



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES CUAUTITLÁN
PLAN DE ESTUDIOS DE LA LICENCIATURA
EN INGENIERÍA QUÍMICA**



PROGRAMA DE LA ASIGNATURA DE:				
TEORÍA CINÉTICA COMPUTACIONAL				
IDENTIFICACIÓN DE LA ASIGNATURA				
MODALIDAD:	Curso			
TIPO DE ASIGNATURA:	Teórico-Práctica			
SEMESTRE EN QUE SE IMPARTE:	Séptimo o Noveno			
CARÁCTER DE LA ASIGNATURA:	Optativa de campo complementario			
NÚMERO DE CRÉDITOS:	6			
HORAS A LA SEMANA:	4	Teóricas: 2	Prácticas: 2	Semanas de clase: 16
				TOTAL DE HORAS: 64
SERIACIÓN:	Si (<input checked="" type="checkbox"/>)	No (<input type="checkbox"/>)	Obligatoria (<input checked="" type="checkbox"/>)	Indicativa (<input type="checkbox"/>)
SERIACIÓN ANTECEDENTE:	Seriación por bloques: Se requiere haber cubierto el 80% de créditos de los 6 primeros semestres			
SERIACIÓN SUBSECUENTE:	Ninguna			

OBJETIVO GENERAL

Lograr que al finalizar el curso el alumno sea capaz de utilizar los conceptos relacionados a diferentes ramas de la teoría cinética, tales como autómatas celulares, retículas de gas, retículas de Boltzmann, dinámica browniana y métodos de Monte Carlo, para formular modelos matemáticos y algoritmos computacionales que permitan caracterizar fenómenos de transporte, reacciones químicas y dinámica interfacial, en equipos y operaciones unitarias, con aplicación a diseño en ingeniería química.

ÍNDICE TEMÁTICO

UNIDAD	TEMAS	Horas Teóricas	Horas prácticas
1	Teoría Cinética	4	2
2	Autómatas Celulares y Retículas de Gas	2	4
3	Retículas de Boltzmann	12	12
4	Fenómenos Termohidrodinámicos Complejos	6	6
5	Dinámica Browniana	4	4
6	Métodos de Monte Carlo	4	4
	TOTAL DE HORAS TEÓRICAS	32	0
	TOTAL DE HORAS PRÁCTICAS	0	32
	TOTAL DE HORAS	64	

CONTENIDO TEMÁTICO

1. TEORÍA CINÉTICA

- 1.1. Orígenes de la teoría cinética
- 1.2. Contribución de Maxwell a la teoría cinética
- 1.3. Aportaciones de Ludwig Boltzmann
- 1.4. La ecuación de Boltzmann
- 1.5. El teorema H de Boltzmann, entropía e información
- 1.6. Distribución de Maxwell-Boltzmann
- 1.7. Inversión de tiempo, ciclos de Poincaré y las Paradojas de Loschmidt y Zermelo
- 1.8. El modelo de anillo de Kac y los Stossahlansatz
- 1.9. Ejercicios y algoritmos computacionales

2. AUTÓMATAS CELULARES Y RETÍCULAS DE GAS

- 2.1. Autómatas celulares
 - 2.1.1. Simulación de ondas químicas producidas por reacciones complejas
 - 2.1.2. Simulación de procesos de difusión y equilibrio
 - 2.1.3. Simulación de la dinámica de fluidos
- 2.2. Autómatas celulares de retículas de gas
 - 2.2.1. Fluidización y reglas de colisión
 - 2.2.2. Modelo FHP.
 - 2.2.3. Simulación de dinámica de fluidos sobre objetos sumergidos
 - 2.2.4. Simulación de procesos de difusión térmica
 - 2.2.5. Simulación de reacciones químicas
- 2.3. Ejercicios y algoritmos computacionales

3. RETÍCULAS DE BOLTZMANN

- 3.1. Formulación de la ecuación discreta de Boltzmann
- 3.2. El operador de colisión BGK
- 3.3. Aplicación del método de retículas de Boltzmann a procesos de difusión con reacción química
 - 3.3.1. Función de distribución al equilibrio
 - 3.3.2. Expansión de Chapman-Enskog
 - 3.3.3. Condiciones de frontera (Dirichlet, Neumann, de rebote, toroidal)
 - 3.3.4. Difusión unidimensional con reacción química. Algoritmo computacional
 - 3.3.5. Difusión bidimensional con reacción química. Algoritmo computacional
 - 3.3.6. Modelo de retículas para ondas químicas
 - 3.3.7. Difusión axisimétrica. Algoritmo computacional
- 3.4. Aplicación a sistemas de reacción-difusión-convección
 - 3.4.1. Simulación de procesos de difusión-convección mediante redes de Boltzmann

- 3.4.2. Función de distribución al equilibrio
- 3.4.3. Expansión de Chapman-Enskog para sistemas de difusión-convección 2D
- 3.4.4. Diseño de reactores de flujo en pistón isotérmicos
- 3.4.5. Diseño y optimización de reactores de membrana de enzima inmovilizada
- 3.4.6. Combustión en una capa porosa. Algoritmo computacional
- 3.4.7. Ejercicios
- 3.5. Dinámica de fluidos isotérmicos incompresibles
 - 3.5.1. Modelo de retículas de Boltzmann para la ecuación de Navier-Stokes
 - 3.5.2. Operador de colisión BGK
 - 3.5.3. Función de distribución al equilibrio
 - 3.5.4. Expansión de Chapman-Enskog para sistemas de dinámica de fluidos
 - 3.5.5. De la ecuación de retículas de Boltzmann a la ecuación de Navier-Stokes
 - 3.5.6. Algoritmo de retículas de Boltzmann para flujo entre placas paralelas
 - 3.5.7. Algoritmo de retículas de Boltzmann para flujo laminar axisimétrico
 - 3.5.8. Algoritmo para flujo a través de lechos porosos

4. FENÓMENOS TERMOHIDRODINÁMICOS COMPLEJOS

- 4.1. Inestabilidades hidrodinámicas
 - 4.1.1. Inestabilidad de Taylor-Couette
 - 4.1.1.1. Ecuaciones diferenciales gobernantes
 - 4.1.1.2. Modelo de retículas de Boltzmann
 - 4.1.1.3. Algoritmo computacional
 - 4.1.1.4. Aplicaciones en ingeniería química
 - 4.1.2. Inestabilidad de Rayleigh-Bénard
 - 4.1.2.1. Ecuaciones diferenciales gobernantes
 - 4.1.2.2. Modelo de retículas de Boltzmann
 - 4.1.2.3. Algoritmo computacional
 - 4.1.2.4. Aplicaciones en ingeniería química
 - 4.1.3. Inestabilidad de Bénard-Poiseuille
 - 4.1.3.1. Ecuaciones diferenciales gobernantes
 - 4.1.3.2. Modelo de retículas de Boltzmann
 - 4.1.3.3. Algoritmo computacional
 - 4.1.3.4. Aplicaciones en ingeniería química
 - 4.1.4. Modelo de retículas de Boltzmann para flujos turbulentos

5. DINÁMICA BROWNIANA

- 5.1. Fenómenos de sedimentación
- 5.2. Fenómenos de acreción, floculación y electrofloculación
- 5.3. Formulación del modelo basado en dinámica browniana
- 5.4. Algoritmo computacional
- 5.5. Aplicaciones en ingeniería química

6. MÉTODOS DE MONTE CARLO

- 6.1. Variables estocásticas discretas y continuas
- 6.2. Generación de números pseudoaleatorios
- 6.3. Método Metrópolis
- 6.4. Integración por Monte Carlo
- 6.5. Trayectorias aleatorias
- 6.6. Movimiento browniano
- 6.7. Simulación de procesos estocásticos
- 6.8. Simulación de procesos de difusión
- 6.9. Simulación de reacciones químicas
- 6.10. Simulación de sistemas de reacción difusión

ACTIVIDADES PRÁCTICAS

La parte práctica de la asignatura corresponde a la resolución de problemas y a la elaboración de algoritmos de cómputo que se relacionen con las unidades temáticas descritas. Estas actividades deberán reflejar el número de horas prácticas señaladas en este programa y deben ser consideradas en la evaluación final de la asignatura.

BIBLIOGRAFÍA

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA:

- Deville, M. O. & Thomas B. G. Mathematical Modelling for Complex Fluids and Flows. Springer. USA. 2012.
- Kauzmann, W. Kinetic Theory of Gases. Dover Books. New York, USA. 2012
- Nagnibeda, E. Non Equilibrium Reacting Gas Flows: Kinetic Theory of Transport and Relaxation Processes (Heat and Mass Transfer). Springer. USA. 2010.
- Succi, S. The Lattice Boltzmann Method for Fluid Dynamics and Beyond (Numerical Mathematics and Scientific Computation). Oxford University Press. USA, 2001.
- Mohamad, A. A. Lattice Boltzmann Method. Fundamentals and Engineering Applications with Computer Codes. Springer. USA. 2011.
- Sukop, M. C., Thorne D. T. Lattice Boltzmann Modeling. Springer. USA. 2010.
- Chang, Q., Iwan J. Application of Lattice Boltzmann Method. Thermal Multiphase Fluid Dynamics. Springer. Berlin, Germany. 2008.
- Wolf-Gladrow, D. Lattice Gas Cellular Automata and Lattice Boltzmann Models. Springer. USA. 2000.
- Hoekstra, A. G., Kroc, G. Slot, P. Simulating Complex Systems by Cellular Automata. Springer, USA. 2010.
- Li, T. M. Cellular Automata (Mathematics Research Development: Computer Science, Technology and Applications). Nova Science Publications. USA. 2011.

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

- Liboff, R. L. Kinetic Theory. Classical, Quantum and Relativistic Descriptions. Springer. USA. 2012.
- Zhou, J. G. Lattice Boltzmann Method for Shallow Water Flows. Springer. USA. 2010.
- Kier, L. B. Modeling Chemical Systems using Cellular Automata. Springer. Netherlands. 2005.
- Brush, S. G. The Kinetic Theory of Gases. Imperial College Press. UK. 2003.
- Yuang, P. Thermal Lattice Boltzmann Two-Phase Flow. VDM Verlag. Berlin, Germany 2009.
- Sone, Y. Kinetic Theory and Fluid Dynamics. Birkhauser. Berlin, Germany. 2002.

CIBERGRAFÍA

- Kinetic Molecular Theory. <http://www.chm.davidson.edu/vce/kineticmolecularttheory/basicconcepts.html>
- Interactive Lattice Boltzmann. Tutorial based flow simulation and visualization. <http://www.cs.kent.edu/~zhao/vis08tutorial/>
- Lattice Boltzmann Scheme Tutorial. <http://www.math.u-psud.fr/~fdubois/organisation/19janv2010/programme-2-19janv2010.pdf>
- FHP Lattice Gas Automata Tutorial. <http://softology.com.au/tutorials/latticegas/fhplga.htm>
- Monte Carlo Simulations Tutorials. <http://people.revoledu.com/kardi/tutorial/Simulation/index.html>
- Introduction to Practice of Molecular Simulations: Molecular Dynamics, Monte Carlo, Brownian Dynamics, Lattice Boltzmann. <http://www.tumblr.com/tagged/brownian-dynamics>

**SUGERENCIAS DIDÁCTICAS RECOMENDADAS PARA IMPARTIR LA
ASIGNATURA**

SUGERENCIAS DIDÁCTICAS	UTILIZACIÓN EN EL CURSO
Exposición oral	x
Exposición audiovisual	
Actividades prácticas dentro de clase	x
Ejercicios fuera del aula	x
Seminarios	
Lecturas obligatorias	
Trabajo de investigación	x
Prácticas de Taller	
Elaboración de algoritmos computacionales en clase	x
Trabajo en sala de cómputo	x
Otras	

MECANISMOS DE EVALUACIÓN.

ELEMENTOS UTILIZADOS PARA EVALUAR EL PROCESO ENSEÑANZA-APRENDIZAJE	UTILIZACIÓN EN EL CURSO
Exámenes parciales	x
Examen final	x
Trabajos y tareas fuera del aula	x
Exposición de seminarios por los alumnos.	
Participación en clase	x
Asistencia	

PERFIL PROFESIOGRÁFICO REQUERIDO PARA IMPARTIR LA ASIGNATURA			
LICENCIATURA	POSGRADO	ÁREA INDISPENSABLE	ÁREA DESEABLE
Ingeniería Química	Ingeniería Química ó Ciencias Químicas		Termodinámica Estadística
Con experiencia docente			