



MINISTERIO DE EDUCACIÓN
UNIVERSIDAD NACIONAL DE SAN JUAN



INSTITUTO DE INGENIERÍA QUÍMICA



FACULTAD DE INGENIERÍA

Programas

- DOCTORADO EN INGENIERÍA QUÍMICA: Mención Procesos Limpios
- MAESTRÍA EN TECNOLOGÍAS AMBIENTALES
- Convenio SECITI – FACULTAD DE INGENIERIA

Curso: **TÓPICOS EN TERMODINÁMICA AVANZADA**

Profesor Responsable: **Dr. Marcelo Zabaloy (PLAPIQUI-CONICET – Universidad Nacional del Sur) – Bahía Blanca**

Primer Semestre de 2020



Programas de: Doctorado en Ingeniería Química: Mención Procesos Limpios y Maestría en Tecnologías Ambientales – Convenio SECITI – FI para Perfeccionamiento de Actividades de Posgrado

Curso: ***Tópicos en Termodinámica Avanzada***

Unidad Ejecutora: **Instituto de Ingeniería Química**

Tipo de Asignatura y Destinatarios:

- **Curso Optativo para Alumnos inscriptos en el Doctorado en Ingeniería Química: Mención Procesos Limpios**
- **Curso Optativo para Alumnos inscriptos en la Maestría en Tecnologías Ambientales**
- **Curso de Perfeccionamiento para Profesionales**

Docente Responsable: **Dr. Marcelo Zabaloy** (PLAPIQUI-CONICET – Universidad Nacional del Sur) – Bahía Blanca

Asignación Horaria: **50 hs totales**

Cronograma Día	Horario	Actividad
1 (Lunes)	9:00 a 12:00 y 14:00 a 17:00	Clases teóricas y de uso de software
2 (Martes)	9:00 a 12:00 y 14:00 a 17:00	Clases teóricas y de uso de software
3 (Miércoles)	9:00 a 12:00 y 14:00 a 17:00	Clases teóricas y de uso de software
4 (Jueves)	9:00 a 12:00 y 14:00 a 17:00	Clases teóricas y de uso de software
5 (Viernes)	9:00 a 12:00 y 14:00 a 17:00	Clases teóricas y de uso de software
6 (Sábado)	9:00 a 12:00 y 14:00 a 17:00	Clases teóricas y de uso de software
7	A confirmar	Exámenes: teórico y de uso de Software

Evaluación

Habrá un primer tramo intensivo que consistirá en el dictado presencial de las clases. Esto se realizará durante 6 días (Lunes a Sábado), 6 horas por día (tres por la mañana y tres por la tarde).

Durante las clases se asignarán prácticas, a ser resueltas por los alumnos con ayuda de software.

Los alumnos completarán la resolución de las prácticas en parte durante los 6 días de dictado de clases, y en gran parte con posterioridad a esas fechas, enviando los informes correspondientes al instructor vía e-mail.

El instructor responderá consultas vía video conferencia.

Una vez completadas las prácticas por parte de los alumnos, el instructor viajará nuevamente a San Juan para tomar, durante el día 7, un examen sobre uso de software y otro teórico.

El instructor permanecerá en San Juan entre 2 y 3 días en su segundo viaje, al efecto de completar las correcciones y labrar el acta oficial con las notas finales.



MINISTERIO DE EDUCACIÓN
UNIVERSIDAD NACIONAL DE SAN JUAN



INSTITUTO DE INGENIERÍA QUÍMICA



FACULTAD DE INGENIERÍA

Al final del curso los alumnos rendirán un par de exámenes, uno de ellos con ayuda de computadoras.

Duración: 50 horas.

Modalidad: Se impartirán clases presenciales en el aula y en el laboratorio de computación. Se asignarán prácticas que deberán ser resueltas con ayuda de software.

Lugar de Dictado: Aula de Posgrado del Departamento de Posgrado de la Facultad de Ingeniería

Cupo: 20 asistentes

Arancel:

4000 \$ a personas no pertenecientes a la UNSJ

2000 \$ para personal perteneciente a la UNSJ

1000 \$ para integrantes del nucleamiento de Ingeniería Química



Tópicos en Termodinámica Avanzada

Objetivo

Los objetivos del presente curso posgrado son: (a) comprender los diagramas de fases de compuestos puros y de sistemas binarios, ternarios y multicomponente; (b) comprender la estructura básica de los modelos y métodos de cálculo que se utilizan para generarlos; y, (c) aplicar apropiadamente programas de cómputo del equilibrio entre fases a problemas diversos.

Programa

1. Introducción.
2. Compuestos Puros: Comportamiento Fenomenológico
3. Mezclas Fluidas: Comportamiento Fenomenológico.
4. Sistemas binarios: Líneas críticas, azeotrópicas y de equilibrio líquido- líquido-vapor. Clasificación de van Konynenburg y Scott.
5. Diagramas de fases isotérmicos, isobáricos e isopléticos.
6. Clasificación de Fluidos de Yacimiento basada en envolventes de fases.
7. Comportamiento de fases de sistemas ternarios.
8. Criterios de Equilibrio entre fases. Fugacidad.
9. Ecuaciones de estado. Ecuación del Virial. Ecuación de van der Waals (VdW). Ecuaciones de Peng-Robinson (PR) y SRK. Variantes. Curva espinodal. Principio de estabilidad mecánica. Inestabilidad, meta-estabilidad y estabilidad global. Ecuación del Virial para mezclas: relación con reglas de mezclado para modelos VdW, PR y SRK. Identificación de fases. Flash multifásico. Estimación de parámetros.
10. Energía de Gibbs de Exceso (g^E) y coeficientes de actividad. Modelos termodinámicos. Equilibrio líquido-líquido.
11. Marco General: Conclusión.

Bibliografía seleccionada

LIBROS

- E.A. Brignole, S. Pereda. Volume 3: Phase Equilibrium Engineering, 1st Edition. Print Book. Expected Release Date: 12 Jun 2013. ISBN: 978-0-444-56364-4.
- Elliott R., Lira, C.T. (1999) Introductory Chemical Engineering Thermodynamics, Prentice Hall PTR. New Jersey.
- Chemical, Biochemical, and Engineering Thermodynamics by Stanley I. Sandler (2006)
- Thermodynamics: Fundamentals for Applications (Cambridge Series in Chemical Engineering) by J. P. O'Connell and J. M. Haile (2005)
- Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics (The McGraw-Hill Series in Civil and Environmental Engineering) by J.M. Smith, Hendrick C Van Ness, and Michael Abbott (2001)
- B.E. Poling, J.M. Prausnitz, J.P. O'Connell "The Properties of Gases and Liquids", 5th Edition, McGraw-Hill, New York (2000)
- 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)



Models for Thermodynamic and Phase Equilibria Calculations (Chemical Industries) by Stanley I. Sandler (1993)

Polymer Phase Diagrams. R. Koningsveld, W.H. Stockmayer, E. Nies. Oxford. University Press. Oxford New York. (2001)

ARTÍCULOS

Matías J. Molina, Sabrina B. Rodríguez-Reartes, Marcelo S. Zabaloy. Computation and Analysis of Binary Multiphase Isochores. Fluid Phase Equilibria. Aceptado para su publicación el 14/Junio/2019. Article reference FLUID12227.

Gerardo O. Pisoni, Martín Cismondi, Marcelo S. Zabaloy. Computation and analysis of surfaces and lines of three-phase equilibrium in ternary systems: Application illustrated for a CO₂(1)+H₂O(2)+2-propanol(3)-like system. Fluid Phase Equilibria, 457 (2018) 18-37.

Gerardo O. Pisoni, Martín Cismondi, Marcelo S. Zabaloy, Lucio Cardozo-Filho, Detailed calculation of complex fluid phase equilibrium sections for ternary systems, The Journal of Supercritical Fluids, Volume 130, 2017, Pages 399-414.

J.I. Ramello, J.M. Milanesio, G.O. Pisoni, M. Cismondi, M.S. Zabaloy. Direct detection of double retrograde behavior in binary systems for equation of state models. Fluid Phase Equilibria 426 (2016) 131-144

M. Cismondi, M.L. Michelsen, M.S. Zabaloy. Automated generation of phase diagrams for binary systems with azeotropic behavior. Ind. Eng. Chem. Res., 2008, 47 (23), 9728–9743

M.S. Zabaloy. Cubic Mixing Rules. Ind. Eng. Chem. Res. 2008, 47, 5063–5079.

M. Cismondi, M. L. Michelsen, M. S. Zabaloy. Automated generation of phase diagrams for supercritical fluids from equations of state. Theory & Thermodynamics. 11th European Meeting on Supercritical Fluids. May 4 – 7, 2008. Barcelona, Spain. [Trabajo #192. Artículo Completo en USB-DRIVE del Congreso: OC_TT_7.pdf].

Martín Cismondi, Diego N. Nuñez, Marcelo S. Zabaloy, Esteban A. Brignole, Michael L. Michelsen, Jørgen M. Møllerup. GPEC: A Program for Global Phase Equilibrium Calculations in Binary Systems.. EQUIFA-SE 2006: VII Conferencia Iberoamericana sobre Equilibrio entre Fases para el Diseño de Procesos. Morelia, Michoacán, México. Octubre 21-25, 2006. Artículo completo en CD-ROM del congreso.

Rodríguez-Reartes, S. B., Cismondi, M., Zabaloy, M.S. Computation of solid–fluid–fluid equilibria for binary asymmetric mixtures in wide ranges of conditions. doi:10.1016/j.supflu.2011.02.004. The Journal of Supercritical Fluids, Volume 57, Issue 1, (May 2011), Pages 9-24.

Rodríguez-Reartes, S. B., Cismondi, M., Zabaloy, M.S. Modeling Approach for the High Pressure Solid–Fluid Equilibrium of Asymmetric Systems. dx.doi.org/10.1021/ie101620p. Ind. Eng. Chem. Res., (2011), 50 (5), pp 3049–3059.

Cismondi, M., Møllerup, J.M., Zabaloy, M.S. Equation of state modeling of the phase equilibria of asymmetric CO₂ + n-alkane binary systems using mixing rules cubic with respect to mole fraction. Journal of Supercritical Fluids, 55, 671-681 (2010)

J. M. Milanesio, M. Cismondi, L. Cardozo-Filho, L. M. Quinzani and M. S. Zabaloy. Phase Behavior of Linear Mixtures in the Context of Equation of State Models. Ind. Eng. Chem. Res. 2010, 49, 2943–2956.

G. Pisoni, M. Cismondi, L. Cardozo-Filho, M.S. Zabaloy. Critical end line topologies for ternary systems. J. of Supercritical Fluids 89 (2014) 33–47. Editor-in-Chief's Featured Article May 2014.

On the Problem of Phase Identification in a Mixture. S.I. Sandler, L.R. Dodd. Fluid Phase Equilibria 31, 313-316 (1986).