

Beneficios de la utilización del simulador comercial PROMAX® en combinación con cálculo manual en el análisis de un proceso industrial en el Grado de Ingeniería Química

María-Fernanda López-Pérez, Salvador C. Cardona, Vicent Fombuena, Jaime Lora, Carlos Carbonell

Departamento de Ingeniería Química y Nuclear. Universitat Politècnica de València (UPV). Plaça Ferràndiz i Carbonell, s/n 03801 Alcoy, Alicante (Spain). malope1@iqn.upv.es, scardona@iqn.upv.es, vifombor@upvnet.upv.es, jlora@iqn.upv.es, carcaral@upvnet.upv.es.

Cdiutcev'

Eqo o gtekrn'rtqeguul'uko wrxvtu" wug"lp" Ej go kecn' Gpi kpggtkpi "F gi tgg"ku"cp" ghgevkg" vqni"vq" ko rrtqg"iawf gpv'rgctpkpi 0Ewtg pwpf. 'vj gug'vqnu'ctg" guacdtkij gf "kp"ewttkewc"cpf "vj gl "cmqy "vj cv" iawf gpu"ecp"iawg"e'uko kxt "lqhy ctg"v'ij gl "y kniawg"lp"vj gkt "rt qhgukqpcn'itkg00 qt gqxtg. 'vj g"iawf gpu" ecp"cpn'f/g. "uko wrxv"cpf "qr vko k'g"eqo rrgz"lpf wmt kecn'rt qdrgo u0J qy gxtg. 'vj ku"v'rg"qhl'iqhy ctg" ku"pqvf gxgrqf gf "lqt "gcej kpi "cevkxkgl"cpf "k'vij qw'f "pqv'dgego g'cp"kpwt wo gpv'y j ke j "vj g'f cv"ctg" gpvgt gf "lqt "vj g"iawf gpu. "cpf "vj g't guwmu"ctg" qdugt xgf "itng"e "drcenidqz. "f w'v'g"uqo vko gu"vj gl "ctg" pqv'cdrg"vq"wpf gtwcpf "j qy "vj g't guwmu"ctg" qdvc kpgf "qt "h'ij g"ij qy gf "t guwmu"ctg" eqtt gev"cpf" eqpukwgp0

*Kp"vj ku'y qtm"e'uko rrg'lpf wmt kecn'rt qeguul' guqmwkqp"o gyj qf qnqi { "ku"rt gupvvgf 0kp"vj ku'o gyj qf qnqi { "vj g'rt qdrgo "ku"lqnxgf "lqt "vj g'ij g"iawf gpu"iawkpi "y q'f h'itgt gpv'y c'f u"eqo d'k'kpi "o cpwcn'ecrewrwvkqp." *vj g't cf k'kqpcn'qpg+"vj j ke j "ku"iawf "lp"rt g'xkqwu"iawllgeu. "y k'ij "vj g"iawf "qhl"ij g"RTQO CZI "uko wrxvt0' Vj g"qdugt xgf "cf xcpwi gu"qhl"ij ku"o gyj qf qnqi { "ctg"o w'k'rg. "vj g"eqpuqk'f cvkqp"qhl'eqpegru"lt go " rrtg'xkqwu"iawllgeu. "vj g"iawf gpv'o q'v'x'cvkpu"y j gp"vj gl "y qtm'y k'ij "vj ku"eqo o gtekrn'iqhy ctg. "iawf "kp" eqo rcpkgu. "cpf "uc'v'k'evkqp"y j gp"vj gl "ecp"iawxg"vj g'rt qdrgo "cpf "vj gl "qdv'k'pg"vj g"uco g't guwmu"vq" qdugt xgf "kp"vj g"uko wrxvt0'Vj g"cevkxk'f "qhl"e "rt qeguul'lt "qdv'k'k'kpi "kuqgevcpg"ku"rt gupvvgf "kp"vj ku" y qtn0'Vj g"v'cuu"r g'lt qto gf "kp"vj g"cevkxk'f "qhl"e "rt qeguul'lt "qdv'k'k'kpi "kuqgevcpg"ctg"ij qy gf "kp"vj ku" y qtn0'F guki p'ecrewrwvkqp"cpf "cpn'f uku"qhl'ij g'eqpvkpwqu"iawllt gf "vc'pn'it gcevt "y j gtg"vj g'ej go kecn' t gcevkqp"qeewt"ctg"rt gupvvgf "kp"q'f gt "v'q'f go q'p'wt cv'g"vj g"dgpg'k'ku"qhl'ij ku"eqo d'k'p'cvkqp"qhl'gcej kpi " o gyj qf qnqi k'gu0*

M'g'f y q'f u'c' Ngctpkpi "ko rrtqggo gpv."Eqo o gtekrn' uko wrxvt. "RTQO CZI ."o cpwcn'ecrewrwvkpu. " Ej go kecn'Gpi kpggtkpi "F gi tgg"

"

Tguwo gp''

Gn'iawq'f g'uko wrxvt q'gu'eqo gtekrn'gu'gp"gn'I tcf q'f g'k'pi g'p'kgt "S w'p' kec. "gu"wp'c"j gtt co k'gpw"o w'f" g'k'ec/ "rctc"o glqtct "gn'ic'rt g'p'f k'clg'f g'iq'u'emo p'qu0'G'au'u"j gtt co k'gpw'c"guacd'rg'ek'f cu"gp"r'qu'r'nc'p'gu" f g"guw'f k'qu"cew'c'ng'u"r gto k'gp"swg"r'qu"guw'f k'cpv'gu"wk'k'egp"rtqi tco cu"uko k'ct gu"c"r'qu"s w'g"j c'f" ko r'nc'p'v'f qu'gp"r'cu'go r't gucu'f q'p'f g'f gu'ctt q'nc't"p"iaw'x'k'f c"rt q'hgukqpcn'0Rqt "q'nt c'rt cvg. "vco d'k'p'p'rgu" r gto k'g"cp'ck'ct. "uko wrxvt" { "qr vko k'ct "rt qdrgo cu"lpf wmt kecn'rt qeguul'eqo r'ng'lu'0Rgt q'rc" w'k'k'j c'ek'p"f g" g'ug"v'k'q'f g'iqhy ctg"u"r"o c'f q'f "p'q'r'gpuc'f qu"rctc"cevkxk'f cf gu'f qe'gpv'gu"p'q'f gd'g'eqpxgt v'k'ug"gp" wp"kpwt wo gpv"gp" gn' s w'g"r'qu" c'no p'qu"kpwt q'f w'ecp"wpqu" f cvqu" { "qdugt xgf"r'qu"t guw'nc'f qu."

Dgp gk ekqu f g'rc 'wkkk c ek p' f gr luko wrc f qt 'eqo gtekn' RTQO CZÌ 'gp' eqo dkpc ek p' eqp' e' a rewrq' o cpwcn' gp' gn' cp' rku' f g' wp' r' t qeguq' kpf wmt kn' gp' gr' l t cf q' f' g' kpi gpkgt 'S w' p' k ec

wkkk' a pf qru' eqo q' eclc' pgi t c. "gp' rc' s' wg' pq' gp' kppf gp' eqo q' ug' qd' kpp' rqu' f' c' vqu' { "gp' o' wej' cu' qecukpp' gu' p' q' ugr' cp' f' k' kpi w' k' 'uk' r' qu' t' g' w' m' c' f' qu' u' q' p' 'eqj' gt' gp' v' gu' q' p' q' 0'

Gp' g' w' g' 't' c' d' c' l' q' 'ug' 'rt' g' u' g' p' v' c' 'w' p' c' 'o' g' v' q' f' q' r' q' i' 'f' 'g' p' 'r' c' 's' w' g' 'u' g' 'r' t' g' u' g' p' v' c' 'w' p' 'r' t' q' e' g' u' q' 'k' p' f' w' m' t' k' c' n' i' t' g' r' v' k' c' o' g' p' v' g' 'u' g' p' e' k' n' q' . { "gp' gr' l' s' w' g' 'r' qu' g' u' w' f' k' c' p' v' g' u' 'r' q' t' g' u' w' g' r' g' f' g' f' q' u' 'l' q' t' o' c' u' f' k' g' t' g' p' v' g' u' = eqo dkpc' gr' l' e' a' rewrq' o' cpwcn' gu' f' gek' t' . "gn' l' t' c' f' k' e' k' p' c' n' 'w' k' k' c' f' q' 'gp' 'c' u' k' i' p' c' w' t' c' u' 'c' p' v' g' t' k' q' t' g' u' . "eqp' 'r' c' 't' g' u' q' r' w' e' k' p' " f' g' n' r' t' q' d' r' g' o' c' b' g' f' k' c' p' v' g' n' l' u' k' o' w' r' c' f' q' t' 'RTQO CZÌ 0N' c' u' x' g' p' v' c' l' c' u' f' g' g' u' a' c' 'o' g' v' q' f' q' r' q' i' 'f' 'u' q' p' 'o' A' n' k' r' i' g' u' " g' p' v' t' g' r' c' u' s' w' g' f' g' u' a' c' e' c' p' . "eqp' u' q' r' f' c' e' k' p' f' g' g' e' q' p' e' g' r' v' q' u' f' g' c' u' k' i' p' c' w' t' c' u' 'c' p' v' g' t' k' q' t' g' u' . "o' q' v' k' c' e' k' p' 'r' q' t' " r' c' t' v' g' f' g' 'r' qu' c' n' w' o' p' q' u' c' n' i' w' k' k' c' t' " u' q' h' y' c' t' g' 'r' t' q' l' g' u' k' p' c' n' i' { "u' c' v' k' u' c' e' e' k' p' " c' n' i' t' g' u' q' r' w' g' t' " g' n' r' t' q' d' r' g' o' c' " q' d' v' g' p' k' p' f' q' 'w' p' t' g' u' w' m' c' f' q' 'u' k' o' k' r' c' t' c' n' i' f' g' n' l' u' k' o' w' r' c' f' q' t' 0G' p' g' u' w' g' c' t' v' f' e' w' r' q' 'u' g' 'r' t' g' u' g' p' v' c' 'r' c' e' v' k' k' f' c' f' f' g' 'w' p' " r' t' q' e' g' u' q' f' g' q' d' v' g' p' e' k' p' f' g' k' u' q' q' e' v' c' p' q' . f' q' p' f' g' 'u' g' 'k' p' f' k' e' c' p' 'r' c' u' v' c' t' g' c' u' t' g' c' r' k' c' f' c' u' 'g' p' g' n' l' e' a' rewrq' . f' k' u' g' o' q' " { " c' p' 'r' k' u' l' f' g' n' l' t' g' c' e' v' q' t' " e' q' p' v' k' p' w' q' f' g' 'v' c' p' s' w' g' 'c' i' k' c' f' q' f' q' p' f' g' 'u' g' 'r' t' q' f' w' e' g' 'r' c' 't' g' c' e' e' k' p' s' w' p' k' e' c' 0'

Rc' r' c' d' t' u' e' r' c' x' g' < 'O' g' l' q' t' c' f' g' n' l' c' r' t' g' p' f' k' c' l' g' . "U' k' o' w' r' c' f' q' t' 'eqo gtekn' RTQO CZ. "e' a' rewrq' u' o' cpwcn' u' I t' c' f' q' f' g' k' p' i' g' p' k' g' t' 'S' w' p' k' e' c' "

"

1. Introducció

Actualmente, la simulación de procesos en el Grado de Ingeniería Química es una de las disciplinas básicas que deben desarrollarse en la titulación, con el objetivo de que los estudiantes consigan competencias en esta materia y puedan acceder al mundo laboral con conocimientos indispensables para desarrollar su profesión. Por ello, los simuladores se han introducido como parte de la transferencia de conocimiento en los planes de estudios de sus grados (Dahm, 2002; Lewin, 2001).

Las herramientas de modelado y simulación, son cada vez más utilizadas por los profesionales de la ingeniería. En el caso que nos ocupa, la ingeniería química, se necesitan instrumentos que ayuden a analizar y tomar decisiones para el diseño, operación y optimización de los procesos, además de proponer nuevas alternativas para resolver retos actuales. El uso extendido de estos softwares de simulación en las empresas, ha hecho obligatorio que el alumno cuando acabe sus estudios de grado, conozca estas herramientas, además de cuando utilizarlas y cómo hacerlo.

En bibliografía existen diversos ejemplos del uso de simuladores comerciales tales como HYSYS, PRO II, ASPEN PLUS, CHEMCAD y PROMAX para la resolución de problemas de ingeniería química (Hoorfar, 2018; Puig-Gamero, 2021; Komulainen, 2012; de Lucas-Consuegra, 2018) en los que las conclusiones que se obtienen de implementar estas actividades en las asignaturas son:

- Mejora de las notas obtenidas por los alumnos debido al aumento de su motivación por utilizar programas comerciales que podrán utilizar en su vida profesional.
- Los trabajos, normalmente de forma cooperativa, mejoran la competencia de trabajo en grupo, tan demandada profesionalmente.
- Practican la búsqueda de información y la realización de informes técnicos.
- Analizar, modelar y simular sistemas complejos no definidos

Por todo lo anterior, y debido a la importancia de la simulación y de las competencias que se adquieren para la empleabilidad de nuestros estudiantes, como llevar a cabo tareas de diseño y trabajo de proyectos (Grant, 2006) en el Grado de Ingeniería de la Universitat Politècnica de València, Campus d'Alcoi, existen varias asignaturas en las que se desarrollan actividades de simulación de procesos utilizando el Software PROMAX®.

Sin embargo, aunque los simuladores tengan un uso cada vez más amigable para el usuario y faciliten la resolución de problemas (permiten analizar diferentes fenómenos de forma rápida), los programas de simulación comerciales, no son softwares o sistemas preparados, ni pensados, para el desarrollo psicopedagógico de los estudiantes, por lo que resulta imprescindible planificar la actividad o trabajo a realizar para que propicie el aprendizaje. En muchos artículos donde se utilizan simuladores comerciales, los problemas a resolver son demasiado complejos y el alumno puede llegar a no entender que está calculando el programa, y cómo lo hace, por lo que le es muy complicado analizar el resultado que obtiene y poder discutir, por ejemplo, sobre que mejoras puede realizarse en el proceso para optimizarlo (Zumalacárregui, 2018).

Nuestra experiencia previa en la resolución de problemas de ingeniería química con Matlab (Carbonell, 2021) corrobora que el alumno asimila mejor los contenidos cuando utiliza una herramienta que le facilita los cálculos, pero siempre y cuando, esta no se convierta en una caja negra, de las que el alumno no tiene conocimiento, ya que pierde su función docente, o que solo sepa utilizar su interfaz, sin entender el por qué y para qué la utiliza. Por ello, cuando se plantea un problema real con un simulador, el alumno debe saber en todo momento que modelos matemáticos, correlaciones, paquetes termodinámicos está utilizando el simulador y por qué. En este trabajo se va a presentar una actividad realizada con el simulador PROMAX®, pero cuidando que el alumno pueda comparar sus resultados con los que obtendría con un cálculo manual, y pueda juzgar las diferencias que se producen y el motivo de las mismas.

2. Objetivos

Dicho artículo pretende presentar como se ha llevado a cabo una actividad relacionada con la ingeniería química resuelta mediante cálculo tradicional y el simulador PROMAX®.

El problema planteado es el diseño de un proceso de producción de isooctano. La actividad se desarrolla en 4º curso del Grado de Ingeniería Química en la asignatura Procesos Industriales de la Ingeniería Química (asignatura troncal del semestre A) y tiene como doble finalidad, aprender a utilizar un simulador comercial, a la vez que afianzar los conocimientos que los estudiantes poseen, adquiridos en asignaturas anteriores.

Con dicha actividad se pretenden dos objetivos fundamentales para el alumno:

1. Acercamiento a situaciones reales para que el alumno participe en el proceso de aprendizaje y no sea un mero espectador, aumentando su interés por la asignatura.
2. Mejorar la docencia impartida por el docente, incluyendo herramientas y estrategias de aprendizaje utilizando simuladores comerciales.

Otro objetivo es valorar la eficacia del sistema de comparación por dos métodos de resolución, en el aprendizaje de contenidos de los mismos.

3. Desarrollo de la innovación

Como se ha comentado en el apartado de objetivos, en este trabajo se va a realizar la descripción de la metodología docente utilizada para el diseño de una parte del proceso de producción del isooctano utilizando un simulador comercial como es PROMAX® junto con la comparación de los resultados obtenidos con los cálculos que el alumno realiza de forma tradicional.

El trabajo es una actividad con un gran peso en la nota final del curso (30% del total), se realiza por grupos de 3-4 personas que deben entregar un informe explicando detalladamente los cálculos realizados y los pasos seguidos para obtener los resultados que se piden. Un 50% de la actividad se realiza durante las horas de clase presencial.

3.1. Elección Simulador PROMAX®

PROMAX® es un paquete de simulación de procesos basado en los flujos. Es utilizado para diseñar y optimizar el procesado de gas, proceso de refinó, y las instalaciones químicas (especializado en petroquímica). Es el programa elegido en el Grado de Ingeniería Química en las asignaturas de Análisis y Simulación de procesos, Experimentación en Ingeniería Química III (ambas en 3er curso, semestre B) y Procesos Industriales de Ingeniería Química (4º curso, semestre A).

Durante las asignaturas citadas, los docentes han introducido al alumno en las unidades de operación más importantes de la ingeniería química, es decir, desde las instalaciones hidráulicas, intercambiadores de calor, compresores, separadores, reactores hasta columnas de separación. En cada uno de los procesos se realizan ejercicios para que el alumno pueda entender cómo trabaja el simulador. Todos los contenidos están incluidos en un manual que se le ofrece al alumno al comienzo de su entrenamiento con este simulador.

El procedimiento metodológico para llevar a cabo las simulaciones con este software no difiere del que se aplica para la simulación en general:

1. Interpretación del problema, identificación de equipos, corrientes y propiedades.
2. Crear un caso de estudio
3. Selección de sustancias involucradas en el proceso
4. Seleccionar paquete termodinámico
5. Construir un diagrama de flujo
6. Simulación del proceso
7. Análisis e interpretación de los resultados

3.2. Problema o caso a estudiar

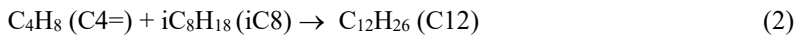
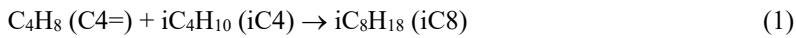
El caso presentado en este trabajo se desarrolla en la asignatura Procesos Industriales de Ingeniería Química cuyas competencias relacionadas con el uso del simulador son:

- Capacidad para el análisis, diseño, simulación y optimización de procesos y productos.
- Diseñar procesos en las diferentes actividades industriales en el ámbito de la ingeniería química.
- Diseñar equipos, instalaciones y servicios en la industria química.

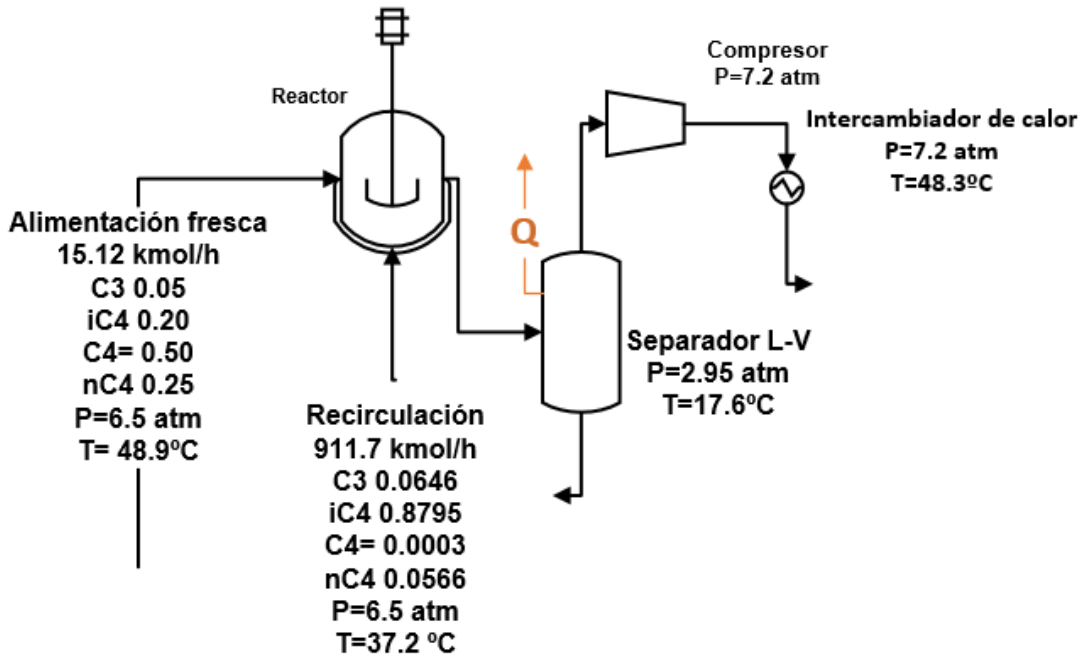
La actividad que deben desarrollar los alumnos está relacionado con la producción industrial del isooctano. La parte a desarrollar incluye el reactor y el separador líquido-vapor. Al alumno se le presenta el esquema del proceso (fig 1) incluyendo las corrientes de alimentación con las propiedades de temperatura y presión necesarias para los cálculos. Debido a que es la última asignatura donde se estudian este simulador y ya tienen los conocimientos suficientes, ya pueden trabajar sobre procesos con varias unidades de operación.

El enunciado de la actividad es el siguiente:

“Uno de los procesos de obtención de isooctano (iC8) es la reacción entre el 1-buteno (C4=) y el isobutano (iC4), mediante reacciones de alquilación en presencia de un catalizador (H2SO4). Aunque el mecanismo de reacción de la alquilación es muy complejo, este se puede simplificar en las siguientes reacciones:



Como se puede ver, hay una reacción no deseada, (2), formándose un componente de alto peso molecular como es el dodecano (C12).



Hki 03'Guswgo c'iko rnhkecf q'cns vkr ekp'qnglkpcuOE5'rtr cpq.'kE6'kuqdwcpq.'E6? '3/dwgpq.'pE6'p/dwcpq.'kE: 'kuqgewcpq.'
 E34'fj gefcpq"

En el reactor considerado un reactor continuo de tanque agitado, los hidrocarburos están en forma de gotas y son dispersados en una fase de H₂SO₄. El isobutano y el 1-butenos son transferidos en una interfase a través de dos líquidos inmiscibles. La velocidad de este paso depende del agitador y su velocidad, determinando el tamaño de la gota y su patrón de flujo interno además del área interfacial. Las reacciones químicas se dan en torno a la interfase, sin embargo, y para facilitar los cálculos, en este trabajo se va a suponer que la reacción se lleva a cabo en un reactor adiabático en fase líquida, sin cambio de presión, y que el catalizador no interviene.

Las reacciones son elementales y las constantes cinéticas tienen una dependencia de la temperatura del tipo Arrhenius (Tabla 1).

Vcdx'30E qpuwcpvu'ekp² vkecu'

Parámetro	Reacción (1)	Reacción (2)
Factor pre-exponencial (m³/kmol·s)	1.62·10 ⁹	4.16·10 ¹²
Energía de Activación (kJ/kmol)	6.5·10 ⁴	8.1·10 ⁴

Las unidades de concentración a utilizar en las expresiones cinéticas son kmol/m^3

Además, hay otros compuestos que acompañan a la mezcla isobutano y 1-buteno, como son el propano y el n-butano, que actúan como inertes en este proceso.

Para aumentar la selectividad del producto deseado, las concentraciones de isooctano y de 1-buteno deben mantenerse bajas y la temperatura también debe permanecer lo más baja posible. Una forma de conseguir que aumente la selectividad (isooctano producido dividido por la suma de la producción de isooctano y docecano) es utilizar un gran exceso de isobutano, por lo que, se debe recuperar y recircular a la salida del reactor. La selectividad del isooctano respecto al 1-buteno suele ser 0.95. En el siguiente diagrama puede verse un esquema muy simplificado de este proceso (Fig 1)''.

El esquema y parte de los datos utilizados en el enunciado se han obtenido de publicaciones de un autor muy destacado en Ingeniería Química como es William L. Luyben (Luyben, 2011). A los alumnos se les ofrece también tablas que deben rellenar con datos de partida, la selectividad y conversión en el caso de los cálculos manuales y el volumen del reactor en el caso de PROMAX. De esta forma, los estudiantes también practican las resoluciones desde dos puntos de vista diferentes.

Los alumnos deben estudiar varias partes del proceso, deben realizar cálculos para comprobar cómo se modifica el volumen y la temperatura del reactor, modificando la conversión y la selectividad del buteno o al contrario. En segundo lugar, los alumnos deben estudiar cual son las composiciones de salida del separador líquido-vapor. También estudian las potencias necesarias en el compresor y el intercambiador de calor.

3.3. Conocimientos adquiridos en asignaturas anteriores."

Para la resolución del caso presentado, el estudiante debe poseer conocimientos previos de balances de materia, cinética, reactores, termodinámica, además de manejar MATLAB®; ya que es necesario resolver matemáticamente los problemas. En las asignaturas del Grado de Ingeniería Química de la Universitat Politècnica de València, Campus d'Alcoi, existe una coordinación para utilizar MATLAB® en las resoluciones de los problemas que necesiten cálculos matemáticos (Lopez-Perez, 2015).

Todos los cálculos que van a realizar en el problema propuesto, pueden realizarse tanto, con la resolución matemática tradicional, utilizados en las asignaturas anteriores, como con el programa de Simulación PROMAX®. De esta forma, los estudiantes pueden comprobar que PROMAX® va a realizar cálculos internos similares a los que ellos han realizado de forma manual. Con esto, también se le ofrece al alumno una perspectiva del Grado, en el cual ha ido adquiriendo competencias y conocimientos que utilizará en su vida profesional. Por otra parte, el alumno comprueba que todo lo aprendido anteriormente tiene una utilidad.

4. Resultados

En este apartado, debido a la gran cantidad de cálculos, solo vamos a mostrar algunos resultados obtenidos por un grupo de alumnos, más concretamente la parte del reactor químico.

4.1. Resultados obtenidos con cálculos tradicionales para el diseño y optimización del reactor.

En este punto, los alumnos nos presentan los resultados utilizando los conceptos que aprendieron, sobretodo, en las asignaturas de Bases en la Ingeniería Química (2º Curso), Cinética Química y Catálisis (2º Curso) y Reactores Químicos (3º Curso). Para la resolución de esta parte, utilizaron el programa MATLAB y las plantillas ofrecidas para su resolución (Dominguez, 2021).

En esta parte de la tarea, se estudia como varía el volumen del reactor y la temperatura modificando la conversión y la selectividad del buteno. Para poder obtener un resultado adecuado los pasos a seguir deben ser:

1. Búsqueda bibliográfica de los datos de entalpías y calores específicos. Para simplificar los cálculos, se les permitió mantener constante el calor específico en el intervalo de reacción. Los estudiantes podían buscar los datos en libros o también se les facilitó la web <https://webbook.nist.gov/chemistry/>
2. Planteamiento de los balances de materia y energía de todos los componentes, utilizando los datos de conversión del buteno como de la selectividad. Tomaron como consideración que el reactor era ideal para que los cálculos tradicionales fuesen más sencillos. Hay que recordar que los resultados mostrados en este trabajo solo son una parte del trabajo global.
3. Preparación de la plantilla de MATLAB para la resolución de los balances de materia y energía (fig 2)
4. Obtención de las corrientes de salida de cada uno de los productos involucrados en las reacciones, además del flujo molar total.
5. Obtención del volumen del reactor
6. Presentación de resultados en una memoria

```

%% Balance de energía reactor
%Entalpías de formación estandar de liquido (entalpia del gas + entalpia de
%condensación) KJ/mol
Hf0_c3 = -119.8*1000;
Hf0_ic4 = -155.59*1000;
Hf0_c4 = -21.13*1000;
Hf0_c12 = -352.1*1000;
Hf0_nc4 = -148*1000;
Hf0_ic8 = -259.3*1000;

% Cp liquida de los componentes J/mol-K
Cp_c3 = 119.6;
Cp_ic4 = 129.7;
Cp_c4 = 128.96;
Cp_c12 = 376;
Cp_nc4 = 132.42;
Cp_ic8 = 237.8;

% Entrada
% Corriente 1
Hf1_c3 = Hf0_c3+Cp_c3*(48.9-25);
Hf1_c4 = Hf0_c4+Cp_c4*(48.9-25);
Hf1_ic4 = Hf0_ic4+Cp_ic4*(48.9-25);
Hf1_nc4 = Hf0_nc4+Cp_nc4*(48.9-25);
% Corriente 11
Hf11_c3 = Hf0_c3+Cp_c3*(37.2-25);
Hf11_c4 = Hf0_c4+Cp_c4*(37.2-25);
    
```

*Hli 04'Rrcpwnuf g'OVNCD'rctc'g'guqwek'p'f'g'Dcn'peguf'g'o'cygt'k'f'Gpgti'f'e'gp'e'o'newq'it'cf'lekqpc'rf'g'hc'c'evk'lf'cf'f'g'f'lug'o'q''
f'g'lt'g'evqt''''*

Los resultados de las corrientes de salida del reactores obtenidos (Tabla 2), fueron analizados por los alumnos, concluyendo que el parámetro influyente era la conversión, y que aunque tuviésemos una selectividad diferente, el tamaño del reactor también se vería modificado mayoritariamente por este parámetro (Tabla 3). Se ve un aumento de 2 m³ de pasar de una conversión de 95% a una de 97.5%.

Dgp gk kqu f g'rc 'wkkk| c ek> p'f gr lko wrc f qt 'eqo g tek n'RTQO CZÌ 'gp'eqo dk p c ek> p'eqp'e^a r ewrq'o c p wcn' gp'gn'c p^a r kuku'f g'wp'rt qe guq'kp f wmt k c n'gp'gr l t c f q'f g'kpi gpkgt f' S w f b k ec

Vc drc '40T g w n c f qu'f g'eqt i k p v g u'f g'ic n f c f g n i t g c e v q t 'e c r e w r c f qu'o' g f k p v g' r r c p k n c u'f g'O CVNCD'eqp'e^a r ewrq' t c f k e k a p c n' wkkk| c f q'gp'c u k i p c w t c u'f g'Dc u g u'gp'rc'kpi gpkgt f' S w f b k ec 'l' T g c e v q t g u

Selectividad (%)	Conversión (%) del C ₄	X _{c4} (%)	X _{c4=} (%)	X _{en4} (%)	X _{c3} (%)	X _{c8} (%)	X _{c12} (%)	Flujo molar salida reactor (kmol/h)
95	95	0.8667	0.000426	0.0602	0.0649	0.0073	0.000385	919.38
95	97.5	0.8667	0.000213	0.0603	0.0649	0.0075	0.000396	919.18
96.7	95	0.8666	0.000426	0.0602	0.0649	0.0076	0.000259	919.38
96.7	97.5	0.8666	0.000213	0.0603	0.0649	0.0078	0.000265	919.18

Vc drc '50T g w n c f qu'f g'x q m o gp'f g n i t g c e v q t 'l' v g o r g t c w t c u'f g'ic n f c f g n i o l a o q'gp'e^a r ewrq'eqp'O CVNCD

Selectividad (%)	Conversión (%) del C ₄	Volumen (m ³)	T(K) salida del reactor
95	95	1,809	315,512
95	97,5	3,622	315,6469
96,7	95	1,5	315,5232
96,7	97,5	3,013	315,6584

4.2. Resultados obtenidos con el simulador PROMAX®

En este punto del grado, los alumnos ya han estudiado los conceptos necesarios para el desarrollo de la actividad, además de los nociones clave del Simulador para poder implementar un reactor ideal. Durante la asignatura de Simulación de Procesos Químicos y Experimentación en Ingeniería III, los alumnos han visto el uso del simulador y han recibido suficiente información sobre su uso. En la siguiente figura se presenta una de las diapositivas que se ofrecen en las asignaturas donde se imparte PROMAX® (fig 3).

ProMax 5.0
Reactores químicos

Tipo de reactor	¿Mecanismo de reacción?	¿Cuándo utilizarlo?
Conversion	Sí	<ul style="list-style-type: none"> Para calcular rápidamente productos de reacción. Se especifica la conversión de un reactante determinado. Cuando no se conocen datos cinéticos detallados. Ej.: En hidrot ratamiento, alquilación, craqueo catalítico y coque.
Equilibrium	Sí	<ul style="list-style-type: none"> Para procesos que alcancen el equilibrio o estén cerca de él. Requiere conocer las constantes de equilibrio (calculadas por ProMax o aportadas por el usuario). Ej.: En las simulaciones de reactores de isomerización.
Plug flow	Sí	<ul style="list-style-type: none"> Para reactores de flujo pistón. Se requiere información cinética y que no se alcance el equilibrio. Ej.: En las simulaciones de reactores de reformado catalítico.
Stirred Tank	Sí	<ul style="list-style-type: none"> Para reactores CSTR. Se requiere información cinética y que no se alcance el equilibrio. Ej.: En las simulaciones de reactores de reformado catalítico.
Gibbs Minimisation	Opcional	<ul style="list-style-type: none"> Para procesos que alcancen el equilibrio o estén cerca de él. Ej.: En la simulación de incineradores.

Hli 05 'Rt g u g p v c e k > p'f g' t c p u r c t g p e k'f g'w r qu'f g' t g c e v q t g u'o' u' u g p e k n u' s' w g' r w g f g p' w k k | c t u g'gp'RTQO CZÌ ''

Debido a que, en los simuladores, es necesario definir un paquete termodinámico, en el enunciado del problema se indica este dato, además de ofrecer medidas del reactor; recordemos que la finalidad del simulador no es calcular el volumen del reactor, sino observar como varían los parámetros al variar condiciones de operación.

Los datos que se le ofrecen son: “Eqpukf gtc pf q"gn'rc swgvg'vgt o qf kp" o leq'f g'Rgpi /Tqdkpuqp"{'s wg'rc " ec'f c"fg"rt gul>p"gp"gn't gcevt "gu'pwr."cpcrk ct"gn'ghgevt"swg"vkgpg"gn'xqmw gp'f gn't gcevt "uqdt g"rc" eqpxgtuk>p'f gn'3/dwgpq"l'rc'ugrgevkxf cf"cn'kuqgecpq."tgn'gpcpf q'rc'uki wkgpv'wdr"Vcdr"6-0"

Ug"eqpukf gtc"swg"gn't gcevt "gu'ek'pf tkeq."eqp"wp"gur guqt "fg"32"o o."{"wpc"cnwtc"ki wcn'c"7"xgegu"gn' f k'o gvt q"kvgt pq'f gn't gcevt 0"

Los pasos que los alumnos seguirán en esta parte de la actividad serán:

1. Especificar el paquete termodinámico. En este caso Peng-Robinson.
2. Indicar tipo de reactor y cinética de ambas reacciones.
3. Establecimiento de corrientes de entrada y salida, además de los diferentes tamaños del reactor.
4. Simulación del proceso utilizando la herramienta Solver para la realización de todas las simulaciones con las diferentes medidas del reactor.
5. Presentación de resultados en una memoria

Vcdr'60Vcdr'c'tgn'pct'gp'rc'cevkxf cf'fg'RTQO CZì

Efecto del volumen del reactor				Cálculo ProMax							
Dext (m)	Volumen (m3)	Selectividad (%)	Conversión (%) (C4=)	xC3 (%)	xiC4 (%)	xnC4 (%)	xC4= (%)	xiC8 (%)	xC12 (%)	Fsalida (kmol/h)	Treactor (K)
0.3											
0.5											
0.75											
1											
1.25											
1.5											

Además de presentar la memoria en PDF o Word, estos archivos debían ir acompañados del archivo generado con el Simulador. Los datos a introducir relacionados con el reactor son: tipo de reactor, en este caso un reactor continuo de tanque agitado y el set de reacciones donde se especifica la estequiometría de la reacción y constantes cinéticas de ambas reacciones. Naturalmente, la cinética propuesta debía ser sencilla para que los alumnos no tuvieran problemas con el cálculo manual. Posteriormente, se establecía el tamaño del reactor y se simulaba la parte del proceso correspondiente al reactor (fig. 4). Para poder simular y obtener los parámetros de salida del reactor como conversión, selectividad, temperatura y flujos molares de todos los componentes que intervienen en las reacciones con diferentes entradas, los alumnos podían utilizar la herramienta de EXCEL que está enlazada al simulador.

Dgp gk ekuf g'rc 'wkrk/cek>p'f grlko wrcf qt 'eqo gtekn'RTQO CZÌ 'gp'eqo dkpcck>p'eqp'e^a rwnq'ò cpwcn' gp'gn'c^a rkukuf g'wp'rt qeguq'kpf wmt kc'n'gp'grlI t cf q'f'g'kpi gpkgt'f'c'S wfb'kcc

Visor de proyecto - ProMax@\\CORENTINE\VDI\UPVNET\malope1\Escritorio\ProMax_trabajo.pmx

Archivo ProMax Ventana

TIPO DE REACTOR

Nombre REAC-100 Ejecutar

Conexiones Datos de proceso Evaluación Set de reacciones Corrientes Análisis Tablas Gráficos Notas

Categorías REAC-100 Transf. de calor

Especificaciones Internos Componentes Elementos Reacciones

REAC-100	
Tipo	Tanque agitado continuo
Set de reacciones	Reacciones
Especificación de Gibbs	General
Formulación de transferencia de masa	Maxwell-Stefan general
Correlación de transf. de masa	Wild
Caída de presión	0 bar
Correlación de caída de presión	Definido por el usuario

Reacción 1

Reacción Notas

Nombre de la reacción Reacción 1

Estequiometría y ordenes de reacción

Coefficientes estequiométricos: reactivos < 0, productos > 0.

Componente	Fórmula	Coef. estequiométrico	Directa	Inversa	Equilibrio
1-Butene	C4H8	-1	1		
Isobutane	C4H10	-1	1		
Isooctane	C8H18	1	0		

Activa

Ecuación química C4H8 + C4H10 -> C8H18

Ecuaciones a utilizar Directa

Base de concentración Molaridad

Unidades de concentración kmol/m³

Equilibrio

Fase de la reacción Total

Constante de velocidad de reacción: $k = k_0 \cdot T^n \cdot \exp(-E_a/(R \cdot T))$

Componente base de la cinética 1-Butene

Base de la velocidad de reacción moles / volumen

Unidades de la velocidad de reacción kmol/(m³s)

Densidad partícula de catalizador kg/m³

Directa

Unidades K

k0 1,62e+09

ln(k0) 21,2057

Ea 65000 kJ/kmol

Ea/R 7817,71

n 0

Visor de proyecto - ProMax@\\CORENTINE\VDI\UPVNET\malope1\Escritorio\ProMax_trabajo.pmx

Archivo ProMax Ventana

DIMENSIONES DEL REACTOR

Nombre REAC-100 Ejecutar

Conexiones Datos de proceso Evaluación Set de reacciones Corrientes Análisis Tablas

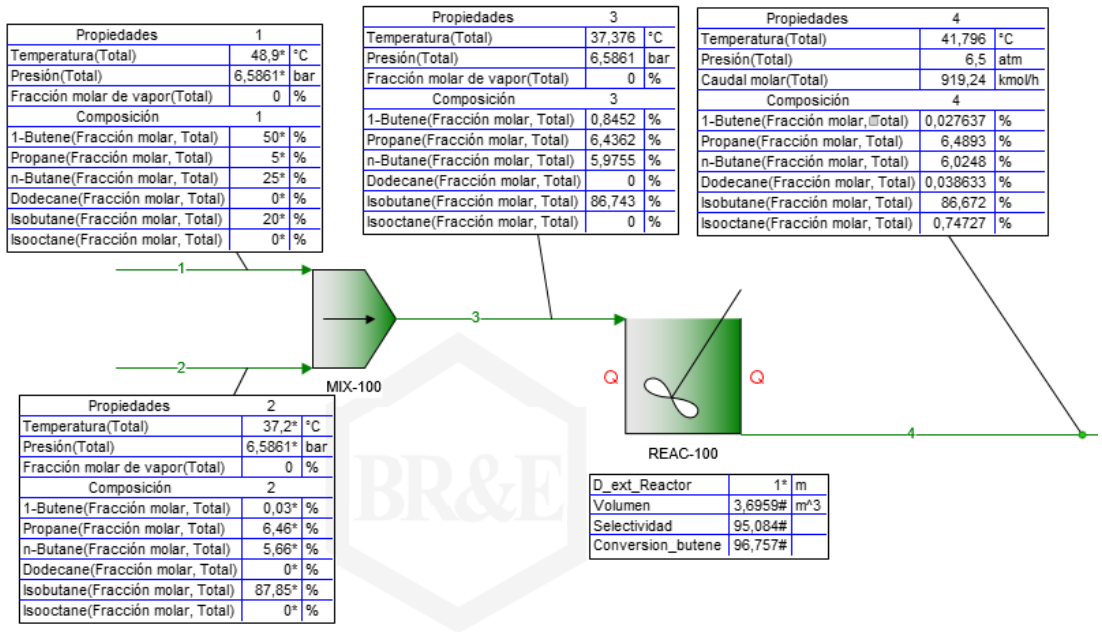
Categorías REAC-100 Transf. de calor

Especificaciones Internos Componentes Elementos Reacciones

REAC-100	
Diámetro de partícula	mm
Área superficial	1/m
Masa de catalizador	kg
Longitud recorrida por el fluido	4,9 m
Área de flujo	0,754296 m ²
Tubos	
Reacciones en los tubos	<input checked="" type="checkbox"/>
Longitud	4,9 m
Diámetro externo	1 m
Pitch	31,75 mm
Número de tubos	1
Espesor	10 mm
Calibre (BWG)	0
Diámetro interno	0,98 m
Pasos	1
Primer paso por los tubos	Contra-corrient

Hli 06'Ecr wteuf g'rcpcmc'eqp'quf'kgt gpygu'r cuqu'rctc'ko rngo gpwct'wp't'gcevqt'eqp'kw'f'g'c'pswg'ci kcf q'gp'RTQO CZÌ ''

En la siguiente figura se muestra un gráfico con los resultados cuando el volumen del reactor es de 3.7 m³



Hki 07'Ecr wmcuf'g'rcpcnc'eqp'iqu'tgunncf qu'qdvxplf qu'eqp'rc'gpvt cf c'f'g'xqmo gp'50'o 5'gp'RTQO CZI "

Las tabla presentada por los alumnos nos indica que los resultados son similares a los obtenidos con los cálculos utilizados en la parte manual (Tabla 5). Se puede ver que a medida que aumenta el volumen del reactor, la conversión, como era lógico esperar, aumenta. Sin embargo, la selectividad se mantiene casi constante, por lo que, coincide con los resultados obtenidos con el método de cálculo tradicional o manual (fig 6). Los alumnos pueden de esta manera, comprobar que los cálculos que el simulador realiza son similares a los que ellos aprenden durante el Grado.

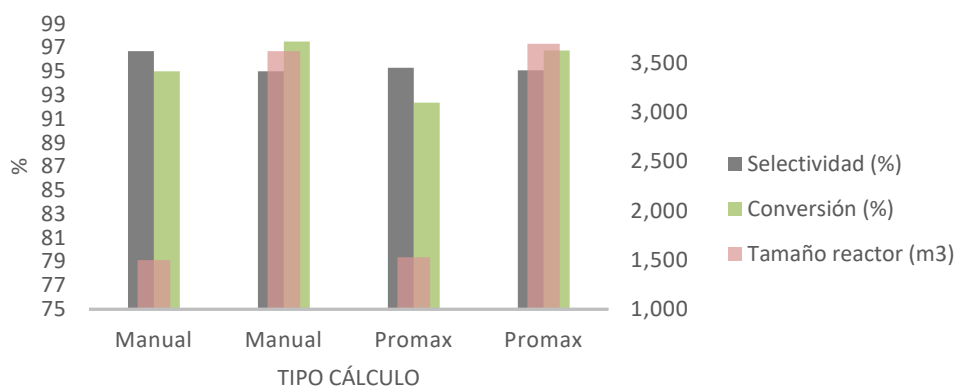
Vcdrc'70Tgunncf qu'qdvxplf qu'gp'rc'ldo wrc'ek»p

Efecto del volumen del reactor				Cálculo ProMax							
D_ext (m)	Volumen (m³)	Selectividad (%)	Conversión (%) (C4=)	xC3 (%)	xiC4 (%)	xnC4 (%)	xC4= (%)	xiC8 (%)	xC12 (%)	Fsalida (kmol/h)	Treactor (K)
0.3	0.0862	98.19	35.46	6.46	86.71	5.99	0.55	0.29	0.01	924.042	312.160
0.5	0.4343	96.11	76.43	6.48	86.68	6.01	0.20	0.60	0.02	920.832	314.026
0.75	1.5276	95.31	92.38	6.49	86.67	6.02	0.06	0.72	0.04	919.583	314.748
1	3.6959	95.08	96.76	6.49	86.67	6.02	0.03	0.75	0.04	919.241	314.946
1.25	7.3074	95.00	98.34	6.49	86.67	6.03	0.01	0.76	0.04	919.116	315.017
1.5	12.7301	94.97	99.04	6.49	86.67	6.03	0.01	0.76	0.04	919.061	315.049

"
"
"
"



Dgp gte kqu'f g'rc 'wkk/cek>p'f grlko wrcf qt 'eqo gtekn'RTQO CZÌ "gp'eqo dkpcck>p'eqp'e^a rwnq'o cpwcn' gp'gn'cp' rku'f g'wp'rt qeguq'kpf wmt kn'gp'grl t cf q'f g'kpi gpkgt'f 'S w'p'lec



Hli 08'Eqo rctcek>p't guwncf qu'qdvplf qu'gpvt g'e^a rwnq'o cpwcn'RTQO CZÌ "

4.3. Observación participante

Se ha realizado actividades de observación como técnica de revisión para comprobar que los resultados obtenidos concuerdan con lo esperado.

Para ello, se creó una plantilla donde se indican los elementos en los que se realiza la observación (Tabla 6). Es una observación con datos cualitativos, aun así, es una técnica muy práctica para aplicar en el aula. Se registró durante los días de clase en las que se realizaba la actividad.

Vcdnc '80Rvplw' o gqf qm' f'g'qdugt.xcek>p' rctvlekr cvkxc

Valoración utilizando observación como metodología de evaluación.	Muy poco	Poco	Bastante	Mucho
Rctvlekrcek>p'f grli twr q'gp'rcu'rt gi wpcu'f g' erug'0Cevkwmf 'rctvlekr cvkxc "gp'gn'crt gpf k'clg" Rt gi wpcu'f grli twr q'f wcpvg'rc 'erug"				
Rctvlekrcek>p'f g'hu'kpvgi tcvgu'f grli twr q'gp' gn'vcclq' rctvlekrcek>p'gp'lw't qm"				
Gu ^a p' o ^a u' o qvxc f qu'f wcpvg'rc 'cevklf cf " s w g' ewcpf q' uq' g' u' e ^a rwnq'o cpwcn' I t cf q' f g' hcvk' eek>p' ewc' rkc vxc 'r qt " qdugt.xcek>p'+ ewcpf q' co dqu't guwncf qu' hgu" eqkpe'f gp"				

En todas las anotaciones que se tomaron durante el curso, el porcentaje de respuestas “bastante” y “mucho” era mayor del 80%, con lo que, una primera conclusión es que al alumnado le motiva más este tipo de ejercicios, donde puede utilizar una herramienta industrial y comparar con sus cálculos. Cuando ambos resultados coinciden, la satisfacción de haber desarrollado de forma correcta el problema, provoca en el grupo una actitud positiva hacia la asignatura.

5. Conclusiones

Teniendo en cuenta el trabajo que los alumnos desarrollan con la actividad propuesta en la asignatura Procesos Industriales en Ingeniería Química calculando y simulando un proceso industrial real, relativamente sencillo, hemos observado que los alumnos se sienten satisfechos de dicho trabajo. Con la observación de los diferentes trabajos presentados durante los cursos en los que se han desarrollado este tipo de actividades (curso 16-17 hasta la actualidad) podemos concluir que:

1. Aumenta la motivación de los alumnos al utilizar un simulador comercial y manejar herramientas que podrán encontrar en su futuro laboral.
2. Perciben las asignaturas anteriores como pasos necesarios en su futuro profesional, ya que son conceptos que comprueban que se utilizan en la realidad y no son solo materias inconexas que no se utilizan en la Ingeniería Química. Este punto es crucial en el grado, ya que en muchos comentarios de los egresados aparece la percepción de que cuando se incorporen a su vida laboral, lo que han estudiado no lo van a utilizar nunca. Por ello, el combinar este tipo de actividades, cálculo tradicional y el software de simulación, es una forma práctica de paliar esta situación. Validan los cálculos manuales con los resultados obtenidos por el Simulador y son capaces de ver las limitaciones y suposiciones que tienen que utilizar cuando realizan los cálculos manuales para poder resolver los procesos de forma sencilla.
3. El trabajo cooperativo mejora habilidades como discusión, facilita la gestión de bibliografía, también mejora las capacidades de enfrentarse a problemas más complejos y facilita la realización de los informes.
4. Con el simulador comercial, y después de comprobar que el Simulador no es una caja negra en la que desconocen que cálculos internos realiza, son capaces de analizar, modelar y simular sistemas más complejos que con el cálculo manual.

Como conclusión general podemos decir que los programas de simulación favorecen la transferencia de conocimiento porque trabajan en un entorno real muy parecido al que los estudiantes tendrán en un futuro. Pero creemos que si se combina con los cálculos tradicionales para que se comparen resultados, la comprensión y consolidación de conceptos que han visto durante el grado, por parte de los estudiantes, se potencia de forma extraordinaria.

6. Referencias

CARBONELL C., CARDONA S.C., DOMÍNGUEZ I., FOMBUENA V., LÓPEZ-PÉREZ M. F., LORA J. (2021) "How to guide chemical engineering students in the solution of complex engineering problems". INTED2021 Proceedings 15th International Technology, Education and Development Conference March 8th-9th, 2021 Edited by L. Gómez Chova, A. López Martínez, I. Candel Torres IATED Academy, ISBN: 978-84-09-27666-0 ISSN: 2340-1079

DAHM, K.D, HESKETH, R. P, SAVELSKI, M. (2002) "Is Process Simulation Used Effectively in ChE Courses?" *L'Ej go kect'gpi kpggt kpi 'gf wectkqp*. vol.36, issue 3, p.192

DE LUCAS-CONSUEGRA, A., SERRANO, A., LLANOS, J. (2018) "Use of process simulator to enhance the teaching-learning process of flow of fluids for engineering students". *Ego rwoCrriOGpi OGf we.*, vol.26, p. 980-993

DOMINGUEZ-CANDELA, I., CARDONA, S., LORA, J., LOPEZ-PEREZ, M.F., FOMBUENA V. (2021) "Assessment of students in the use of matlab guide templates for solving material balances. A teaching experience in chemical engineering degree" INTED2021 Proceedings 15th International Technology, Education and Development Conference March 8th-9th, 2021 Edited by L. Gómez Chova, A. López Martínez, I. Candel Torres IATED Academy, ISBN: 978-84-09-27666-0 ISSN: 2340-1079



Dgpglkekqu'f g'rc'wkrk/cek»p'f gr'uko wrc'f qt'eqo gtekn'RTQO CZI' "gp'eqo dkpcck»p'eqp'e" rwnq'ob cpwcn' gp'gn'cp" rku'f g'wp'rt qeguq'lpf wmt kn'gp'gr'I tcf q'f'g'kpi gpkgt'f' S w'p' kec

GRANT, C.D., DICKSON, B.R. (2006) "Personal skills in chemical engineering graduates: the development of skills within degree programmes to meet the needs of employers". *Gf weOEj go OGpi 0* vol. 1, p. 23–29

HOORFAR M., ALCHEIKHHAMDON Y., CHEN .B. (2018) "A novel tool for the modeling, simulation and costing of membrane based gas separation processes using Aspen HYSYS: Optimization of the CO₂/CH₄ separation process", *Ego rwtu'f' 'Ej go kecn'Gpi kpggt'kpi* . vol. 117, issue 2, p. 11-24

KOMULAINEN, T.M., ENEMARK-RASMUSSEN, R., SIN, G., FLETCHER, J.P., CAMERON, D. (2012) "Experiences on dynamic simulation software in chemical engineering education". *Gf weOEj go OGpi* ., vol. 7, p. 153–162

LEWIN, D.R., SEIDER, W.D., SEADER, J.D., DASSAU, E., GOLBERT, J., ZAIATS, G., SCHWEITZER, D., GOLDBERG D. (2001) *Wikpi "Rt qegu'Uko wrc'vtu"lp'Ej go kecn'Gpi kpggt'kpi <"O wko gf'k" I w'f' glqt"vj g"Eqt g" Ewt'kwno* . John Wiley and Sons, Inc.,New York, NY

LOPEZ-PEREZ, M.F., CARDONA, S.C., LORA, J., ABAD, A., TORREGROSA, J.I. (2015). "Resultados del Proyecto de Innovación y Mejora Educativa. Utilización de MATLAB como estrategia didáctica y de coordinación horizontal y vertical entre asignaturas del Grado de Ingeniería Química" *0* Comunicación en Congreso IN-Red. 2015. <<http://inred.blogs.upv.es/>>

LUYBEN, W.L. (2011) *Rt kpek'ngu'c'pf "ecug'tawf'kgu'qH'uko wnc'p'g'qu'f' g'uki p* John Wiley and Sons, Inc.,New York, NY. ISBN 978-0-470-92708-3

PUIG-GAMERO M., PIO D.T, TARELHO, L.A.C., SÁNCHEZ P., SANCHEZ-SILVA L. (2021) "Simulation of biomass gasification in bubbling fluidized bed reactor using Aspen Plus®", *Gp'gti {"E'q'x'gt'uk'q'p" c'pf "O c'pci go g'p'v* vol. 235, issue 1, p. 113981

ZUMALACÁRREGUI DE CÁRDENAS, L., VALVERDE PALOMINO, J. L. (2018) "Ejemplo para el uso de un simulador en los estudios de ingeniería química", *Ego rws w'p' kec'Gf' wecek»p'S w'p' kec* .'xqn12, issue 4, p. 203-208