



Tecnología Química

ISSN: 0041-8420

revista.tec.quimica@fiq.uo.edu.cu

Universidad de Oriente

Cuba

Bory Prévez, Henry; Rodríguez Heredia, Dunia
ANACOMB: UN PROGRAMA PARA EL ANÁLISIS DE REACCIONES DE COMBUSTIÓN
PARA QUÍMICA GENERAL

Tecnología Química, vol. XXVII, núm. 3, septiembre-diciembre, 2007, pp. 68-74

Universidad de Oriente
Santiago de Cuba, Cuba

Disponible en: <http://www.redalyc.org/articulo.oa?id=445543754010>

- Cómo citar el artículo
- Número completo
- Más información del artículo
- Página de la revista en redalyc.org

redalyc.org

Sistema de Información Científica

Red de Revistas Científicas de América Latina, el Caribe, España y Portugal

Proyecto académico sin fines de lucro, desarrollado bajo la iniciativa de acceso abierto

ANACOMB: UN PROGRAMA PARA EL ANÁLISIS DE REACCIONES DE COMBUSTIÓN PARA QUÍMICA GENERAL

Henry Bory Prévez, Dunia Rodríguez Heredia
Instituto Superior Politécnico "Julio Antonio Mella", Santiago de Cuba

En el presente trabajo se explica el funcionamiento de AnaComb versión 1.0 (analizador de combustión), programa que se diseña para el análisis de las reacciones de combustión que se estudian en el tema Termodinámica de la asignatura Química General del primer año de las carreras de perfil eléctrico. El programa, entrando el combustible, su estado de agregación y el del agua, devuelve la ecuación de la combustión completa ajustada, y luego, entrando como datos las propiedades de estado: variación de entalpía de combustión o de formación del combustible, variación de energía libre de combustión o de formación del combustible y la variación de entropía de la combustión o entropía absoluta del combustible, calcula las propiedades de estado no entradas y a opción del usuario, otros parámetros termodinámicos importantes como: calor evolucionado a presión constante, calor evolucionado a volumen constante, variación de la energía interna y trabajo, devolviendo junto a los resultados un breve comentario. Se brinda al usuario, además, la opción de guardar el análisis en un fichero. El programa Anacomb fue diseñado empleando el lenguaje de programación MatLab 5.3.

Palabras clave: entalpía, energía libre, entropía, combustión, calor.

This present work explains the functioning of AnaComb version 1.0 (Combustion Analyzer), a program that is designed for the analysis of combustion reactions that are studied in the topic Thermodynamics of the subject General Chemistry of the first year of the electrical profile careers. Entering the fuel, its aggregation state and of the water, the program returns the equation of the complete adjusted combustion, and then entering as data the state properties: variation of combustion enthalpy or of formation of the fuel, variation of free combustion energy or of formation of the fuel, and the variation of combustion entropy or absolute fuel entropy; it calculates property states of non inputs and to user's option, other important thermodynamic parameters as: heat evolved at constant pressure, heat evolved at constant volume, variation of internal energy and work, returning next to the results a brief comment. It also offers to the user the option to save analysis in a file. The program Anacomb was designed using the program language MatLab 5.3.

Key words: enthalpy, free energy, entropy, combustion, heat.

Introducción

Dentro de la asignatura Química General para las carreras de perfil eléctrico, tenemos el tema de Termodinámica Química, tema de vital importancia. Dentro de ésta se imparten las reacciones de combustión, debido a la dificultad que presentan los estudiantes en la comprensión y dominio de los conceptos, definiciones y aplicación de la termodinámica química a las reacciones de combustión completa. Nos propusimos diseñar un paquete de programa nombrado AnaComb v 1.0 (Analizador de Combustión versión 1.0), que dado

el combustible, su estado de agregación que puede ser sólido (s), líquido (l) o gaseoso (g), y el estado de agregación del agua que puede ser líquida (l) o gaseosa (g), devuelva la ecuación de combustión completa ajustada siempre para 1 mol del combustible, y conociendo que el proceso ocurre a presión constante de una atmósfera y a temperatura constante de 298 K, permita calcular diferentes propiedades de estado como variación de entalpía de formación del combustible (ΔH°_f) conocida la variación de entalpía de la combustión (ΔH°_c) o viceversa, la variación de la energía libre de formación del combustible (ΔG°_f), conocida la

variación de la energía libre de la combustión (ΔG°_c) o viceversa, la entropía absoluta del combustible (S°), conocida la variación de entropía de la combustión (ΔS°_c) o viceversa; además, de variables termodinámicas como: cantidad de calor a presión constante (Q_p), trabajo (w), variación de la energía interna (ΔE) y cantidad de calor a volumen constante (Q_v), que el estudiante puede seleccionar a voluntad para que el programa los calcule.

El programa tiene como datos implícitos la entalpía de formación, la energía libre de formación y la entropía absoluta, tanto del dióxido de carbono gaseoso, del dióxido de carbono gaseoso, así como del agua líquida y gaseosa. Los únicos combustibles aceptados por AnaComb son los compuestos por C e H o C,H y O.

Desarrollo

Descripción del programa

En este acápite se brinda una descripción del funcionamiento de AnaComb mediante un ejemplo, empleando el combustible etanol (C_2H_5OH) en estado líquido reaccionado con el dióxido de carbono gaseoso, produciendo dióxido de carbono gaseoso y agua líquida, y se desea calcular ΔH°_c conocido ΔH°_f , ΔG°_c , ΔG°_f , ΔS°_c , S° , así como Q_p , w , ΔE y Q_v .

El programa AnaComb v.1.0 fue diseñado con el paquete de programa profesional MatLab 5.3, al invocarlo se presenta mediante una ventana principal como se muestra en la figura 1.

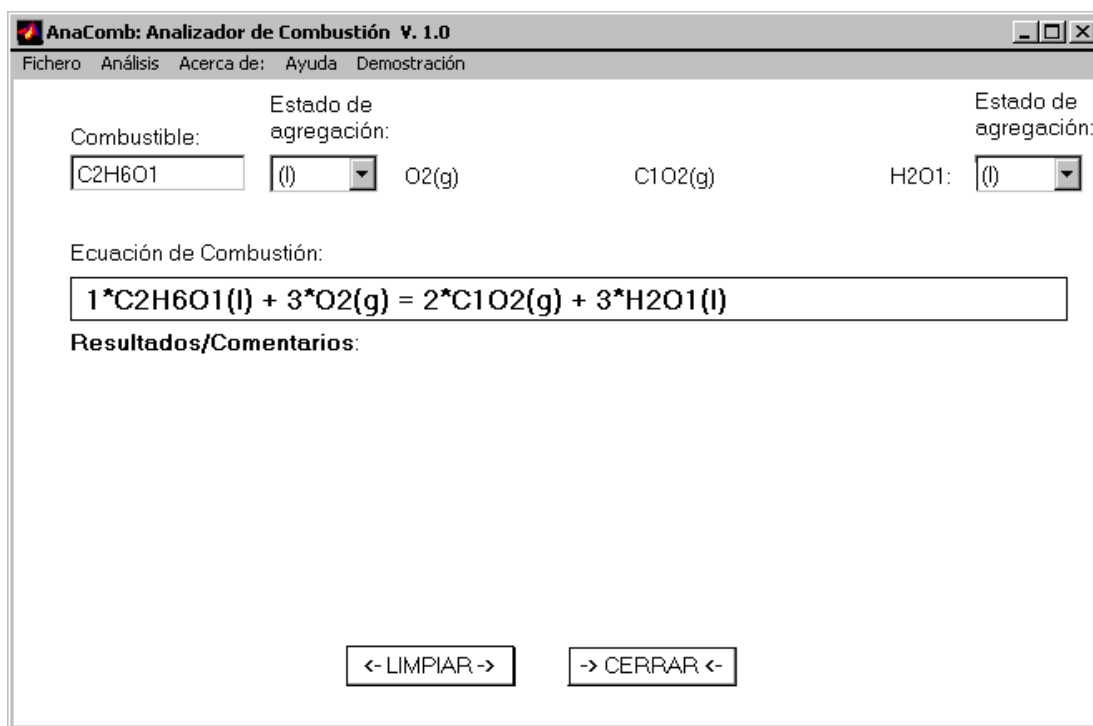


Fig. 1 Ventana principal de Anacomb v 1.0.

La ventana principal posee un menú que incluye las opciones: fichero, análisis, acerca de:, ayuda y demostración, que se describirán posteriormente. En la ventana principal existe un área para editar el combustible, debajo de combustible; además, se muestran los compuestos que inter-

vienen en la reacción de combustión y mediante controles debajo de estado de agregación; el usuario puede escoger el estado de agregación del combustible y del agua producto de la combustión. Por defecto, el programa lo tiene ajustado al estado gaseoso.

Para el uso del programa se debe seleccionar primero el estado de agregación del combustible y del agua (para este ejemplo ambos son (l)), y luego se escribe el combustible en forma compacta, o sea, cada símbolo químico una sola vez separados por sus subíndices correspondientes, aunque sean uno; para este ejemplo, el etanol (C_2H_5OH) se escribe como: $C_2H_6O_l$, luego se presiona retorno y en la franja blanca debajo de ecuación de combustión, aparece la ecuación de la combustión completa ajustada (Fig. 1).

En el área debajo de Resultados/Comentarios, AnaComb visualiza los resultados del cálculo de todas las variables de estado, así como de las termodinámicas seleccionadas. En la parte inferior de la ventana principal, se encuentran los botones LIMPIAR para inicializar el programa y borrar toda la información editada en esta venta-

na, lo cual prepara a AnaComb para un nuevo análisis, y el botón SALIR para terminar la ejecución del programa.

Luego que el programa brinda la ecuación de la combustión ajustada, se encuentra listo para realizar el análisis, la entrada de datos y la selección de las variables por calcular. Para realizar este paso, se da clic con el ratón en el menú Análisis, y aparece la ventana Incógnitas/Datos, (Fig. 2). En esta ventana, se da clic con el ratón sobre las variables por calcular, y en la misma está seleccionado por defecto: ΔH°_c , ΔG°_c y ΔS°_c (marcadas con un punto negro). Al dar clic sobre las otras variables termodinámicas, aparece una marca dentro del cuadradito, indicando que se desea calcular. En la (Fig. 2) se muestra la ventana con las variables seleccionadas por calcular en nuestro ejemplo.

Fig. 2 Ventana de Incógnitas/Datos, que permite seleccionar las variables por determinar.

Si se desea abandonar el análisis, se presiona el botón CANCELAR de la ventana Incógnitas/Datos (Fig. 2). De desear realizar el análisis, se presiona el botón CALCULAR, la ventana Incógnitas/Datos se

cierra y aparecerá la ventana Datos que se repetirá tres veces, para que el usuario escriba los valores de las variables de estado que desea entrar como datos, una ventana por cada variable de estado (Fig. 3).

Datos

Variable Termodinámica: DHfcombustible

Unidad de Medida: (kJ/mol)

-277.6

(a)

Datos

Variable Termodinámica: DGfcombustible

Unidad de Medida: (kJ/mol)

-174.8

(b)

Datos

Variable Termodinámica: Scombustible

Unidad de Medida: (J/mol.k)

161.0

(c)

Fig. 3 Ventana de entrada de los valores de las variables de estado que constituyen los datos. (a) Para la variación de entalpía. (b) Para variación de energía libre. (c) Para la entropía.

Observe que en cada ventana se indica la unidad de medida de la propiedad de estado por entrar como dato, y que en el número que representa el valor de la variable, la parte entera está separada de la decimal por un punto. En estas ventanas, luego de entrado el valor numérico de la propiedad de estado, se presiona retorno; la ventana se cierra, y aparece la consecutiva, así hasta la tercera y última ventana, que luego de presionar retorno se cierra, y aparecen en el área Resultados/Comentarios: de la ventana principal los valores de las propiedades de estado y de las termodinámicas que se deseaban calcular junto a breves comentarios (Fig.4).

El menú Fichero está compuesto por un submenú, que brinda las siguientes opciones:

- Nuevo Análisis: realiza la misma acción que el botón LIMPIAR.
- Guardar análisis como: permite guardar el análisis realizado en un fichero con un nombre asignado por el usuario, con una de las siguientes extensiones: doc (documento Word), txt y asc (para bloc de notas), m (fichero MatLab). Este fichero contiene toda la información editada en la ventana principal (Fig. 5).
- Cerrar: termina la ejecución del programa y cierra la ventana principal.

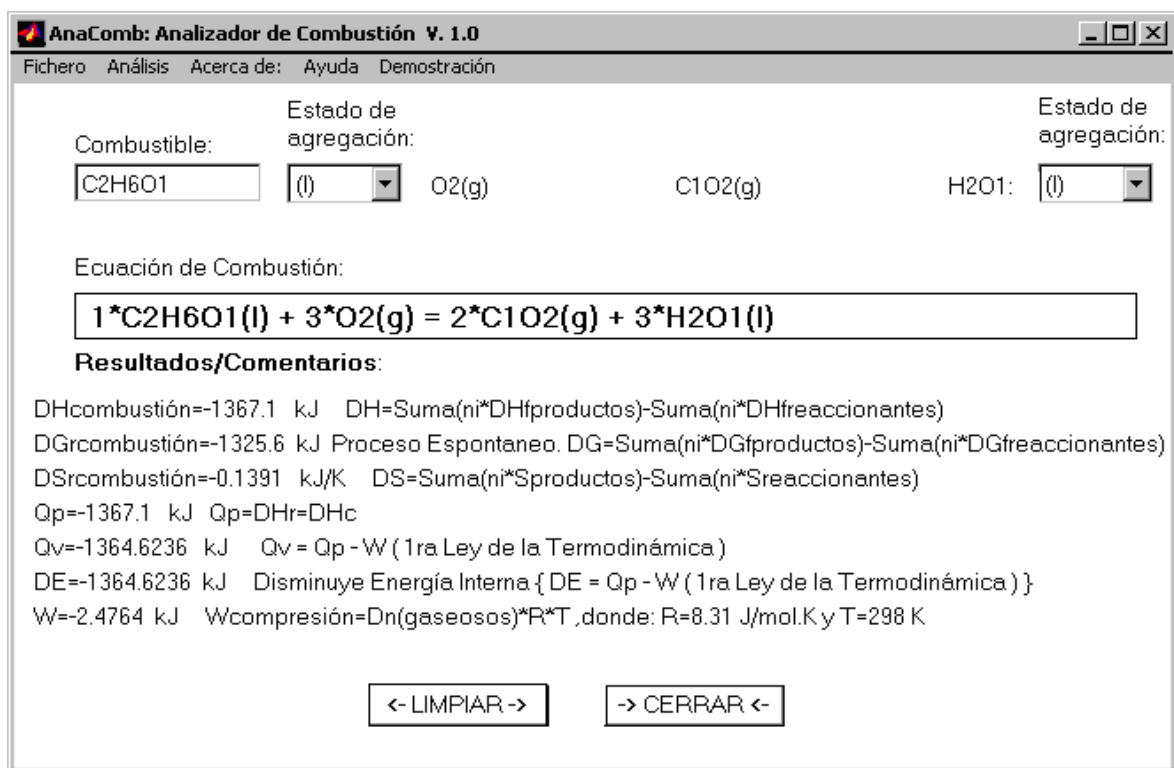


Fig. 4 Ventana principal de Anacomb v 1.0, con los resultados y comentarios de las variables calculadas.

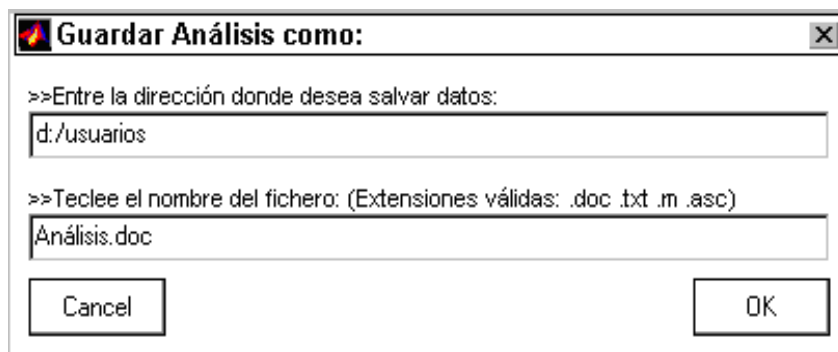


Fig. 5 Caja de diálogo para la entrada de dirección y nombre del fichero donde se desea salvar el análisis.

La opción del menú Acerca de: muestra el nombre del programa y de los creadores del

mismo, junto a un logotipo que representa a AnaComb, como se muestra en (Fig. 6).

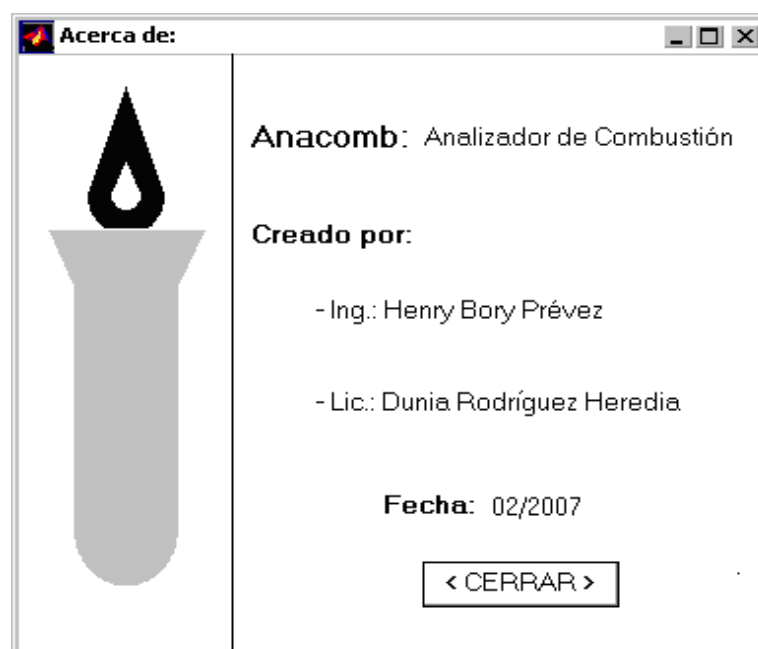


Fig. 6 Ventana Acerca de.

La opción Ayuda, abre una ventana que ofrece al usuario una breve descripción del

programa, su funcionamiento y cómo explotarlo (Fig. 7).

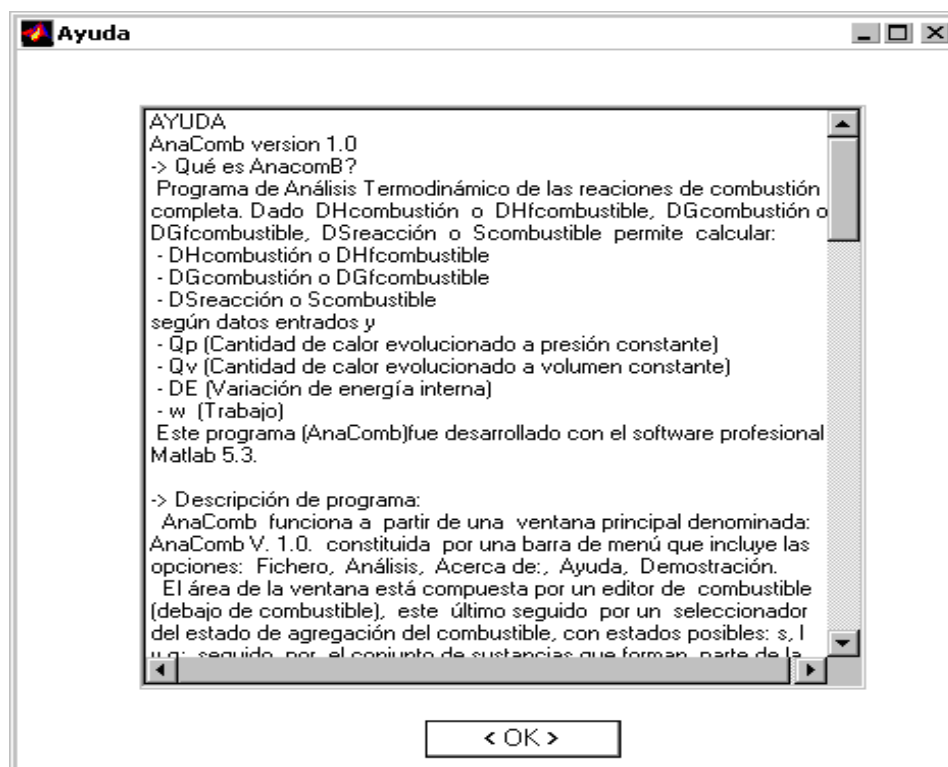


Fig. 7 Ventana de ayuda del programa Anacomb v 1.0.

La última opción del menú de la ventana principal, Demostración, da la posibilidad de correr dos ejemplos, según escoja el usuario, uno con el Etano (C_2H_6) y el otro con el Metanol (CH_3OH), donde se indica paso a paso el procedimiento que se debe seguir para explotar el programa. Se recomienda seguir las instrucciones indicadas en cada demostrativo para evitar posibles errores.

Conclusiones

Se ha diseñado un programa específico para el análisis de las reacciones de combustión, que cuenta con las siguientes características:

- Se copia, no se instala.
- Ocupa poco espacio de memoria (menos de 200 kilobyte).
- Fácil de usar.
- Posee un ambiente agradable.
- Posee diferentes validaciones y sus correspondientes advertencias, para indicar al estudiante el error cometido al entrar algún dato o al realizar una acción.
- Dado el combustible en forma compacta, el programa devuelve la reacción de combustión ajustada.

- Posee una ayuda breve y concreta, que es suficiente para entender y manipular el programa.
- Cuenta con dos ejemplos demostrativos que enseñan paso a paso cómo explotar a AnaComb.
- Junto a los resultados del análisis, se indican las ecuaciones empleadas en el cálculo de las variables y la interpretación de algunas de éstas.
- Permite guardar en un fichero toda la información relacionada con el análisis realizado, dando la posibilidad de poder exportar los resultados a otros programas o imprimir el fichero como material de estudio.

Bibliografía

1. Lara, A. R., y otros, *Química General*, La Habana, Editorial Pueblo y Educación, 1987, págs. 260-310.
2. Pérez-Regalado, O. I., *Prácticas de Química*, La Habana, Instituto Superior Politécnico "José Antonio Echeverría", págs. 4-7, Cuba.
3. Hougen, O. A.; Watson, K. M.; Ragatz, R. A., *Principios de los procesos químicos*, Francia, Ed. Reverté S. A., págs. 11-31. .
4. Strömberg, A. y otros, *Problemas de termodinámica química*, URSS, Ed. MIR, 1980, págs. 11-25.
5. Glasstone, S., *Termodinámica para químicos*, 5ta edición, La Habana, Editorial Pueblo y Educación, 1977, págs. 3-17, 84-116.