

## Aplicación del Simulador ChemCAD™ en la Enseñanza en Carreras de Ingeniería

Luis A. Toselli, Mónica P. Guerrero, Vanina M. Monesterolo y Romina A. Beltrán

Universidad Tecnológica Nacional, Fac. Reg. Villa María, GISIQ, Av. Universidad 450, X5900HLR, Villa María, Cba., Argentina (e-mail: [toselli\\_l@frvm.utn.edu.ar](mailto:toselli_l@frvm.utn.edu.ar))

---

### Resumen

Se plantea una revisión de las acciones desarrolladas en la aplicación de la simulación de procesos y en particular del uso de un simulador comercial de procesos, como apoyo para la enseñanza en carreras de ingeniería de distintas especialidades. Estas experiencias fueron realizadas en la Facultad Regional Villa María de la Universidad Tecnológica Nacional en Argentina. Se analiza la utilización dada al software ChemCAD™ y sus módulos CC-Therm™ y CC-Batch™ durante más de una década en cátedras del ciclo superior de las carreras de ingeniería que imparte la Facultad, en especial en ingeniería química. También se hace referencia a su empleo en la especialidad de ingeniería mecánica y en cursos de posgrado de tecnología de alimentos. Como ejemplo, se describe un trabajo académico que con alumnos del cuarto nivel de ingeniería química. Este ejemplo muestra como se puede integrar el uso de la simulación con experiencias de planta piloto en forma eficiente. Como conclusiones se destaca la relevancia que tiene esta integración de conocimientos para el proceso enseñanza aprendizaje y la formación de mejores ingenieros.

*Palabras clave: simulación de procesos, enseñanza en ingeniería, simuladores comerciales, ChemCAD*

## Application of the ChemCAD™ Simulator to the Teaching in Engineering Careers

### Abstract

Several activities related to the application of process simulation and in particular to the use of a commercial process simulator, as an effective teaching tool in different engineering careers, are presented and discussed. These experiences were done at the Villa María Faculty of Engineering of the National Technological University in Argentina. The use of the commercial software ChemCAD and its modules CC-Therm™ and CC-Batch™ for more than a decade in courses given to engineering students, especially in chemical engineering, is analyzed. Reference is also done to the experiences with students of mechanical engineering and with a graduate course in food technology. As an example, an academic work with junior and senior students of chemical engineering is described. The example shows how simulation and pilot plant experiments can be integrated in an efficient form. The main conclusion is the importance that this knowledge integration has for the teaching-learning process and for the formation of better engineers.

*Keywords: process simulation, engineering teaching, commercial simulators, ChemCAD*

### INTRODUCCION

Los simuladores comerciales han evolucionado considerablemente en las últimas décadas, convirtiéndose hoy en herramientas de aplicación cuyo uso resulta esencial tanto en el ámbito industrial como en el área educativa (Maciel et al., 1998). Un simulador como CHEMCAD™ posibilita a sus usuarios evaluar las condiciones de funcionamiento de un determinado proceso o equipo, realizar su dimensionamiento, proponer alternativas de operación mediante modificación de sus variables, al tiempo que le permite disponer de un amplio banco de datos de componentes además de la posibilidad de incorporar nuevos, entre otras muchas opciones (Chemstations, 2005)

En general, puede decirse que un estudiante que ha alcanzado un cierto nivel de formación en su carrera o un profesional de ingeniería podrá respaldar considerablemente sus capacidades desarrollando habilidades para el análisis, síntesis y evaluación de procesos si cuenta con el apoyo de esta poderosa herramienta y se afianza en su manejo. Sin embargo, el usuario de un simulador de tales características debe tener un conocimiento acabado del proceso que es objeto de estudio, ser capaz de evaluar y seleccionar el modelo termodinámico que mejor se ajuste al sistema, comprender las ventajas y limitaciones del modelo de simulación con el que representa al proceso, además de entender acerca de los métodos que utiliza el software para su resolución (Scenna, 2001). El desafío académico que se plantea consiste entonces en encontrar la manera adecuada de aplicar éste en la construcción del conocimiento, definiendo el modo de aproximación y uso que deberá hacer el alumno en los diferentes estadios de su carrera.

## METODOLOGÍA

En la Facultad Regional Villa María de la UTN se dispone del software en cuestión desde el año 1994, utilizándose desde entonces para la enseñanza en un número creciente de cátedras que componen la estructura curricular de la especialidad de Ingeniería Química, en la cual se ha desarrollado una importante experiencia. Se ha estructurado su empleo de un modo gradual que comienza al promediar la carrera, esto es a partir del tercer año de cursado, cuando un alumno regular ya ha alcanzado una adecuada base de conocimientos teórico-prácticos. La aproximación al simulador se propone de una manera articulada en distintas cátedras de éste nivel, cuya enseñanza se ve enriquecida al aplicar su potencial al tratamiento de contenidos temáticos específicos (Tabla 1).

Tabla 1: Detalle de cátedras y aplicaciones en el tercer nivel de la especialidad de Ing. Química.

Nivel	Cátedras	Aplicación
III	Informática Aplicada	Introducción al manejo de ambos bancos de datos disponibles en el software. Definición de nuevos componentes (modelos de regresión, obtención de parámetros para estimación de propiedades).
	Introducción a la Simulación	Elaboración de diagramas de flujo. Incluye reconocimiento de tipo y características de equipos (unidades de operación), análisis topológico de proceso, partición y rasgado, selección de corrientes de corte.
	Matemática Superior Aplicada	El conocimiento matemático preexistente se fortalece con una mejor visualización de las técnicas de resolución de sistemas de ecuaciones. Se complementa con aplicaciones de métodos aceleradores de convergencia (Wegstein, DEM) y estimación de parámetros para modelos de regresión.
	Fisicoquímica	Tratamiento de casos de estudio de equilibrio líquido-vapor. Aplicación de ecuaciones de estado.
	Termodinámica	Estimación de propiedades de compuestos. Otros cálculos y aplicaciones utilizando métodos de contribución de grupos.
	Integración III	Resolución de balances de materia y energía de equipos y/o procesos sencillos en estado estacionario y no estacionario.
	Fenómenos de Transporte	Resolución de problemas de flujo, bombas, pérdidas de carga en tuberías y accesorios

Se resuelven con apoyo computacional, cálculos y problemas que el alumno está capacitado para desarrollar en forma manual o mediante programas de uso general, pero que ahora puede abordar

bajo otra perspectiva, analizando sus ventajas. El uso más intensivo se da en Integración III, en donde finalmente adquiere un manejo suficiente para la resolución integral de balances. En particular, en Fenómenos de Transporte, se plantean las primeras experiencias comparativas frente a resultados experimentales obtenidos en planta piloto.

En cátedras del cuarto nivel se profundiza el grado de aplicación, tal como puede observarse en la Tabla 2. Específicamente en la cátedra Integración IV se desarrollan además contenidos teóricos de simulación, síntesis y optimización de procesos y la ejercitación está dirigida principalmente a la resolución integral de problemas reales de ingeniería. En éste año se avanza en el tratamiento de aplicaciones comparativas de simulación frente a experiencias desarrolladas en planta piloto y se progresa en su empleo orientado al diseño de equipos de separación y termotransferencia. Finalmente, en el quinto nivel de la especialidad (y tercero consecutivo de aplicación) su uso está focalizado en una única cátedra, tal como puede apreciarse en la Tabla 3. También se aplica en forma regular, aunque en menor medida, en la especialidad de Ingeniería Mecánica en dos cátedras del cuarto nivel. (Tabla 4). En el posgrado, aún cuando la experiencia existente resulta más acotada, se lo utiliza en una carrera de maestría, de acuerdo a lo descrito en tabla 5.

Tabla 2: Detalle de cátedras y aplicaciones en el cuarto nivel de la especialidad de Ing. Química.

<i>Nivel</i>	<i>Cátedras</i>	<i>Aplicación</i>
IV	Integración IV	Desarrollo de modelos basados en procesos industriales reales, adaptados para su aplicación académica, permitiendo cotejar los resultados teóricos obtenidos frente a valores experimentales disponibles. Incluye el empleo del módulo CC-BATCH™.
	Tecnología de la Energía Térmica	Diseño y verificación de intercambiadores de calor de tipo doble tubo y de tubo y coraza con CC-THERM™.
	Operaciones Unitarias I	Tratamiento de procesos de separación continuos y discontinuos.
	Operaciones Unitarias II	Tratamiento de procesos de separación continuos y discontinuos de sistemas gas-líquido. Abarca actividades de diseño y análisis de comportamiento hidráulico de equipos. Incluye el empleo del módulo CC-BATCH™.
	Ingeniería de las Reacciones	Modelado y simulación de reacciones de equilibrio.

Tabla 3: Detalle de cátedras y aplicaciones en el quinto nivel en la especialidad de Ing. Química.

<i>Nivel</i>	<i>Cátedra</i>	<i>Aplicación</i>
V	Integración V	Empleo personalizado del estudiante para tratar el proceso del tema elegido para su proyecto final.

Tabla 4: Detalle de cátedras y aplicaciones realizadas en la especialidad de Ingeniería Mecánica.

<i>Nivel</i>	<i>Cátedras</i>	<i>Aplicación</i>
IV	Mecánica de los Fluidos	Resolución de problemas de flujo, bombas, pérdidas de carga en tuberías y accesorios.
	Tecnología del Calor	Diseño y verificación de intercambiadores de calor de tipo doble tubo y de tubo y coraza con CC-THERM™, análisis integral de su comportamiento (incluye estudio de vibraciones).

Tabla 5: Empleo en el área de posgrado en Maestría en Tecnología de los Alimentos.

Curso	Aplicación
Modelado y Simulación de Procesos en la Industria Alimentaria	Tratamiento mediante simulación de procesos varios que resultan de interés para la industria alimentaria, (destilerías, plantas de extracción de aceites vegetales, entre otros).
Otros usos	Empleo avanzado en estudios realizados para el desarrollo de tesis específicas.

A efectos de describir con mayor detalle alguna de estas experiencias, se presenta una síntesis de un trabajo propuesto como actividad académica en el cuarto nivel, en relación con la temática de destilación.

#### *Descripción de un ejemplo de aplicación*

Se plantea la resolución de un caso de estudio titulado “separación de sistemas multicomponentes mediante destilación batch”. Este tiene como objetivo que el estudiante, bajo la supervisión de la cátedra y aplicando el software existente, realice un estudio integral del problema considerado. Se propone como hipótesis de trabajo la existencia de una solución acuosa residual (subproducto de una destilería) cuyo aprovechamiento tiene un probable potencial económico y por esta cuestión debe evaluarse la factibilidad de recuperar de ella uno o más productos con valor comercial. Se parte de una solución acuosa multicomponente rica en etanol en la que se encuentran presentes además otros dos alcoholes superiores, ambos en menor proporción y se plantea, en principio, la intención de recuperar una fracción de etanol concentrado y, de ser factible, la de un segundo componente.

La actividad se desarrolla en clases sucesivas, en las que el alumno comienza por realizar una revisión de la bibliografía sugerida (Jacques et al., 1999; Toselli, 2002; Diwekar, 1996) y demás documentación técnica disponible (Barton, 1994; Edwards, 2005) a efectos de definir un adecuado marco teórico que le permita focalizar debidamente el problema a tratar. Esto lo conduce a analizar cuestiones tales como: probabilidad de formación de azeótropos de los compuestos presentes, conveniencia de seleccionar de modelos de fase líquida para el manejo del equilibrio líquido-vapor y de NRTL, en particular, para un adecuado tratamiento de los componentes en solución (Faúndez et al., 2006; Faúndez y Valderrama, 2004).

Como pretende utilizar la simulación para la evaluación teórica de la operación de separación que deberá realizar en el equipo existente en planta piloto (cuyo esquema se muestra en la Fig. 1) reconocer y evaluar sus características resulta una exigencia previa, para luego poder implementar el modelo en CC\_BATCH. De esta manera realiza un relevamiento de datos tales como: volúmenes de carga máximo y mínimo operativos, HEPT y número de etapas teóricas de la columna, factibilidad de conducir la destilación a presión atmosférica o bajo vacío, límites prácticos para el suministro energético, del sistema de refrigeración y de manejo del reflujo, entre otros.

Luego de implementar y validar el modelo evalúa en él diferentes opciones y alternativas de separación, analizando el comportamiento de variables, tales como: calor a suministrar, relación de reflujo, tiempos de operación y también la conveniencia o no de realizar destilaciones sucesivas. Esto le permite encontrar las condiciones de operación que deberían conducirlo, en teoría, a la obtención un producto que cumple con el objetivo técnico-económico propuesto. Las mismas se implementan luego en el equipo real y se efectúa la destilación de manera experimental, comparándose finalmente los resultados obtenidos frente a los teóricos esperados. Concluida la actividad se procede a la evaluación y discusión de cierre del caso de estudio, que se completa con la presentación de un informe técnico ajustado a normas establecidas por la cátedra.

#### **DISCUSIÓN DE LAS EXPERIENCIAS**

Se ha podido establecer que la utilización del simulador contribuye de manera significativa a un mejor desarrollo de las cátedras, enriqueciendo la calidad de la formación académica que se brinda. Su aplicación concreta a partir del tercer nivel resulta adecuada, aún cuando se debe luchar inicialmente con un preconceito existente en la mayoría de los estudiantes y por el cual, erróneamente, suponen que el simulador puede constituir “una solución en si mismo” y solo por contar con él podrán resolver situaciones que superan su propia capacidad.

Luego de utilizarlo entiende rápidamente que, en realidad, es él y no el software quien fija el límite de complejidad de los problemas que puede abordar. Por tal razón, los mejores resultados se alcanzan en los dos años finales. A esto contribuye, de manera natural, el mayor grado de formación alcanzado y su propia maduración como usuario. Es posible afirmar que a esta altura, se produce un verdadero “descubrimiento” de su potencial y su visualización como herramienta de indudable valor que, asociada a sus conocimientos, tiene un efecto sinérgico sobre su rendimiento como futuro profesional de ingeniería.

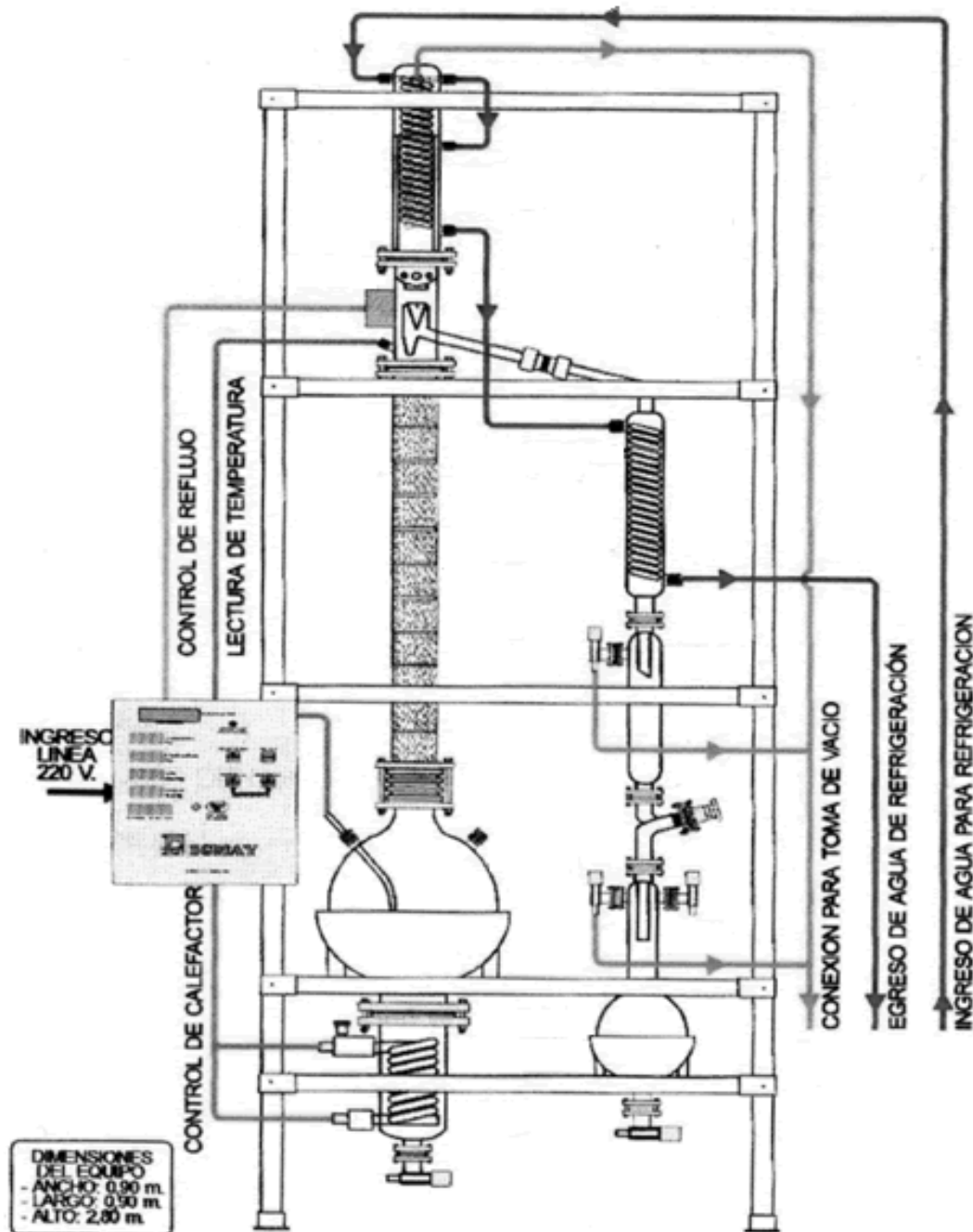


Fig. 1: Esquema del destilador batch utilizado en ensayos experimentales

## CONCLUSIONES

A partir de las antes expuesto se puede concluir que:

- i) Su empleo ha resultado muy eficiente para la enseñanza de conceptos y fundamentos de ingeniería. Un uso gradual e integrado en cátedras del ciclo superior favorece una armónica integración de conocimientos.
- ii) Una amplia mayoría de los estudiantes se muestra motivada para capacitarse en el manejo y aplicación del software. El alumno tiene expectativas al respecto y muestra su predisposición, tanto en las carreras de grado como en posgrado.
- iii) El primer año de aplicación resulta de adaptación para el estudiante y una fluida interacción docente-alumno resulta fundamental para afianzar su aprendizaje.
- iv) La formación adquirida en simulación es un valor adicional al momento de buscar la inserción laboral y constituye un rasgo distintivo que es valorado, especialmente, por las empresas más desarrolladas que son demandantes de éste tipo de capacitación.
- v) Aún cuando su uso se ha consolidado en un importante número de cátedras, una aplicación más amplia todavía es posible, en particular, en el quinto nivel de ingeniería química en otras materias cuyas temáticas están cubiertas por las potencialidades del software.

## REFERENCIAS

Barton, P.I.; *Batch Process Simulation Why and How*. Department of Chemical Engineering, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge (1994).

Chemstations, Inc., *CHEMCAD and CC - BATCH - User Guide and Tutorial*, Houston, Texas, USA (2005), <http://www.chemstations.net>.

Diwekar, U.; *Batch Distillation. Simulation, Optimal and Design Control*. Series Chemical and Mechanical Engineering, Taylor & Francis Publishers (1996).

Edwards, J.E.; *Process Modelling Selection of Thermodynamic Methods*. P & I Design Ltd., United Kingdom (2005). [www.chemstations.net/documents/thermo.pdf](http://www.chemstations.net/documents/thermo.pdf)

Faúndez, C., V. Alvarez y J.O. Valderrama; *Predictive Models to Describe VLE in Ternary Mixtures Water+ Ethanol+ Congener for Wine Distillation*, *Thermochimica Acta*: 450, 110-117 (2006).

Faúndez, C. y J.O. Valderrama; *Ecuaciones de Estado vs. Modelos de Coeficientes de Actividad para Describir el Equilibrio Líquido-Vapor en Mezclas Ternarias de Interés en Destilación Alcohólica*. *Alimentaria*: 42, 141-146 (2004).

Jacques, K., T.P Lions y D.R. Kelsall; *The Alcohol Textbook*. 3<sup>er</sup> edition, Ed. Murtagh & Associates, Nottingham University Press, United Kingdom (1999).

Maciel, M.R.W., R. Maciel-Filho y C.J.G. Vasconcelos; *The Use of Commercial Simulators in the Engineering Teaching: A Naturally Simulating Approach*. International Conference on Engineering Education, R. de Janeiro, Brazil (1998).

Scenna, N.J.; *Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos*, Editorial UTN, 1<sup>o</sup> edición (2001).

Toselli, L.A.; *Obtención de Etanol por Proceso Fermentativo. Tratamiento de Corrientes "Downstream"*. Tesis de Maestría en Tecnología de los Alimentos, FRVM de la UTN (2002).