GUÍA DOCENTE ABREVIADA DE LA ASIGNATURA

G792 - Ampliación de Termodinámica

Grado en Ingeniería Química

Curso Académico 2016-2017

1. DATOS IDENTIFICATIVOS					
Título/s	Grado en Ingeniería Química			Tipología y Curso	Optativa. Curso 4
Centro	Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales y de Telecomunicación				
Módulo / materia	MATERIA OPCIÓN A: INGENIERÍA QUÍMICA FUNDAMENTAL MÓDULO OPTATIVO				
Código y denominación	G792 - Ampliación de Termodinámica				
Créditos ECTS	6	Cuatrimestre	Cuatrimestral (2)		
Web					
Idioma de impartición	Español	English friendly	No	Forma de	Presencial

Departamento	DPTO. INGENIERIAS QUIMICA Y BIOMOLECULAR
Profesor responsable	MANUEL ALVAREZ GUERRA
E-mail	manuel.alvarezg@unican.es
Número despacho	E.T.S.I. Industriales y Telecomunicación. Planta: - 5. DESPACHO (S5005)
Otros profesores	EUGENIO DANIEL GORRI CIRELLA

3.1 RESULTADOS DE APRENDIZAJE
- Que el alumno sea capaz de manejar los principios termodinámicos de interés en el ámbito de la Ingeniería Química.
- Que el alumno sea capaz de aplicar modelos termodinámicos clásicos para describir el comportamiento de fluidos puros y mezclas sencillas.
- Que el alumno sea capaz de identificar modelos termodinámicos avanzados que se utilizan en la actualidad para modelar sistemas complejos.
- Que el alumno sea capaz de conocer diferentes herramientas matemáticas actualmente existentes para resolver problemas termodinámicos y de poder aplicarlas para dar respuesta a necesidades habituales que surgen en el ámbito profesional del ingeniero químico.

4. OBJETIVOS

Comprender conceptos, principios, relaciones y base experimental de la teoría termodinámica que amplíen los estudiados en asignaturas previas del grado, desde un punto de vista fundamentalmente práctico y aplicado.
Profundizar en la aplicación práctica de modelos termodinámicos clásicos como ecuaciones de estado cúbicas o modelos de coeficientes de actividad. Introducir al estudiante en modelos más avanzados y actuales basados en mecánica estadística y termodinámica molecular, de interés para describir el comportamiento de fluidos complejos.
Resolver casos prácticos que permitan conocer a los estudiantes las posibilidades que ofrecen diferentes herramientas informáticas para abordar problemas termodinámicos que pueden necesitar utilizar en su futuro profesional: software general ampliamente disponible (p.e. Excel), simuladores de procesos químicos (p.e. Aspen Plus), software específico (p.e. COSMOtherm).

6. ORGANIZACIÓN DOCENTE

	CONTENIDOS
1	1. Revisión de aspectos termodinámicos básicos. Principios del equilibrio de fases. Potencial químico, fugacidad.
2	2. Modelos termodinámicos clásicos: Fundamentos y aplicaciones prácticas utilizando software general (Excel, MATLAB), simuladores de procesos químicos (Aspen Plus) y software específico (Thermosolver, UNIFAC) 2.1. Ecuaciones de estado cúbicas. Cálculos de densidad de fluidos y de fugacidades. Extensión a mezclas multicomponentes. 2.2. Métodos de contribución de grupos para estimar propiedades. Aplicaciones a la estimación de contantes críticas, densidades, capacidades caloríficas, entalpías de formación. Estimación de parámetros de interés ambiental con EPI Suite. 2.3. Modelos de coeficientes de actividad. Métodos de contribución de grupos (UNIQUAC, UNIFAC) 2.4. Aplicaciones al cálculo de equilibrio de fases: (a) VLE: Ajuste de datos experimentales para obtener coeficientes de actividad; (b) LLE: Predicción de la separación de fases y composiciones en equilibrio; (c) Equilibrio en disoluciones de electrolitos; (d) VLE a altas presiones: punto de burbuja, punto de rocío, evaporación flash. 2.5. Equilibrio químico: sistemas con reacciones múltiples. Equilibrio en sistemas heterogéneos.
3	3. Modelos termodinámicos avanzados: introducción a los fundamentos y ejemplos de aplicaciones prácticas 3.1. Conceptos básicos de mecánica estadística y termodinámica molecular 3.2. Modelos SAFT (Statistical Associating Fluid Theory) y CPA EoS (Cubic-Plus-Association Equation of State) 3.3. Introducción a métodos de simulación computacional: Dinámica Molecular y Método de Monte Carlo 3.4. Métodos basados en cálculos de mecánica cuántica: Método COSMO-RS. Aplicaciones prácticas utilizando software avanzado (COSMOtherm)

7. MÉTODOS DE LA EVALUACIÓN

Descripción	Tipología	Eval. Final	Recuper.	%
Prueba Objetiva 1	Examen escrito	No	Sí	10,00
Portafolio 1	Trabajo	No	Sí	30,00
Presentación Portafolio 1	Otros	No	Sí	10,00
Prueba Objetiva 2	Examen escrito	No	Sí	10,00
Portafolio 2	Trabajo	No	Sí	30,00
Presentación Portafolio 2	Otros	No	Sí	10,00
TOTAL				100,00

Observaciones

La evaluación continua se basa en la realización de dos pruebas objetivas (semanas 8 y 15 del cuatrimestre) y la entrega y presentación oral de dos portafolios sobre las actividades y aplicaciones prácticas planteadas.

Observaciones para alumnos a tiempo parcial

Se conservarán los resultados obtenidos por los alumnos a tiempo parcial durante un curso académico.

8. BIBLIOGRAFÍA Y MATERIALES DIDÁCTICOS

BÁSICA

J.R. Elliott, C.T. Lira. “Introductory Chemical Engineering Thermodynamics, 2nd ed.” Prentice Hall Pearson Education, New Jersey, 2012.

M. Koretsky, "Engineering and chemical thermodynamics", 2nd edition, Wiley, Hoboken, New Jersey, 2013.

B. Poling, J. M. Prausnitz, J. O'Connell. “The Properties of Gases and Liquids”, 5th ed., McGraw-Hill, New York, 2001.

Esta es la Guía Docente abreviada de la asignatura. Tienes también publicada en la Web la información más detallada de la asignatura en la Guía Docente Completa.