	
3980	99.732644	
3979	99.731033	

## Apéndice D

Espectros de infrarrojo (50°C, 100°C, 150°C, 160°C, 170°C, 180°C, 190°C, 200°C, 250°C  
Resina a diferentes temperaturas)





## Apéndice E

### Área de interés de los grupos -OH y -C=C-

°C	RIEMANN		SIMPSON 1/3		SIMPSON 3/8	
	-OH	-C=C-	-OH	-C=C-	-OH	-C=C-
(Resina base) 25	1491.209483	1079.098105	1491.204426	1079.127533	1491.204492	1075.275295
50	1464.137680	1424.415059	1464.132838	1424.459409	1464.132886	1421.261733
100	1421.715067	1415.200235	1421.710803	1415.245828	1421.710683	1411.978103
150	1424.381647	1431.986813	1424.377236	1432.032409	1424.377384	1428.842374
160	1204.252694	1677.384019	1204.254224	1677.436220	1204.254391	1671.573608
170	668.542665	1018.373071	668.543071	1018.404664	668.543114	1015.713345
180	660.352463	892.215495	660.352774	892.245005	660.353156	891.257279
190	62.205690	423.063717	62.205546	423.077591	62.205555	422.346957
200	33.990240	76.481241	33.989981	76.482240	33.990089	76.293406
250	14.231844	21.054020	14.231687	21.053767	14.231450	20.998767