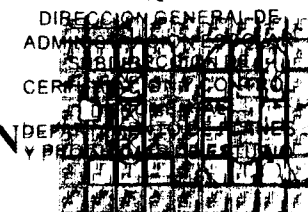




**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO.**  
**FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES CUAUTITLÁN**  
**CARRERA DE INGENIERÍA QUÍMICA**

1091



PROGRAMA DE LA MATERIA: TERMODINÁMICA ESTADÍSTICA QUE CURSARÁN LOS ALUMNOS DE OCTAVO O NOVENO SEMESTRE  
DE LA CARRERA DE INGENIERÍA QUÍMICA, PAQUETE TERMINAL : TERMODINÁMICA ESTADÍSTICA  
ÓRGANO INTERNO QUE COORDINA EL PROGRAMA DE LA ASIGNATURA: DEPARTAMENTO DE FÍSICA. SECCIÓN MECÁNICA  
HORAS/SEMANA : 3 (3 TEÓRICAS) CRÉDITOS : 6  
CAMPO: COMPLEMENTARIO CARÁCTER DE LA ASIGNATURA: OPTATIVA MODALIDAD: CURSO TEÓRICO  
ASIGNATURA PRECEDENTE: NINGUNA (SERIACIÓN POR BLOQUES) ASIGNATURA SUBSECUENTE: NINGUNA

### INTRODUCCIÓN

La Termodinámica Estadística es una herramienta muy útil para caracterizar procesos físicos y químicos. Ha sido empleada para determinar propiedades de transporte, como la conductividad térmica de gases, la viscosidad y los coeficientes de difusividad, importantes para el ingeniero químico. Sin embargo, no está limitada a esa área. En los últimos años ha habido muy buenos avances en la explicación de fenómenos que por otras técnicas no es posible describir. Por ejemplo, las técnicas de caminantes al azar, las de grupos de renormalización, las de retículas de gas, la dinámica molecular y las retículas de Boltzmann, han permitido explicar algunas características interesantes de transiciones de primer orden y continuas, algo de la dinámica de los flujos turbulentos, dinámica de las reacciones químicas, la ruta periódica hacia al caos, etcétera.

En este curso se da un enfoque moderno a la Termodinámica Estadística, tratando de desarrollar los temas de mayor interés en la ingeniería química, incluyendo sistemas moleculares, microscópicos, macroscópicos, e incluso diseños de equipo. En el momento de escribir esto, la técnica de redes de Boltzmann parece muy promisoría en prácticamente todas las áreas de interés de la Ingeniería Química, como la transferencia de calor por conducción, convección y radiación; difusión de mezclas de multicomponentes, transiciones de fase; turbulencia; flujos laminares. Por cierto, en la caracterización de flujos laminares, en algunos casos, al aplicar redes de Boltzmann, se recuperan las Ecuaciones de Navier Stokes, pero no en todos, y sin embargo se obtienen descripciones que concuerdan bastante bien con los resultados experimentales.

### OBJETIVO

Al terminar el curso el alumno deberá ser capaz de:

Explicar el fundamento teórico de varias de las técnicas de Termodinámica estadística y construir algoritmos computacionales que permitan hacer predicciones cuantitativas exactas de fenómenos de interés en la Ingeniería Química.

**PROGRAMA:**

No de HORAS	T E M A :	OBJETIVOS AL FINALIZAR LA CLASE, EL ALUMNO DEBERÁ SER CAPAZ DE :	NÚMERO DE HORAS
6	<b>UNIDAD I. INTRODUCCIÓN A LA TERMODINÁMICA ESTADÍSTICA</b> 1.1 CONCEPTOS FUNDAMENTALES 1.2 DEFINICIÓN DE VARIABLES DEPENDIENTES E INDEPENDIENTES 1.3 DISCRETIZACIÓN 1.4 EL TEOREMA ERGÓDICO	<b>UNIDAD IV. MÉTODOS DE LATTICE DE GAS.</b> 4.1 FUNDAMENTOS FÍSICOS 4.2 MODELOS MATEMÁTICOS 4.3 ALGORITMOS COMPUTACIONALES 4.4 APLICACIONES	12
6	<b>UNIDAD II. MÉTODOS DE CAMINANTES AL AZAR</b> 2.1 FUNDAMENTOS 2.2 ALGORITMOS 2.3 APLICACIONES	<b>UNIDAD V. MÉTODOS DE RETÍCULAS DE BOLTZMANN</b> 5.1 FUNDAMENTOS 5.2 FUNCIONES DE DISTRIBUCIÓN 5.3 RETÍCULAS TÍPICAS QUE CONSERVAN SIMETRÍA 5.4 RETÍCULAS QUE NO CONSERVAN SIMETRÍA 5.6 DISCRETIZACIÓN DEL ESPACIO 5.7 ALGORITMO COMPUTACIONAL 5.8 APLICACIONES	12
12	<b>UNIDAD III. GRUPOS DE RENORMALIZACIÓN</b> 3.1 TRANSICIONES DE FASE DE PRIMER ORDEN Y CONTINUAS 3.2 EL HAMILTONIANO DE UN SISTEMA MAGNÉTICO POR INTERACCIONES DE ESPÍN 3.2 ALGORITMO DEL GRUPO DE RENORMALIZACIÓN POR CONSTRUCCIÓN DE BLOQUES DE ESPÍN 3.2 EXPONENTES CRÍTICOS 3.3 ALGORITMO COMPUTACIONAL 3.4 RESULTADOS 3.5 GRUPOS DE RENORMALIZACIÓN EN TURBULENCIA		



DIRECCION GENERAL DE  
 ADMINISTRACION ESCOLAR  
 SUBDIRECCION DE  
 CERTIFICACION Y CONTROL  
 DOCUMENTAL  
 DEPARTAMENTO DE PLANES  
 Y PROGRAMAS DE ESTUDIO



DIRECCION GENERAL DE  
ADMINISTRACION ESCOLAR  
SUBDIRECCION DE  
CERTIFICACIÓN Y CONTROL  
DOCUMENTAL  
DEPARTAMENTO DE PLANES  
Y PROGRAMAS DE ESTUDIO

## BIBLIOGRAFÍA:

### BIBLIOGRAFÍA BÁSICA:

- BETTS, DAVID S. & TURNER E. ROY. INTRODUCTORY STATISTICAL MECHANICS. ADDISON WESLEY PUBLISHERS. LONDON, ENGLAND. 1992
- BINNEY, J.J.; DOWRICK, N.J.; FICHER, A.J. & NEWMAN, M.E.J. THE THEORY OF CRITICAL PHENOMENA. CLARENDON PRESS. OXFORD, ENGLAND. 1993
- CRESWICK, R.J.; FARACH, H.A. & POOLE, C.P. INTRODUCTION TO RENORMALIZATION GROUPS IN PHYSICS. JOHN WILEY AND SONS. NEW YORK, USA. 1992
- FAUST, G; HAASE, M. & ARGYRIS, J. AN EXPLORATION OF CHAOS. NORTH HOLLAND, AMSTERDAM, 1994
- HIGUERA, F. AND J. JIMÉNEZ. BOLTZMANN APPROACH TO LATTICE GAS SIMULATIONS. EUROPHYS. LETT 9(7): 663-668, (1989).
- HIGUERA, F., SUCCI AND R. BENZI. LATTICE GAS DYNAMICS WITH ENHANCED COLLISIONS. EUROPHYS. LETT. 9(4):345-349, (1989).
- HOOVER, Wm G. COMPUTATIONAL STATISTICAL MECHANICS. ELSEVIER, AMSTERDAM, 1991
- Mc DONALD, WILLIAM; DWORZECKA, MARÍA & ERLICH, ROBERT. CONSORTIUM OF UPPER-LEVEL PHYSICS SOFTWARE. STATISTICAL THERMODYNAMICS PROGRAMS 1994.
- MCNAMARA, G. AND G. ZANETTI. USE OF THE BOLTZMANN EQUATION TO SIMULATE LATTICE-GAS AUTOMATA. PHYS. REV. LETT., 61:2332-2335, (1988).
- Mc QUARRY, DONALD. STATISTICAL MECHANICS. HARPER AND ROW. NEW YORK, 1976
- NIEMEIJER TH. AND VAN LEEUWEN, J.M. PHASE TRANSITIONS IN CRITICAL PHENOMENA. ACADEMIC PRESS, N.Y. VOL. 6. 1976
- QIAN, Y.H. ; D'HUMIERES, D. & LALLEMAND, P. LATTICE BGK MODELS FOR NAVIER-STOKES EQUATION. EUROPHYS. LETT. 17 (6) :479-84(1992).
- SAURO, SUCCI. THE LATTICE BOLTZMANN EQUATION FOR FLUID DYNAMICS AND BEYOND. (OXFORD: CLARENDON: OXFORD UNIVERSITY, 2001).
- WOLF-GLADROW, DIETER A. (EDITOR) . LATTICE GAS CELLULAR AUTOMATA AND LATTICE BOLTZMANN MODELS. (SPRINGER-VERLAG, BERLIN HEIDELBERG 2000)

### BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA:

- De GENNES, P.G. ON THE APPLICATION OF RENORMALIZATION GROUP TO STUDY OF POLYMERS. PHYSICS LETTERS, 38 A, 339
- FRISCH, U; HASSLACHER, B. & POMEAU, Y. LATTICE-GAS AUTOMATA FOR THE NAVIER-STOKES EQUATIONS. PHYSICAL REVIEW LETTER, 56:1, 505-1508, (1986)