

## Reflexiones sobre la enseñanza de la termodinámica en ingeniería química

### *Reflections on the teaching of thermodynamics in chemical engineering*

**Dr. Enrique Rodolfo Bazúa Rueda\***

Universidad Nacional Autónoma de México, UNAM, Facultad de Química  
Correo-e (*e-mail*): erbr@unam.mx

\*Autor a quien debe dirigirse la correspondencia

Recibido: Abril 10, 2021

Aceptado: Mayo 15, 2021

#### Resumen

Desde 1974, hace ya casi medio siglo, una vez concluido el doctorado en la Universidad de California en Berkeley e incorporado como profesor de tiempo completo en la Facultad de Química de la Universidad Nacional Autónoma de México, he dedicado mis actividades académicas a enseñar termodinámica, principalmente a ingenieros químicos. He impartido cursos a nivel de licenciatura y posgrado y cursos de actualización a un número considerable de ingenieros en el ejercicio profesional. En este artículo comento sobre las reflexiones sobre la enseñanza de la termodinámica en ingeniería química que forman la esencia de la metodología que he seguido. Los profesores debemos establecer claramente los objetivos que perseguimos en la enseñanza. No es nada más transmitir conocimientos, la enseñanza es mucho más. Incidimos positiva o negativamente de acuerdo con nuestra actitud hacia los alumnos. Ellos son el objetivo de nuestro quehacer docente. Si somos PROFESORES o MENTORES -con mayúsculas- entonces, debemos ir más allá de solamente enseñar una disciplina, debemos incorporar elementos que los ayuden a mejorar su autoestima, desarrollar sus habilidades intelectuales y, sobre todo, a crecer como personas. Las actitudes de nosotros hacia los alumnos: Respeto, consideración y motivación, son esenciales para un buen desempeño como docente. Establecer retos que los perciban con entusiasmo y se comprometan es un ingrediente importante para lograr su desarrollo integral como persona. Los objetivos que he perseguido en la enseñanza de la termodinámica se resumen a continuación:

- El objetivo general que he tenido es que el alumno desarrolle su capacidad intelectual. La enseñanza de la termodinámica ha sido el vehículo para lograrlo.
- El enfoque que he seguido en la docencia es el aprendizaje por resolución de problemas.
- Me enfoco en desarrollar la habilidad para resolver problemas complejos que están a su alcance.
- Los alumnos aprenden cuando ellos resuelven un problema, no cuando ven cómo el profesor lo resuelve en clase. Aunque no puedan llegar a la solución, el haberlo intentado tiene un valor de aprendizaje importante y cuando ven la solución *LES CAE EL VEINTE*.
- Poner retos importantes que los lleven a crecer intelectualmente y aumentar su autoestima.
- Los alumnos deben realizar un proyecto que involucre los conocimientos aprendidos en la solución de un problema complejo.
- Estar dispuesto a ayudar cuando se atorán y valorar cada pregunta.
- El procedimiento y los instrumentos de evaluación deben motivar al estudiante a realizar el esfuerzo por aprender.
- El examen debe cumplir una finalidad de aprendizaje en sí mismo. Al diseñar un examen debemos preguntarnos ¿Qué quiero que aprendan al resolver el examen?
- Los problemas del examen no son más difíciles que los resueltos en clase o en la serie de problemas. Me permiten diferenciar la capacidad de razonamiento de cada estudiante.
- Los exámenes son un indicador de que tanto se están cumpliendo los objetivos de aprendizaje del curso y el desarrollo de las habilidades para resolver problemas.
- Trato de ser justo en la asignación de la calificación final y que sea un reflejo del esfuerzo que puso cada estudiante en el curso y sea una recompensa al esfuerzo realizado.

**Palabras clave:** Enseñanza, termodinámica, ingeniería química

#### Abstract

*Since 1974, almost half a century ago, after completing my doctorate at the University of California at Berkeley, and incorporated as a full-time professor at the Faculty of Chemistry at the National Autonomous University of Mexico, I have dedicated my academic activities to teaching thermodynamics, mainly chemical engineers. I have taught undergraduate and graduate level courses and refresher courses to a considerable number of practicing engineers. In this article I comment on the reflections on the teaching of thermodynamics in chemical engineering that form the essence of the methodology that I have*

---

followed. Teachers must clearly establish the objectives we pursue in teaching. It is not just transmitting knowledge, teaching is much more. We influence positively or negatively according to our attitude towards students. They are the objective of our teaching work. If we are MENTORS -with capital letters- then, we must go beyond just teaching a discipline, we must incorporate elements that help them improve their self-esteem, develop their intellectual abilities and, above all, grow as people. Our attitudes towards students: Respect, consideration and motivation, are essential for a good performance as a teacher. Establishing challenges that are enthusiastically perceived and committed is an important ingredient to achieve their integral development as a person. The goals I have pursued in teaching thermodynamics are summarized below:

- The general objective that I have had is for the student to develop their intellectual capacity. The teaching of thermodynamics has been the vehicle to achieve this.
- The approach I have followed in teaching is problem-solving learning.
- I focus on developing the ability to solve complex problems that are within your reach.
- Students learn when they solve a problem, not when they see how the teacher solves it in class. Although they cannot reach the solution, having tried it has an important learning value and when they see the solution, "They can hear and they can answer because they have comprehended the issue".
- Set important challenges that lead them to grow intellectually and increase their self-esteem.
- Students must carry out a project that involves the knowledge learned in the solution of a complex problem.
- Be willing to help when they get stuck and value each question.
- The evaluation procedure and instruments must motivate the student to make the effort to learn.
- The exam must serve a learning purpose in itself. When designing an exam we must ask ourselves what do I want them to learn by solving the exam?
- Test problems are no more difficult than those solved in class or in the problem series. They allow me to differentiate the reasoning ability of each student.
- The exams are an indicator of how well the learning objectives of the course and the development of problem solving skills are being met.
- I try to be fair in assigning the final grade and that it is a reflection of the effort that each student put into the course and is a reward for the effort made.

**Keywords:** Teaching, thermodynamics, chemical engineering

## Antecedentes

Cursé la carrera de ingeniería química en la Facultad de Química de la Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM) de 1964 a 1968 y la formación que recibí en química, matemáticas, operaciones unitarias, cinética química, reactores y fenómenos de transporte fue excelente. Sin embargo, en la disciplina de la termodinámica tuve una formación muy deficiente, **me atiborraron de fórmulas que no entendía para qué servían** y, por consiguiente, no pensaba, ni por asomo, que podría ser la disciplina a la que dedicara mis esfuerzos profesionales. Lo que me apasionaba era la aplicación de las matemáticas en la solución de problemas industriales y la ingeniería de reactores y fenómenos de transporte eran el vehículo idóneo. Pero el destino tenía otros planes para mí y comencé a tropezarme con la termodinámica desde la tesis de licenciatura.

**Primer tropiezo.** El proyecto de tesis de licenciatura, elaborada en 1968-1969, versaba sobre el desarrollo y programación en Fortran del: "Modelo matemático de un reactor de síntesis de amoniaco". El modelo era un conjunto de ecuaciones diferenciales parciales que describían los balances de materia y energía con reacción química. Los cursos de reactores y fenómenos de transporte proporcionaron los elementos para la formulación del modelo. Para su solución se emplearon métodos numéricos: Newton-Raphson, Runge-Kutta y diferencias finitas que tuve que aprender sobre la marcha. Por otro lado, el modelo requería, como parte fundamental, la evaluación de propiedades termodinámicas (capacidad calorífica y fugacidades) y de transporte (viscosidad, conductividad térmica y difusividad) de una

---

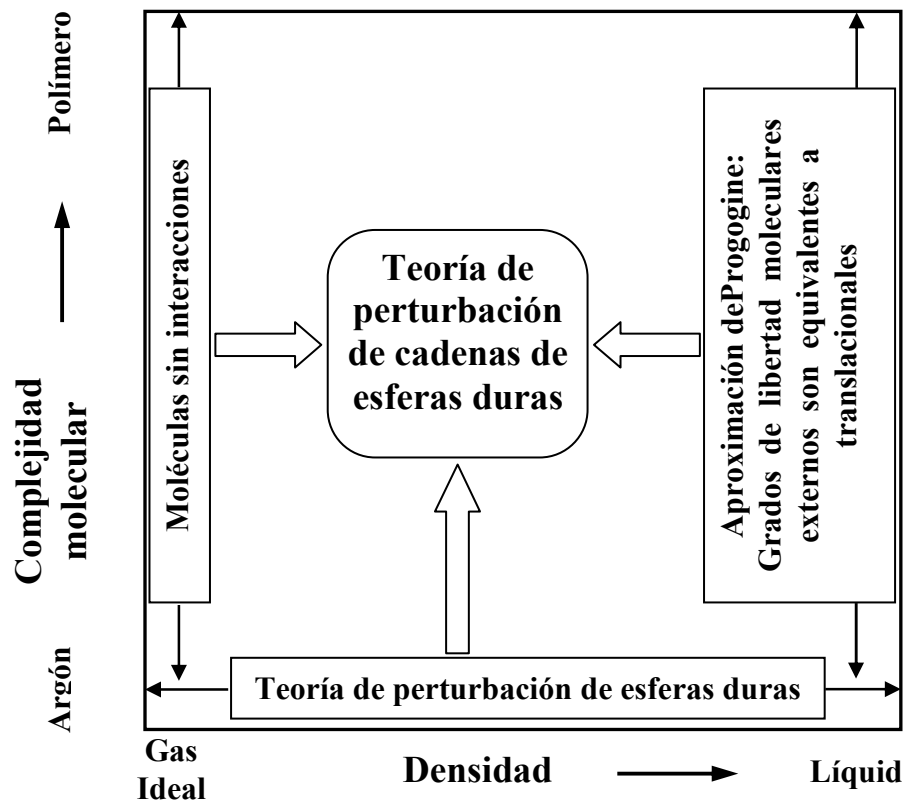
mezcla de nitrógeno, hidrógeno y amoníaco, como componentes principales, a la presión de 400 atmósferas, presión de operación del reactor. Considerar la mezcla como gas ideal era impropio y tuve que aprender cómo evaluarlas para una mezcla de gases reales. Descubrí en 1968 el libro "The Properties of Gases and Liquids" de Reid y Sherwood donde aprendí a utilizar ecuaciones de estado y los métodos de estimación basados en estados correspondientes. Esta fue la primera incursión que tuve a la aplicación de la termodinámica a un proceso industrial.

**Segundo tropiezo.** En el inicio de los estudios de posgrado, durante el primer semestre en 1969, tomé el curso de termodinámica que impartía el Prof. John M. Prausnitz basado en su libro "Molecular Thermodynamics of Fluid Phase Equilibria". Con este curso la termodinámica comenzó a tener sentido y entendí que, para las aplicaciones en el mundo real, se tenían que conjuntar armónicamente dos aspectos. Primero, las ecuaciones fundamentales de la termodinámica eran la base para desarrollar las ecuaciones generales que se aplican a la solución de problemas que involucren mezclas de sistemas reales para cualquier variedad de componentes. Segundo, el libro enfatiza la necesidad de tener modelos a nivel molecular que describan el comportamiento de mezclas reales de muy variada naturaleza. Este curso dejó una huella profunda y labró las bases sobre las que he basado la enseñanza de la termodinámica.

**Tercer tropiezo.** Mi pasión por las matemáticas y los fenómenos de transporte me llevaron a escoger el tema de tesis de maestría: "Theory of the internal viscosity in polymer chain dynamics", bajo la supervisión del Prof. Michael C. Williams, quien a su vez fue alumno del Prof. Robert B. Bird, gurú de los fenómenos de transporte, tesis que concluí en 1971. Sin embargo, la marca que había dejado el curso de Prausnitz empezó a surtir efecto. A la par de la realización de la tesis de maestría llevé a cabo mi primera incursión formal a la termodinámica con un trabajo de investigación que dio como resultado mi primera publicación en termodinámica: "Vapor-liquid equilibria for cryogenic mixtures". E.R. Bazúa y J.M. Prausnitz, *Cryogenics*. 11 (2):114-119 (April 1971).

**Cuarto tropiezo y capturado definitivamente.** Para el doctorado la suerte estaba echada y no dudé que quería continuar trabajando bajo la asesoría del Prof. John M. Prausnitz. Esta ha sido una de las decisiones más importantes que he tomado en la vida y ha marcado mi carrera profesional como profesor de termodinámica. La tesis doctoral llevó por título: "Statistical Thermodynamics of Hydrocarbon Mixtures for Process Design" y la concluí en 1975. En ella desarrollé un modelo de ecuación de estado para representar las propiedades de mezclas con moléculas de muy diferentes tamaños. Parte del gas ideal y conjuga la teoría de perturbación de esferas duras, válida para moléculas esféricas pequeñas como el argón, y la teoría de Prigogine para líquidos, válida para moléculas grandes de muy variada complejidad. Me adentré entonces en el modelado termodinámico para calcular propiedades de mezclas de interés industrial. La esencia del modelo está representada en el diagrama de la

Figura 1 y son las bases para el desarrollo de lo que se conoce como la *Teoría de perturbación de cadenas de esferas duras (PHCT: Perturbed-Hard-Chain Theory)*.



**Figura 1. Diagrama que ilustra las bases del desarrollo de los modelos de Teoría de perturbación de cadenas de esferas duras (PHCT: Perturbed-Hard-Chain Theory)**

Todos los alumnos del Prof. Prausnitz reconocemos la profunda influencia que ha tenido sobre nosotros y es reconocido como uno de los fundadores de la ingeniería química moderna. El Instituto Americano de Ingeniería Química (AIChE) ha rendido homenaje a los fundadores dedicando un número especial de la revista AIChE Journal. Los primeros cuatro son los siguientes:

Neal R Admunson: Rapid evolution of chemical engineering science (July 2013)

R. Byron Bird: The integration of transport phenomena into chemical engineering (April 2014)

**John M. Prausnitz: Bridging abstractions and realities (September 2015)**

Roger Sanders: Intellectual leader of process systems engineering (September 2016)

---

En el homenaje al Prof. Prausnitz, John P. O'Connell, uno de sus alumnos escribió la siguiente reflexión que sintetiza su legado:

*This Founders Tribute issue honors John Prausnitz as an exceptional intellectual leader, scholar, and educator and summarizes his impact on chemical engineering. **John's early vision of connecting fundamental molecular theory to practical thermodynamic applications with Molecular Thermodynamics was an essential element in our profession's parade shift from empiricism to engineering science.** John's writings and lectures have transformed our core knowledge and guided its utilization into areas well outside traditional engineering bounds. Further, he has vigorously advocated for technology to be considered in the context of all of life and as a human enterprise. Finally, John's personal interactions across generations and disciplines have inspired the personal and professional development of a vast community of students, coworkers, and colleagues. In countless ways, John Prausnitz has influenced the contemporary foundation and functioning of chemical engineering and of realms beyond. © 2015 American Institute of Chemical Engineers AIChE J., 61: 2675–2688, 2015*

### Contexto de la enseñanza de la termodinámica

Los eventos que describí en el apartado anterior incidieron decisivamente en cómo he abordado la enseñanza de la termodinámica a los alumnos de ingeniería química. Desde un inicio he basado la enseñanza de la termodinámica bajo las siguientes premisas:

- ✓ Las fórmulas, ecuaciones y expresiones de la termodinámica deben presentarse en el contexto de dónde vienen y cuáles son sus aplicaciones
- ✓ Los modelos forman una parte esencial de la aplicación de la termodinámica, sobre todo en sistemas reales de interés industrial
- ✓ Enfatizo el uso de información experimental para resolver problemas. Los datos experimentales son fundamentales para la aplicación de la termodinámica, ya sea en forma directa o a través de modelos
- ✓ La conexión con el mundo real debe estar siempre presente.

Como lo esboza el Prof. Prausnitz, los problemas y las soluciones están en el mundo real y la termodinámica está en el mundo abstracto. Para resolver un problema debemos:

- 1) Primero formularlo, esto es, traducir el problema del mundo real al mundo abstracto de la termodinámica;
- 2) Segundo, resolver el problema en el marco de la termodinámica; y
- 3) Tercero, traducir el resultado del mundo abstracto al mundo real, esto es, ¿Qué indica la solución sobre el comportamiento del mundo real que hemos analizado?

Los lineamientos generales en que he basado la docencia de la termodinámica son los siguientes:

- ✓ Basar la enseñanza en la solución de problemas

- ✓ Conectar siempre con aplicaciones relevantes a la ingeniería química
- ✓ Enfatizar la utilización de los datos experimentales en los cálculos termodinámicos
- ✓ Adentrar a los alumnos en la aplicación de modelos termodinámicos para los cálculos en procesos industriales
- ✓ Aplicar los conceptos desarrollados en la solución de problemas desde las primeras semanas del curso. Comenzar las aplicaciones con modelos sencillos (solución ideal y gas ideal) y transitar en forma ordenada hacia modelos de sistemas reales (coeficientes de actividad y ecuaciones de estado).

Para explicar el contexto de la enseñanza de la termodinámica plasmé las diferentes piezas en el diagrama que presento en la Figura 2.

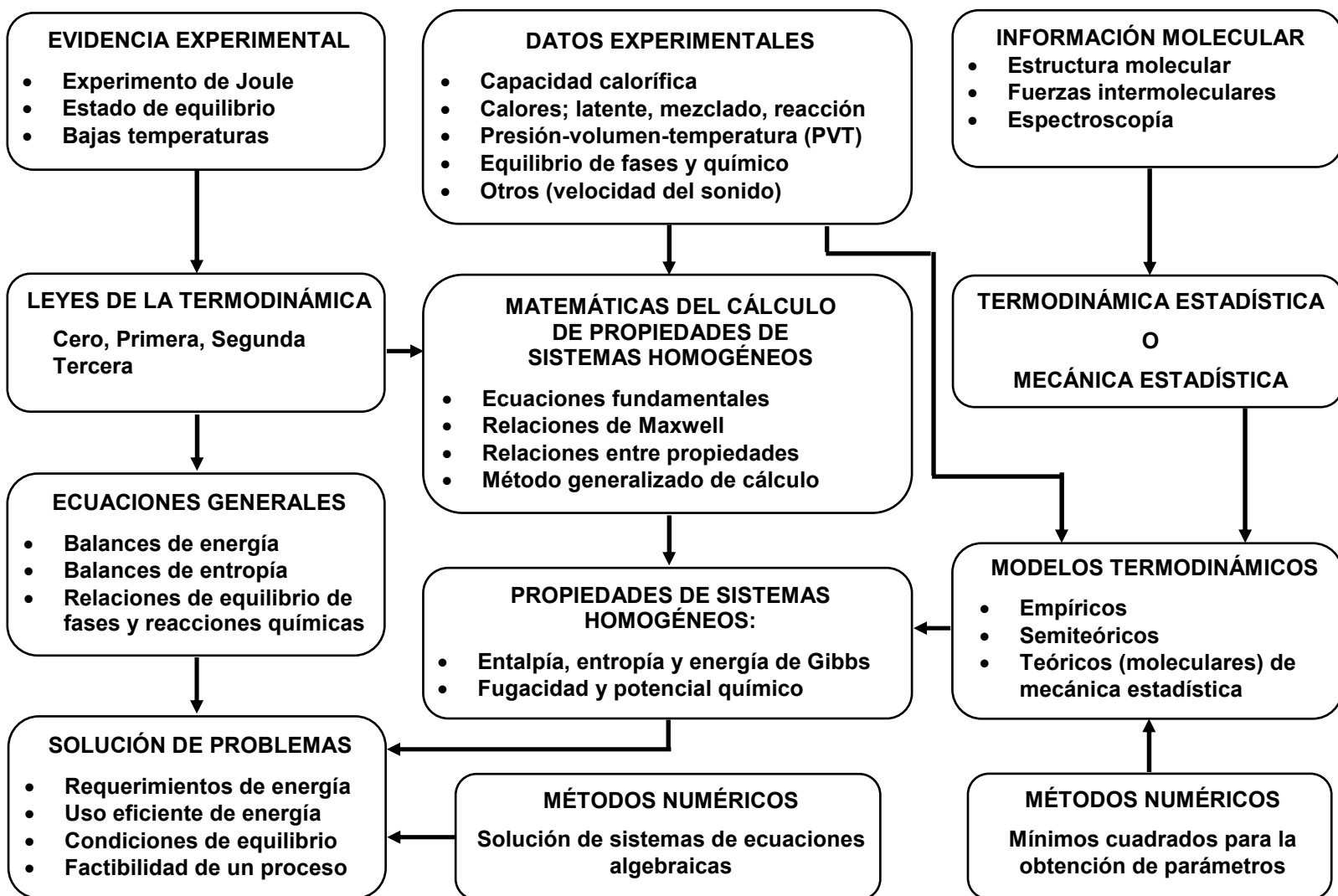
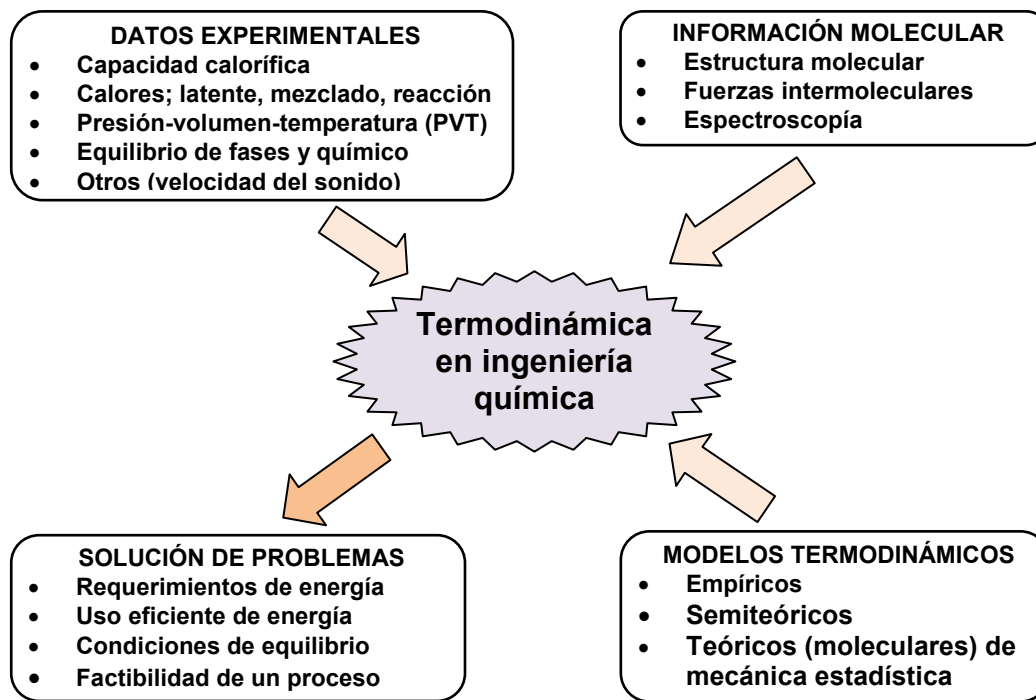


Figura 2. Esquema general de la termodinámica para la solución de problemas relevantes para la industria de proceso

En todos los cursos, a todos los niveles, siempre comienzo explicando este diagrama y delineando la inscripción del curso en particular en las piezas del diagrama. A continuación, explico los diferentes bloques del diagrama y la conexión entre ellos. Las flechas indican el flujo de información y, al mismo tiempo, los elementos antecedentes que se necesitan para ejecutar las deducciones y cálculos en cada bloque.

**EVIDENCIA EXPERIMENTAL y las LEYES DE LA TERMODINÁMICA.** La termodinámica es una ciencia fenomenológica y surge de la observación del mundo que nos rodea. De la observación del equilibrio surge el concepto de temperatura y la Ley cero de la termodinámica. Del experimento de Joule se formula el principio de conservación de la energía y la primera ley de la termodinámica. La observación de la evolución de los sistemas en forma espontánea hacia el equilibrio da origen a la segunda ley de la termodinámica. Experimentos del comportamiento de los sistemas a temperaturas extremadamente bajas dan pie a la formulación de la tercera ley de la termodinámica. Las leyes de la termodinámica son objeto de estudio en el curso introductorio de termodinámica. En los cursos de termodinámica para ingenieros químicos se parte de que los estudiantes tienen como antecedente un curso donde se abordaron las leyes de la termodinámica. **Tomaremos esta base para establecer la estructura termodinámica necesaria para resolver problemas de interés industrial, esto es problemas reales.**

El contexto general del diagrama es que en la parte superior tenemos la información experimental de las sustancias y mezclas medidas en laboratorios. Estas mediciones forman la base de todas las aplicaciones de la termodinámica, sin ellas no podemos resolver problemas. El objetivo de la termodinámica es tomar esta información y resolver problemas con ayuda de los modelos termodinámicos. Este objetivo general se plasma en el diagrama simplificado de la Figura 3.



**Figura 3. Esquema general simplificado de la termodinámica para la solución de problemas relevantes para la industria de proceso**

El bloque de **SOLUCIÓN DE PROBLEMAS**, en la parte inferior a la izquierda, es el bloque al cual fluye toda la información, es el fin último. Para la solución de toda clase de problemas se requieren tres ingredientes:

1. Formular las ECUACIONES GENERALES de balance de energía, balance de entropía y relaciones de equilibrio de fases y en reacciones químicas pertinentes para el problema en cuestión.
2. Calcular las PROPIEDADES TERMODINÁMICAS que requieren las Ecuaciones Generales para cada una de las mezclas presentes en las fases que conforman el sistema.
3. Solamente algunos problemas sencillos tienen solución analítica, la mayoría requiere de utilizar algún MÉTODO NUMÉRICO para resolver el sistema de ecuaciones.

Los bloques de ECUACIONES GENERALES y PROPIEDADES TERMODINÁMICAS son las piezas centrales de la aplicación de la termodinámica en toda clase de problemas, incluyendo las aplicaciones a problemas de la industria química y de proceso.

**ECUACIONES GENERALES.** Las ecuaciones generales que se requieren para la solución de toda clase de problemas son: El balance de energía, el balance de entropía y las relaciones de equilibrio de fases y en reacciones químicas. Estas ecuaciones generales se derivan de las LEYES DE LA TERMODINÁMICA, que fueron establecidas para sistemas cerrados, y constituyen su generalización para todo tipo de sistemas. En ingeniería química la mayoría de los problemas se plantean como sistemas abiertos para resolver procesos a régimen estacionario. Las ecuaciones para este caso son:

$$\text{Balance de energía: } \sum_{\text{Entradas}} [h]_{\text{ent}} \dot{E} + \dot{Q} + \dot{W} = \sum_{\text{Salidas}} [h]_{\text{sal}} \dot{S} \quad (1)$$

$$\text{Balance de entropía: } \sum_{\text{Entradas}} [s]_{\text{ent}} \dot{E} + \sum_{\text{Fuentes de calor}} \frac{\dot{Q}}{T_{\text{ext}}} + (\dot{S}_{\text{Gen}})_{\text{Total}} = \sum_{\text{Salidas}} [s]_{\text{sal}} \dot{S} \quad (2)$$

Donde:  $\dot{E}$ ,  $[h]_{\text{ent}}$ ,  $[s]_{\text{ent}}$ ;  $\dot{S}$ ,  $[h]_{\text{sal}}$ ,  $[s]_{\text{sal}}$  son el flujo molar, la entalpía molar, la entropía molar de las corrientes de entrada y salida del sistema, respectivamente

$\dot{Q}$  y  $\dot{W}$  son la carga térmica transferida al sistema desde una fuente térmica a  $T_{\text{ext}}$  y la potencia entregada al sistema, respectivamente

$$\text{Relaciones de equilibrio de fases: } \begin{array}{l} \hat{f}_1^\alpha = \hat{f}_1^\beta = \hat{f}_1^\gamma \\ \hat{f}_2^\alpha = \hat{f}_2^\beta = \hat{f}_2^\gamma \\ \vdots \\ \hat{f}_{n_c}^\alpha = \hat{f}_{n_c}^\beta = \hat{f}_{n_c}^\gamma \end{array} \quad (3)$$



---



---


$$\text{Equilibrio en reacciones: } K_j = \prod_{i=1}^{n_c} \left( \frac{f_i}{f_i^{ref}} \right)^{v_{ij}} = \exp \left( - \sum_{i=1}^{n_c} v_{ij} \mu_i^{ref} / RT \right) \quad (4)$$

Donde:  $f_i^\alpha, f_i^\beta, f_i^\gamma$ ;  $i = 1, 2, \dots, n_c$ , son la fugacidad del componente  $i$  en las fases  $\alpha, \beta, \gamma$ , respectivamente  
 $K_j$ ;  $j = 1, 2, \dots, n_r$ , es la constante de equilibrio de la reacción química  $j$   
 $v_{ij}$  es el coeficiente estequiométrico del componente  $i$  en la reacción  $j$   
 $f_i^{ref}$  y  $\mu_i^{ref}$  son la fugacidad y el potencial químico (que es igual a la energía de Gibbs de formación) del componente  $i$  en el estado de referencia que se escoge para calcular la constante de equilibrio.

El balance de energía se requiere para calcular la carga térmica  $\dot{Q}$ , la potencia  $\dot{W}$  o la temperatura de salida de una corriente cuando se especifica la carga térmica o la potencia. Se aplica a cualquier proceso, incluyendo mezclado o reacción química.

El balance de entropía se requiere para calcular la generación de entropía en el proceso,  $(\dot{S}_{gen})_{Total}$ , a causa de las irreversibilidades termodinámicas. La generación de entropía es un ingrediente indispensable en el análisis termodinámico de procesos ya que sirve para calcular el potencial de ahorro de energía de un proceso dado por el trabajo perdido  $\dot{W}_p = T_{amb} (\dot{S}_{gen})_{Total}$ . También se utiliza cuando se desea conocer la temperatura de salida de una corriente cuando el proceso se considera reversible, como el cálculo de la potencia mínima para comprimir una corriente a la presión final.

Las ecuaciones de equilibrio de fases y equilibrio en reacciones químicas son aplicables a sistemas con cualquier combinación de fases gas, líquido y sólido que estén presentes en el sistema. Por ejemplo: i) encontrar las condiciones de temperatura o presión de una corriente líquida o vapor saturada; ii) calcularla cantidad y composición de las fases presentes en una corriente cuando se especifican temperatura y presión (problema *flash*); iii) calcular la conversión al equilibrio, o bien, con un acercamiento al equilibrio especificado, de un sistema de reacciones químicas.

En varias aplicaciones es necesario combinar las ecuaciones de balance de energía o entropía y las relaciones de equilibrio de fases o reacciones químicas para encontrar las condiciones de una corriente de salida, por ejemplo: i) calcular la temperatura, cantidad y composición de las fases presentes en una separación adiabática o con una carga térmica especificada.

***Estas ecuaciones generales, con el modelo termodinámico apropiado para caracterizar al sistema real, son aplicables a cualquier proceso por más complejo que sea. Estas ecuaciones generales son las ecuaciones que utilizan los simuladores de proceso para representar a los procesos industriales.***

La mayoría de los cursos comienzan con el desarrollo de las ecuaciones de este bloque que se aplicará a todos los problemas del curso en cuestión.

➔ *Sugiero que, una vez desarrolladas estas ecuaciones, se apliquen para la solución de problemas con modelos ideales como Ley de Raoult, Ley de Henry y gas ideal. Después vendrán las aplicaciones con modelos reales como coeficientes de actividad y ecuaciones de estado. Esta secuencia ayuda a afianzar los conceptos de balances de energía y entropía y ecuaciones de equilibrio de fase y en reacciones químicas minimizando las complejidades del cálculo de propiedades en la etapa inicial.*

**PROPIEDADES TERMODINÁMICAS.** Este bloque constituye el ingrediente central para las aplicaciones. En él se debe enfatizar la utilización de la información experimental. Es un bloque complejo que propongo se aborde desmenuzado por grado de complejidad creciente en los siguientes ámbitos de aplicación:

☞ **Uso de información directa que requiere solamente la lectura de las propiedades en tablas o diagramas, como:**

- ➔ Tablas de propiedades de componentes puros como las Tablas de vapor de agua y diagramas presión-entalpía de componentes puros.
- ➔ Diagramas entalpía-composición de mezclas, diagramas de fase, diagrama psicrométrico y diagramas de equilibrio en reacciones químicas.

➔ *Con la información directa y las ecuaciones generales se puede comenzar la solución de problemas. Tiene la gran ventaja que se enfatiza el planteamiento de las ecuaciones generales para casos particulares sin la complejidad del cálculo de propiedades. Se puede utilizar para problemas de circuitos de vapor de agua, circuitos de refrigeración, problemas de separación de mezclas binarias y problemas de equilibrio químico en mezclas de gases ideales. Estos temas se pueden abordar en las primeras semanas del curso y los alumnos comienzan a percibir la utilidad de la termodinámica en la solución de problemas relevantes en procesos industriales.*

☞ **Uso de información experimental directa con el procedimiento de cálculo generalizado de propiedades, en particular entalpía y entropía.**

- El método generalizado de cálculo de propiedades se organiza para el cálculo de propiedades que se requiere en los balances de energía y entropía.

Las diferencias de entalpía y entropía entre las corrientes de salida y entrada se evalúan estableciendo una *ruta de cálculo por pasos*. La suma de los pasos debe llevar a las corrientes de entrada a las condiciones de las corrientes de salida. **En cada paso se modifica solamente una variable de proceso manteniendo el resto constante.** En la Tabla 1 se muestran las variables que se modifican en cada paso y las propiedades termodinámicas que se requieren para el cálculo.

**Tabla 1. Variable que se modifica en cada paso del cálculo generalizado de propiedades e información termodinámica que se requiere**

Variable de proceso que se modifica	Variabes de proceso que se mantienen constantes	Propiedad termodinámica que se requiere
Temperatura	Presión, fase y composición	Capacidad calorífica a presión constante
Presión	Temperatura, fase y composición	Ecuación de estado
Cambio de fase	Temperatura, presión y composición	Calores latentes
Cambio de composición por mezclado	Temperatura y presión	Calores de mezclado
Cambio de composición por reacción química	Temperatura y presión	Calores de reacción

Entonces, la diferencia de propiedades se calcula sumando las contribuciones de todos los pasos como se establece en las ecuaciones (5a y b):

$$\sum_{\text{Salidas}} [h]_{\text{sal}} \dot{S} - \sum_{\text{Entradas}} [h]_{\text{ent}} \dot{E} = \sum_{\text{Suma de todos los pasos}} \Delta \dot{H}_{\text{paso}} \quad (5a)$$

$$\sum_{\text{Salidas}} [s]_{\text{sal}} \dot{S} - \sum_{\text{Entradas}} [s]_{\text{ent}} \dot{E} = \sum_{\text{Suma de todos los pasos}} \Delta \dot{S}_{\text{paso}} \quad (5b)$$

Las consideraciones generales para establecer la *ruta de cálculo por pasos* son las siguientes:

- El cambio de composición por mezclado o separación de corrientes requiere de la información de calores de mezclado que indica el efecto térmico al formar la mezcla a partir de los componentes puros. Esta información se encuentra disponible casi siempre a una sola temperatura y presión, normalmente 25°C y 1 atm. La información experimental disponible determinará las condiciones de temperatura, presión y fase del *estado intermedio* que se debe establecer en la ruta.
- El cambio de composición por reacciones químicas requiere de la información de calores de reacción que indica el efecto térmico al pasar los reactivos como componentes puros a los productos también como componentes puros. Esta información se encuentra disponible casi siempre a una sola temperatura y presión, normalmente 25°C y 1 atm. La información experimental disponible determinará las condiciones de temperatura, presión y fase del *estado intermedio* que se debe establecer en la ruta.

- 
- Cuando en un proceso hay cambios de composición por mezclado-separación y por reacción química es conveniente establecer el mismo estado intermedio para ambos casos, de lo contrario la ruta requerirá un mayor número de pasos para pasar de un estado intermedio al otro.
  - Con base en lo anterior, la ruta de cálculo está formada por cinco etapas. Cada etapa estará conformada por los pasos que se requieran. En la Figura 4 se muestra el esquema del cálculo generalizado de propiedades para una ruta con un solo estado intermedio para mezclado, separación y reacción química.
  - Las corrientes que no cambian composición, entre la entrada y la salida, ejemplificadas por las corrientes K y N, se tratan en forma directa con pasos para la variación de temperatura, presión y fase.
  - En las Etapas (1) y (5) se llevan las corrientes de entrada al estado intermedio y las de salida del estado intermedio a las condiciones finales, respectivamente. En la etapa (2) se separan las corrientes en los componentes puros, en la etapa (3) se realizan las reacciones químicas necesarias para formar los componentes que se encuentran en las corrientes de salida y, en la etapa (4) se mezclan los componentes puros para formar las corrientes de salida.
  - **Etapa (1)** para llevar cada una de las corrientes de entrada a las condiciones intermedias a las que se encuentra disponible la información de calores de mezclado o calores de reacción. Los pasos de esta etapa son los cambios de temperatura, presión y fase necesarios a composición constante.
  - **Etapa (2)** para llevar a cabo el cambio de composición por mezclado, separación o reacción química a las condiciones del estado intermedio a la que se encuentre la información experimental. Esta etapa consiste en separar cada una de las corrientes involucradas en los componentes puros. El efecto térmico es el calor de mezclado a la composición de las corrientes involucradas, con signo contrario.
  - **Etapa (3)** para llevar a cabo las reacciones químicas para formar los productos a partir de los reactivos, todos como componentes puros. El efecto térmico es el calor de reacción a las condiciones en que encuentre la información experimental.
  - **Etapa (4)** para mezclar los componentes puros para formar las corrientes que darán lugar a las corrientes de salida a la composición correspondiente. El efecto térmico es el calor de mezclado a la composición de las corrientes involucradas.
  - **Etapa (5)** para llevar cada una de las corrientes de salida de las condiciones del estado intermedio a las condiciones finales. Los pasos de esta etapa son los cambios de temperatura, presión y fase necesarios a composición constante.



- 
- En cursos de termodinámica o balances de materia y energía recomiendo que se emplee en procesos a baja presión que permita utilizar el modelo de gas ideal e ignorar el efecto de presión en las fases líquidas y sólidas. De este modo, la entalpía no cambia al variar la presión y la entropía solamente cambia para la fase gas con la expresión  $\Delta S = -NR \ln(P_2/P_1)$ . La estrategia didáctica consiste en abordar aplicaciones con creciente grado de complejidad por la información termodinámica requerida. La secuencia sugerida es la siguiente:
- Primero, procesos donde no hay cambio de composición en las corrientes. De este modo solamente se requieren cambios de temperatura, presión y fase, En la ruta general no se requieren las etapas (2), (3) y (4) y cada corriente se considera por separado.
  - Segundo, procesos donde hay cambio de composición por mezclado-separación y con o sin reacciones químicas, pero en los cuales se puede utilizar la aproximación de solución ideal. En este caso los calores de mezclado son despreciables y en las etapas (2) y (4) la entalpía no cambia y para la entropía se utiliza la entropía de mezclado ideal que solamente depende de la composición. Si hay reacciones químicas se incluye la etapa (3) y se incorporan los calores de reacción.
  - Tercero, procesos donde hay cambio de composición por mezclado-separación y con o sin reacciones químicas, en los cuales se deben incorporar la información experimental de los calores de mezclado de las soluciones líquidas no-ideales. Esta información se utiliza en las etapas (2) y (4)
- La aplicación de estos modelos a problemas reales ofrece una oportunidad para elaborar proyectos para que los alumnos los resuelven, ya sea individualmente o por equipos.
- ☉ Cálculo de propiedades con modelos simples como propiedades coligativas, Ley de Raoult y Ley de Henry, en particular, fugacidades y potenciales químicos.
- En cursos de equilibrio de fases es conveniente comenzar con la solución de problemas como puntos de burbuja y rocío y cálculos *flash* para mezclas multicomponentes con modelos sencillos de Ley de Raoult, Ley de Henry y propiedades coligativas. De esta forma se enfatiza la regla de las fases y el planteamiento de las ecuaciones de equilibrio pertinentes con el cálculo de fugacidades con los modelos simples que son proporcionales a las fracciones mol. Los alumnos comienzan a percibir los alcances de la solución de problemas de equilibrio de fases, algunos con solución analítica o con ayuda del método de Newton-Raphson. Se pueden abordar problemas de equilibrio líquido-vapor, líquido-líquido-vapor con la aproximación de líquidos totalmente inmiscibles como sistemas con hidrocarburos y agua, mezcla líquida-sólido puro.
- En cursos de equilibrio en reacciones químicas es oportuno comenzar con solución de problemas con modelos sencillos de gas ideal, Ley de Raoult, Ley de Henry y propiedades coligativas. Es muy importante enfatizar que la

---

constante de equilibrio de una reacción química es solamente función de la temperatura de reacción y se calcula con las energías de Gibbs de formación de los componentes puros. El balance de materia se debe plantear con el concepto de avance de reacción, así, los avances de reacción se convierten en las incógnitas. Sugiero la siguiente secuencia de problemas a resolver:

- Equilibrio en un sistema gaseoso con gas ideal, primero con una reacción y después considerando un sistema de reacciones.
  - Equilibrio en sistemas gaseosos con la presencia de sólidos puros. Primero, una reacción y una fase sólida, después varias reacciones y varias fases sólidas.
  - Equilibrio en sistemas líquidos considerando el modelo de solución ideal (fugacidad proporcional a la fracción mol). Primero con una reacción y después con varias reacciones.
  - Equilibrio en sistemas de un líquido con la presencia de uno o varios sólidos puros, con una o varias reacciones químicas.
  - Equilibrio en sistemas líquido-vapor con los modelos de la Ley de Raoult y la ley de Henry.
  - Equilibrio en sistemas líquido-gas-sólidos puros con los modelos de gas ideal y solución líquida ideal.
- ☞ La discusión de los diagramas de fases y la regla de las fases de Gibbs deben acompañar a lo largo de la enseñanza de la termodinámica. Son un recurso didáctico que aporta elementos que pueden ayudar en el tránsito del mundo real al mundo abstracto de la termodinámica y viceversa.
- ☞ Por último, la cereza del pastel. Cálculo de propiedades con modelos de ecuaciones de estado y modelos de coeficientes de fugacidad. Estos modelos son indispensables en la aplicación a problemas industriales reales. Algunas consideraciones didácticas:
- Este tema debe abordarse en cursos de licenciatura para que los estudiantes perciban el alcance de la termodinámica en la solución de problemas reales de la industria.
  - En los cursos de termodinámica de posgrado debe formar el corazón del curso.
  - En cursos donde se utilicen los simuladores de proceso como recurso de cálculo, debe incluirse este tema como una parte fundamental del curso, de lo contrario el simulador de procesos será una caja negra.
  - Los modelos sencillos de gas ideal y solución ideal son el punto de partida y, a partir de ellos, explicar la necesidad y características de los modelos de ecuaciones de estado y coeficientes de actividad. Enfatizar su utilidad para la modelación de sistemas reales.
  - En el tema de ecuaciones de estado comenzar con los modelos más utilizados, las ecuaciones de estado cúbicas (Peng-Robinson, Soave-Redlich-Kwong). Enfatizar las ventajas en la solución de problemas reales, pero también, discutir sus limitaciones. Solamente en cursos avanzados se pueden abordar ecuaciones de estado más complejas como *CPA*, *SAFT*, *PC-SAFT* o *PHCT*.

- En el tema de modelos de coeficientes de actividad abordar los modelos de mayor aplicación en problemas industriales, por lo menos *NRTL* y *Wilson*. Los modelos *UNIQUAC* y *UNIFAC* pueden abordarse en cursos avanzados de licenciatura y de posgrado.
- En todos los cursos debe incluirse el tema de ajuste de parámetros que incluye: 1) Contrastar los resultados de los cálculos de los modelos con los datos experimentales y 2) Estrategias de ajuste de parámetros, esto es, modificar los parámetros de los modelos para que los cálculos se asemejen mejor a los datos experimentales.

➔ **Estos modelos requieren un número cuantioso de operaciones matemáticas que dificulta su instrumentación con cálculos manuales. Esto no puede ser obstáculo para su inclusión en la docencia de todos los cursos a todos los niveles. Las hojas de cálculo como Excel son un recurso que facilitan los cálculos numéricos y contribuyen a facilitar la solución de problemas reales.**

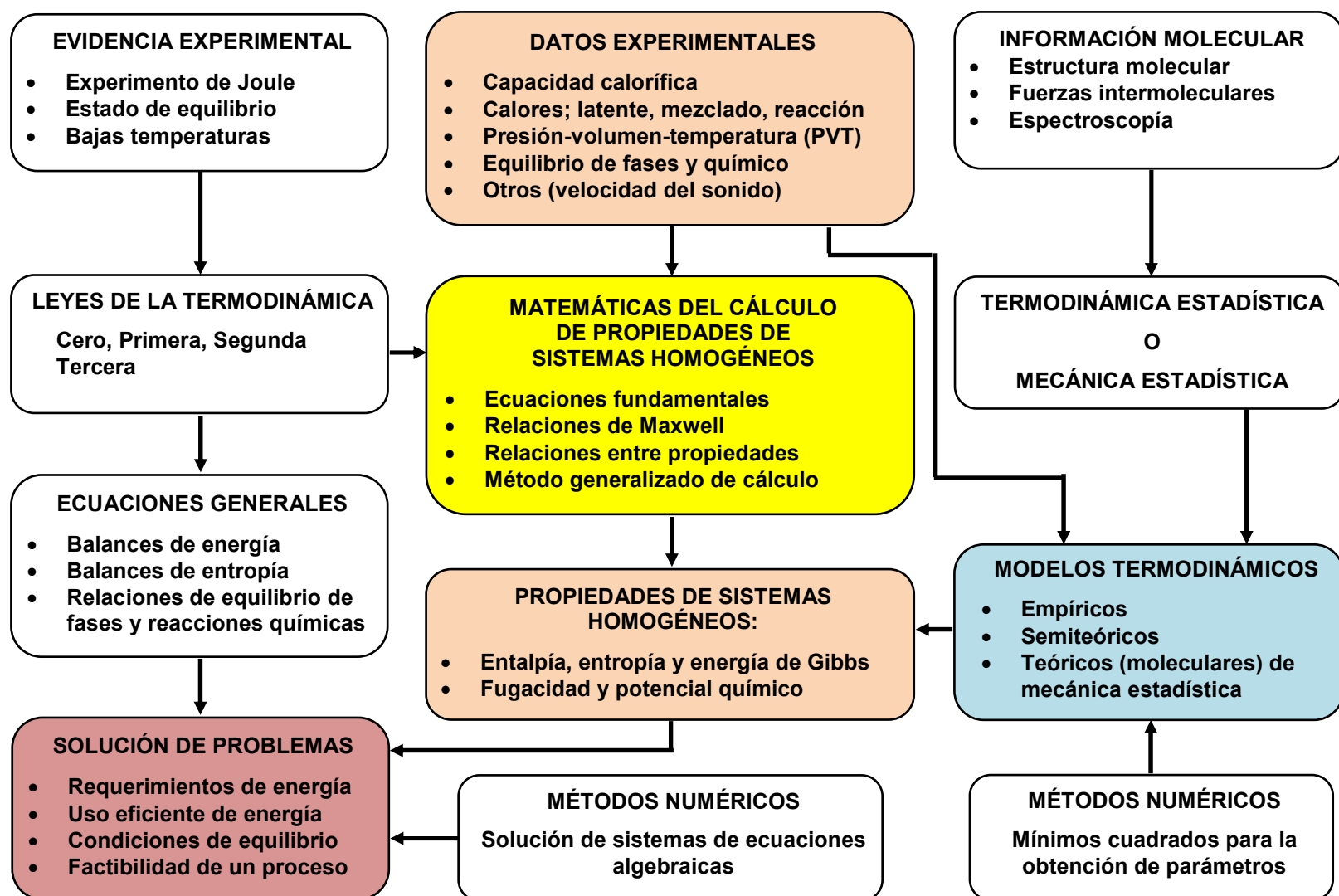
➔ **La aplicación de estos modelos a problemas reales ofrece una oportunidad para elaborar proyectos para que los alumnos los resuelven, ya sea individualmente o por equipos.**

**MATEMÁTICAS DEL CÁLCULO DE PROPIEDADES DE SISTEMAS HOMOGÉNEOS.** Este bloque está formado por el formalismo matemático que se desarrolló en el siglo XIX, entre otros por J. Willard Gibbs y J.D. van der Waals. **Es una parte esencial de la termodinámica y constituye el corazón del formalismo termodinámico. Gracias a este bloque podemos resolver problemas reales.** El recurso matemático es el cálculo de varias variables y es la parte más árida de la termodinámica, Se pasa de una ecuación a otra, siempre en el mundo de las matemáticas. De estudiante yo me preguntaba: ¿Todo esto para que sirve? Este hecho contribuyó fuertemente a que no entendiera la termodinámica como lo describí en los antecedentes. Este bloque si no se aborda conectándolo con la realidad, provoca en los estudiantes la aversión a la termodinámica. Para evitarlo, propongo que se enfatice como punto de partida la secuencia de bloques que llevan de los datos experimentales a la solución de problemas, como se ilustra en la Figura 4. Es vital que se tenga siempre presente que el objetivo de todo el formalismo termodinámico es proveer las herramientas conceptuales y matemáticas que se requieren para resolver problemas reales a partir de la información experimental del sistema que se está analizando.

- El formalismo matemático se desarrolla a partir de las leyes de la termodinámica. Se establecen las ecuaciones diferenciales fundamentales de la termodinámica para las funciones termodinámicas *U, H, A y G*, la primera de ellas y origen de todo el desarrollo matemático es:  $dU = TdS - PdV + \hat{\mu}_1 dN_1 + \hat{\mu}_2 dN_2 + \dots + \hat{\mu}_{n_c} dN_{n_c}$
- Las ecuaciones fundamentales se aplican a sistemas homogéneos, esto es a sistemas formados por una sola fase multicomponente. De modo que son aplicables para calcular propiedades de sistemas homogéneos. Este hecho lleva a establecer el axioma central del cálculo de propiedades: ***Las propiedades de un sistema formado por varias fases multicomponentes se calculan como la suma de las propiedades de cada una de las fases.***



- A partir de las ecuaciones fundamentales, con ayuda del cálculo de varias variables, se desarrollan las Relaciones de Maxwell y las relaciones entre propiedades, todas como derivadas parciales, que forman la base del cálculo de propiedades. *La motivación fundamental del desarrollo de este formalismo es tener expresiones con las que se puedan calcular propiedades termodinámicas a partir de datos experimentales.*
- Las propiedades se calculan integrando las derivadas parciales y sustituyendo las ecuaciones del modelo termodinámico que represente al sistema. Una estrategia muy utilizada es la formulada en el cálculo generalizado de propiedades descrito en el diagrama de la Figura 5.



**Figura 5.** Conexión del bloque *MATEMÁTICAS DEL CÁLCULO DE PROPIEDADES* (ver Figura 2) con los bloques antecedentes de *DATOS* y *MODELOS* y con el objetivo de cálculo de *PROPIEDADES* y *SOLUCIÓN DE PROBLEMAS*

**TERMODINÁMICA O MECÁNICA ESTADÍSTICA.** La designación Termodinámica estadística la utilizamos más los ingenieros químicos y los químicos. Por otro lado, la designación Mecánica estadística la utilizan más los físicos. Ambas son equivalentes. En ella se estudia el comportamiento molecular de los sistemas y, a partir de la información de la estructura y propiedades de las moléculas y de las fuerzas de interacción entre ellas, se formulan modelos que representan el comportamiento de los sistemas multicomponentes. Lo más común es formular el modelo en el ámbito de la función de partición canónica que lleva a establecer la energía de Helmholtz,  $A$ , como una función de las variables termodinámicas:  $A = A(T, V, N_1, N_2, \dots, N_{i,c})$ . A partir de esta función, utilizando las relaciones termodinámicas del bloque MATEMÁTICAS DE LAS PROPIEDADES, se obtienen la ecuación de estado, la entalpía, la entropía, las fugacidades y potenciales químicos. Para cálculos de sistemas reales se han desarrollado modelos basados en teoría de perturbación, como *PHCT* (ver Figura 1) y *PC-SAFT*, y para fluidos con asociaciones, como *CPA* y *SAFT* que están ganando popularidad en aplicaciones industriales. Los ingenieros químicos estamos muy activos en este tema.

➔ **Por la importancia que tiene la termodinámica estadística en el planteamiento de modelos termodinámicos, es muy conveniente que contemos con cursos optativos de licenciatura y de posgrado que incorporen una introducción a la termodinámica estadística y el estudio de modelos.**

**MÉTODOS NUMÉRICOS.** Como se ha descrito en estas reflexiones de la enseñanza de la termodinámica, debemos abordar la solución de problemas relevantes para aplicaciones en sistemas de interés industrial. Muchos de estos problemas requieren el auxilio de métodos numéricos, principalmente con dos temas: 1) Solución de un sistema de ecuaciones algebraicas y 2) Minimización de una función objetivo. Para vislumbrar la importancia de los métodos numéricos en la termodinámica, a continuación, mencionaremos problemas cuya solución requiere la intervención de métodos numéricos.

- **Problemas que se formulan como un sistema de ecuaciones algebraicas y que requieren una solución numérica.** El método de Newton-Raphson, ya sea de una variable o multivariable, es útil para este fin.
  - Cálculo de la presión de burbuja o rocío de una mezcla multicomponente con cualquier modelo, excepto modelos simples como Ley de Raoult y Ley de Henry para los cuales hay solución analítica. El sistema de ecuaciones son las ecuaciones de igualdad de fugacidades.
  - Cálculo de la temperatura de burbuja o rocío de una mezcla multicomponente con cualquier modelo, incluyendo modelos simples como Ley de Raoult y Ley de Henry. El sistema de ecuaciones son las ecuaciones de igualdad de fugacidades.
  - Cálculo del problema *flash* para una mezcla multicomponente con cualquier modelo, incluyendo modelos simples como Ley de Raoult y Ley de Henry. Solamente tiene solución analítica para una mezcla binaria con un modelo simple. El sistema de ecuaciones son las ecuaciones de igualdad de fugacidades y los balances de materia.

- 
- Cálculo de avances de reacción en problemas de equilibrio químico para un sistema de reacciones con cualquier modelo, incluyendo modelos simples como gas ideal, Ley de Raoult y Ley de Henry, con excepciones muy contadas que dan ecuaciones algebraicas lineales o cuadráticas. El sistema de ecuaciones son las ecuaciones de equilibrio formuladas en términos de la constante de equilibrio y los balances de materia formulados en términos de los avances de reacción.
  - Cálculo de la temperatura y los avances de reacción en problemas de reactores adiabático con cualquier modelo. El sistema de ecuaciones son las ecuaciones de equilibrio formuladas en términos de la constante de equilibrio, los balances de materia formulados en términos de los avances de reacción y el balance de energía.
  - Solución de problemas de balance de energía en procesos con recirculaciones con cualquier modelo. La solución requiere que se establezca una o varias corrientes de corte, El sistema de ecuaciones son las diferencia entre los valores estimados y los valores calculados de las variables de las corrientes de corte.
- **Problemas que se formulan como minimización de una función objetivo.** El método de minimización con restricciones es útil para este fin.
- Solución de problemas de equilibrio de fases y de reacciones químicas en una o varias fases por la minimización de la energía de Gibbs, sujeto a las restricciones de los balances de materia. La función objetivo es la energía de Gibbs y las restricciones son los balances de materia.
- **Problemas de ajuste de parámetros que se formulan como minimización de una función objetivo.** La función objetivo es la suma de cuadrados de los errores entre los cálculos del modelo y los valores experimentales. El método de mínimos cuadrados es útil para este fin
- Ajuste de los parámetros de la ecuación de presión de vapor de un componente puro, por ejemplo, ecuación de Antoine, con datos experimentales de presión de vapor.
  - Ajuste de los parámetros de interacción binarios en modelos de ecuaciones de estado y coeficientes de actividad para equilibrio líquido-vapor o líquido-líquido.
- ➔ **En consecuencia, es imprescindible que los alumnos puedan resolver problemas con el auxilio de métodos numéricos, de lo contrario su ámbito de acción se limitará a problemas sencillos. En caso de que los alumnos no tengan antecedentes o no se disponga de tiempo en el curso, se puede recurrir a ayudas numéricas como la función *solver* en las hojas de cálculo de Excel**

### Comentarios finales

En estas reflexiones sobre la enseñanza de la termodinámica he plasmado los objetivos que he perseguido en 47 años de docencia. El alumno siempre va por delante en todos los aspectos de la docencia. Siempre he tenido presente que el objetivo es entusiasmar al alumno para que el tránsito por la termodinámica tenga sentido y vean la conexión con la realidad, sobre todo en

el contexto de la ingeniería química. He procurado ubicar los conceptos en el contexto de la solución de problemas relevantes. En todos los cursos les he dejado algún proyecto para que lo desarrollen ya sea individualmente o en equipos. Los proyectos han sido retos que los motivan por superarse y cuando los concluyen aumenta significativamente su autoestima, se sienten poderosos y capaces de enfrentar cualquier reto y así son en realidad, poderosos y capaces. Cuando converso con ellos después de muchos años me manifiestan que el proyecto fue muy significativo para su formación y se sienten orgullosos de lo que lograron.

Para terminar, enlistaré el tipo de proyectos que les he dejado a lo largo de los cursos que he impartido:

- Elaboración de un diagrama presión-entalpía para una sustancia pura con el modelo de la ecuación de estado de Peng-Robinson. Los alumnos programaban todas las ecuaciones necesarias para los cálculos, unos utilizando una calculadora programable y otros programando en Fortran. Utilizaban un método numérico para los cálculos de la presión de vapor para la curva de saturación.
- Elaboración de un diagrama entalpía-composición para una mezcla binaria por el método generalizado de cálculo de propiedades. Los alumnos se apoyaban con una hoja de Excel. Para las líneas de saturación utilizaban el modelo *NRTL* o Wilson de coeficientes de actividad.
- Efectuar balances de materia y energía en un proceso industrial real utilizando el método de cálculo generalizado de propiedades. El proceso tiene un reactor químico, equipos de separación de corrientes y una recirculación. Los cálculos los elaboran con auxilio de una hoja de cálculo de Excel y la función *solver* para la convergencia de la corriente de corte.
- Para un proceso de separación con equipo de transferencia de calor y separación de fases, efectuar los cálculos de balances de materia y energía y de equilibrio líquido-vapor con el modelo de ecuación de estado de Peng-Robinson. Los alumnos se apoyan con una hoja de Excel.

## Glosario

<b>Término</b>	<b>Significado</b>
<i>CPA</i>	Siglas en inglés para la ecuación de estado <i>Cubic Plus Association</i> . Incorpora un término de asociación molecular en las ecuaciones de estado cúbicas
Expresión mexicana “ <i>caer el veinte</i> ”	Durante el tiempo en que Teléfonos de México era una empresa paraestatal, el costo de una llamada telefónica era de veinte centavos. Para garantizar el pago debía introducirse la moneda en la ranura, se marcaba en número y, cuando se oía la respuesta, la moneda o ‘ <b>veinte</b> ’ caía a una caja interior y entonces ambas personas ya podían hablar pudiendo ser oídas. De ahí viene este modismo idiomático: «¡ <i>Ya nos cayó el veinte!</i> » para indicar que los interlocutores se entienden, que ambos saben de lo que están hablando y

Término	Significado
Gibbs	que, por fin, se ha captado la idea que ambos discuten Josiah Willard Gibbs fue un físico estadounidense que contribuyó de forma destacada a la fundación teórica de la termodinámica. Nacimiento: 11 de febrero de 1839, New Haven, Connecticut, Estados Unidos. Fallecimiento: 28 de abril de 1903, New Haven, Connecticut, Estados Unidos. Premios: Medalla Copley, Premio Rumford
Mentor o profesor	mentor, ra. Del griego Μέντωρ <i>Méntōr</i> 'Méntor', personaje de la <i>Odisea</i> , consejero de Telémaco. 1. m. y f. Consejero o guía. 2. m. y f. Maestro, padrino. Fue su mentor político. 3. m. y f. <a href="https://dle.rae.es/mentor?m=form">ayo</a> . (Diccionario de la lengua española, <a href="https://dle.rae.es/mentor?m=form">https://dle.rae.es/mentor?m=form</a> ). Profesor, ra. Del latín <i>professor</i> , -ōris. 1. m. y f. Persona que ejerce o enseña una ciencia o arte (Diccionario de la lengua española, <a href="https://dle.rae.es/profesor?m=form">https://dle.rae.es/profesor?m=form</a> )
<i>Mentor</i>	<i>Mentorship is the influence, guidance, or direction given by a mentor. Mentor is someone who teaches or gives help and advice to a less experienced and often younger person. In an organizational setting, a mentor influences the personal and professional growth of a mentee</i> / La tutoría es la influencia, guía o dirección dada por un mentor. Mentor es alguien que enseña o brinda ayuda y consejos a una persona menos experimentada y, a menudo, más joven. En un entorno organizacional, un mentor influye en el crecimiento personal y profesional de sus educandos (Wikipedia)
<i>NRTL</i>	Siglas en inglés para el modelo <i>Non RandomTwoLiquid</i> de coeficientes de actividad
<i>PC-SAFT</i>	Siglas en inglés para <i>Perturbed-Chain Statistical Associating Fluid Theory</i> . Modelo de termodinámica estadística para moléculas no esféricas que se consideran como una cadena de esferas duras y que pueden tener asociaciones
<i>PHCT</i>	Siglas en inglés para <i>Perturbed-Hard-Chain-Theory</i> . Modelo de termodinámica estadística para moléculas no esféricas que se consideran como una cadena de esferas duras
<i>Problema flash</i>	Problema de separación de fases. Para designarlo en inglés se utiliza la palabra <i>flash</i> . No hay una traducción clara en español. Muchos autores lo llaman <i>Problema de separación instantánea</i>
<i>SAFT</i>	Siglas en inglés para <i>Statistical Associating Fluid Theory</i> . Modelo de termodinámica estadística para moléculas que se asocian
<i>UNIQUAC</i>	Siglas en inglés para el modelo <i>UNIversal QUAsi Chemical</i> de coeficientes de actividad que considera tamaño de las moléculas y fuerzas intermoleculares
<i>UNIFAC</i>	Siglas en inglés para el modelo <i>UNIquac Functional-group Activity Coefficients</i> de coeficientes de actividad de contribución de grupos funcionales, basado en UNIQUAC
van der Waals	Johannes Diderik van der Waals fue un profesor universitario y físico neerlandés. Nacimiento: 23 de noviembre de 1837, Leiden, Países Bajos. Fallecimiento: 8 de marzo de 1923, Amsterdam, Países Bajos. Es conocido por su trabajo en la ecuación del estado de los gases y los líquidos por el cual ganó el Premio Nobel de Física en 1910

---

## Reconocimientos

Este artículo es un reconocimiento al Prof. John M. Prausnitz por su extraordinaria trayectoria, como quedó plasmado en el homenaje del AIChE que relaté en los antecedentes. Sus contribuciones sobre las aplicaciones de la termodinámica molecular a problemas relevantes es un pilar en que se soporta la ingeniería química moderna. Su influencia a través del curso de posgrado, el libro de texto y el proyecto de tesis doctoral moldearon mi carrera académica y la forma como he abordado la enseñanza de la termodinámica. Mi formación inicial y el gusto por la ingeniería química se los debo a los profesores Alejandro Purón-de-la-Borbolla y Alberto Bremauntz-Monge, con quienes aprendí la parte medular de ingeniería química: Balances de materia y energía, flujo de fluidos, transferencia de calor y procesos de separación, siempre enfatizando las aplicaciones en el mundo real. Nunca he tenido duda de que la ingeniería química es la disciplina a la que debía y debo dedicar mi esfuerzo profesional.

## Referencias bibliográficas

- Bazúa-Rueda, E.R. 1975. Statistical Thermodynamics of Hydrocarbon Mixtures for Process Design. Tesis doctoral en Ciencias en Ingeniería Química. Universidad de California, Berkeley. Estados Unidos.
- Bazúa-Rueda, E.R. 1971. Theory of the internal viscosity in polymer chain dynamics. Tesis de Maestría en Ciencias en Ingeniería Química. Universidad de California, Berkeley. Estados Unidos.
- Bazúa-Rueda, E.R., Hernández-Castaños, D.B. 1969. Modelo matemático de un reactor de síntesis de amoniaco. Tesis profesional. Universidad Nacional Autónoma de México, Facultad de Química. Ciudad de México, México.

## Acknowledgments

*This article is in recognition of Prof. John M. Prausnitz for his extraordinary career, as reflected in the AIChE tribute that I related in the background. His contributions on the applications of molecular thermodynamics to relevant problems is a cornerstone of modern chemical engineering. Its influence through the graduate course, the textbook and the doctoral thesis project shaped my academic career and the way I have approached the teaching of thermodynamics. My initial training and taste for chemical engineering are due to the Professors Alejandro Purón-de-la-Borbolla and Alberto Bremauntz-Monge, with whom I learned the core part of chemical engineering: mass and energy balances, fluid flow, heat transfer and separation processes, always emphasizing applications in the real world. I have never had any doubt that chemical engineering is the discipline to which I should and must dedicate my professional effort.*

Bazúa, E.R., Prausnitz, J.M. 1971. Vapor-liquid equilibria for cryogenic mixtures. *Cryogenics*. 11(2):114-119.

O'Connell, J.P. 2015. Introductory Retrospective. John M. Prausnitz: Bridging abstractions and realities. *AIChE J.* 61(9):2675-2688.

<https://aiche.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/aic.14761>

# AIChE JOURNAL

AN OFFICIAL PUBLICATION OF THE AMERICAN INSTITUTE OF CHEMICAL ENGINEERS  
CHEMICAL ENGINEERING RESEARCH AND DEVELOPMENT


September 2015

**John M. Prausnitz: Bridging Abstractions and Realities**

$$\ln \phi_i \equiv \ln \frac{\bar{f}_i}{y_i P} = \frac{1}{RT} \int_0^P \left[ \bar{V}_i - \frac{RT}{P} \right] dP$$

$$\ln \gamma_i \equiv \ln \frac{\bar{f}_i}{y_i \bar{f}_i^0} = \frac{1}{RT} \int_0^P \left[ \bar{V}_i - V_i^0 \right] dP$$

$$\phi_i = \gamma_i \phi_i^0$$



Abstraction	Abstraction
↑ Step 1	↓ Step 3
Reality	Reality
Problem	Solution
Step	
<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Project real problem into abstraction.</li> <li>2. Solve abstract problem.</li> <li>3. Project abstract solution into reality.</li> </ol>	

Founders Tribute  
John M. Prausnitz

VIEW THIS JOURNAL ONLINE AT [WILEYONLINELIBRARY.COM](http://WILEYONLINELIBRARY.COM)

WILEY

AIChE

ONLINE SUBMISSION AND PEER REVIEW  
[mc.manuscriptcentral.com/aiche](http://mc.manuscriptcentral.com/aiche)

### **John M. Prausnitz AIChE Institute Lecturer Award**

The Executive Board of the Program Committee invites a distinguished member of AIChE to present a comprehensive authoritative review of the chemical engineering science in his or her field of specialization.

In honor of one of chemical engineering's most extraordinary leaders, AIChE is pleased to announce the renaming of its prestigious, annual Institute Lecture to the John M. Prausnitz AIChE Institute Lecture. Dr. Prausnitz is an AIChE Fellow and 64-year member. He is a Member of the National Academy of Sciences, National Academy of Engineering, and the American Academy of Arts and Sciences.

In 2003, he was presented with the National Medal of Science. The AIChE Foundation gratefully acknowledges the generosity of John's closest peers who have made lead gifts to establish an endowment to support the Lecture and ensure John's name will be recognized in perpetuity.

Prior to 2016 the John M. Prausnitz AIChE Institute Lecturer Award was named the Institute Lecturer Award.

Prausnitz, J.M., Lichtenthaler, R.N., Gomes-de-Azevedo, E. 1999. *Molecular Thermodynamics of Fluid-Phase Equilibria*. 3a. ed. Prentice Hall Intl. Series. ISBN 0-13-977745-8. New Jersey, EE.UU.

Reid, R.C., Sherwood, T.K. 1958. *The Properties of Gases and Liquids: Their Estimation and Correlation*. 5a. ed. McGraw-Hill. New York, EE.UU.