

1. Nombre de la materia:	
Seminario de Ingeniería de Polimerización Avanzada.	
2. Docente responsable:	
a- Nombre y Apellido: Juan Martin Maffi b- Máximo título alcanzado: Doctor en Ingeniería c- Correo electrónico: jmaffi@itba.edu.ar	
3. Equipo docente:	
-	
4. Fechas:	
Inicio: 28/10/2026	Finalización: 26/11/2026
5. Lugar de cursada:	
SDF, Presencial.	
6. Días y horarios de cursada:	
Miércoles de 10 a 13 h.	
7. Presentación de la materia:	
La ingeniería de polimerización plantea un problema que distingue a toda una clase de sistemas de la ingeniería de reacciones clásica: el estado del sistema no es un vector de concentraciones escalares, sino una distribución de propiedades moleculares (longitud de cadena, composición, secuencia, ramificación, topología) que se construye a través de escalas y fases. Predecir esa distribución completa, y no sólo sus promedios, a partir de la cinética es el núcleo conceptual de la disciplina, y cada decisión de modelado constituye un compromiso explícito entre fidelidad y tratabilidad. El problema central es predecir la distribución de propiedades moleculares a partir de la cinética, atravesando escalas (molécula → partícula → reactor → flowsheet) y fases, y cerrando el lazo con los datos (estimación, identificabilidad, control). Las herramientas que esto exige (balances de población, métodos de momentos y de distribución completa, simulación estocástica, acople multiescala y problemas inversos mal planteados) son transferibles a cristalización, sistemas particulados, aerosoles, biología de sistemas y, en general, a todo proceso con estado distribucional. Este encuadre hace al seminario relevante más allá de la especialidad. El curso usa la polimerización como vehículo, no como fin, y culmina en la frontera computacional actual (kinetic Monte Carlo de alto rendimiento, diseño inverso por aprendizaje activo, gemelos digitales y reactores autónomos autooptimizantes).	
8. Requisitos de admisibilidad:	
Es necesario que el estudiante tenga conocimientos en: • Ecuaciones diferenciales ordinarias. • Programación científica (Python, Matlab, Julia, etc.). • Nociones de cinética química. • Álgebra lineal. • Probabilidad y estadística.	
9. Duración en hs.	



- a- Horas teóricas: 15.
b- Horas prácticas: 0.
c- Horas totales: 15.

10. Idioma del dictado:

Castellano.

11. ¿Podría dictarse una versión en idioma inglés?:

Sí.

12. Objetivos de aprendizaje:

- 1- Formular balances de poblaciones para sistemas de polimerización y diagnosticar la validez de las hipótesis de cierre que los vuelven tratable.
- 2- Seleccionar y justificar el método de resolución de los problemas presentados, según la propiedad de interés.
- 3- Modelar la construcción de microestructura y arquitectura y su impacto sobre la distribución de largos de cadena, acoplando escalas partícula-reactor cuando corresponda.

13. Contenidos:

Módulo 1: distribuciones de largo de cadena, cinética de reacción y balances poblacionales.
Módulo 2: resolución numérica de las distribuciones de largo de cadena, algoritmos, ventajas y desventajas.
Módulo 3: arquitectura molecular y microestructura.
Módulo 4: reactores multifásicos y acople de escalas.
Módulo 5: inferencia, identificabilidad y frontera computacional.

14. Trabajo de laboratorio:

El curso no contempla trabajo de laboratorio

15. Metodología de enseñanza:

Clases magistrales con participación activa del alumnado.

16. Bibliografía obligatoria:

- W. H. Ray, On the mathematical modeling of polymerization reactors, J. Macromol. Sci. Rev. Macromol. Chem., 8(1), 1-56, 1972. 4
- D. Ramkrishna, Population Balances: Theory and Applications to Particulate Systems in Engineering, Academic Press, 2000.
- H. M. Hulburt, S. Katz, Some problems in particle technology: a statistical mechanical formulation, Chem. Eng. Sci., 19(8), 555-574, 1964.
- P. J. Flory, Principles of Polymer Chemistry, Cornell Univ. Press, 1953.
- F. R. Mayo, F. M. Lewis, Copolymerization. I. A basis for comparing the behavior of monomers in copolymerization, J. Am. Chem. Soc., 66(9), 1594-1601, 1944.
- R. G. Gilbert, Emulsion Polymerization: A Mechanistic Approach, Academic Press, 1995.
- J. B. P. Soares, T. F. L. McKenna, Polyolefin Reaction Engineering, Wiley-VCH, 2012.

17. Bibliografía complementaria:

- M. Wulkow, The simulation of molecular weight distributions in polyreaction kinetics by discrete Galerkin methods, *Macromol. Theory Simul.*, 5(3), 393-416, 1996.
- S. Kumar, D. Ramkrishna, On the solution of population balance equations by discretization. A fixed pivot technique, *Chem. Eng. Sci.*, 51(8), 1311-1332, 1996.
- D. Meimaroglou, C. Kiparissides, Review of Monte Carlo methods for the prediction of distributed molecular and morphological polymer properties, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 53(22), 8963-8979, 2014.
- D. T. Gillespie, Exact stochastic simulation of coupled chemical reactions, *J. Phys. Chem.*, 81(25), 2340-2361, 1977.
- A. D. Trigilio, Y. W. Marien, P. H. M. Van Steenberge, D. R. D'hooge et al., Benchmark cases and guidelines for kinetic Monte Carlo simulations with linear polymers, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 64(20), 9974-9992, 2025.

18. Recursos didácticos para la enseñanza:

Computadora, Software de simulación (MATLAB, python, Julia, otros).

19. Modalidad de evaluación:

El alumno será evaluado mediante la resolución de un pequeño proyecto, que consiste en la lectura de un trabajo de investigación de actualidad, con tres posibles formas de análisis: 1) modelado propio con las herramientas del curso, 2) reproducción crítica de los resultados de un trabajo, 3) crítica metodológica de un trabajo publicado. El trabajo debe ser defendido oralmente.

20. Requisitos de aprobación:

Para aprobar el seminario el alumno deberá:

1. Asistir al menos al 80% de las clases.
2. Defender satisfactoriamente el proyecto asignado, con nota superior o igual a 4 (cuatro).

