

Uso de *software* en clases de termodinámica para evaluar propiedades de sustancias puras

Using software to evaluate thermodynamics properties of pure substances in thermodynamics courses

Ana R. Herrera-Soto ^{1*}, William E. Fagiani-Cruz ¹

¹Área de Investigación, Desarrollo Tecnológico e Innovación Escuela de Ingeniería Química, Universidad de San Carlos de Guatemala

*Autor al que se dirige la correspondencia: herrerana_29@yahoo.com

Recibido: 19 de julio 2023 / Revisión: 06 de noviembre 2023 / Aceptado: 29 de diciembre 2023

Resumen

En clases de termodinámica los estudiantes de ingeniería aprenden a estimar propiedades termodinámicas de sustancias, utilizando distintos modelos: ecuaciones de estado, tablas de datos termodinámicos o diagramas. Las tablas de datos termodinámicos son el resultado de tabular información que se obtiene de ecuaciones multiparamétricas, estos datos también pueden ser almacenados en distintos paquetes de *software*. El uso de esta tecnología aporta ventajas a un curso de termodinámica, permitiendo ahorrar tiempo en cálculos y enfocarse en el estudio de conceptos. El acceso a *software* con datos termodinámicos puede verse limitado por el valor económico que implica la adquisición de licencias de usuario. Pero es posible utilizar programas tipo *free and open source*, como *Cantera* y *CoolProp*, bibliotecas de datos termodinámicos a las que se puede acceder de forma gratuita utilizando distintos lenguajes de programación. El uso de *software* de este tipo requiere que los usuarios escriban códigos de programación para obtener los datos que tratan de estimar, lo cual podría parecer intimidante para una persona con poca experiencia en programación, pero también implica una ventaja pues podría propiciar que el estudiante comprenda la relación entre variables, conceptos termodinámicos y los códigos que necesita usar en sus cálculos. En el caso de un curso de termodinámica de la Escuela de Ingeniería Química de la Universidad de San Carlos de Guatemala se implementó el uso de *Cantera*, permitiendo observar que los estudiantes mostraban resistencia a utilizar este tipo de tecnología, además de problemas en el manejo de conceptos y del lenguaje del *software*.

Palabras clave: *Free and open source*, Jupyter notebook, *CoolProp*, *Cantera*, enseñanza de termodinámica, Python

Abstract

In thermodynamics courses engineering students learn to estimate the thermodynamic properties of substances, by using different models: equations of state, thermodynamics tables and charts. The thermodynamics tables are the result of tabulating the information obtained by using multiparameter equations, this data could also be saved in software. The implementation of this technology in a thermodynamics course brings different advantages, allowing to save time spent in calculations and to focus on the concept study. But the economic value associated with purchasing user licenses could be a limitation in the use of this software. To avoid this problem the implementation of free and open source software could be evaluated. Examples of this kind of software are the libraries of thermodynamic data: *Cantera* and *CoolProp*, which can be accessed by using different programming languages. The use of *Cantera* and *CoolProp* is free. When using this kind of software to estimate data the user must write programming codes. This may seem intimidating for a person with little experience in coding, but this could also be an advantage because it could lead the student to understand the relationship between the variables, the thermodynamic concepts and the codes needed in his calculations. The use of *Cantera* was part of a thermodynamic course from the Chemical Engineering School of the San Carlos University of Guatemala. This made it possible to observe resistance in the students to use this kind of technology, and problems in the concept management and in the use of the software language.

Keywords: Free and open source, Jupyter notebook, *CoolProp*, *Cantera*, teaching thermodynamics, Python



Introducción

Al trabajar con balances de masa y energía se hace necesario contar con información sobre el comportamiento de variables fisicoquímicas de las sustancias puras, por ejemplo, el valor de la entalpía o el volumen específico del agua que está pasando por un intercambiador de calor. El valor de estas propiedades se definirá según la presión y la temperatura en la que se encuentra la sustancia, y se podrán estimar sus valores utilizando las herramientas que ha desarrollado la termodinámica. Por ejemplo, la ecuación del gas ideal, ecuaciones de estado multiparamétricas, diagramas termodinámicos, tablas de datos termodinámicos, o *software* que almacena este tipo de información. Es en los cursos de termodinámica en donde los estudiantes de ingeniería aprenden a manejar e interpretar este tipo de herramientas (Martin et al., 2016).

El uso de herramientas básicas como tablas de vapor o diagramas termodinámicos ayuda al estudiante de termodinámica a comprender como las distintas variables se relacionan y cambian al modificar las condiciones de un sistema (Mayhew, 1991). En tanto que el uso de *software* para el cálculo de propiedades termodinámicas permite ahorrar el tiempo empleado en la resolución de un problema, permitiendo al profesor enfocarse en el estudio de los conceptos (Gourde & Akih-Kumgeh, 2017), ilustrando a los estudiantes de forma inmediata como los cambios realizados en el sistema pueden afectar el resultado final (Martin et al., 2016). El uso de ambos tipos de herramientas presenta ventajas y desventajas para el estudiante y el profesor de termodinámica. Sin embargo, la implementación de *software* en un curso de termodinámica debería llevar al profesor a hacerse cuestionamientos que normalmente no evaluaría al limitarse a la utilización de libros de texto. Aspectos como el acceso de sus estudiantes al *software* requerido es uno de los más importantes a evaluar. El profesor también debería de evaluar si el uso de *software* podría o debería de reemplazar por completo el uso de tablas y diagramas termodinámicos, cuestionando si el uso de ambos tipos de herramientas puede ser complementario e incluso ilustrativo para el estudiante.

La solución al problema que podría implicar la compra de *software* para el uso en clases de termodinámica se podría encontrar en la implementación de *software* tipo *open source*, y en el uso de *libraries* o bibliotecas que contengan información de modelos termodinámicos.

En la Universidad de San Carlos de Guatemala (USAC), la Escuela de Ingeniería Química imparte un curso de termodinámica, en donde uno de los objetivos de aprendizaje es que los estudiantes desarrollen la capacidad de utilizar tablas de datos termodinámicos, utilizándolas como herramientas para analizar balances de energía y ciclos. Se decidió implementar el uso de *software* en dicho curso de termodinámica para que los estudiantes aprendieran a utilizar este tipo de herramientas para hacer estimaciones que normalmente harían con la versión impresa de las tablas de datos termodinámicos. Sin embargo, el uso del *software* en el curso no anuló el uso de la versión impresa de las tablas de datos termodinámicos. El *software* utilizado fue *Cantera*, el cual es de tipo *open source*.

Contenido

Historia de las tablas de propiedades termodinámicas de sustancias puras

La termodinámica ha recorrido un largo camino en la descripción de propiedades termodinámicas, iniciando con el desarrollo de la ecuación del gas ideal hasta las ecuaciones de estado multiparamétricas que se utilizan hoy en día para describir el comportamiento de sustancias puras. Según Span (2000), fue la publicación de la ecuación de Van der Waals la que permitió empezar a describir el comportamiento de una sustancia en todos sus posibles estados de agregación, dando lugar a la aparición de las ecuaciones cúbicas. Luego aparecería la ecuación de Benedict-Web-Rubin, modelo que según Span (2000) presenta una exactitud superior a las ecuaciones cúbicas. Los avances tecnológicos desarrollados en las décadas posteriores dieron lugar a la aparición de nuevos modelos, basados inclusive en datos experimentales y que permitieron la creación de algoritmos de optimización, que luego se combinarían con formulaciones basadas en la energía de Helmholtz (utilizados hoy en día en modelos empíricos) (Span, 2000).

Las ecuaciones de estado multiparamétricas son la base para la obtención de datos termodinámicos utilizados en aplicaciones científicas e industriales (Span, 2000). Por ejemplo, el agua es una de las sustancias más utilizadas a nivel industrial, tanto es así que autores como Kim y colaboradores (2020) reconocen la importancia de calcular de manera adecuada sus propiedades termodinámicas, pues estos parámetros son ampliamente utilizados en la operación y diseño de

equipo industrial. Uno de los modelos más utilizados para evaluar las propiedades termodinámicas del agua es la formulación IAPWS-95 desarrollada por Wagner y Pruß en 1995. Según estos investigadores la importancia de la evaluación de las propiedades termodinámicas del agua radica en su uso en aplicaciones que van desde la generación de electricidad en termoeléctricas hasta evaluaciones del comportamiento del clima, además de su amplio uso en aplicaciones industriales (Wagner & Pruß, 2002).

A pesar de la importancia del desarrollo de modelos como el IAPWS-95, el estudio de ellos o de ecuaciones de estado paramétricas no son temas que sean abordados normalmente en los cursos de termodinámica (Span, 2000). Dada la complejidad de estas ecuaciones de estado, la información que se adquiere a partir de ellas suele representarse en tablas o diagramas termodinámicos (Çengel & Boles, 2015), y es con estas herramientas con las que suelen trabajar los estudiantes de ingeniería en cursos de termodinámica, pues resultan herramientas más fáciles y sencillas de comprender. Por ejemplo, en su libro *Thermodynamics: an engineering approach* Çengel y Boles (2015) no reproducen la formulación IAPWS-95 presentada por Wagner y Pruß, sino que presentan datos termodinámicos del agua calculados y tabulados a partir de este modelo.

En la literatura se pueden encontrar un sin número de ecuaciones y modelos que representan el comportamiento de las sustancias puras. Por ejemplo, la publicación científica *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, que es el resultado del trabajo en conjunto del *National Institute of Standards and Technology* y el *American Institute of Physics*, para el año 2000 reportaba haber publicado más de 25 artículos científicos con tablas de datos termodinámicos y los modelos o ecuaciones multiparamétricas correspondientes (Span, 2000). Dos de los artículos más citados de la revista corresponden a la publicación de ecuaciones estándar de referencia para el dióxido de carbono y el agua (Harvey & Burgess, 2021).

Uso de tablas de propiedades puras en los cursos de termodinámica

Uno de los temas abordados en los cursos de termodinámica a nivel universitario, es el cálculo o estimación de propiedades de sustancias puras, que luego son utilizadas en balances de energía que involucran sistemas como el ciclo de Rankine, ciclos de refrige-

ración o aplicaciones psicrométricas. En estas clases los estudiantes deben aprender a manejar ecuaciones de estado y modelos, que van desde la ecuación del gas ideal, incluyendo las ecuaciones de estado cúbicas y modelos como los de Lee Kesler, hasta inclusive aprender a localizar estados en las tablas o diagramas de datos termodinámicos que se obtienen a partir de los modelos multiparamétricos. Autores como Martin y colaboradores (2016) consideran que el desarrollo de estas habilidades por parte de los estudiantes es un aspecto clave en la formación que reciben en los cursos de termodinámica.

Las tablas de vapor y los diagramas termodinámicos ofrecen la ventaja de ser exclusivos para una sustancia en particular y están divididos en regiones que permiten diferenciar entre fases. Las tablas de vapor generalmente están divididas en tres secciones: la región de líquido subenfriado, la región de saturación y la región de vapor sobrecalentado (Çengel & Boles, 2015). Además, al utilizar las tablas de vapor o los diagramas termodinámicos como fuentes de información en los balances de energía se evita el uso de ecuaciones que involucran integrales y derivadas.

En los cursos de termodinámica los estudiantes deberán aprender a ubicar los estados de manera adecuada en una de las regiones de la información tabulada. Al hacer esto deben utilizar los conceptos que han adquirido sobre el equilibrio líquido vapor, el cambio de fase, los procesos latentes y los procesos sensibles. También se hace necesario aprender a manejar el concepto de calidad de vapor y utilizar interpolaciones. Generalmente, para los estudiantes resulta complicado enlazar estos conceptos y los cálculos asociados. Autores como Liu (2011) han señalado que los estudiantes de termodinámica suelen presentar dificultades para ubicar los estados termodinámicos en las tablas de vapor, confundiendo las regiones de distintas fases señaladas en las tablas. Al respecto Martin y colaboradores (2016) opina que utilizar conceptos abstractos, como los que maneja la termodinámica, junto con el manejo de modelos, ecuaciones de estado, tablas de datos termodinámicos y operaciones básicas como la interpolación resulta en actividades retadoras para los estudiantes de ingeniería.

Generalmente, en los cursos de termodinámica los estudiantes tienen acceso a las tablas de vapor de diferentes sustancias a través de los libros de texto. Como se mencionó anteriormente, el libro *Thermodynamics: an engineering approach* de Çengel y Boles (2015) presenta tablas de vapor del agua, pero también incluye tablas de datos termodinámicos para el 1,1,1,2

Tetrafluoroetano (R-134 a). El libro *Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics* de Smith y colaboradores (2018) también incluye tablas de vapor del agua, aunque en un formato distinto al que presenta el libro Çengel y Boles. Tablas de datos termodinámicos de distintas sustancias también pueden encontrarse en el *Manual de Ingeniero Químico de Perry* (Southard et al., 2019), aunque la adquisición de este tipo de documento puede tener un precio elevado para un estudiante a nivel licenciatura.

Es necesario considerar que los libros de texto no son las únicas herramientas en donde los estudiantes pueden encontrar las tablas de datos termodinámicos. Este tipo de información también puede ser obtenida a partir de paquetes de *software* que incluyen los modelos de las propiedades de sustancias puras. En las siguientes secciones se mencionan algunos ejemplos de este tipo de *software*, y se discute sobre su implementación en cursos de termodinámica, citando autores que han trabajado con estos programas, y describiendo la experiencia que se ha tenido al implementar su uso en un curso de termodinámica de la Escuela de Ingeniería Química, de la Universidad de San Carlos de Guatemala.

Software para evaluar propiedades termodinámicas de sustancias puras:

Las tablas de datos termodinámicos no son los únicos productos que se obtienen a partir de las ecuaciones multiparamétricas. La información de estos modelos también puede ser representada en diagramas termodinámicos, como el diagrama de *Mollier*, o puede ser alojada en programas para computadora. Cualquiera de las dos opciones elimina la necesidad de realizar interpolaciones o de aplicar directamente el concepto de regla de la palanca, lo cual podría implicar una ventaja para ahorrar tiempo de cálculo. Sin embargo, es necesario resaltar que, al utilizar diagramas termodinámicos, la precisión de los datos obtenidos depende de que el estado que se está tratando de evaluar se encuentre posicionado cerca de una línea marcada en el diagrama, de lo contrario se tendrán que hacer aproximaciones. Esto último puede resultar en que dos personas, evaluando el mismo dato, hagan una aproximación distinta.

El uso de *software* para la evaluación de propiedades termodinámicas implica la creación de algoritmos de cálculo que involucren a las ecuaciones de estado multiparamétricas. En este caso si dos per-

sonas evalúan el mismo estado, utilizando el mismo programa deberían de obtener el mismo resultado, lo mismo sucedería con el uso de las tablas de datos termodinámicos.

Kazakov y colaboradores (2008) resaltan un aspecto clave del uso de *software* para el cálculo de propiedades termodinámicas: el fácil e inmediato acceso a la información sobre las sustancias ayuda en el desarrollo de aplicaciones industriales y científicas. Almacenar este tipo de información en una base de datos permite tener a la disposición del usuario información de propiedades termodinámicas de más de una sustancia, eliminando la necesidad de consultar distintas fuentes.

La aparición de *software* para estimar propiedades termodinámicas no es reciente. Sin embargo, sus características han ido evolucionando junto con el desarrollo de nuevas tecnologías. Por ejemplo, en 1996 *ChemicaLogic Coporation* creó una herramienta que permite calcular las propiedades del agua (en fase líquida o gaseosa) con base en la formulación IAPWS-95, utilizando hojas de cálculo de *Microsoft Excel* (Lide, 1996). Más adelante la misma compañía pondría a disposición del público el *software Thermodynamic and Transport Properties of Water and Steam*, el cual también puede ser utilizado para calcular las propiedades termodinámicas del agua, basándose en el modelo IAPWS-95. A diferencia de la hoja de cálculo, este programa es un archivo ejecutable con su propia interfaz gráfica, que solamente puede ser ejecutado en *Windows* (ChemicaLogic Corporation, 2003). El acceso a ambas herramientas es gratuito.

El *National Institute of Standards and Technology* de Estados Unidos (*NIST*) ha creado un sitio de internet denominado *NIST Chemistry WebBook* en donde se pueden consultar propiedades químicas y físicas de distintas sustancias (Linstrom & Mallard, 2023). El acceso a esta base de datos es gratuito. La información que aparece en ella no solamente proviene de fuentes del *NIST*, sino que también presenta información obtenida a partir de otras fuentes; según Linstrom y Mallard (2001) el sitio provee los metadatos necesarios para identificar a las fuentes de donde proviene la información. Linstrom y Mallard resaltan que el *Chemistry WebBook* ha sido utilizado en la industria, para el desarrollo de investigaciones e inclusive con fines educativos. Esta herramienta creada por el *NIST* es un ejemplo exitoso del almacenamiento y distribución de información de propiedades termodinámicas a través de dispositivos electrónicos (Kazakov et al., 2008).

También existe en el mercado *software* dedicado a cálculos termodinámicos que requiere la compra de una licencia de usuario para poder utilizarlos. Por ejemplo, el *Engineering Equation Solver* y *REFPROP*. El *Engineering Equation Solver* es un programa que puede ser utilizado para resolver problemas de cálculo, generar gráficas, etc. (F-chart Software, 2023). Además, el programa incluye una base de datos de propiedades termodinámicas de varias sustancias, entre ellas el agua, el etanol, la acetona, y el 1,1,1,2 Tetrafluoroetano (R-134a). Por su parte el *National institute of standards and Technology*, de Estados Unidos, creó el programa *REFPROP*. Este programa contiene una base de datos de propiedades termodinámicas y de transporte para sustancias puras y mezclas (Lemmon et al., 2018). Por su parte el programa *Steam97 Application* se caracteriza por almacenar información de las propiedades termodinámicas del vapor de agua basándose en la formulación IAPWS-IF97 (MegaWatSoft, s.f.), para usar este programa también es necesario adquirir una licencia.

Uso de software en cursos de termodinámica:

El uso de *software* y simulaciones en la educación de estudiantes de ingeniería se ha vuelto vital (Nehra & Tyagi, 2014).

En la actualidad los profesores de termodinámica están implementando el uso de *software* en la enseñanza de sus cátedras. Este es el caso que presentan Gourde y Akih-Kumgeh (2017), quienes crearon en *MATLAB* un programa destinado a ser utilizado por estudiantes de cursos de termodinámica para evaluar las propiedades del agua. El programa puede usarse para la evaluación de ciclos de potencia y de refrigeración, e incluso para la generación de diagramas termodinámicos que ilustren el comportamiento de las variables termodinámicas durante los procesos. En este caso es necesario recordar al lector que el uso de *MATLAB* tiene un precio económico asociado. El trabajo de Gourde y Akih-Kumgeh (2017) es un ejemplo de cómo la tecnología se ha ido incorporando en los cursos de termodinámica. Como lo dicen Mulop y colaboradores (2012) la enseñanza de la termodinámica ha evolucionado desde un enfoque tradicional en el aula hasta la incorporación de *software*. El uso de este tipo de materiales no se limita solamente a la evaluación de propiedades termodinámicas de las sustancias, sino que también contempla el estudio de ciclos termodinámicos y simulaciones. Un aspecto a favor de la utiliza-

ción de *software* en las clases de termodinámica es que su uso facilita la resolución de problemas, reduciendo el tiempo dedicado a hacer cálculos, permitiendo al profesor dedicar más tiempo de clase al estudio y evaluación de conceptos (Gourde & Akih-Kumgeh, 2017).

Desde el punto de vista de los estudiantes, puede que para algunos el uso de los programas de computadora pueda resultar más sencillo que utilizar los datos tabulados. Pero su uso también puede provocar efectos indeseados. Por ejemplo, que los estudiantes dejen de asociar y comprender los conceptos involucrados en un problema (Gourde & Akih-Kumgeh, 2017); o como lo señalan Bakrania y Mallouk (2017), su uso puede resultar en que los estudiantes no comprendan las relaciones existentes entre distintas variables termodinámicas utilizadas para describir el estado de sustancias puras. Esto hace necesario que los estudiantes ya estén familiarizados con el uso de las tablas de datos termodinámicos y los diagramas de propiedades, antes de aprender a utilizar el *software* que seleccione el profesor para el desarrollo del curso. De no tener estos conocimientos se corre el riesgo de que el estudiante se confunda y que pierda el enfoque en el estudio del concepto que se desea abordar en una clase en particular.

Se ha observado que la implementación de *software* en la enseñanza de termodinámica puede también influir en el estudiante, dándole más confianza para resolver problemas que necesitan métodos numéricos (Castier & Amer, 2011). Otro aspecto que considerar son los beneficios que puede aportar la utilización de *software* que requiera que el usuario escriba comandos para obtener información de él, lo cual sucede frecuentemente cuando se implementa *software* tipo *open source*. Los aspectos positivos y negativos del uso de este tipo de programas en cursos de termodinámica se discutirán en las siguientes secciones.

Valor económico asociado al uso de software y la alternativa open source:

Los párrafos anteriores muestran que existen distintos tipos de *software* o herramientas que pueden ser utilizados en los cursos de termodinámica. Algunos de ellos son gratuitos, mientras que para acceder a otros es necesario comprar una licencia de usuario. La adquisición de las licencias necesarias para trabajar con estos programas implica un costo económico que algunas instituciones educativas no pueden cubrir y que en ocasiones los estudiantes tampoco pueden pagar (Lehtola & Karttunen, 2022; Nehra & Tyagi, 2014;

Vallejo et al., 2022). Este es el caso que se observó al decidir implementar el uso de *software* en uno de los cursos de termodinámica de la Escuela de Ingeniería Química.

Para solventar el problema mencionado en el párrafo anterior instituciones académicas han adoptado el uso de *software* gratuito y de código abierto (*free and open source software*) en la enseñanza de diversas materias. Lehtola y Karttunen (2022) explican que la utilización de *software open source* presenta distintas ventajas cuando es utilizado en la educación, las cuales son: la posibilidad de acceder al *source code*, y el hecho de que el *software* podría seguir siendo utilizado en aplicaciones distintas a las evaluadas en las clases, por ejemplo, a nivel industrial. En la actualidad se considera que los programas *open source* han alcanzado el nivel necesario para poder ser utilizados en enseñanza de la ingeniería y en investigación (Nehra & Tyagi, 2014).

Lo anterior lo ejemplifican Martin y colaboradores (2016) quienes evaluaron la utilización de un programa de computadora en un curso de termodinámica. En este caso los investigadores utilizaron *PYro*, un programa gratuito tipo *open source*, ejecutado a través de *Python*. Estos investigadores utilizaron el programa para que los estudiantes evaluaran el ciclo de *Brayton*, y observaron que la implementación de la herramienta ayudaba a los estudiantes a realizar los cálculos de una manera más versátil, permitiéndoles inclusive manipular las condiciones en las que se evaluaba el ciclo con mayor facilidad que si los cálculos se hicieran con tablas de datos termodinámicos. Además, los investigadores resaltan la facilidad con la que se pueden obtener diagramas que representen los ciclos al utilizar *PYro*. Según Martin y colaboradores (2016) el hecho de que el uso de esta herramienta sea gratuito es un aspecto importante que considerar en su implementación en un curso de termodinámica.

Características del *free and open source software* y uso en cursos de termodinámica:

La característica que podría resultar más atractiva para el uso del *software* tipo *free and open source* en cursos de termodinámica es el hecho que los estudiantes y las instituciones educativas no deben de hacer inversiones económicas para adquirir este tipo de programas. Para poder utilizar este tipo de *software* bastará con que los estudiantes tengan acceso a una

computadora, utilizando su equipo personal o utilizando los laboratorios de computación que suelen tener las universidades.

Tener acceso al código de programación del *software* podría no resultar atractivo para un profesor de termodinámica, a menos que esté interesado en hacer modificaciones para implementar funciones en específico, o si quisiera enseñar a sus estudiantes a programar ciertos tipos de cálculos.

Sin embargo, hay un aspecto que debe ser tomado en cuenta al utilizar un programa tipo *open source*: su interfaz de usuario no será tan amigable como la interfaz de otros programas que funcionan con interfaces gráficas. En los programas tipo *open source* normalmente es necesario ingresar una serie de comandos en un lenguaje de programación en específico para obtener el resultado que se está buscando. Esto podría resultar desalentador para los usuarios que no están acostumbrados a trabajar en programas que requieren el ingreso de códigos. Lo anterior implica que antes de implementar un programa con estas características, el profesor deberá evaluar si sus estudiantes poseen los conocimientos necesarios para poder utilizar este tipo de *software*.

También es necesario tomar en cuenta que en la actualidad se pueden utilizar interfaces que hacen más fácil la interacción del usuario con algunos lenguajes de programación. Es el caso de *Jupyter Notebook*, una herramienta gratuita tipo *open source*, que permite escribir y ejecutar programas utilizando distintos lenguajes de programación (Granger & Perez, 2021). La interfaz que ofrece *Jupyter Notebook* resulta amigable con el usuario que normalmente no tiene mucha experiencia en el ámbito de la programación (Wang et al., 2023). Un lenguaje de programación que ha ganado popularidad en la comunidad científica es *Python*, cuyos usuarios suelen elogiar por su sintaxis simple, característica que lo hace fácil de emplear para personas que no tienen experiencia en programación, además de que el acceso a él es gratuito (Perkel, 2015). En la actualidad existen muchas *librerías* o bibliotecas con distintas funcionalidades y aplicaciones científicas a los que se puede acceder con el lenguaje *Python*, a través de *Jupyter Notebook*, y utilizando *Anaconda* (Craig et al., 2022). *Anaconda* es un *software* que da acceso al usuario a plataformas para escribir códigos en distintos lenguajes de programación, entre ellos *Jupyter Notebook* (Rolon-Mérette et al., 2020).

¿Es necesario utilizar *software* en las clases de termodinámica?

Los cursos de termodinámica generalmente están enfocados en que los estudiantes conozcan y comprendan los conceptos relacionados con esta rama de la ciencia. Por ejemplo, en un curso de termodinámica el estudiante debe aprender el significado de conceptos como capacidad calorífica, entalpía, energía interna, entre otros. Luego el estudiante podrá utilizar estos conceptos para plantear y resolver balances de energía, aplicándolos en evaluaciones propias de otras materias que forman parte del pensum de estudio de ingeniería.

Además de comprender los conceptos, el estudiante deberá desarrollar la habilidad para estimar estas propiedades, utilizando modelos matemáticos o tablas de datos termodinámicos, como las tablas de vapor del agua. El estudiante normalmente tendrá acceso a esta información a través de sus libros de texto, pero también puede utilizar *software*. Su uso presentará distintas ventajas: los cálculos se realizarán más rápidamente, se tendrá acceso a información de más sustancias, y el uso del *software* puede ser replicado en el ambiente laboral en el que se desarrollará el estudiante. En cursos avanzados de termodinámica, la implementación del *software* puede ser de gran beneficio, pues al reducir el tiempo de cálculo el profesor y los estudiantes pueden enfocarse en estudiar o analizar conceptos con mayor atención.

¿Es necesario que los estudiantes aprendan a buscar propiedades termodinámicas sin *software*?

El uso de *software* en las clases de termodinámica para buscar propiedades de sustancias puras no debería reemplazar por completo el uso de tablas o diagramas termodinámicos. El uso de estas herramientas impresas (o su versión digital) resulta una primera aproximación útil para que los estudiantes comprendan cómo se comportan las variables termodinámicas cuando las condiciones a las que se encuentra una sustancia pura cambian. Lo anterior se puede atribuir a que las tablas de datos termodinámicos de sustancias puras generalmente están separadas en secciones correspondientes a los estados de agregación en los que se puede encontrar la sustancia. Lo mismo sucede con los diagramas termodinámicos que generalmente ilustran las fronteras entre las fases líquida, vapor saturado y vapor sobrecalentado. En el caso del *software*

es necesario tomar en cuenta que algunos de ellos no hacen estas distinciones, por lo que el estudiante podría no saber en qué fase se encuentra una sustancia en un estado termodinámico determinado, haciendo que la interpretación del resultado matemático sea difícil para el estudiante.

Probablemente el uso de tablas de datos termodinámicos y diagramas ayude al estudiante a comprender mejor los conceptos evaluados. Permitir que el estudiante utilice en primera instancia este material lo preparará para comprender mejor cómo funciona un *software* para la búsqueda de propiedades termodinámicas; evitando que el estudiante sólo se dedique a ingresar datos al programa sin comprender lo que está haciendo (Mayhew, 1991).

Si el estudiante comprende los conceptos relacionados con el uso de tablas de datos para la evaluación de estados termodinámicos podrá utilizar de forma efectiva el *software* a su disposición, de lo contrario no comprenderá como ingresar datos al programa. Para buscar la información de un estado en particular se deben de calcular los grados de libertad, con ello se sabrá cuantas variables deben ser definidas para ubicar el resto de la información. El estado que localice el *software* dependerá de las variables definidas por el usuario, quien tendrá que hacer la distinción de cuantas de estas variables debe ingresar. Por ejemplo, si se busca la información de un estado que se encuentra dentro de la zona de saturación, el usuario debe reconocer la necesidad de ingresar el valor de la temperatura o la presión y el valor de la fracción de vapor. Si el usuario no comprende el concepto de fracción de vapor no podrá utilizar el programa de forma correcta y obtendrá un resultado erróneo. Este concepto generalmente se estudia cuando se aprende a utilizar las tablas de vapor y los diagramas termodinámicos. El uso de tablas de datos termodinámicos y diagramas ayuda a los estudiantes a comprender las relaciones que existen entre las distintas variables termodinámicas que describen estados (Mayhew, 1991).

Algunas de las características de los programas tipos *free and open source* podrían ayudar a reforzar el aprendizaje de conceptos en las clases de termodinámica. Al tener una interfaz que requiera el ingreso de códigos para estimar propiedades, obliga al usuario a relacionar los comandos con los conceptos que ha estudiado en la clase de termodinámica. Es decir, el estudiante debe ser capaz de analizar estos conceptos, ya que como lo sugieren autores como Reades (2020) la programación requiere la habilidad para manipular entidades abstractas. Entornos como *Jupyter* ayudan al

usuario a pensar, escribiendo los códigos que necesita utilizar y analizar los resultados que obtiene (Granger & Perez, 2021). En el caso de emplear la programación en el área de termodinámica, el usuario deberá conocer y saber interpretar los conceptos de grados de libertad y calidad de vapor antes de escribir los comandos necesarios para que el programa haga los cálculos. Al querer introducir el uso del *software Cantera* en una clase de termodinámica de la Escuela de Ingeniería Química, se tomó en cuenta lo anterior, pues se consideró imprescindible explicar los conceptos de grados de libertad y calidad de vapor a los estudiantes. Por otro lado, el uso de *software* en las clases prepara a los estudiantes para un ambiente laboral donde necesariamente tendrán que utilizar distintos tipos de programas y plataformas electrónicas.

Programas tipo open source para cursos de termodinámica:

Existen distintos programas y bases de datos que pueden ser utilizados para buscar propiedades termodinámicas de sustancias puras. Como se mencionó en párrafos anteriores algunos de ellos requieren la compra de una licencia de usuario y no se hablará sobre ellos en esta sección. La alternativa a ellos es utilizar *software* tipo *free and open source*.

Dados los avances que se han desarrollado en la creación y utilización de *software* tipo *open source*, se pueden encontrar distintas herramientas de este tipo que permiten la evaluación de propiedades termodinámicas. En este documento solamente se hará referencia a dos de ellas: *Cantera* y *CoolProp*, ambas pueden ser empleadas utilizando el lenguaje *Python*. Pero es necesario recalcar que una búsqueda de este tipo de herramientas llevará al lector a encontrar diversas opciones entre las que podrá evaluar cuál de ellas le resulta más útil según sus intereses.

Cantera es un programa tipo *open source*, creado por D. G. Goodwin, que cuenta con herramientas que pueden ser utilizadas para resolver problemas de termodinámica, cinética química y procesos de transporte (Goodwin et al., 2022). Si bien el objetivo con el que fue creado *Cantera* no es precisamente la búsqueda de propiedades de sustancias puras, este programa tiene almacenados modelos de 9 sustancias puras: dióxido de carbono, heptano, 1,1,1,2 Tetrafluoroetano (R-134a), hidrógeno, metano, nitrógeno, oxígeno y agua (Goodwin et al., 2022). Para acceder a esta información el usuario debe escribir el comando correspondiente al

modelo de la sustancia, y luego escribir los comandos necesarios para identificar los datos que definen al estado termodinámico que desea evaluar. Con esto el programa le proporcionará el valor de variables como energía interna, entalpía, entropía, calidad de vapor, entre otros. *Cantera* fue el *software* utilizado en el curso de termodinámica de la Escuela de Ingeniería Química en la USAC.

CoolProp también es una biblioteca tipo *open source*, que contiene la información termodinámica y física de 110 sustancias puras y pseudopuras, cuyas referencias pueden ser consultadas en su página web (Bell et al., 2014). Además de las sustancias antes mencionadas, *CoolProp* tiene incorporado un algoritmo que permite hacer cálculos psicrométricos. Se puede acceder a esta biblioteca a través de diferentes lenguajes de programación e interfaces, por ejemplo: *Excel*, *MATLAB* o *Python*, entre otros (Bell et al., 2014).

Para trabajar con *CoolProp* o *Cantera* un estudiante de termodinámica puede utilizar Anaconda para crear un *Jupyter Notebook*, y a través de él escribir los comandos necesarios para que la biblioteca calcule las propiedades termodinámicas de una sustancia en específico. Por ejemplo, estimar la energía interna del agua a una temperatura y presión determinada.

El estudiante puede utilizar *Cantera* o *CoolProp* para calcular la misma información que encuentra impresa en las tablas, por ejemplo, en las tablas de vapor del agua. Y también puede comparar la información con lo que encuentra en los diagramas termodinámicos. O inclusive comparar los resultados de los modelos almacenados en estos programas, con los modelos o ecuaciones de estado que ha estudiado en su clase de termodinámica. El uso de códigos también permite que usuario cree, con la ayuda de estas bibliotecas, programas que automaticen los cálculos realizados al evaluar ciclos termodinámicos. Esto lo ejemplifica el sitio web de *Cantera* al ofrecer al usuario, a modo de ejemplo, un algoritmo que puede ser utilizado para evaluar el ciclo de *Rankine*.

¿Tienen los estudiantes de ingeniería química las habilidades necesarias para trabajar con programas tipo free and open source?

La respuesta a la pregunta anterior dependerá del currículum bajo el que estén diseñadas las licenciaturas en ingeniería química en distintas universidades. Por lo tanto, el profesor de termodinámica debería evaluar si sus estudiantes han recibido algún tipo de enseñanza

que los condujera a escribir códigos o a programar, pues en algunos casos los cursos relacionados con el uso de computadoras podrían limitarse al uso de programas básicos, con interfaces gráficas de usuario. Sin embargo, utilizar programas que requieran codificación podría ayudar a los estudiantes a desarrollar habilidades que desconocían, y que en el mundo actual serán de utilidad en el campo laboral.

Por otro lado, si el estudiante no cuenta con el *hardware* para instalar los programas necesarios para trabajar en el curso de termodinámica, la implementación de *Jupyter Notebook* podría presentar una ventaja: este tipo de documento puede ser ejecutado en línea, utilizando elementos compartidos, como lo permite la herramienta *Binder*, sin la necesidad de instalar los programas en las computadoras. Al hacer esto, bastará con que el estudiante tenga acceso a la dirección de internet donde se ha almacenado el *Jupyter Notebook*, y con ello podrá trabajar, utilizando el programa o biblioteca que el profesor haya seleccionado.

Evaluación de la implementación del *software* *Cantera* en cursos de termodinámica

En el segundo ciclo del año 2019 se implementó el uso del *software* *Cantera* como parte del contenido de uno de los cursos de termodinámica impartidos en la Escuela de Ingeniería Química de la Universidad de San Carlos. La decisión de utilizar este *software* tipo *open source* se basó en la posibilidad de tener acceso a él, ya que su adquisición es gratuita.

Para acceder al *software* los estudiantes utilizaron *Anaconda* junto con *Jupyter Notebook* y el lenguaje de programación *Python*.

En este semestre el curso se desarrolló de forma presencial, lo cual influyó en la dificultad para que los estudiantes llevarán sus computadoras a la clase. Para solventar esto se daban demostraciones y ejemplos de uso del *software* en la clase magistral, dejando que el estudiante decidiera si podía o no llevar su computadora. Luego se les asignaba una tarea en la cual debían utilizar el *software*, pero esta tarea podía ser resuelta en casa. Se llevaron a cabo exámenes en donde se incluyeron problemas en los que los estudiantes debían utilizar el *software*. El *software* fue utilizado por los estudiantes para evaluar las propiedades de sustancias puras, inclusive analizando y utilizando el algoritmo publicado por *Cantera* en su página *web* para evaluar el ciclo de *Rankine*.

Durante las clases magistrales se pudo observar resistencia en los estudiantes a utilizar esta herramienta, lo cual podría ser atribuido a la falta de formación de competencias en programación a lo largo de todo su recorrido académico. También se observó en ellos dificultades para comprender el significado, sintaxis y estructura de los comandos a utilizar.

En una de las evaluaciones realizadas se les pidió a los estudiantes modificar el algoritmo de *Cantera* para el ciclo de *Rankine* con el fin de resolver un problema que incluyera regeneración. Un total de 37 estudiantes resolvieron la evaluación. Tomando en cuenta que este problema tenía un valor asignado de 10 puntos, es notorio que solamente el 51.35% de los estudiantes evaluados obtuvieron una nota superior al 50% del puntaje total del problema, pero el 72.97% mostraron dificultades para plantear el problema y el algoritmo, lo que tenía un valor del 30% de la nota total.

En otra oportunidad, durante el mismo ciclo académico, se realizó una evaluación en donde se incluyó un problema en el cual los estudiantes debían escribir un algoritmo para calcular el rendimiento de un ciclo de refrigeración por compresión de vapor utilizando *Cantera*. En esta ocasión el problema tenía un valor de 20 puntos, de los cuales 10 puntos correspondían al planteamiento del problema. De los 26 estudiantes evaluados, 30.76% de ellos mostró problemas para plantear la solución al problema, y solo el 11.53% obtuvo una nota superior al 50% del puntaje asignado.

Las dificultades observadas en ambos exámenes probablemente pueden atribuirse a dos factores relativamente independientes: las deficiencias en la comprensión conceptual del ciclo de refrigeración evaluados (*Rankine* y refrigeración por compresión de vapor) y la falta de habilidades para construir algoritmos y utilizar el lenguaje del *software*.

Conclusiones

La termodinámica, al igual que cualquier otra disciplina creada por el ser humano, ha evolucionado día a día. Esto se ve reflejado en la evolución de los modelos que se utilizan para describir el comportamiento termodinámico de las sustancias puras, partiendo del uso de la ecuación del gas ideal, llegando a las ecuaciones de estado multiparamétricas. Todo esto ha ofrecido la oportunidad de automatizar los cálculos de propiedades termodinámicas, utilizando *software* capaz de contener los modelos que son exclusivos de cada sus-

tancia. La implementación de este tipo de tecnología en los cursos de termodinámica puede tener aspectos positivos para el profesor y el estudiante. Al primero le permite ahorrar tiempo de cálculo y enfocarse en las explicaciones necesarias para lograr que sus estudiantes comprendan los conceptos. Para los estudiantes, el uso de *software* en su formación académica los prepara para el trabajo a nivel industrial, en donde seguramente tendrá que utilizar este tipo de tecnología, adaptándose a los diferentes tipos de productos tecnológicos que existen en el mercado. Pero también es necesario mencionar los aspectos negativos de la implementación de este tipo de tecnología en el aula, como el hecho de que los estudiantes pueden utilizar el *software* de forma automática, sin detenerse a evaluar el significado de las variables evaluadas, poniendo en riesgo la comprensión de los conceptos estudiados en el curso, o que desarrollen una dependencia de este tipo de herramientas que no les permita desarrollar las capacidades necesarias para utilizar las versiones impresas de las tablas de datos termodinámicos, reduciendo a la vez su capacidad de interpretar datos termodinámicos. El uso de *software* tipo *free open source* puede parecer intimidante para el usuario que no tiene experiencia en el mundo de la programación, como es el caso que se observó en los estudiantes del curso de termodinámica de la Universidad de San Carlos, descrito anteriormente. En esta oportunidad se pudo observar que los estudiantes mostraban problemas para manejar el *software* *Cantera* y su lenguaje, sumándose a las dificultades para la interpretación de conceptos propios de la termodinámica. Por ello es recomendable trabajar más en la implementación de estas herramientas en el aula para el estudio de la termodinámica, usándolas como complemento de las tablas de datos termodinámicos impresas, debido a que el uso combinado de ambas herramientas podría ayudar a que los estudiantes lleguen a comprender mejor las relaciones que existen entre las distintas variables que deben manejarse para estudiar un estado termodinámico. La experiencia en el curso de termodinámica de la Universidad de San Carlos, permite concluir que el uso de *software* debe ser un complemento en el curso, que no sustituye el uso de tablas de datos termodinámicos tradicionales. El acceso a programas gratuitos, como el tipo *open source* es importante, y asegura que casi todas las entidades académicas podrán trabajar con este tipo de programas sin la necesidad de la compra de licencias. En ese sentido la experiencia en la Universidad de San Carlos permite destacar el uso del lenguaje de programación

Python, ejecutado a través de *Jupyter Notebook*, en donde se puede trabajar con bibliotecas de información termodinámica como *Cantera* o *CoolProp*.

Contribución de los autores

Coordinación, elaboración y revisión del Documento: Todos los autores

Revisión y búsqueda de literatura: ARHS

Lectura y resumen de documentos: ARHS

Participación en la estructura y escritura del documento: Todos los autores

Materiales suplementarios

Este artículo no tiene archivos complementarios.

Referencias

- Bakrania, S., & Mallouk, K. (2017). Blowing off Steam Tables. 2017 ASEE Annual Conference & Exposition Proceedings. <https://doi.org/10.18260/1-2-27661>
- Bell, I. H., Wronski, J., Quoilin, S., & Lemort, V. (2014). Pure and pseudo-pure fluid thermophysical property evaluation and the open-source thermophysical property library CoolProp. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 53(6), 2498-2508. <https://doi.org/10.1021/ie4033999>
- Castier, M., & Amer, M. M. (2011). XSEOS: An evolving tool for teaching chemical engineering thermodynamics. *Education for Chemical Engineers*, 6(2), Artículo e62-e70. <https://doi.org/10.1016/j.ece.2010.12.002>
- Çengel, Y. A., & Boles, M. A. (2015). Properties of pure substances. En *Thermodynamics: An engineering approach* (8th ed., pp. 124-134). McGraw-Hill.
- Chemica Logic Corporation. (2003). Thermodynamic and transport properties of water and steam (2.0). ChemicaLogic Corporation. <http://www.chemicallogic.com/Pages/DownloadnSteamTabCompanion.html>
- Craig, P. A., Nash, J. A., & Crawford, T. D. (2022). Python scripting for biochemistry and molecular

- biology in Jupyter Notebooks. *Biochemistry and Molecular Biology Education*, 50(5), 479-482. <https://doi.org/10.1002/bmb.21676>
- F-chart Software. (2023). Engineering Equation Solver (11.620 2023-06-11). <https://fchartsoftware.com/ees/>
- Goodwin, D. G., Moffat, H. K., Schoegl, I., Speth, R. L., & Weber, B. W. (2022). Cantera: An object-oriented software toolkit for chemical kinetics, thermodynamics, and transport processes (2.6.0). *Zenodo*. <https://doi.org/https://doi.org/10.5281/zenodo.6387882>
- Gourde, R. M., & Akih-Kumgeh, B. (2017). A Matlab program for the determination of thermodynamic properties of steam. *International Journal of Mechanical Engineering Education*, 45(3), 228-244. <https://doi.org/10.1177/0306419016682146>
- Granger, B. E., & Pérez, F. (2021). Jupyter: Thinking and toytelling with ode and Data. *Computing in Science & Engineering*, 23(2), 7-14. <https://doi.org/10.1109/MCSE.2021.3059263>
- Harvey, A. H., & Burgess, D. R. (2021). Fifty years of reference data. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 50(1), Artículo 010401. <https://doi.org/10.1063/5.0040316>
- Kazakov, A., Muzny, C. D., Chirico, R. D., Diky, V. V., & Frenkel, M. (2008). Web thermo tables - an on-line version of the TRC Thermodynamic Tables. *Journal of Research of the National Institute of Standards and Technology*, 113(4), 209. <https://doi.org/10.6028/jres.113.016>
- Kim, C., Kim, H., & Mun, K. (2020). Use of the international association for the properties of water and steam (IAPWS) formulations, IAPWS-95 & IAPWS-IF97: Making of Mollier diagram and T-s diagram of water and steam. *Thermal Science and Engineering Progress*, 20, Artículo 100691. <https://doi.org/10.1016/J.TSEP.2020.100691>
- Lehtola, S., & Karttunen, A. J. (2022). Free and open source software for computational chemistry education. *WIREs Computational Molecular Science*, 12(5). <https://doi.org/10.1002/wcms.1610>
- Lemmon, E. W., Bell, I. H., Huber, M. L., & McLinden, M. O. (2018). NIST Standard Reference Database 23: Reference Fluid Thermodynamic and Transport Properties-(REFPROP) Version 10. National Institute of Standards and Technology, Standard Reference Data Program. <https://doi.org/https://doi.org/10.18434/T4/1502528>
- Lide, D. R. (1996). SteamTab: Thermodynamic and transport properties of steam. *Journal of Chemical Information and Computer Sciences*, 36(6), 1228-1228. <https://doi.org/10.1021/ci960123w>
- Linstrom, P. J., & Mallard, W. G. (2001). The NIST Chemistry WebBook: A chemical data resource on the internet. *Journal of Chemical & Engineering Data*, 46(5), 1059-1063. <https://doi.org/10.1021/je000236i>
- Linstrom, P. J., & Mallard, W. G. (Eds.). (2023). *NIST chemistry WebBook, NIST Standard Reference Database Number 69*. National Institute of Standards and Technology. <https://doi.org/10.18434/T4D303>
- Liu, Y. (2011). Development of instructional courseware in thermodynamics education. *Computer Applications in Engineering Education*, 19(1), 115-124. <https://doi.org/10.1002/cae.20297>
- Martin, C. R., Moore, J. P., & Ranalli, J. A. (2016). Teaching the foundations of thermodynamics with PYro. *2016 IEEE Frontiers in Education Conference (FIE)*, 1-6. <https://doi.org/10.1109/FIE.2016.7757589>
- Mayhew, Y. R. (1991). Does the methodology of teaching thermodynamics to engineers need changing for the 1990s? *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part A: Journal of Power and Energy*, 205(4), 283-286. https://doi.org/10.1243/PIME_PROC_1991_205_038_02
- MegaWatSoft. (s.f.). Steam97 Application. MegaWatSoft. Recuperado el 11 de junio de 2023, de <https://www.megawatsoft.com/steam-tables/steam97-application.aspx>
- Mulop, N., Yusof, K. M., & Tasir, Z. (2012). A review on enhancing the teaching and learning of thermodynamics. *Procedia - Social and Behavioral Sciences*, 56, 703-712. <https://doi.org/10.1016/j.sbspro.2012.09.706>
- Nehra, V., & Tyagi, A. (2014). Free open source software in electronics engineering education: A survey. *International Journal of Modern Education and Computer Science*, 6(5), 15-25. <https://doi.org/10.5815/ijmecs.2014.05.03>

- Perkel, J. M. (2015). Programming: Pick up Python. *Nature*, *518*(7537), 125-126. <https://doi.org/10.1038/518125a>
- Reades, J. (2020). Teaching on Jupyter. *Region*, *7*(1), 21-34. <https://doi.org/10.18335/region.v7i1.282>
- Rolon-Mérette, D., Ross, M., Rolon-Mérette, T., & Church, K. (2020). Introduction to Anaconda and Python: Installation and setup. *The Quantitative Methods for Psychology*, *16*(5), S3-S11. <https://doi.org/10.20982/tqmp.16.5.S003>
- Smith, J. M., Van Ness, H. C., Abbot, M. M., & Swihart, M. T. (2018). Appendix E. Steam tables. En *Introduction to chemical engineering thermodynamics* (8th ed., pp. 684-723). McGraw-Hill.
- Southard, M. Z., Rowley, R. L., & Wilding, W. V. (2019). Physical and Chemical Data. En D. W. Green & M. Z. Southard (Eds.), *Perry's chemical engineers' handbook* (9th ed., pp. 191-265). McGraw-Hill.
- Span, R. (2000). *Multiparameter equations of state: An accurate source of thermodynamic property data*. Springer Science & Business Media. <https://doi.org/10.1007/978-3-662-04092-8>
- Vallejo, W., Díaz-Uribe, C., & Fajardo, C. (2022). Google Colab and virtual simulations: Practical e-learning tools to support the teaching of thermodynamics and to introduce coding to students. *ACS Omega*, *7*(8), 7421-7429. <https://doi.org/10.1021/acsomega.2c00362>
- Wagner, W., & Pruß, A. (2002). The IAPWS formulation 1995 for the thermodynamic properties of ordinary water substance for general and scientific Use. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, *31*(2), 387-535. <https://doi.org/10.1063/1.1461829>
- Wang, Y., Li, M., Wang, X.-S., Gildersleeve, A., & Turki, N. (2023). ATRP Kinetic Simulator: An online open resource educational tool using Jupyter Notebook and Google colaboratory. *Journal of Chemical Education*, *100*(7), 2770-2775. <https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.2c01250>