Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales y de Telecomunicación

GUÍA DOCENTE DE LA ASIGNATURA

G792 - Ampliación de Termodinámica

Grado en Ingeniería Química
Optativa. Curso 4

Curso Académico 2017-2018

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 impartición	Presencial

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

2. CONOCIMIENTOS PREVIOS

Se recomienda haber cursado la asignatura Termodinámica y Transmisión de Calor y disponer de los conocimientos básicos de fundamentos matemáticos impartidos en el primer curso del grado.

3. COMPETENCIAS GENÉRICAS Y ESPECÍFICAS DEL PLAN DE ESTUDIOS TRABAJADAS

Competencias Genéricas	Nivel
Conocimiento en materias básicas y tecnológicas, que les capacite para el aprendizaje de nuevos métodos y teorías, y les dote de versatilidad para adaptarse a nuevas situaciones.	2
Competencias Específicas	**Nivel**
Conocimientos de termodinámica aplicada y transmisión de calor. Principios básicos y su aplicación a la resolución de problemas de ingeniería. Conocimientos de los principios básicos de la mecánica de fluidos y su aplicación a la resolución de problemas en el campo de la ingeniería. Cálculo de tuberías, canales y sistemas de fluidos.	3
Capacidad para el diseño y gestión de procedimientos de experimentación aplicada, especialmente para la determinación de propiedades termodinámicas y de transporte, y modelado de fenómenos y sistemas en el ámbito de la Ingeniería Química, sistemas con flujo de fluidos, transmisión de calor, operaciones de transferencia de materia, cinética de las reacciones químicas y reactores.	1
Competencias Transversales	**Nivel**
Habilidad para trabajar de forma autónoma.	2
Trabajo en un equipo con carácter interdisciplinar.	1

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).

5. MODALIDADES ORGANIZATIVAS Y MÉTODOS DOCENTES	
ACTIVIDADES	HORAS DE LA ASIGNATURA
ACTIVIDADES PRESENCIALES	
HORAS DE CLASE (A)	
- Teoría (TE)	20
- Prácticas en Aula (PA)	10
- Prácticas de Laboratorio (PL)	30
- Horas Clínicas (CL)	
Subtotal horas de clase	60
ACTIVIDADES DE SEGUIMIENTO (B)	
- Tutorías (TU)	15
- Evaluación (EV)	8
Subtotal actividades de seguimiento	23
Total actividades presenciales (A+B)	83
ACTIVIDADES NO PRESENCIALES	
Trabajo en grupo (TG)	10
Trabajo autónomo (TA)	57
Tutorías No Presenciales (TU-NP)	
Evaluación No Presencial (EV-NP)	
Total actividades no presenciales	67
HORAS TOTALES	150

6. ORGANIZACIÓN DOCENTE

	CONTENIDOS	TE	PA	PL	CL	TU	EV	TG	TA	TU-NP	EV-NP	Semana
1	1. Revisión de aspectos termodinámicos básicos. Principios del equilibrio de fases. Potencial químico, fugacidad.	2,00	2,00	0,00	0,00	1,00	0,00	2,00	3,00	0,00	0,00	1
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.	8,00	3,00	15,00	0,00	7,00	4,00	4,00	27,00	0,00	0,00	2-8
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)	10,00	5,00	15,00	0,00	7,00	4,00	4,00	27,00	0,00	0,00	8-15
TOTAL DE HORAS		20,00	10,00	30,00	0,00	15,00	8,00	10,00	57,00	0,00	0,00	

Esta organización tiene carácter orientativo.

TE	Horas de teoría
PA	Horas de prácticas en aula
PL	Horas de prácticas de laboratorio
CL	Horas Clínicas
TU	Horas de tutoría
EV	Horas de evaluación
TG	Horas de trabajo en grupo
TA	Horas de trabajo autónomo
TU-NP	Tutorías No Presenciales
EV-NP	Evaluación No Presencial

7. MÉTODOS DE LA EVALUACIÓN

Descripción	Tipología	Eval. Final	Recuper.	%
Prueba Objetiva 1	Examen escrito	No	Sí	10,00

Calif. mínima	0,00
Duración	
Fecha realización	Semana 8
Condiciones recuperación	Prueba semana 15
Observaciones	Evaluación conceptual de los contenidos correspondientes a las 8 primeras semanas

Portafolio 1	Trabajo	No	Sí	30,00

Calif. mínima	0,00
Duración	
Fecha realización	Semana 8
Condiciones recuperación	
Observaciones	

Presentación Portafolio 1	Otros	No	Sí	10,00

Calif. mínima	0,00
Duración	
Fecha realización	Semana 8
Condiciones recuperación	
Observaciones	

Prueba Objetiva 2	Examen escrito	No	Sí	10,00

Calif. mínima	0,00
Duración	
Fecha realización	Semana 15
Condiciones recuperación	Prueba final en fecha establecida por la Escuela
Observaciones	Evaluación conceptual de los contenidos correspondientes a las semanas 8-14

Portafolio 2	Trabajo	No	Sí	30,00

Calif. mínima	0,00
Duración	
Fecha realización	Semana 15
Condiciones recuperación	
Observaciones	

Presentación Portafolio 2	Otros	No	Sí	10,00

Calif. mínima	0,00
Duración	
Fecha realización	Semana 15
Condiciones recuperación	
Observaciones	

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.
Complementaria
G.M. Kontogeorgis, G.K. Folas. “Thermodynamic Models for Industrial Applications: from Classical and Advanced Mixing Rules to Association Theories.” Wiley, Reino Unido, 2010.
A. Z. Panagiotopoulos. “Essential Thermodynamics”. Drios Press, Princeton, NJ, 2012.
J. R. Solana. “Perturbation Theories for the Thermodynamic Properties of Fluids and Solids”, CRC Press, Boca Raton, FL, 2013.
J. M. Prausnitz, R. Lichtenthaler, E. Gomes de Azevedo. “Termodinámica molecular de los equilibrios de fases”, 3ª ed., Prentice Hall, Madrid, 2000.
J.M. Smith, H.C. Van Ness, M.M. Abbott, “Introducción a la Termodinámica en Ingeniería Química”, 7ª Ed., McGraw-Hill, 2007.
S.I. Sandler, "Using Aspen Plus in Thermodynamics Instruction", Wiley, NJ, 2015.

9. SOFTWARE

PROGRAMA / APLICACIÓN	CENTRO	PLANTA	SALA	HORARIO
Aspen Plus	ETSIIT			
COSMOtherm	ETSIIT			
Thermosolver (software libre disponible en el sitio web: http://cbee.oregonstate.edu/education/Thermosolver/)	ETSIIT			
EPI SuiteTM v4.11 (disponible en el sitio web: http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuitedl.htm)	ETSIIT			

10. COMPETENCIAS LINGÜÍSTICAS

- ☐ Comprensión escrita
- ☐ Comprensión oral
- ☐ Expresión escrita
- ☐ Expresión oral
- ☐ Asignatura íntegramente desarrollada en inglés

Observaciones