

## **SIMULADOR SimElv COMO HERRAMIENTA DIDÁCTICA**

Izquierdo Misiego, C.; Sánchez Curto, J. M\*.; Martín Sánchez, N.;  
Montero García, J.; Sánchez Montero, M. J.; Salvador Palacios F.

*Departamento de Química Física. Facultad de Ciencias Químicas.*  
Universidad de Salamanca

\*Instituto de Investigaciones Marinas de Vigo (CSIC)

### **RESUMEN**

Presentación del funcionamiento y resultados que ofrece el programa *SimElv* elaborado como herramienta didáctica interactiva para complementar el trabajo de laboratorio de futuros Graduados en el ámbito de la Química. Contempla la simulación del trabajo experimental diseñado para obtener datos de equilibrio líquido-vapor (destilación cerrada) que previamente desarrollará el alumno en el laboratorio. Ofrece la posibilidad de trabajar con diversidad de sistemas binarios permitiendo analizar comparativamente distintos tipos de comportamientos. El programa ofrece también distintas posibilidades de análisis de los datos obtenidos tanto desde el punto de vista gráfico como numérico.

### **ABSTRACT**

*We report the functioning and results of the use of the SimElv program. This program was developed as an interactive teaching tool that will complement the laboratory work of future graduate students within the sphere of Chemistry. It involves simulation of the experimental work designed to obtain data on liquid-vapour equilibrium (closed distillation) that students will have previously developed at the laboratory. It offers the possibility of working with diverse binary systems, allowing comparatively different types of behaviour to be compared. The program also provides different possibilities for the analysis of data obtained both from the graphic and from the numerical points of view.*

**Palabras clave:** Docencia Práctica. Experimentos en Química. Equilibrio Fases. Destilación

## INTRODUCCIÓN

Atendiendo a la premisa fundamental del proceso que ha dado lugar a la adaptación al Espacio Europeo de Educación Superior (EEES), las enseñanzas de Grado tienen como finalidad esencial la adquisición por el estudiante de una formación general, orientada a la preparación del ejercicio de actividades profesionales (art. 9.1 del R.D. 1393/2007). En consecuencia, la Universidad ha de plantearse la formación de personas capaces de progresar y de resultar eficaces profesionalmente en una sociedad en continuo cambio; este propósito está implícito en todas las Declaraciones que han contribuido a la construcción del EEES, y todas las Universidades lo han asumido al suscribir la *Magna Charta Universitatum*, donde se establece que: “*la tarea de las universidades de extender el conocimiento entre las jóvenes generaciones implica que, en el mundo de hoy, debe también servir a la sociedad en su totalidad,....*”

En este marco de búsqueda de mejora y adaptación de la Universidad al mundo contemporáneo y sus necesidades es indudable que la formación de carácter práctico adquiere una especial relevancia, ya que será, la base del éxito profesional de los futuros Graduados. En este sentido la formación del Graduado en Químicas o Ingeniería Química desde el punto de vista práctico, se inicia en los laboratorios del Prácticas planteados en su titulación .

En consecuencia, resulta evidente la necesidad de contar con diseños y desarrollos de actividades relacionadas con este aspecto práctico que garanticen la obtención de las competencias y habilidades que se desea que alcancen los nuevos Graduados en cualquiera de los ámbitos relacionados con la Química.

La imposibilidad de desarrollar todas las experiencias necesarias para verificar la información de carácter teórico suministrada, ocasiona con frecuencia una desconexión profunda entre ambos tipos de enseñanza.

Utilizar los medios informáticos para el diseño y desarrollo de prácticas relacionadas con los contenidos teóricos representa en la actualidad una potente herramienta de trabajo porque permite la visualización de experiencias inaccesibles con los medios disponibles o que requerirían largas horas de laboratorio, con la ventaja

añadida de ser una metodología con un fuerte poder de atracción sobre los alumnos que puede enfocarse en favor de un mejor aprendizaje.

El trabajo que se presenta surgió sobre la base de estas ideas y constituye el primer paso de un amplio proyecto cuyo objetivo general es ofrecer a los futuros estudiantes de Grado en Química e Ingeniería Química un conjunto de programas de simulación que le permitan obtener distintos tipos de diagramas de equilibrio de fases para diversidad de sistemas cuya obtención sistemática en el laboratorio presenta dificultades de tipo operativo o temporal. La utilización de dichos programas permitirá diseñar actividades para el trabajo autónomo del alumno, individual o en grupos coordinados, encaminado a analizar comparativamente el comportamiento de diferentes sistemas y su posible tratamiento con propósitos de establecer predicciones a nivel práctico.

## MARCO TEÓRICO

El programa *SimElv*, elaborado en Java por el Licenciado en Ingeniería Química D. Juan María Sánchez Curto como Proyecto Fin de Carrera de la Titulación de Ingeniería Técnica en Informática de Sistemas de la Universidad de Salamanca, posibilita la simulación de un proceso destilación cerrada con el propósito de obtener datos de equilibrio líquido-vapor para distintos tipos de sistemas a elección del alumno utilizando la refractometría como técnica de análisis cuya utilización también es simulada por el programa.

En la actualidad son numerosos programas presentados en reuniones de carácter didáctico destinados a la simulación de procesos de interés en termodinámica (Chamorro, c. *et al.*, 2003 ; García, F *et al.* , 2003 ; Alonso, C. *et al.*, 2003; Carreras, R. 2001) pero ninguno de ellos cubre los aspectos desarrollados en el programa **SimELv** siendo, por tanto una nueva herramienta de utilidad didáctica para los futuros estudiantes de Grado en Química e Ingeniería Química

La elaboración y desarrollo de este programa se enmarca en un amplio Proyecto destinado a crear herramientas didácticas informatizadas que permitan cubrir los aspectos más relevantes relacionados con el comportamiento P-V-T de fluidos puros y mezclas y obtención de los diagramas de fases característicos de interés práctico.

El programa diseñado con una interfaz sencilla y accesible a los conocimientos informáticos de los alumnos permite al usuario trabajar con distintos sistemas y, para cada uno de ellos, ofrece las siguientes posibilidades:

- Edición gráfica de diferentes disoluciones binarias y realización de las medidas de sus índices de refracción con el propósito de disponer de curvas de calibrado de índice de refracción como función de la composición para el sistema seleccionado. (datos de Sáez de la Torre, 1981).
- Tratamiento numérico de dichas curvas de calibrado para la posterior determinación de la composición de las mezclas resultantes del proceso de destilación.
- Simulación del proceso de destilación cerrada de diferentes muestras del sistema seleccionado con la visualización del proceso de destilación propiamente dicho y del posterior análisis de la composición del destilado y residuo resultantes una vez alcanzado el equilibrio que el alumno deberá llevar a cabo manejando el refractómetro cuyo funcionamiento también se simula.
- Generación de un informe final, a partir de los datos obtenidos almacenados en ficheros html, que permite disponer de:
  - Curva de calibrado junto con su ajuste numérico,
  - Diagrama T-Zi
  - Curva de equilibrio Yi-Xi..
- Utilización de un tutorial de aprendizaje con las siguientes posibilidades:
  - Visualización del diagrama de fases P-T para distintas sustancias puras así como de la evolución durante un calentamiento isobárico en un sistema cilindro-pistón.
  - Construcción de diagramas P-Zi y T-Zi para sistemas binarios ideales con indicación gráfica de las regiones características de los distintos estados de agregación

Los diagramas líquido-vapor T-Zi ó Yi-Xi.. obtenidos de la simulación de la destilación podrán ser analizados posteriormente por los alumnos como trabajo complementario con el propósito de comparar los resultados que ofrecen los distintos modelos que predicen desviaciones de la idealidad

## DESARROLLO DE LA INVESTIGACIÓN :

### Descripción del software

El Programa *SimElv* consta de dos partes. Por un lado, el desarrollo experimental simulado del proceso de destilación cerrada con el propósito de obtener diagramas de equilibrio líquido-vapor para sistemas binarios y, por otro, el tutorial que el alumno puede utilizar de forma previa para comprender el comportamiento P-V-T de componentes puros o los diagramas líquido-vapor para mezclas binarias ideales.

En cualquier caso la ejecución del programa supone la presentación al usuario de la ventana principal que aparece reflejada en la Figura 1. En ella se podrá ver el equipo de destilación y, en la parte izquierda, la información sobre la mezcla binaria seleccionada para trabajar, las condiciones de operación (presión y temperatura), así como muestras destiladas y muestras medidas.

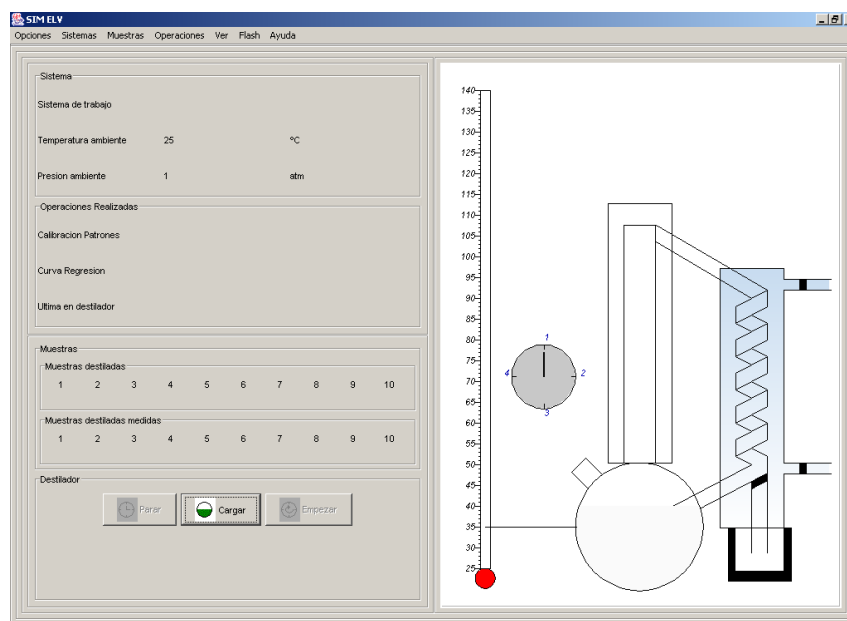


Figura 1: Ventana Principal de la aplicación SimElv

### Menús de la aplicación.

La ventana principal ofrece al alumno las siguientes posibilidades utilizables en la parte superior con los menús desplegables que se muestran en la siguiente tabla:

Opciones	Sistemas	Muestras	Operaciones	Ver	Flash	Ayuda
Cancelar	Parejas de	Muestra 1	Análisis	Calibrado		Puros
Simulación	componentes	Muestra 2	Fases	T-Zi		P-Zi
Salir	binarios	Muestra 3		Yi-Xi		T-Zi
	a estudiar	Muestra 4				

#### a) Sistemas

El alumno podrá elegir uno de los 10 sistemas que se ofrecen como posibles para trabajar durante el proceso de simulación. En la **Figura 2** puede verse la ventana que aparece una vez elegido el sistema para el caso particular del sistema binario benceno-isooctano.

En dicha ventana se presenta al alumno un conjunto de disoluciones de concentración conocida, o patrones, para el sistema seleccionado caracterizadas por un color diferente para cada sistema y por la mayor o menor intensidad del mismo para las diferentes concentraciones. El objetivo será obtener con ellos el correspondiente calibrado que proporcione la relación índice de refracción-composición

En la parte inferior de la misma pantalla el alumno podrá ver, de forma esquemática el refractómetro con el que procederá a hacer las medidas de índice de refracción que utiliza el fundamento del refractómetro de Abbé y que habrá visto y manejado previamente en el laboratorio.

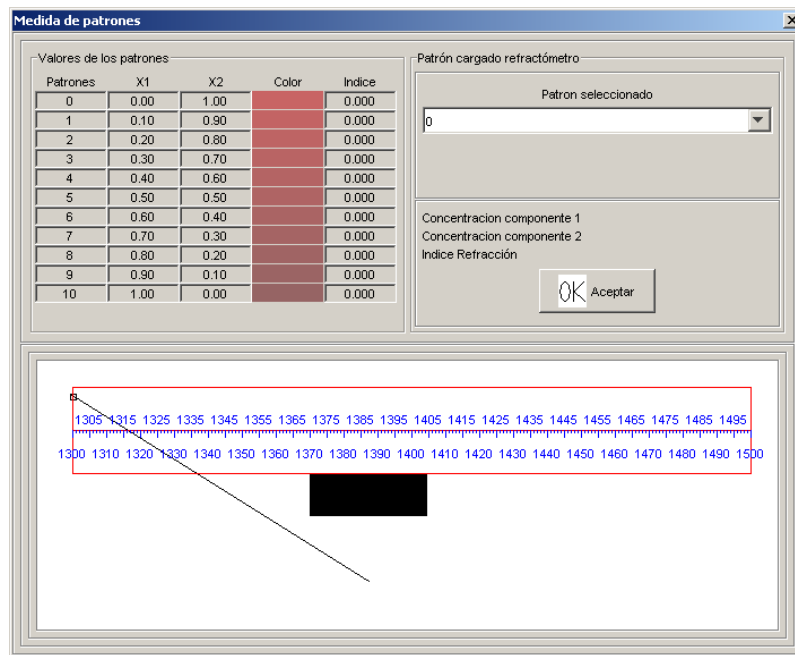
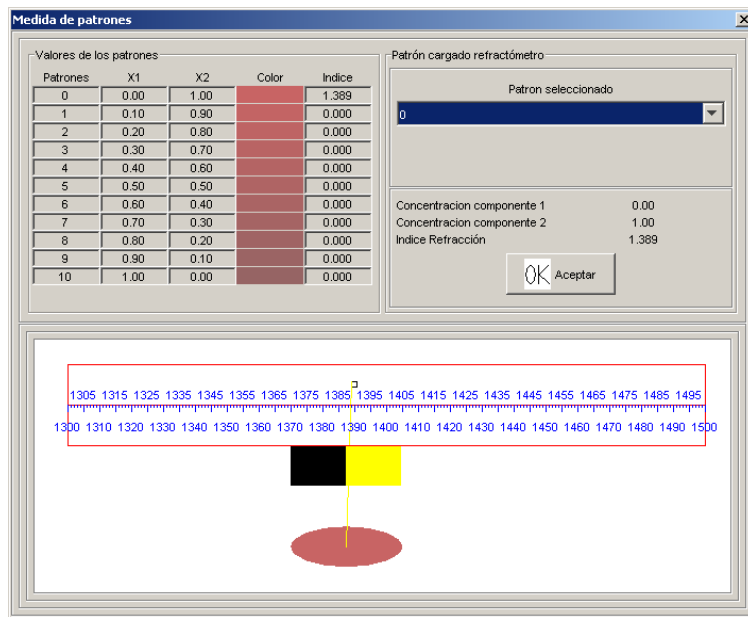


Figura 2: Patrones correspondientes al sistema benceno-isooctano y esquema del Refractómetro de Abbé

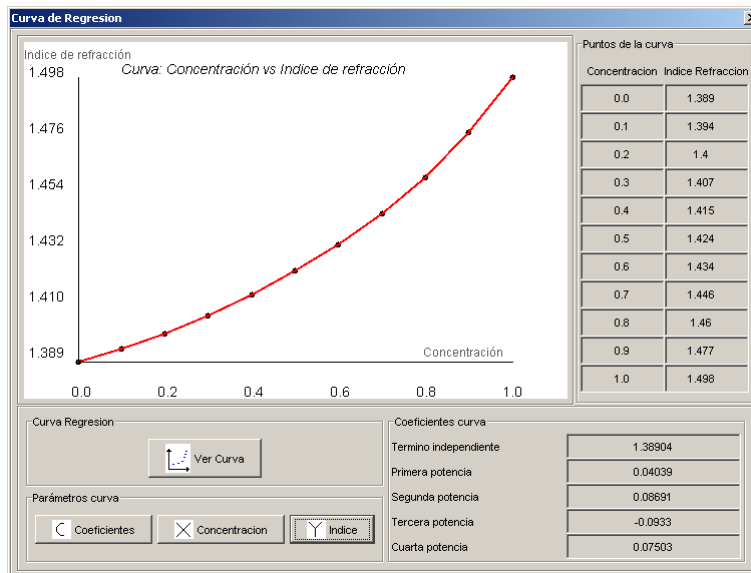
### ***Obtención del calibrado***

El alumno seleccionará un patrón y aparecerá sobre el refractómetro tal y como puede observarse en la Figura 3. A continuación deberá determinar el índice de refracción que le corresponde arrastrando el cuadro que aparece en la parte superior izquierda sobre la escala hasta alcanzar la situación que se muestra en dicha figura característica de haber conseguido incidencia rasante y después de pulsar el botón *Aceptar*, aparecerá en la tabla de patrones el valor obtenido. El alumno deberá proceder de forma análoga con el resto de patrones para obtener el calibrado completo.



**Figura 3: Obtención del calibrado**

Concluido el proceso de calibración, el alumno podrá proceder a obtener el ajuste numérico representativo de la dependencia encontrada obteniendo los resultados que recoge la Figura 4: Representación gráfica del calibrado con el ajuste numérico superpuesto y parámetros del ajuste efectuado.



**Figura 4: Resultados del calibrado para el sistema seleccionado**



## b) Muestras

Una vez determinado el Calibrado del sistema, el alumno deberá proceder a simular la destilación de las muestras de diferente composición que se le ofrecen. Para ello, una vez seleccionada la muestra, se le ofrecerá la opción de cargar para simular su paso al destilador empezar para que se inicie el calentamiento del calderón y consiguiente subida de temperatura que observará en el termómetro que tiene en pantalla. Podrá observar el sistema de recirculación (Figura 5) que permite al cabo del tiempo alcanzar la situación de equilibrio y, una vez estabilizada la temperatura, podrá optar por parar el proceso y visualizar la separación de destilado y residuo correspondientes al equilibrio alcanzado (Figura 6)

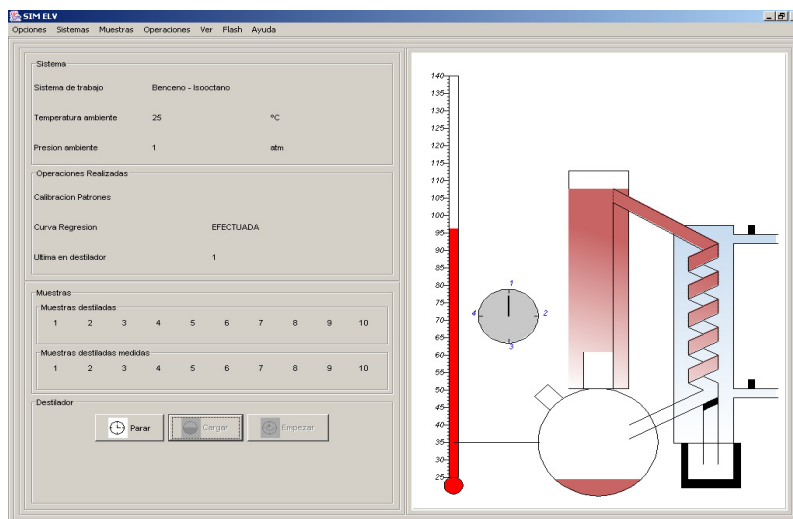


Figura 5: Destilador en funcionamiento.

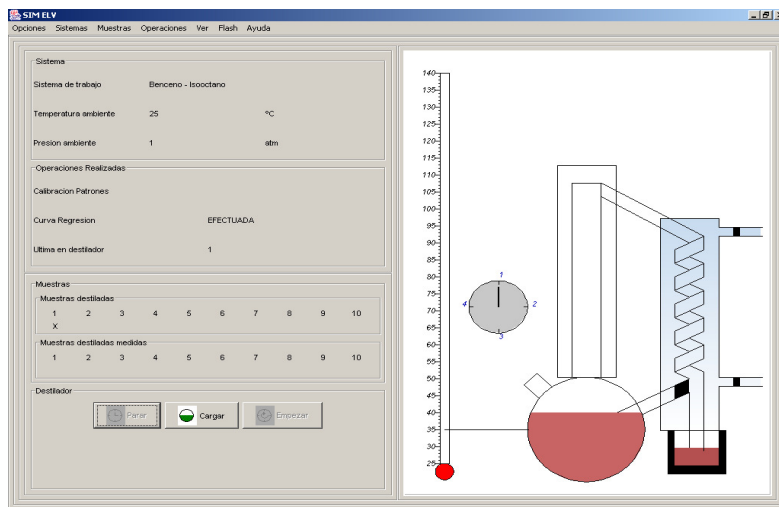


Figura 6. Fases obtenidas tras la destilación.

De las fases resultantes se miden sus índices de refracción, obteniéndose las concentraciones de las fases líquida y vapor. Los valores obtenidos, son datos de equilibrio que se van a representar para obtener las curvas temperatura-composición y concentración de la fase líquida-concentración de la fase vapor, (curva X-Y). Ambas se deben analizar según distintos modelos que predicen las desviaciones de la idealidad.

### c) Operaciones

Esta opción permite proceder al análisis refractométrico de las fases del destilado y residuo resultantes del proceso de destilación para establecer sus composiciones. Para ello se procederá de forma análoga a como se hizo para obtener el calibrado con la única diferencia de que ahora será el destilado ó el residuo lo que se pondrá en el refractómetro y la incidencia rasante corresponderá con una separación blanco-negro en el visor tal y como puede verse en la Figura 7.

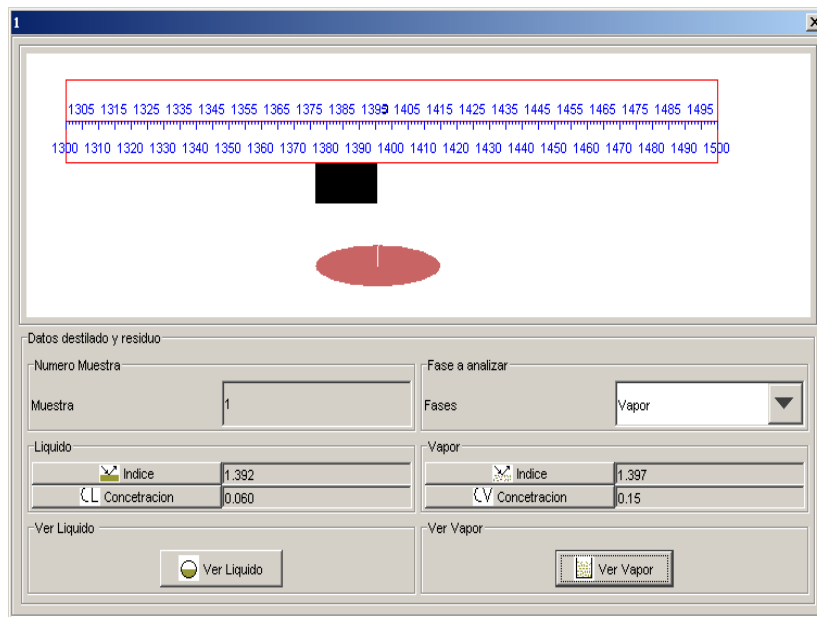
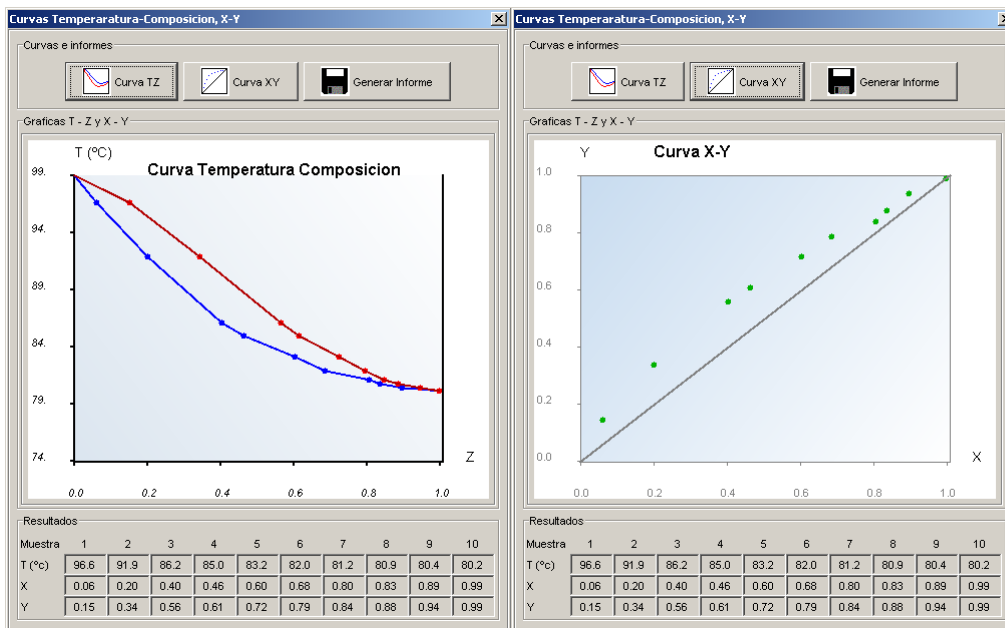


Figura 7: Medida del índice de refracción de las fases en equilibrio.

La carga de las diferentes muestras en el destilador es un proceso que se debe repetir por parte del usuario. Una vez cargadas deben ser destiladas y a continuación se debe realizar el análisis de fases. El proceso se debe realizar diez veces, una para cada una de las muestras.

#### d) Ver

El menú *Ver* ofrecerá al alumno la opción de obtener la representación de los Diagramas  $c T-Z_i / Y_i-X_i$  junto a los datos obtenidos en un informe .html. tal y como se muestra a continuación.



## Informe

Numero	TemperaturaEquilibrio	IndicexEquilibrio	IndiceyEquilibrio
0	96.67	1.392	1.397
1	91.95	1.4	1.41
2	86.22	1.415	1.429
3	85.05	1.42	1.435
4	83.2	1.434	1.448
5	82.03	1.442	1.457
6	81.2	1.458	1.465
7	80.9	1.463	1.471
8	80.49	1.473	1.482
9	80.22	1.493	1.494

Figura 8: Diagramas Ti-Zi /Yi-Xi y otros datos para el informe

### e) Ayuda

El tutorial que se encuentra en el menú de Ayuda proporcionará al alumno las siguientes opciones:

**Puros-Binarios:** Permite visualizar el diagrama de fases P-T de una sustancia pura seleccionada (cf. Figura 8) que se va generando progresivamente a medida que el alumno presiona los botones que en la pantalla aparecen correspondientes a la curva de fusión (S-L) curva de vaporización (L-V) o curva de sublimación (S-V).

Sobre dicho diagrama se puede visualizar la evolución del sistema como consecuencia de un calentamiento isobárico

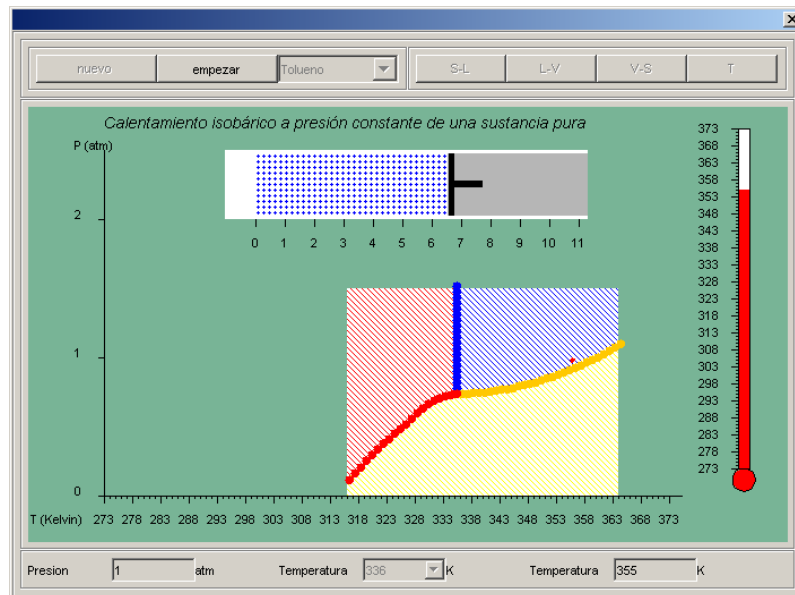


Figura 9: Calentamiento isobárico a presión constante.

### ***Diagramas de Presión-Composición.***

Para trabajar con esta opción el alumno podrá elegir un sistema binario en el cuadro de diálogo inicial y seleccionar también la temperatura de trabajo. El programa, sobre la base de las ecuaciones de Antoine le proporcionará una representación del característico comportamiento ideal para este tipo de representación (**Figura 10**). Además, la elección de una composición de la mezcla, genera la aparición de un dispositivo cilindro-pistón sobre la composición seleccionada que permite visualizar la evolución de la mezcla como consecuencia de procesos de compresión o expansión isotérmica provocados por el arrastre del pistón.

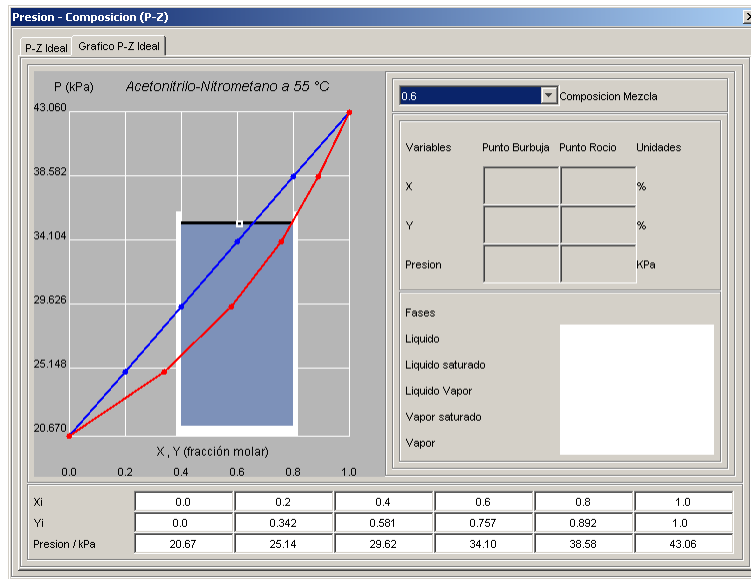


Figura 10: Curvas Presión-Composición para sistemas ideales.

### Diagramas Temperatura-Composición.

Esta opción permitirá al alumno, una vez seleccionado el sistema y la presión de trabajo, mediante los botones adecuados podrá visualizar de forma clara la situación de la región de líquido comprimido, vapor sobrecalentado y las curvas de puntos de burbuja y de rocío que delimitan la región bifásica. En esta última la selección de un punto determinado proporciona una representación del sistema seleccionado en un dispositivo cilindro-pistón cuyo movimiento muestra la evolución de dicho sistema.

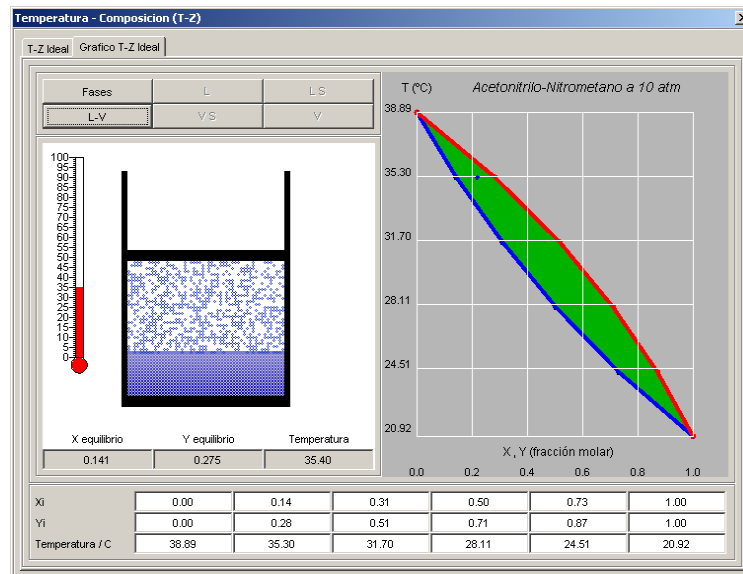


Figura 11: Diagramas Temperatura-Composición comportamiento ideal.

## Complemento de la herramienta de interés didáctico

Las posibilidades que ofrece el programa *SimELv* permite el diseño y desarrollo de actividades docentes de tipo cooperativo con el objetivo de analizar comparativamente el comportamiento líquido-vapor de diversos sistemas así como de estudiar la eficacia de los distintos modelos que tratan de justificar las desviaciones de la idealidad.

A título de ejemplo, se muestra en las figuras 12, 13 y 14 los resultados obtenidos a partir de los datos generados por *SimELv* para el sistema metano-dioxano cuando se procede a analizar el comportamiento experimental obtenido mediante la simulación con los que ofrecerían distintos modelos teóricos de predicción del comportamiento

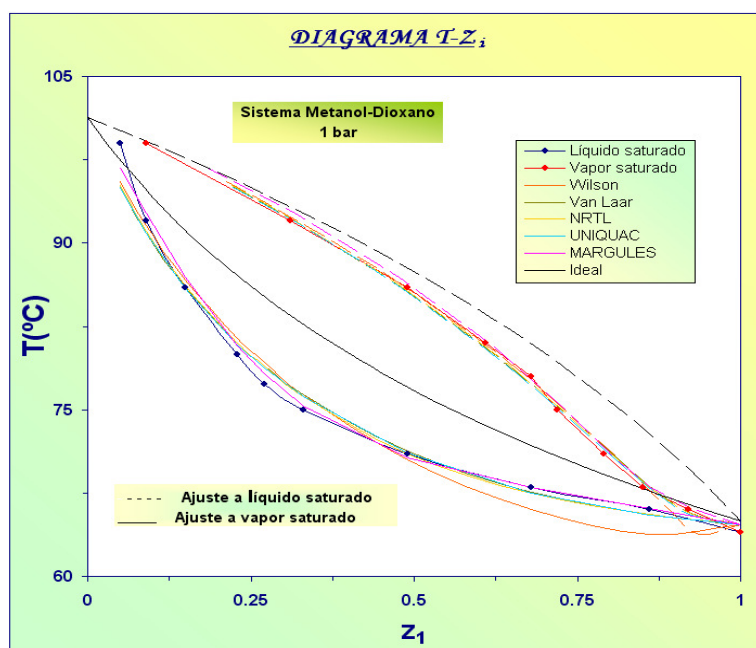


Figura 12: Datos T-Z<sub>1</sub> simulados con SimELv y ajustes a modelos teóricos que predicen el comportamiento L-V

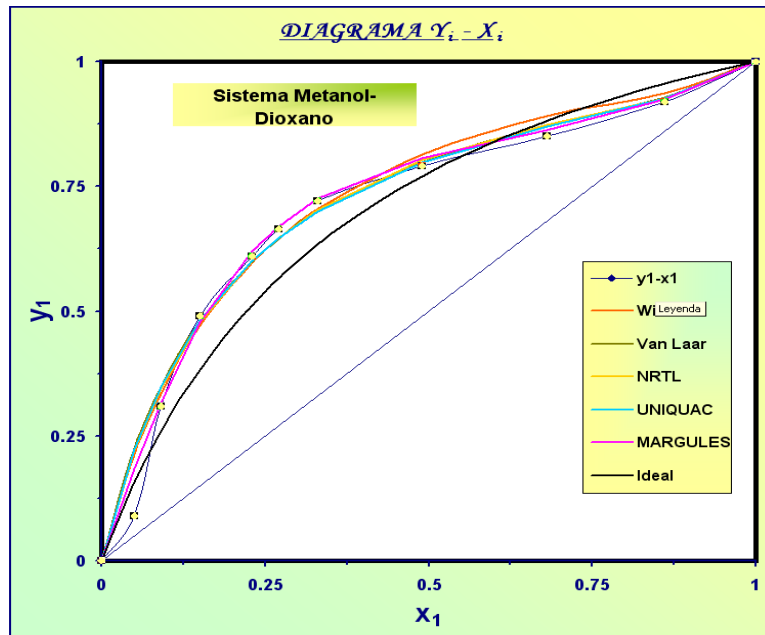


Figura 13: Curva de equilibrio para el sistema metano-dioxano simulada con SimELv y ajustes a modelos teóricos.

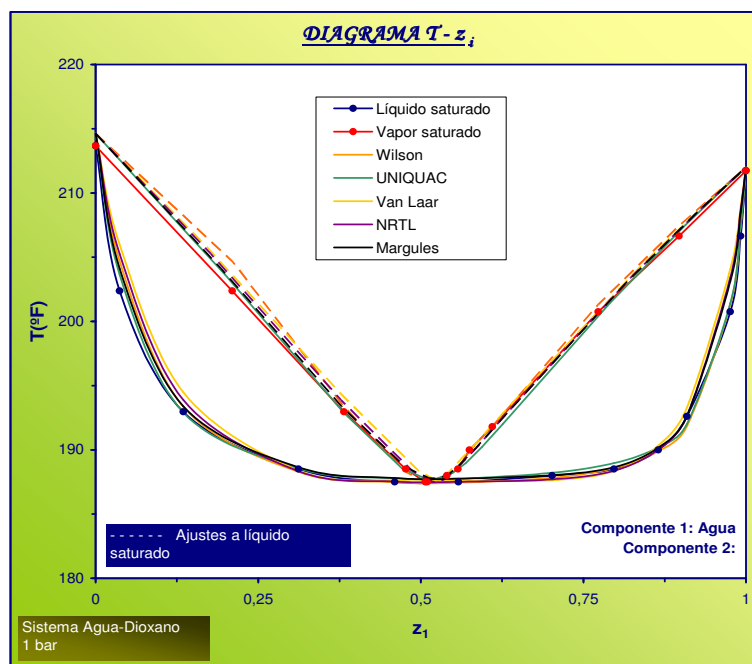


Figura 14: Datos  $T-Z_i$  para un sistema azeotrópico simulados con SimELv y ajustes a modelos teóricos que predicen el comportamiento L-V



## CONCLUSIONES

La herramienta diseñada y desarrollada permite simular la obtención de datos difíciles de conseguir en una práctica académica realizada durante un tiempo limitado. Por tanto el programa *SimELv* representa un nuevo recurso didáctico con una alta potencialidad de aplicación para la enseñanza-aprendizaje dirigida a futuros Graduados en Química e Ingeniería Química.

Desde el punto de vista de la interfaz implementada no existía nada similar anteriormente y se ha realizado pensando en la comodidad y el fácil manejo por parte de los alumnos por su parte, a nivel de información se ha pretendido dar una mayor portabilidad utilizando el formato estándar XML. Los datos obtenidos se encuentran en diferentes ficheros XML.

El programa se admite la posibilidad de combinarse o completarlo con tratamientos numéricos de interés para el análisis del comportamiento líquido-vapor además de tener previsto ampliar las posibilidades que ofrece de ampliación en cuanto a la incorporación de nuevos sistemas a los archivos de datos y su extensión con un diseño análogo a la creación de aplicaciones que contemplen otros equilibrios de fases.

## REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Alonso C., Aguilar F., Montero E. “Integración de las nuevas tecnologías en la formación de los ingenieros: Simulador de un motor *stirling* de aire para el aprendizaje de la ingeniería térmica”. III Jornadas Nacionales de Ingeniería Termodinámica, Valencia 2003.
- Carreras R. “Uso del software en la docencia de la termoquímica aplicada a la combustión”. II Jornadas de Ing.Termodinámica. Tarragona. Págs: 17-24; 2001.
- Chamorro C., Segovia J.J., *et al.* “Simulación informática de prácticas de Termodinámica”. III Jornadas Nacionales de Ingeniería Termodinámica, Valencia 2003.
- González O. “XML”. *Ed: Anaya Multimedia*; 2001

Hortsmann S., Cornell G. “Java 2. Fundamentos” y “Características avanzadas”. *Prentice Hall*; 2003.

McLaughlin Brett. “Java y XML”. *Ed: Anaya Multimedia*; 2003.

Rumbaugh J., Blaha M., Premerlani W., Eddy F., Lorensen W. “Modelado y diseño orientados a objetos. Metodología OMT”. *Ed: Prentice Hall*; 1998.

Sáez de la Torre García A. F. “Determinación y tratamiento termodinámico riguroso de equilibrios líquido-vapor en sistemas binarios isobáricos”.. *Química Física*. Univ. Comp. Madrid; 1981.

Smith J.M., Van Ness H.C., Abbott M.M. “Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics”. *Chemical Engineering Series. Ed: McGraw Hill*; 2001.