

Simulación de prácticas de laboratorio de la asignatura "Experimentación en Ingeniería Química" mediante el uso del simulador de procesos Hysys.Plant

Manuel Cuevas, Diego F. Valdivia, Soledad Mateo y M^a Luisa Parra.

*Departamento de Ingeniería Química, Ambiental y de los Materiales. E.P.S. de Linares.
Universidad de Jaén. C/ Alfonso X El Sabio, 28, 23700, Linares, España.*

mcuevas@ujaen.es

Resumen

La entrada en vigor del Espacio Europeo de Educación Superior (EEES) supone un reto para todos los agentes involucrados en el proceso universitario de enseñanza-aprendizaje. En este sentido, la simulación por ordenador es una herramienta potente que puede aplicarse para asimilar conocimientos en el área de Ingeniería Química. Este trabajo pretende exponer algunos logros alcanzados por el proyecto de innovación docente titulado "Innovación de la docencia en la asignatura *Experimentación en Ingeniería Química* mediante el empleo del simulador de procesos *Hysys*" durante su primer año de desarrollo. Se seleccionaron los mejores modelos termodinámicos para la simulación de prácticas de destilación y extracción líquido-líquido. Finalmente, se compararon los datos ofrecidos por el programa con los obtenidos por los alumnos en el laboratorio. La bondad en el ajuste de resultados, así como la facilidad de uso del simulador, hacen de *Hysys* un medio adecuado para mejorar los aprendizajes en el aula de Ingeniería Química.

INTRODUCCIÓN

En el seno del Espacio Europeo de Educación Superior (EEES) deben crearse nuevos métodos pedagógicos a los que el estudiante y el profesor se acerquen. Los primeros, para aprender de forma más autónoma; los segundos, para enseñar a aprender mediante materiales precisos y dotando al sistema de mayor flexibilidad temporal y espacial.

La enseñanza moderna, hoy en día, no puede ser entendida sin el uso del ordenador. Esta herramienta ha posibilitado, en el campo de la ingeniería, la realización de complejos cálculos con rapidez y fiabilidad. Así, las principales empresas dedicadas al diseño ingenieril (ya sea aeronáutico, automovilístico, químico-industrial,...) han adoptado, para su trabajo diario, programas de diseño asistido por ordenador y de simulación (Rodríguez J., 1998; *AutoCAD 14*, 1^a Ed, Anaya, Madrid, pp. 21). La Universidad no debe ser ajena a este fenómeno, por lo que el uso de estos recursos informáticos debe ser ofrecido a su alumnado al mismo tiempo que se estudian los fundamentos teóricos de las técnicas de cálculo.

La simulación es un potente instrumento para favorecer el proceso de aprendizaje del alumno (Gil et al., 2006; *J Chem Educ* 83: 170-172). Gran número de universidades (fundamentalmente extranjeras) disponen de simuladores de procesos, como *Hysys* y *Aspen*, para su empleo en el área de Ingeniería Química (Fernandes F., 2002; *Comput Appl Eng Educ* 10: 155-160). El interfaz gráfico que acompaña al programa *Hysys*, en su versión 2.2 (producto de *Hyprotech Ltd.*, Calgary, Canadá), es muy intuitivo y de fácil manejo; además, permite una visualización cómoda de equipos y procesos industriales, así

como el acceso a multitud de datos físico-químicos de compuestos (**Fig. 1**).

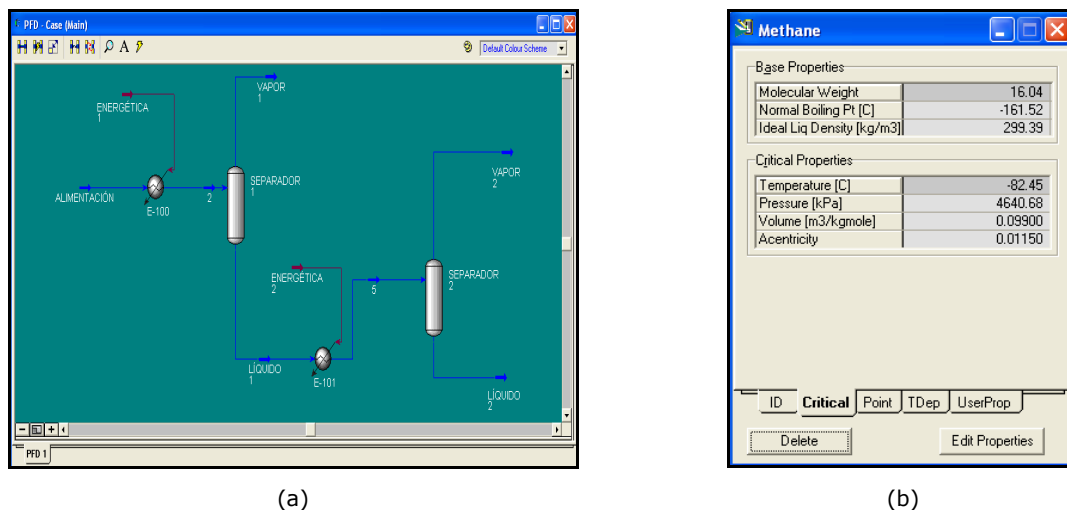


Figura 1. Ejemplos, en *Hysys*, de diagramas de flujo de procesos (a) y tablas de propiedades físicas de compuestos químicos (b).

“*Experimentación en Ingeniería Química*”, es una asignatura troncal impartida en el segundo curso (segundo cuatrimestre) de la titulación de Ingeniero Técnico Industrial, especialidad en Química Industrial. Puede afirmarse que es una de las materias de mayor importancia de la titulación (como lo demuestran sus 12 créditos, LRU) y surge al aplicar los conocimientos teóricos del campo de las Operaciones Básicas al laboratorio de Ingeniería Química. Dentro de la asignatura, el estudio de los procesos de separación por transferencia de materia (destilación y extracción líquido-líquido) y los equipos de intercambio térmico (cambiadores de calor) constituye el núcleo central de enseñanza, ya que estas operaciones son muy importantes en la industria química. Es interesante señalar que la asignatura tendrá cabida en el grado de Ingeniero Químico Industrial.

Durante los últimos años de docencia en “*Experimentación en Ingeniería Química*” se constata la dificultad que los alumnos tienen para comprender los fundamentos teóricos de las prácticas programadas. Además, los profesores encargados de la asignatura han pensado que sería interesante realizar una renovación metodológica consistente en introducir, en el laboratorio, un software capaz de simular algunas de las prácticas que se llevan a cabo. De esta forma, la incorporación de sistemas computacionales de análisis y simulación proporcionaría al estudiante una herramienta para reforzar el estudio y la comprensión de los principios de la destilación, la extracción líquido-líquido y el intercambio térmico como Operaciones Básicas.

OBJETIVOS

El objetivo final del proyecto “Innovación de la docencia en la asignatura *Experimentación en Ingeniería Química* mediante el empleo del simulador de procesos *Hysys*” es conseguir una mejora metodológica en el laboratorio de Ingeniería Química mediante el uso de un simulador comercial de procesos químicos. Se piensa que, con esta herramienta, el alumno podrá comprender mejor los fundamentos teóricos en los que se basa el trabajo experimental. Hay que resaltar que no se pretende sustituir las prácticas

convencionales por el uso exclusivo del ordenador, sino compaginar ambas metodologías: primero habrá que realizar las prácticas y obtener datos experimentales bajo unas condiciones operativas concretas, después se validarán los resultados proporcionados por el software al compararse éstos con los resultados empíricos, finalmente el simulador podrá ser usado para discutir el efecto de las distintas variables de proceso. Las prácticas de laboratorio a simular son:

1. *Equilibrio líquido-líquido*

Obtención de datos termodinámicos del equilibrio líquido-líquido para el sistema ternario agua/ácido acético/cloroformo.

2. *Extracción líquido-líquido: unidades de equilibrio en serie.*

Estudio de un proceso de extracción líquido-líquido en contacto repetido, en tres etapas, con corrientes cruzadas. Se utiliza el sistema ácido acético/cloroformo, como alimentación, y el agua como disolvente extractor.

3. *Diagramas de equilibrio líquido-vapor.*

Obtención de datos termodinámicos del equilibrio líquido-vapor para el sistema binario ciclohexano/isooctano.

4. *Destilación simple en estado no estacionario.*

Estudio de un proceso de destilación diferencial de una mezcla etanol/agua.

5. *Cambiador de calor.*

Estudio del funcionamiento de un cambiador de calor, de carcasa y tubos, en el que tanto el fluido calefactor como refrigerador es agua.

La nueva metodología representará un estímulo para el aprendizaje del alumno, su acercamiento a un programa informático de gran importancia profesional y un refuerzo de las siguientes competencias: capacidad de "aprender a aprender", trabajo en equipo, integración de conocimientos, razonamiento crítico y capacidad de análisis.

Dentro del proyecto de innovación docente, el presente trabajo pretende describir, someramente, el proceso de configuración de *Hysys* para la simulación de las cinco prácticas anteriores.

DESARROLLO

Para lograr la simulación de prácticas en el aula de Ingeniería Química se han abordado las siguientes etapas:

1. Recogida de información en el laboratorio. A este nivel se utilizaron los datos experimentales obtenidos por dos grupos de alumnos durante el desarrollo de las clases en el curso académico 2009-2010.
2. Configuración del programa *Hysys* para generar entornos virtuales capaces de aproximarse, con suficiente precisión, a los resultados experimentales obtenidos en el laboratorio. Aquí es vital la correcta selección de los modelos termodinámicos más adecuados atendiendo tanto al sistema de componentes usado como al equilibrio entre fases con el que se trabaja. Para esto, se compararon los datos de equilibrio empíricos con los proporcionados por los distintos modelos disponibles en el software.

RESULTADOS

Tras comparar los datos empíricos, obtenidos en laboratorio, con los teóricos, proporcionados al aplicar los modelos termodinámicos de *Hysys*, se pudieron seleccionar los modelos más adecuados para predecir los datos del equilibrio entre fases.

En el caso del equilibrio líquido-líquido, éste se aplica al sistema ternario agua/ácido acético/cloroformo. Tras analizar los resultados generados por varios modelos, basados en el uso de coeficientes de actividad y en ecuaciones de estado (*UNIQUAC-ideal*, *UNIQUAC-virial*, *Extended NRTL-virial* y *PRSV*), se optó por seleccionar el paquete de estimación *UNIQUAC-virial*, al ser el que logra una mejor estimación de datos de equilibrio: tanto curva binodal como rectas de reparto.

El equilibrio líquido-vapor se aplica utilizando dos sistemas binarios: ciclohexano/isooctano y etanol/agua. Los datos de equilibrio de la primera mezcla son fáciles de estimar, al estar constituida por dos hidrocarburos que generan un sistema débilmente no ideal. La correlación de *Chao-Seader* fue especialmente interesante para el primer sistema. Sin embargo, la mezcla etanol/agua introduce mayores complicaciones derivadas de su fuerte no idealidad y por la presencia de un aceótropo. Tras el estudio de varios modelos (**Fig. 2**), se optó por seleccionar la ecuación *Extended NRTL-virial* al proporcionar un magnífico ajuste en todo el intervalo de composiciones inferiores a la del aceótropo.

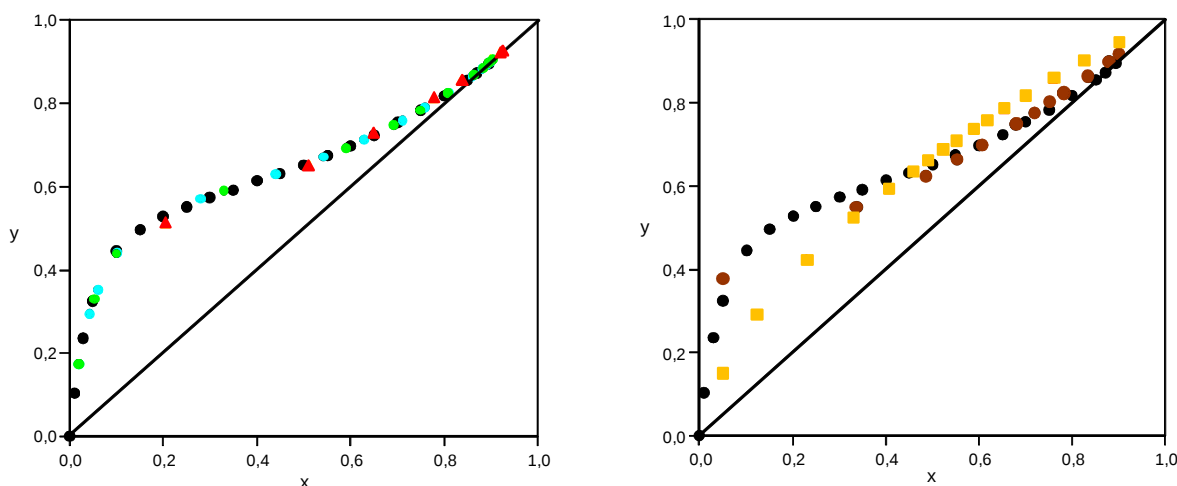


Figura 2. Curva del equilibrio líquido-vapor para el sistema etanol/agua ($P = 1 \text{ atm.}$). Los puntos en negro representan los datos de equilibrio reales. Modelos termodinámicos: $\blacktriangle$ *Antoine*, $\bullet$ *Chien Null-virial*, $\bullet$ *Extended NRTL-virial*, $\blacksquare$ *Lee Kesler Plocker*, $\bullet$ *GCEOS*.

Finalmente, con los anteriores modelos termodinámicos, se pasó a simular las cinco prácticas de laboratorio, creándose otros tantos ficheros que quedan disponibles para los alumnos. A título de ejemplo, en la **Fig. 3** se muestra la pantalla de *Hysys* correspondiente a la configuración necesaria para simular la práctica *Extracción líquido-líquido: unidades de equilibrio en serie*, mientras en la **Fig. 4** se compara, para la práctica *Destilación simple en estado no estacionario*, la evolución temporal de las fracciones molares de etanol en el residuo obtenidas experimentalmente por dos grupos de estudiantes (puntos negros) y generadas por el simulador (puntos blancos).

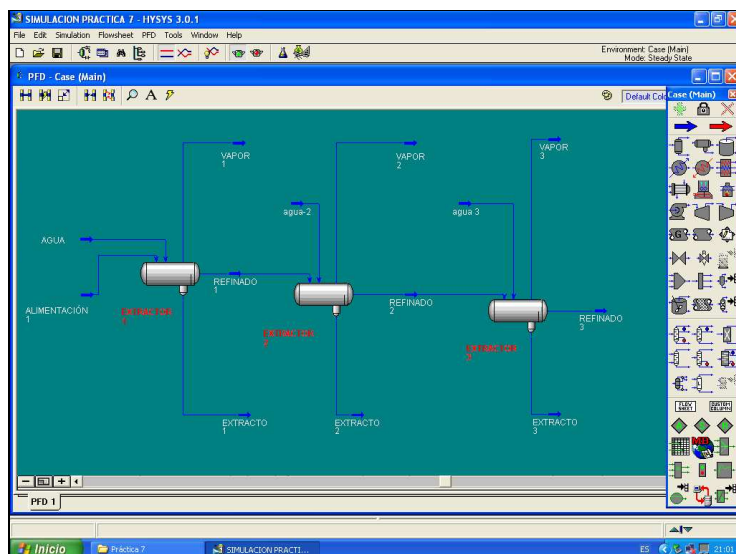


Figura 3. Extracción líquido-líquido: unidades de equilibrio en serie.

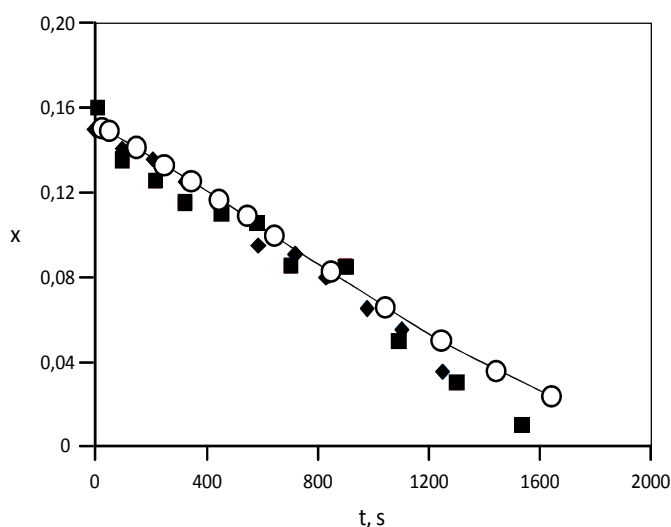


Figura 4. Evolución de la fracción molar de etanol en el residuo. Datos del simulador (puntos blancos) y datos experimentales (puntos negros).

Como conclusión, habría que resaltar el gran potencial que tiene *Hysys* para su uso en el laboratorio de Ingeniería Química. El interés deriva tanto de su facilidad de uso como por la bondad en la predicción de resultados experimentales.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen a la Universidad de Jaén el haber financiado este trabajo a través de la Convocatoria de Proyectos de Innovación Docente 2009-2011 (PID20B). Así mismo, agradecemos la colaboración prestada por los compañeros del Departamento de Ingeniería Química, Ambiental y de los Materiales.