

# Use of computer simulations for improving teaching in the Chemical Engineering laboratory

## Uso de simulaciones por ordenador para mejorar la enseñanza en el laboratorio de ingeniería química

Manuel Cuevas-Aranda, Diego G. Fernández-Valdivia, M. Luisa Parra-Ruiz  
UNIVERSIDAD DE JAEN  
mcuevas@ujaen.es, dfernan@ujaen.es, mlparra@ujaen.es

Sofía Navarro-Nieto  
IES RAMÓN Y CAJAL DE MURCIA  
sofia.navarro@educarm.es

---

### Abstract

*Virtual labs can be adopted as a complement of the university traditional teaching methodologies. This paper describes the results of a teaching pilot project which enabled the use of a commercial process-simulator (Hysys) in the implementation of five virtual labs related to three important unit operations in Chemical Engineering: liquid-liquid extraction, distillation, and heat exchange. The software provided a new approach to the analysis and interpretation of lab results by students. The educational effectiveness of the implemented project was evaluated through questionnaires, and the results showed that in average more of 85% of the student considered Hysys of great utility in their learning process. Project results dissemination was carried out through participation at conferences and seminars about teaching techniques, and also by the publication of a book.*

*Los laboratorios virtuales pueden ser usados, en la Universidad, como complemento de las metodologías tradicionales de trabajo. Esta comunicación describe los resultados de un Proyecto de Innovación Docente universitario que permitió virtualizar, mediante el empleo del simulador comercial (Hysys), cinco sesiones de laboratorio relacionadas con tres importantes operaciones unitarias del área de Ingeniería Química: extracción líquido-líquido, destilación e intercambio de calor. El programa proporcionó un nuevo enfoque para el análisis e interpretación de los resultados de laboratorio por parte de los alumnos. La efectividad docente del proyecto fue evaluada a través de cuestionarios, y los resultados mostraron que, en promedio, más del 85% de los estudiantes consideraron Hysys de gran utilidad en su proceso de aprendizaje. La difusión de los resultados del proyecto fue llevada a cabo a través de la participación en distintos congresos y jornadas de innovación docente, y dio lugar a la publicación de un libro.*

---

Keywords: Chemical engineering education, unit operations, process simulation, Hysys.

Palabras clave: Educación en Ingeniería Química, Operaciones Unitarias, Simulación de procesos, Hysys.

## 1 Introducción

Las instituciones universitarias están experimentando en los últimos años importantes cambios que, desde el punto de vista de la organización y distribución de las enseñanzas y los aprendizajes, se ven claramente condicionados por la presencia del ordenador y de Internet. Así, la red de redes ha desplazado, con un solo clic, al profesor universitario desde el centro educativo tradicional, el aula docente, hasta uno de los millones de nodos de conocimiento que configuran el denominado “ciberespacio” (Salinas, J., 2004). Este reajuste en el status quo del docente, y de la propia institución, que para ambos puede suponer un cierto tipo de debilitamiento, debe ser contemplado como motor de oportunidades educativas. De este modo, es bastante probable que aquellos actores que mejor y más rápido se adapten a la nueva realidad sean los que después puedan ofrecer una oferta formativa de mayor calidad.

Si hoy en día la enseñanza moderna no puede ser entendida sin el uso del ordenador, esto se hace aún más evidente cuando se desarrollan estudios técnicos. Las computadoras permiten, en el campo ingenieril, la resolución de cálculos complejos con rapidez y fiabilidad, de manera que las empresas dedicadas al diseño en ingeniería (aeronáutico, automovilístico, químico-industrial...) han adoptado, para su trabajo diario, programas de diseño asistido por ordenador y de simulación (Rodríguez, J., 1998). La Universidad no debe ser ajena a este fenómeno, por lo que el uso de esos recursos informáticos debe ser ofrecido al alumnado al tiempo que se estudian los fundamentos teóricos de las técnicas de cálculo. Así, los simuladores logran una aplicación práctica inmediata de dichos conocimientos.

Aunque el empleo de los simuladores comerciales en las enseñanzas de Ingeniería Química es relativamente reciente, son numerosos los trabajos en los que se constata su capacidad para favorecer el proceso de aprendizaje del alumno (Ferro, V.R. et al. (2006), Zumalacárregui, L. & Valverde, J.L., 2001). Según Fernandes (2002), el empleo de simuladores comerciales, como Hysys y Aspen, se ha llevado a cabo fundamentalmente en cursos avanzados de diseño industrial (Fernandes, F., 2002), obviando su aplicación en asignaturas introductorias a las Operaciones Básicas de la Ingeniería Química donde el carácter intuitivo de los entornos gráficos de estos programas y su gran potencia de cálculo (que evita al estudiante los tediosos desarrollos numéricos, permitiéndole concentrarse en aspectos conceptuales) podría aumentar su motivación por la materia. Sin embargo, un posible inconveniente de estas herramientas es que no están diseñadas específicamente para el aprendizaje, y no incorporan modelos psicopedagógicos que tengan como centro de atención al alumno.

Las asignaturas llevadas a cabo en los laboratorios de Ingeniería Química son vitales en los grados de Ingeniería Química Industrial e Ingeniería Química, y surgen al trasladar al laboratorio los conocimientos teóricos adquiridos en el campo de las Operaciones Básicas de la Ingeniería Química. Dentro de estas asignaturas, el estudio de los procesos de separación por transferencia de materia (destilación, extracción líquido-líquido, absorción de gases...) y de intercambio térmico (intercambiadores de calor) se considera obligatorio, ya que estas operaciones son de gran importancia industrial.

Durante los últimos años de docencia de “Experimentación en Ingeniería Química” en la Escuela Politécnica Superior de Linares, perteneciente a la Universidad de Jaén, los profesores encargados de la asignatura, al detectar un descenso tanto en la motivación del alumnado como en sus rendimientos académicos medios, pensaron que podría ser interesante realizar una renovación metodológica de la materia consistente en la introducción de un software capaz de simular algunas de las prácticas llevadas a cabo en el laboratorio. De esta forma, la incorporación del simulador proporcionaría al usuario una herramienta para reforzar el estudio y la

comprensión de los principios teóricos de los experimentos realizados, ya que con el programa convenientemente ajustado sería posible modificar un mayor número de variables operativas que las planteadas en el aula, analizando posteriormente su efecto sobre el proceso. Por otro lado, el alumno podría repetir las prácticas de forma virtual (en la sala de informática del centro) tantas veces lo deseara, sin las limitaciones de espacio, tiempo y costes que impone el desarrollo de una prueba real de laboratorio. De este modo, en el curso 2009-10 se inició un Proyecto de Innovación Docente financiado por la Universidad de Jaén denominado “Innovación de la docencia en la asignatura Experimentación en Ingeniería Química mediante el empleo del simulador de procesos Hysys”. En la presente comunicación se describe la metodología seguida así como los materiales virtuales y los resultados docentes obtenidos en el marco del citado Proyecto.

## 2 Materiales y métodos

El Proyecto de Innovación Docente partió de la disponibilidad de un número suficiente de licencias del simulador comercial Hysys.Plant 2.2 (en su día, producto de Hyprotech Ltd., Calgary-Canadá; hoy, de Aspen-Hysys), además de conocimientos básicos para el uso del software por parte del profesorado. Hay que resaltar el carácter intuitivo del interfaz gráfico que acompaña a Hysys, lo que permite una visualización cómoda de equipos y procesos industriales, así como el acceso a multitud de datos físico-químicos de compuestos (Figura 1).

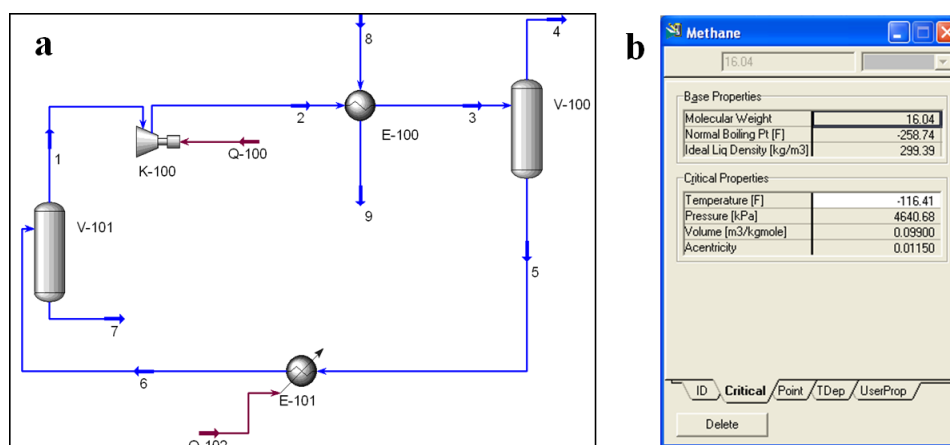


Figura 1: Ejemplos, en Hysys.Plant, de diagrama de procesos (a) y de tabla con propiedades del metano (b).

Al comenzar el proyecto de innovación docente se plantearon varios interrogantes cuya respuesta determinó la metodología de trabajo:

### 1º ¿Qué prácticas se simularían?

En la asignatura se realizan, a lo largo de un cuatrimestre, más de quince prácticas de laboratorio, por lo que pareció adecuado no abarcar, dentro del proyecto, un número superior a cinco o seis casos prácticos. Esto obligó a seleccionar los siguientes desarrollos experimentales:

- *Equilibrio líquido-líquido*. Obtención de los datos termodinámicos de equilibrio para el sistema ternario agua-ácido acético-cloroformo. Usando Hysys se puede investigar el efecto de la temperatura y la presión en la posición del equilibrio.

- *Extracción líquido-líquido: unidades de equilibrio en serie.* Simulación de la operación de extracción líquido-líquido en contacto repetido con corrientes cruzadas (tres etapas). Se utiliza, como alimentación, la mezcla ácido acético-cloroformo, y el agua como disolvente extractor. Se investiga, usando Hysys, el efecto de la modificación del caudal de disolvente extractor en el rendimiento de la extracción.
- *Diagramas de equilibrio líquido-vapor.* Obtención de los datos termodinámicos de equilibrio del sistema binario ciclohexano-isooctano. Se investiga, usando Hysys, el efecto de la presión sobre el equilibrio.
- *Destilación simple en estado no estacionario.* Se simula la destilación diferencial de una mezcla etanol-agua. Usando Hysys se puede investigar el efecto del tiempo en el desarrollo de la operación.
- *Cambiador de calor.* Se estudia el funcionamiento de un intercambiador de calor de carcasa y tubos en el que tanto el fluido calefactor como refrigerador es agua. Con Hysys se podría investigar el efecto de la modificación de las temperaturas de las corrientes de entrada sobre el valor de las temperaturas en las salidas.

2º ¿Cómo se configura Hysys para conseguir una predicción adecuada de los resultados experimentales?

La tarea de configuración del simulador fue llevada a cabo por los profesores de la asignatura durante el curso académico 2009/10, e implicó dos pasos: en primer lugar, selección de los modelos de estimación de propiedades termodinámicas más adecuados para el ajuste de datos experimentales (se consiguió utilizando los resultados empíricos obtenidos en clase en cursos anteriores); posteriormente, creación de los esquemas de proceso (integración de equipos, y corrientes de materia y energía) para simular cada una de las prácticas.

3º ¿Cómo lograr que los alumnos, que no conocen a priori el programa, lo puedan utilizar durante el desarrollo de la asignatura?

Para resolver esta cuestión se organizó, en la Escuela Politécnica Superior de Linares, durante los meses de febrero de 2011 y 2013, el curso “Introducción a la simulación de procesos químicos con Hysys” (Figura 2a). Esta actividad, de 20 h de duración, se diseñó específicamente para que los alumnos conocieran cómo aplicar el simulador sobre las mismas Operaciones Básicas que después se estudiarían en el laboratorio. Además, se editó el libro “Introducción a la simulación en Ingeniería Química” (Figura 2b) como herramienta para apoyar a los estudiantes en el conocimiento del simulador de procesos, (Cuevas, M., 2011).

4º ¿Cómo aplicar el programa durante el período de docencia de “Experimentación en Ingeniería Química”?

Hay que resaltar que el proyecto no pretendió sustituir las prácticas convencionales por el uso exclusivo del ordenador, sino compaginar ambas metodologías. El procedimiento de trabajo pasó, en primer lugar, por la realización de las prácticas y la obtención de los datos experimentales bajo unas condiciones operativas concretas. Después se validaron los resultados proporcionados por el software al compararse éstos con los resultados empíricos y, finalmente, el simulador se usó para discutir el efecto de las distintas variables de proceso. Todo ello supuso el rediseño del cuaderno de prácticas.

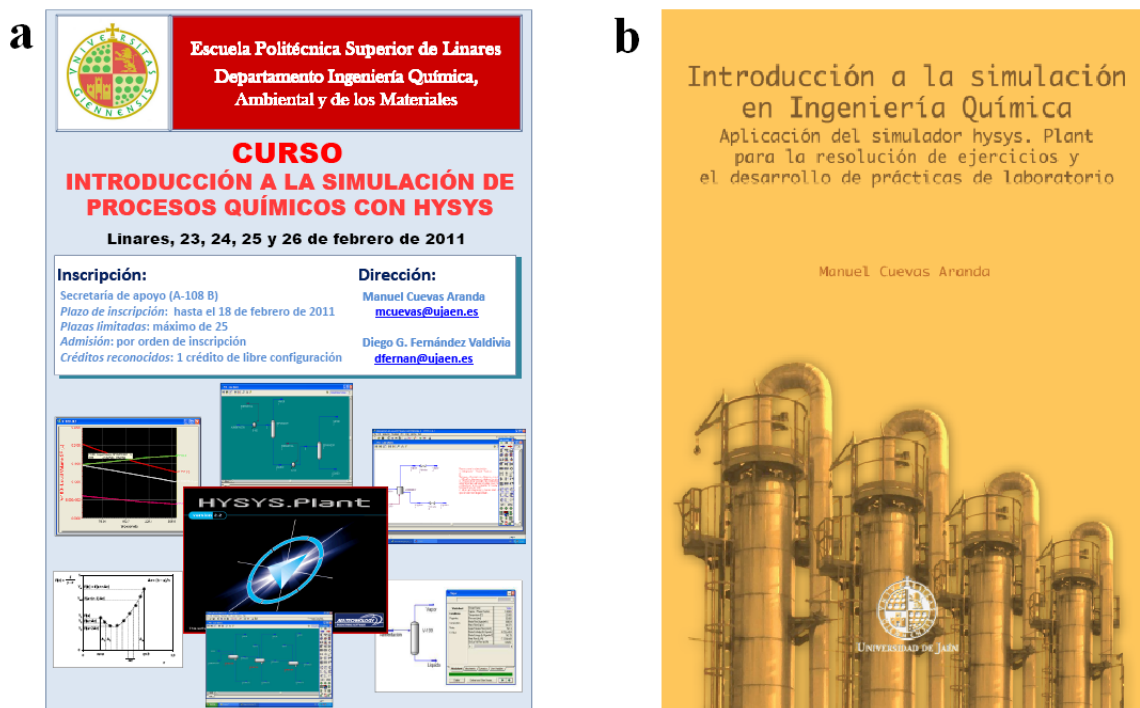


Figura 2: Cartel del curso “Introducción a la Simulación de Procesos Químicos con Hysys” (a), y portada del libro “Introducción a la simulación en Ingeniería Química” (b)

### 5º ¿Cómo evaluar el interés de la propuesta de innovación llevada a cabo?

Los alumnos contestaron cuestionarios orientados a analizar, fundamentalmente, dos aspectos del proyecto: la facilidad de uso del software y el interés del programa para la comprensión de las prácticas de laboratorio (fundamentos teóricos, procedimiento operativo, obtención de resultados...).

## 3 Resultados

A continuación se muestran, en primer lugar, los resultados de la configuración de Hysys llevada a cabo por los profesores integrantes del grupo de trabajo con el fin de simular las cinco prácticas de laboratorio. Posteriormente, se incorporan los resultados de la encuesta realizada a los alumnos para evaluar algunos aspectos del Proyecto de Innovación. Para finalizar, se enumeran los foros donde han sido descritos aspectos relevantes de dicho trabajo.

### 3.1 Configuración del simulador

Tras comparar los datos empíricos, obtenidos en laboratorio en cursos anteriores, con los teóricos, proporcionados por Hysys al aplicar los modelos termodinámicos de su biblioteca, se seleccionaron las ecuaciones predictivas más adecuadas para cada práctica. Respecto al equilibrio líquido-líquido (sistema ternario agua-ácido acético-cloroformo), tras analizar los resultados generados por varios modelos basados en el uso de coeficientes de actividad (UNIQUAC-ideal, UNIQUAC-virial y Extended NRTL-virial) se optó por seleccionar el paquete de estimación UNIQUAC-virial, al lograr el mejor ajuste de los datos de equilibrio (tanto curva binodal

como rectas de reparto). El equilibrio líquido-vapor se estudia utilizando dos sistemas binarios: ciclohexano-isooctano y etanol-agua. Los datos de equilibrio de la primera mezcla fueron perfectamente estimables mediante la correlación de Chao-Seader. El sistema etanol-agua introdujo mayores complicaciones derivadas de su fuerte no idealidad y de la presencia de un aceótropo. Tras el análisis de varios modelos, se optó por la ecuación Extended NRTL-virial, al proporcionar un magnífico ajuste de datos en todo el intervalo de composiciones por debajo del aceótropo (Figura 3).

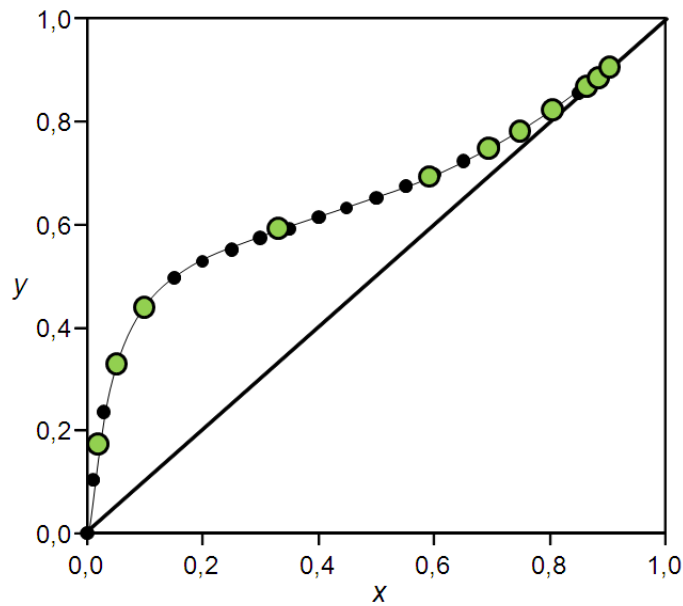


Figura 3: Datos de equilibrio reales (puntos negros) y estimados con el modelo Extended NRTL-virial (puntos verdes) para el sistema etanol-agua a 1 atmósfera.

Finalmente, con los modelos seleccionados, se logró simular las cinco prácticas de laboratorio. En la Figura 4 se incorpora, como ejemplo, la conexión de equipos y corrientes correspondiente a la simulación del experimento titulado “Extracción líquido-líquido: unidades de equilibrio en serie”, mientras en la Figura 5 se compara, para la práctica de destilación simple en estado no estacionario, la evolución temporal de las fracciones molares de etanol en el residuo obtenidas experimentalmente por dos grupos de alumnos (puntos negros) y las generadas por Hysys (puntos verdes).

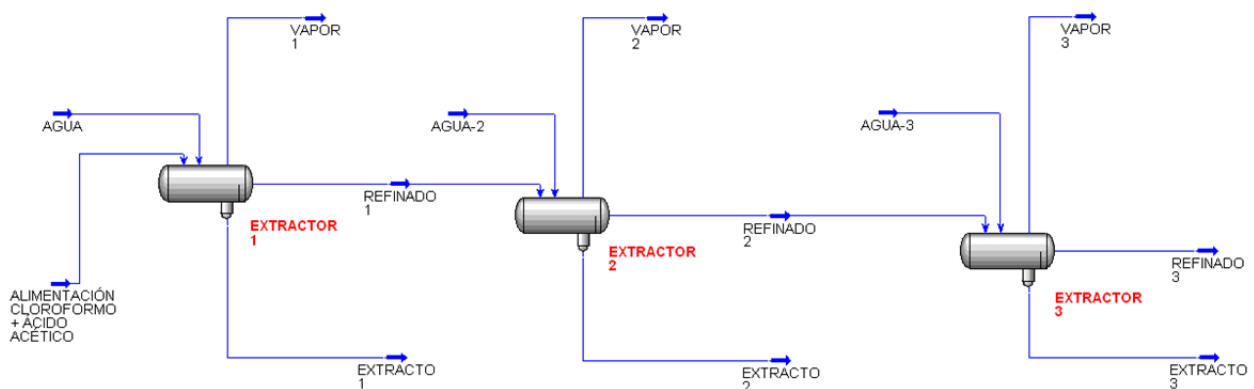


Figura 4: Esquema en Hysys.Plant para la práctica “Extracción líquido-líquido: unidades de equilibrio en serie”.



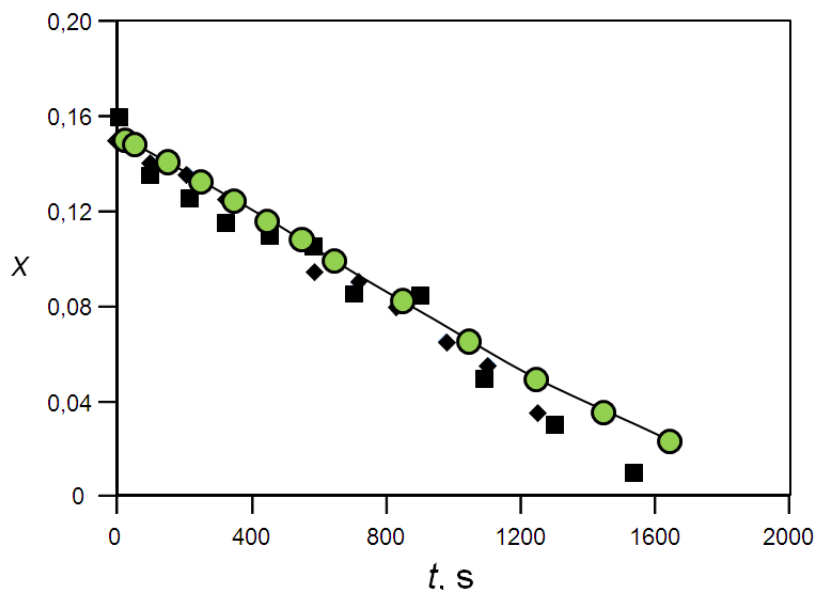


Figura 5: Evolución temporal de la fracción molar de etanol en el residuo. Datos del simulador (puntos verdes) y datos experimentales (puntos negros).

En general, las configuraciones logradas para la descripción de los experimentos fueron aceptables, aunque las desviaciones existentes entre los datos reales y los virtuales fueron mayores en las prácticas de extracción líquido-líquido que en las de destilación. Los cinco ficheros asociados a las prácticas simuladas (Figura 6) quedaron a disposición de los alumnos en la plataforma virtual de la Universidad de Jaén (ILIAS) para su empleo durante el desarrollo de las clases de “Experimentación en Ingeniería Química”.

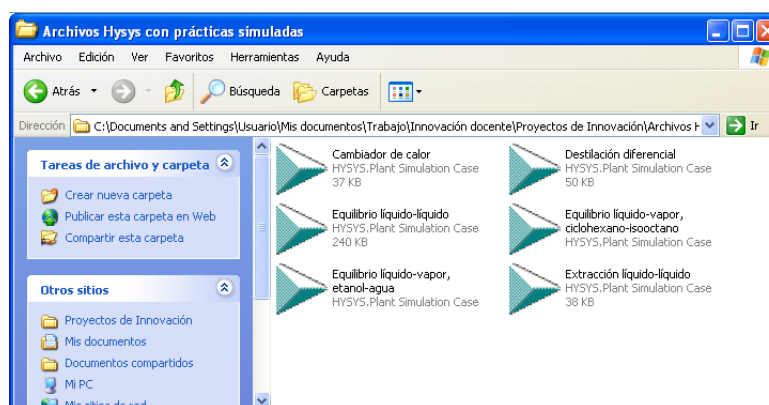


Figura 6: Archivos de Hysys con las cinco prácticas simuladas.

### 3.2 Satisfacción del alumnado

La opinión del alumnado es un punto esencial para verificar la utilidad de cualquier proyecto y dirigir las futuras acciones de mejora. Sin embargo, hay que ser cautos a la hora de examinar los datos de evaluación, porque el simulador únicamente ha sido utilizado durante dos cursos académicos (2010-11 en la titulación I.T.I. Química Industrial, y 2012-13 en el grado de Ingeniería Química Industrial), y sólo la perspectiva generada tras varios años de aplicación podrá ofrecer una visión clara de la realidad. Las afirmaciones usadas para la evaluación han sido las siguientes:

1. Con los conocimientos adquiridos en la asignatura es posible crear archivos en Hysys para simular las prácticas de laboratorio.
2. Al nivel en el que se han desarrollado las prácticas de laboratorio (con los archivos de simulación ya creados y a disposición del alumno) el programa Hysys es fácil de usar.
3. La simulación de las prácticas de laboratorio ha conducido a un mejor entendimiento de los fundamentos teóricos en los que se basan las operaciones unitarias estudiadas.
4. La simulación de las prácticas de laboratorio ha ayudado a un mejor conocimiento del procedimiento operativo llevado a cabo en el aula.
5. La simulación de las prácticas de laboratorio ha ayudado al análisis e interpretación de los resultados experimentales obtenidos.
6. En general, considera que la simulación de las prácticas ha sido útil para el desarrollo de la asignatura “Experimentación en Ingeniería Química”.

Los resultados de la encuesta, sobre un total de 20 estudiantes, se presentan a continuación. Los alumnos han considerado que Hysys es fácil de usar si se dispone de los archivos ya configu-

Tabla 1: *Resultados (respuestas, %) de la encuesta de satisfacción del alumnado.* TD: total desacuerdo; ED: en desacuerdo; AF: a favor; TF: totalmente a favor; NC: no contesta.

Cuestión	Curso académico 2010-11					Curso académico 2012-13				
	TD	ED	AF	TAF	NC	TD	ED	AF	TAF	NC
1	26,7	20,0	46,7		6,7 0	40	40	20	0	0
2	6,7	6,7	46,7	40	0	0	20	40	40	0
3	13,3	20	40	20	6,7	0	40	20	40	0
4	6,7	20	53,3	13,3	6,7	0	0	60	40	0
5	0	13,3	60,0	26,7	0	0	20	40	40	0
6	0	13,3	60,0	26,7	0	0	20	60	20	0

rados para cada una de las prácticas (86,7% y 80% a favor o totalmente a favor en los cursos 2010-11 y 2012-13, respectivamente). Sin embargo, el porcentaje de aprobación sufre un descenso significativo cuando se pregunta sobre la facilidad para que ellos configuren el simulador (53,4% y 20% de aprobación en el ítem 1 durante los cursos 2010-11 y 2012-13, respectivamente). Respecto a la ayuda que representa el empleo del software para comprender el trabajo experimental, el 60% considera que mejoró el entendimiento de los fundamentos teóricos, el 66,7% (curso 2010-11) y 100% (curso 2012-13) que reforzó los conocimientos de los procedimientos operativos, y el 86,7% y 80% que ayudó al análisis e interpretación de los resultados experimentales (cursos 2010-11 y 2012-13, respectivamente). Preguntados, finalmente, sobre el interés general de la simulación de las prácticas con Hysys, más de un 80% del alumnado consideró esta iniciativa positiva o muy positiva.

### 3.3 Participación en foros de innovación docente

- II Jornadas de Innovación Docente en la Universidad de Jaén. Comunicación oral: Simulación de prácticas de laboratorio de la asignatura “Experimentación en Ingeniería Química” mediante el uso del simulador de procesos Hysys.Plant. Jaén, 2010.



- Revista electrónica Universidad de Jaén “Iniciación a la Investigación”, (Cuevas, M. et al., 2010).
- II Jornadas sobre Innovación Docente y Adaptación al EEES en las Titulaciones Técnicas (INDOTEC), (Cuevas, M. et al., 2011b).
- Congreso de Innovación Docente Campus Mare Nostrum, (Cuevas, M. et al., 2011a).

## 4 Conclusiones










Como conclusión, habría que resaltar el gran potencial que tiene Hysys cuando es empleado en el laboratorio de Ingeniería Química. El interés deriva tanto de su facilidad de uso como de la bondad en las predicciones de los resultados experimentales. La respuesta de los alumnos al uso de Hysys ha sido, en general, bastante positiva. Se puede decir que el programa ha supuesto un estímulo para el aprendizaje del alumno, además de su acercamiento a un programa informático de gran importancia profesional y al refuerzo de algunas competencias como son la capacidad de “aprender a aprender”, el trabajo en equipo, la integración de conocimientos, el razonamiento crítico y la capacidad de análisis. Sin embargo, es necesario seguir mejorando el empleo del simulador en el aula de prácticas del área de Ingeniería Química, intentando mejorar la convergencia entre los datos empíricos y los calculados por el programa y, además, ampliando el número de prácticas simuladas por el software.

## 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).

**Nota.** *Este documento ha sido elaborado a partir de la comunicación presentada al XX1 Congreso Universitario de Innovación Educativa en las Enseñanzas Técnicas (XX1 CUIEET). Universitat Politècnica de València, Valencia, julio 2013.*

## Referencias

-  Cuevas M. (2011).  
*Introducción a la simulación en Ingeniería Química. Aplicación del simulador Hysys.Plant para la resolución de ejercicios y el desarrollo de prácticas de laboratorio.*  
Servicio de Publicaciones de la Universidad de Jaén, Jaén.
-  Cuevas M., Fernández D., Mateo S., Parra M. L. (2010).  
*Simulación de prácticas de laboratorio de la asignatura “Experimentación en Ingeniería Química” mediante el uso del simulador de procesos Hysys.Plant.*  
Iniciación a la Investigación: <http://revistaselectronicas.ujaen.es/index.php/ininv>.
-  Cuevas M., Fernández D., Mateo S., Parra M. L. (2011a).  
*Renovación metodológica de la asignatura “Experimentación en Ingeniería Química” por incorporación del simulador comercial de procesos químicos Hysys. Simulación de prácticas de laboratorio y resultados docentes.*  
Actas del Congreso de Innovación Docente Campus Mare Nostrum, Cartagena, España.
-  Cuevas M., Fernández D., Mateo S., Parra M. L. (2011b).  
*Virtualización de una práctica de destilación diferencial, del laboratorio de ingeniería química, mediante el uso del simulador de procesos Hysys.*  
Actas de las II Jornadas sobre Innovación Docente y Adaptación al EEES en las Titulaciones Técnicas (INDOTEC), Granada, España (2011b).
-  Fernandes F. (2002).  
*Use of process simulators for the unit operations education of undergraduate chemical engineers.*  
Computer Applications in Engineering Education, 10, 155-160.
-  Ferro V. R., Gómez J. O., Palomar J. F., Gómez L. M. (2006).  
*Estrategia didáctica tipo ECTS basada en el uso de simuladores de proceso en la titulación de Ingeniero Técnico Industrial, especialidad en Química Industrial.*  
Actas del XIV Congreso Universitario de Innovación Educativa en las Enseñanzas Técnicas (CUIEET), Gijón, España.
-  Rodríguez J. (1998).  
*AutoCAD 14.*  
Anaya, Madrid.
-  Salinas J. (2004).  
*Innovación docente y uso de las TIC en la enseñanza universitaria.*  
Revista de Universidad y Sociedad del Conocimiento (RUSC), 1(1), 1-16.
-  Zumalacárregui L., Valverde J. L. (2001).  
*Ejemplo para el uso de un simulador en los estudios de ingeniería química.*  
Educación Química, 12(4) 203-208.