# METHODOLOGICAL PROPOSAL FOR THE DEVELOPMENT OF APPLICATION FOR SIMULATION IN PHYSICOCHEMICAL LABORATORY PROCESSES

# PROPUESTA METODOLOGICA PARA EL PROCESO DE DESARROLLO DE APLICACIONES DE SIMULACION LABORATORIOS DE PROCESOS FISICO-QUIMICOS

Pedro Alfonso Atuesta Vera\*\*, PhD. Eliseo Amado Gonzalez\*
MSc. Mauricio Rojas Contreras\*\*\*

- \* Director del Instituto de Biocombustibles, Energías Alternativas y Renovables (IBEAR). Unipamplona. E-mail: eamado@unipamplona.edu.co
- \*\* Semillero de investigación del **Grupo de Energía, Transformación Química y Medio Ambiente**. E-mail: pedro.atuesta@unipamplona.edu.co
- \*\*\*Docente Facultad de Ingenierías y Arquitectura. E-mail: mrojas@unipamplona.edu.co

**Abstract:** An experimental methodological proposal for physical chemical lab processes has been developed. Teaching and learning environments which use a simulator greatly improve the effectiveness and efficiency of learning. The methodology for the development of a simulator package dealing with two physical chemical concepts of Gauss' Law and heat dilution is shown.

**Resumen:** Una propuesta metodológica experimental para procesos de laboratorios de fisicoquímica se ha desarrollado. Ambientes de enseñanza y aprendizaje que usan un simulador mejoran la efectividad y eficiencia del aprendizaje. La metodología para el desarrollo de un simulador relacionado con dos conceptos físico-químicos Ley de Gauss y calor de dilución es presentado.

**Keywords:** Improving classroom teaching, interactive environmental learning, simulations, Gauss' law, heat dilution.

# 1. INTRODUCCIÓN

Los procesos educativos se encuentran en un periodo de rápida transición; uno de los principales objetivos es aumentar la eficiencia educacional.

Las simulaciones pueden ser definidas como representaciones correctas de una situación para la cual el usuario tiene un control sobre la salida del programa (Davies, 2002). En este sentido los estudiantes son quienes participan en su propio aprendizaje. Por tanto, los simuladores permiten

desarrollar múltiples ensayos y niveles de complejidad a la velocidad de aprendizaje propia de cada estudiante (Kearsly, 1998).

Las simulaciones también han sido reconocidas como una forma eficiente y efectiva de desarrollar en el usuario procesos complejos de aprendizaje que impliquen relaciones dinámicas (Parush, *et al.*, 2002)

El desarrollo de software de simulación de laboratorios virtuales permitirá dar una nueva

dinámica y un aumento en los niveles de calidad de las experiencias de laboratorio con una reducción de insumos, errores de ejecución y tiempo de laboratorio.

El desarrollo de metodologías de simulación para laboratorio de físico química a nivel de educación de pregrado, se encuentra en una etapa incipiente, aunque existe un serio interés debido al incremento de la educación virtual. Los laboratorios de fisicoquímica presentan varias dificultades: requieren de equipos costosos que se incrementa por el número de estudiantes; en su preparación requieren de un tiempo de preparación largo y en más de una ocasión, requieren de la presencia de varios docentes (Ortega, et al., 2001). Sin embargo, en condiciones de un laboratorio de simulación las variables pueden controladas para reproducir fenómenos que en condiciones de un laboratorio real son difíciles de observar o analizar (García, et al., 2004).

La simulación de los laboratorios de físico-química, previo al desarrollo del laboratorio real, se habrá desarrollado una serie de competencias cognitivas que se complementaran con las competencias motrices. En este documento se describe una propuesta metodológica para el desarrollo de laboratorios virtuales a partir de los conceptos de Ingeniería del software teniendo como premisa la adaptación al contexto de asignaturas relacionadas con los procesos físico-químicos.

# 1.1. Simulación de procesos químicos

La simulación de procesos ha tenido una acogida importante en los centros de educación Universitaria, debido a que se han venido convirtiendo en una ayuda pedagógica, los docentes tienen una herramienta opcional para poder explicar de una manera mas amena y fácil cualquier proceso que se pretenda observar (Gatzke, 2000).

La simulación permite observar el comportamiento de equipos bajo condiciones que podrían ser peligrosas o que se cree podrían serlo (Gatzke, 2000). Existe en el mercado una gran cantidad de herramientas de simulación de acuerdo al tipo de proceso que se desee simular. En procesos químicos existen simuladores como ASPENPLUS®, ChemCAD, ChemShare, FLOWTRAN, HYSYS y ProII, los cuales permiten simular un proceso de una manera fácil y rápida.

# 1.2. Software educativo

El software educativo hace referencia a los programas de computación realizados con la finalidad de ser utilizados como facilitadores del proceso de enseñanza y consecuentemente de aprendizaje (Cataldi, 2000). (Galvis, 1998) sostiene que se pueden usar como sinónimos de "software educativo" los términos "programas didácticos" y "programas educativos", centrando su definición en "aquellos programas que fueron creados con fines didácticos. El software educativo se divide en dos grandes grupos que son los algorítmicos y los heurísticos (Galvis, 1998).

Los algorítmicos debe haber un guía que transmita el conocimiento a los otros, lo que no ocurre en el heurístico en el cual el conocimiento se adquiere por si mismo, se puede avanzar según la necesidad y el interés con los que sean asumidos, siempre se tendrá el inconveniente que unos avancen mas que otros por la misma necesidad pero este suceso ocurre en los dos tipos de software.

#### 2. METODOLOGIA

Normalmente se encuentran metodologías para el desarrollo software de transaccionales (tradicionales, orientadas a objetos) (Galvis, 1998), y de igual manera se encuentran metodologías para desarrollo de Materiales Educativos Computarizados (MEC) [Galvis, 1998] pero demasiado pesadas, en este documento se pretende fusionar los conceptos de ingeniería del software orientada a objetos con conceptos de ingeniería de software educativo lo cual arroja como resultado una propuesta metodológica liviana para el desarrollo de aplicaciones de simulación de laboratorios virtuales en procesos físico-químicos.

La propuesta está estructurada de la forma que veremos a continuación.

# 2.1 Obtención de requerimientos

Para el desarrollo del software de simulación de procesos químicos se tuvieron en cuenta una serie de requerimientos que se hacen necesarios para el cumplimiento de las diferentes etapas de la metodología (Figura 1).

A continuación se mencionaran los requerimientos necesarios para el desarrollo de un simulador:

- Exploración de la guía de laboratorio de sistema tradicional. Aquí encontramos todas las prácticas de los diferentes procesos que se pretenden realizar.
- Desarrollo de laboratorios sistema tradicional.
   Este desarrollo se hace con el objetivo de la toma de resultados para posteriormente plasmar esos resultados en el simulador.
- Exploración de otros simuladores. Esta exploración se hizo para recopilar información a cerca de la existencia de simuladores de los cuales podamos tomar especificaciones para elaborar nuestro propio simulador acoplándolo a nuestros requerimientos.
- Identificación de características de interfaces.
- Identificación de funcionalidades principales del software.
- Identificación de otros requerimientos no funcionales. Se puede notar que en el transcurso del desarrollo de nuestro simulador aparecen unos requerimientos que no se habían tenido en cuenta inicialmente, como el desempeño del producto en diferentes plataformas y la documentación del producto entre otros.

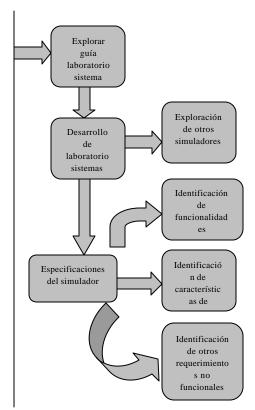


Fig. 1. Obtención de requerimientos

#### 2.2 Análisis

En esta etapa se genera un análisis a partir del modelo de datos, el modelo funcional, los tipos de objeto (objetos de frontera, objetos de control y objetos de entidad), donde se especifica de manera general las funcionalidades que tendrá el simulador, que objetos podrán ser usados directamente por el usuario, la forma en la que el usuario podrá intervenir con el software (Galvis, 2000).

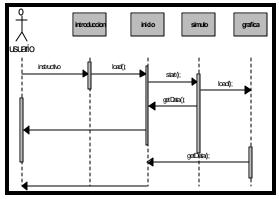


Fig. 2. Diagrama de Secuencia

En el diagrama de secuencia (Figura 2) se describe el manejo del simulador de una manera lógica, en este diagrama tenemos cuatro objetos, el actor (usuario) que actúa con el simulador por medio del proceso (introducción), el cual envía un mensaje al objeto inicia que se encarga de poner en funcionamiento el proceso de simulación, éste envía un mensaje al objeto simulo que se encarga de obtener la temperatura en la que el proceso finaliza por medio del parámetro que se le pasa (peso), este objeto (simulo) envía un mensaje de respuesta a inicia por medio de un parámetro (getData) en el cual le envía la temperatura final que se obtuvo al finalizar el proceso realizado, además simulo envía un mensaje de solicitud al objeto Gráfica y le pasa dos parámetros (peso, temperatura), de acuerdo a estos parámetros gráfica le envía un mensaje de respuesta a inicia y éste le envía el mismo mensaje de respuesta a estudiante el cual contiene la gráfica dada de acuerdo a los valores de temp eratura y peso respectivamente.

#### 2.3 Diseño

La modularización de este software de simulación se hizo por medio de capas, esto se hizo teniendo en cuenta la facilidad para poder separar los procesos en diferentes capas y por medio de fotogramas. Las capas hacen que el modelo se pueda dividir de tal manera que en el momento de necesitar unirlas lo podamos hacer por medio de programación con tan solo hacer el llamado del proceso que se encuentre en determinada capa y tomando la ruta que debe seguir para poder llegar a ella.

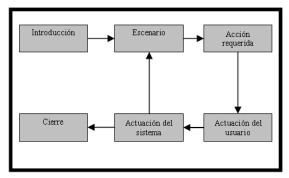


Fig. 3. Diagrama del simulador

Como podemos observar en la [figura 3], se tiene una introducción al simulador donde nos informa acerca del mismo, luego tenemos el escenario en donde se observan las diferentes gráficas que intervienen en el proceso, la acción requerida son los datos que debe introducir el usuario por eso en seguida de ello viene la actuación del usuario donde éste se encarga de insertar los datos requeridos para que el sistema empiece a actuar.

En el momento que el sistema termina su proceso se tienen tres opciones: volver a realizar el proceso, cambiar los datos o salir del simulador.

### 2.4 Integración

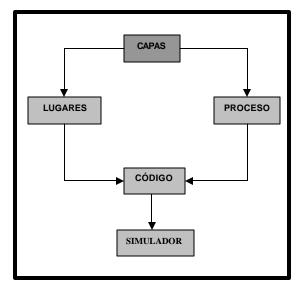


Fig. 4. Proceso de Integración

Se tienen los diferentes procesos por capas para mejor comodidad como la generación de las graficas estadísticas, el simulado del proyecto, la introducción de los datos por parte del usuario, y a continuación se procedió a unir estas capas mediante llamados según la tarea de cada proceso (ver Figura 4).

#### 2.5 Pruebas

En el momento que se obtiene el prototipo inicial se procede al desarrollo de las prueba para ver el comportamiento del software de simulación frente a diferentes factores como la flexibilidad, la robustez, la usabilidad, si el software resiste estas pruebas pasamos a depurarlo para tener un software con toda la capacidad frente a los diferentes problemas que se presenten.

Si por el contrario obtenemos resultados negativos en las pruebas debemos hacer una depuración del producto y revisar las etapas de análisis y la etapa de diseño.

Este desarrollo de las pruebas debe ser realizado por personas involucradas en el tema que abarca el software preferiblemente estudiantes que vean materias relacionadas con la fisicoquímica.

#### 3. RESULTADOS

En la Figura 5, podemos ver la pantalla inicial del simulador de la ley de Gauss, en esta encontramos las instrucciones que el usuario debe seguir para poder realizar la simulación de manera correcta.

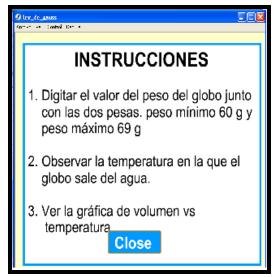


Fig. 5. Ventana inicial Ley de Gay-Lussac

En la figura 6, se puede observar la pantalla donde se encuentran todos los factores que intervienen en el proceso, podemos ver una temperatura en 10 °C (temperatura inicial del agua), en este instante el peso de la bomba se puede despreciar por ser muy pequeño (bomba sin aire).



Fig. 6. Simulador Proceso Ley Gay-Lussac

En la figura 7 podemos observar que el proceso ya se encuentra en funcionamiento, puesto que se nota que la temperatura ha aumentado una cantidad considerable de acuerdo al peso que el usuario específicó en el cuadro de texto (Peso Total), este peso total es el peso de la bomba con aire.



Fig. 7. Software de simulación en funcionamiento

De acuerdo al peso total dado se puede ver en la Figura 8 que la temperatura llega hasta determinado grado en el cual ocurre el fenómeno de la ley de Gauss, fenómeno en el cual la bomba sale del agua en una pequeña cantidad, también se puede observar la grafica estadística resultante en la cual se puede deducir que a medida que la temperatura aumenta el volumen aumenta de la misma manera.

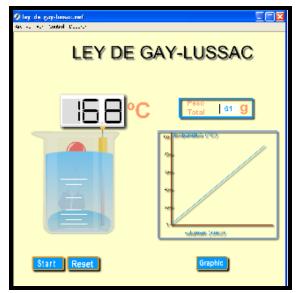


Fig. 8. Simulación terminada

La figura 9 muestra la pantalla inicial del fenómeno del calor de dilución, en ella se puede observar una serie de instrucciones que se deben seguir para que el simulador acepte esos datos ingresados como verdaderos y pueda llevarse a cabo la simulación.

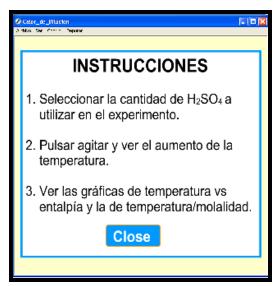


Fig. 9. Ventana inicial Calor de Dilución

En la figura 10 se puede observar el proceso antes de iniciar la simulación, se puede ver una temperatura inicial 10 °C (temperatura del agua), una serie de sustancias que el usuario escoge para ver lo que ocurre.



Fig. 10. Simulador proceso Calor Dilución



Fig. 11. Simulación en proceso

En la figura 11 se puede observar en simulador en funcionamiento, donde se puede notar que la temperatura va aumentando de acuerdo a la cantidad de sustancia elegida.

En la figura 12 se puede ver el simulador ya terminado, aquí se puede observar tanto la temperatura final como también las graficas estadísticas.



Fig. 12. Simulación terminada

Estas simulaciones de permiten ver de una manera gráfica el funcionamiento de un proceso en un tiempo muchísimo mas corto al que se tiene que esperar en la realización de un laboratorio "real".

#### 4. CONCLUSIONES

La simulación de cualquier proceso se ha convertido una herramienta fundamental hoy en día para cualquier persona dedicada a las prácticas de laboratorio, puesto que nos permite establecer las condiciones y limites normales de cada instrumento de operación de un laboratorio, razón por la cual se hace necesario el desarrollo de una herramienta que represente de manera grafica y con precisión cualquier proceso químico.

La interfaz gráfica garantiza el hecho de que el sistema que se desea simular quede completamente especificado puesto que obliga el ingreso de los datos necesarios para que los grados de libertad sean cero y de otra forma no permite realizar la simulación.

Las pruebas realizadas al simulador desarrollado pueden comprobar que de acuerdo a los datos tomados se puede afirmar que el simulador cuenta con un alto grado de precisión en la simulación de los procesos realizados.

Además el simulador permite comparar las variables de estado con la generación de las graficas estadísticas, en las cuales podemos ver el cambio de cada variable de acuerdo al tiempo de ejecución.

#### REFERENCIAS

- Cataldi Z (2000). Metodología de diseño, desarrollo y evaluación de software educativo. *Tesis de Magíster en Informática*. **Vol. 1**: pp.75.
- Davies, C.H (2002). Student engagement with simulations. A case study. *Computers and education*. **Vol. 39**: pp. 271-282.
- Galvis Álvaro H (1998). Micromundos Lúdicos interactivos: aspectos críticos en su diseño y desarrollo. Vol. 1: pp.75. Revista de Informática Educativa, Colombia, Bogotá DC.
- García, E., Ortega, J., Gómez, P (2004). Using a laboratory Simulator in the teaching and study of chemical processes in estuarine systems. *Computers and Education*. **Vol 43**: pp. 81-90.

- Gatzke E (2000). Multiple model approach for CSTR control. *14th IFAC World Congress*, **Vol. 7**: pp. 343-348. Beijing, China.
- Kearsly, G., Schneiderman, B (1998). Engagement theory: A Framework for thechnology based teaching and earning. *Educational Technology*. **Vol. 38**(5): pp. 20-23.
- Ortega, T., Forja, J., Gómez-Parra, A (2001). Teaching estuarine chemical processes by laboratory simulation. *J. Chemical education*. **Vol 78**: pp. 771-774.
- Parush, A., Hamm, H., Shtub, A (2002). Learning histories in simulation based teaching: *The effects on self learning and transfer*. Computers and education. **Vol 39**: pp. 319-332.