POSGRADOS EN INGENIERÍA QUÍMICA

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL SUR

BAHÍA BLANCA ARGENTINA

PROGRAMA DEL CURSO/SEMINARIO: Termodinámica Avanzada	CODIGO:
H O R A S D E C L A S E	P R O F E S O R R E S P O N S A B L E
T E O R I C A S / P R A C T I C A S	Marcelo S. Zabaloy
45 / 55	

Descripción

La materia se enfoca fuertemente en el logro de los siguientes objetivos: (a) comprender los diagramas de fases de compuestos puros y de sistemas binarios, ternarios y multicomponente; (b) comprender la estructura de los modelos y métodos de cálculo que se utilizan para predecirlos; (c) aplicar apropiadamente programas de cómputo del equilibrio entre fases a problemas diversos. El curso se distingue del de termodinámica de grado, entre otras cosas: (i) por considerar el enfoque sistemático para el estudio del comportamiento de fases basado en los llamados mapas característicos del equilibrio entre fases, y su conexión con diagramas restringidos (isotermas, isobaras, isopletas); y, (ii) por considerar herramientas robustas para el cómputo riguroso del equilibrio entre fases, como es el test de estabilidad global basado en la función “distancia con respecto al plano tangente”. En otras palabras, en el curso se intenta que el estudiante profundice significativamente los conocimientos en termodinámica

Programa analítico

CAPITULO I

Equilibrio líquido-vapor. Curva de Presión de vapor.
Regla de las fases. Diagramas de fases para sistemas binarios bajo equilibrio líquido-vapor, líquido-líquido, gas-líquido, sólido – fluido, etc.
Envolventes de fases. Diagramas globales.
Equilibrio en sistemas multicomponente a alta presión. Ejemplos.

CAPITULO II:

Variables termodinámicas, variables intensivas, extensivas y de campo.
Funciones de estado.
Relaciones termodinámicas.
Balances de energía y entropía.
Criterios de equilibrio y estabilidad.
Ecuación de Clausius-Clapeyron.

CAPITULO III

Propiedades de fluidos puros.
Presión de vapor y factor de comprensibilidad. Correlaciones.

CAPITULO IV

Ecuaciones de estado: virial, cúbicas, multiparamétricas.
Curva espinodal.

CAPITULO V

Funciones termodinámicas a partir de relaciones PVT o de la función de Helmholtz. Cálculo de funciones residuales.

VIGENCIA AÑOS	2023					

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL SUR

BAHÍA BLANCA ARGENTINA

PROGRAMA DEL CURSO/SEMINARIO: Termodinámica Avanzada	CODIGO:
H O R A S D E C L A S E	P R O F E S O R R E S P O N S A B L E
T E O R I C A S / P R A C T I C A S	Marcelo Zabaloy
35 / 45	

CAPITULO VI
Propiedades termodinámicas de mezclas. Diagramas de fases.
Reglas de combinación y reglas de mezclado clásicas.

CAPITULO VII
Cálculo del Equilibrio entre fases. Criterio de isofugacidad.

CAPITULO VIII
Cálculo del Equilibrio entre fases con ecuaciones de estado.
Ajuste de parámetros binarios.
Estabilidad termodinámica.

CAPITULO IX
Funciones de exceso y coeficientes de actividad.
Modelos para la energía de Gibbs de exceso.
Cálculo de equilibrio v-l con funciones de exceso.

CAPITULO X
Equilibrio L-L en modelos de coeficientes de actividad.
Equilibrio sólido-líquido.

CAPITULO XI
Enfoques modernos en el modelado termodinámico utilizando ecuaciones de estado.

PROGRAMA DE TRABAJOS PRÁCTICOS
Las actividades prácticas consisten en a) Resolución de problemas asignados en formato “guía de problemas”. No se requiere entregar la resolución de las mismas, b) Resolución de problemas asignados en formato “práctica”, los cuales requieren el uso de computadoras. Esta actividad incluye demostraciones del uso del software. Una vez asignada una Práctica, se establece una fecha de entrega para la resolución de la misma. La entrega es electrónica. Las prácticas requieren el uso de software. Los programas utilizados son: TERMOINT/DIPPR: Este software es una base de datos para compuestos puros. Incluye información como peso molecular, temperatura y presión críticas, factor acéntrico, presión de equilibrio líquido-vapor como función de la temperatura, etc.; ALLPROPS: Este software provee información de numerosas propiedades termodinámicas para un número limitado de compuestos puros, en amplios rangos de condiciones; NIST web site: Esta página de internet contiene información ampliamente variada. La que se utiliza en el curso se similar en su naturaleza a la del programa ALLPROPS; GPEC: Cálculo de Mapas Característicos del Equilibrio entre Fases (MsCsEF) para Sistemas Binarios. Cálculo de diagramas Txy, Pxy, y PT (isopletas). GPEC permite computar todas las proyecciones bidimensionales de los mencionados diagramas, por ejemplo, aquellas que involucran la densidad molar o másica. Los MsCsEF están constituidos por líneas críticas, trifásicas y azeotrópicas. El número de modelos disponibles en GPEC es limitado. Los mismos son del tipo “Ecuación de Estado”; SPECS: Este software permite hacer cálculos de equilibrio entre fases para sistemas binarios y multicomponente incluyendo Flashes multifásicos, envolventes de fases, diagramas Txy, Pxy, curvas de energía de

POSGRADOS EN INGENIERÍA QUÍMICA

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL SUR

BAHÍA BLANCA ARGENTINA

PROGRAMA DEL CURSO/SEMINARIO: Termodinámica Avanzada	CODIGO:
H O R A S D E C L A S E	P R O F E S O R R E S P O N S A B L E
T E O R I C A S / P R A C T I C A S	Marcelo Zabaloy
35 / 45	

Gibbs en función de composición, etc. Los modelos disponibles son numerosos. La supervisión de las actividades prácticas la realiza el profesor a través de clases de consulta tanto para las guías de problemas como para las prácticas. Estas últimas no se califican, solo se visan.

Modalidad de dictado

Dictado de clases teóricas asistidas con software para hacer presentaciones, y con otros paquetes de software, y uso del pizarrón. Discusión de problemas asignados en formato “guía de problemas”. Discusión de problemas asignados en formato “práctica”, los cuales requieren el uso de computadoras. Esta actividad incluye demostraciones del uso del software. Además, los alumnos desarrollan actividades prácticas autónomas. El material del curso (diapositivas de presentaciones, guías de problemas, prácticas, documentos, etc.) se comparte con los alumnos en forma electrónica, a través de plataformas como Nextcloud. Las llamadas clases “teóricas” se imparten manteniendo un continuo diálogo con los alumnos, en que ellos arriban a conclusiones a partir de la información presentada u obtenida utilizando software (método inductivo).

Modalidad de evaluación

La evaluación se realiza a través de dos exámenes que se toman al final del curso. Uno de ellos es convencional y se resuelve sobre el papel. El segundo examen se resuelve con ayuda de computadoras haciendo uso del software del curso. Para aprobar el curso se requiere que la calificación media de estos dos exámenes sea de 6 ó más puntos (en escala de cero a diez).

VIGENCIA AÑOS	2023					

POSGRADOS EN INGENIERÍA QUÍMICA

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL SUR

BAHÍA BLANCA ARGENTINA

PROGRAMA DEl CURSO/SEMINARIO: Termodinámica Avanzada	CODIGO:

BIBLIOGRAFÍA

- Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics, 8th edition. Mcgraw-Hill. J.M. Smith, Hendrick C Van Ness, Michael Abbott and Mark Swihart (2019)
- Stanley I. Sandler. Chemical, Biochemical, and Engineering Thermodynamics, 5th Edition (2017)
- Phase behavior of petroleum reservoir fluids. Second edition. Karen Schou Pedersen; Peter Lindskou Christensen; Jawad Azeem Shaikh. CRC Press, Boca Raton, FL (2015)
- Elliott R., Lira, C.T. (2012) Introductory Chemical Engineering Thermodynamics (Prentice Hall International Series in the Physical and Chemical Engineering Sciences). New Jersey.
- E.A. Brignole, S. Pereda. Volume 3: Phase Equilibrium Engineering, 1st Edition. Print Book. Expected Release Date: 12 Jun 2013. Imprint: Elsevier. ISBN: 978-0-444-56364-4.
- Kontogeorgis, G.M.; Folas, G.K. Thermodynamic Models for Industrial Applications: From Classical and Advanced Mixing Rules to Association Theories. Wiley (2009)
- Thermodynamics: Fundamentals for Applications (Cambridge Series in Chemical Engineering) by J. P. O'Connell and J. M. Haile (2005)
- B.E. Poling, J.M. Prausnitz, J.P. O'Connell "The Properties of Gases and Liquids", 5th Edition, McGraw-Hill, New York (2001) R. Koningsveld, W.H. Stockmayer, E. Nies, Polymer Phase Diagrams, Oxford University Press, Oxford, NY, 2001.
- J.M. Prausnitz, R.N. Lichtenthaler, E. Gomes de Azevedo. Molecular Thermodynamics of Fluid-Phase Equilibria (3rd Edition) (Prentice Hall International Series in the Physical and Chemical Engineering Sciences) (1998)
- PVT and phase behaviour of petroleum reservoir fluids. Danesh A., Elsevier. Ámsterdam (1998)
- Models for Thermodynamic and Phase Equilibria Calculations (Chemical Industries) by Stanley I. Sandler (1993).
- Varias Tesis Doctorales del Grupo de Termodinámica de Procesos de PLAPIQUI y artículos de la literatura.

AÑO	PROFESOR RESPONSABLE		
2023	Marcelo S. Zabaloy		
			

V I S A D O

	DIRECTOR DEL DEPARTAMENTO	DIRECTOR DEL POSGRADO
		 Mariano Asteasuain
FECHA:	FECHA:	FECHA: