



RENIECYT - LATINDEX - Research Gate - DULCINEA - CLASE - Sudoc - HISPANA - SHERPA UNIVERSIA - E-Revistas - Google Scholar  
DOI - REDIB - Mendeley - DIALNET - ROAD - ORCID

## Title: Modelado e implementación de un sistema distribuido para la simulación de reacciones químicas.

**Authors:** MACÍAS-BRAMBILA, Hassem Rubén, PULIDO-GONZÁLEZ, Héctor, GÓMEZ-LÓPEZ, Daniela y GUTIÉRREZ-ÁLVAREZ, Francisco Ramón.

Editorial label ECORFAN: 607-8695

BCIERMMI Control Number: 2019-116

BCIERMMI Classification (2019): 241019-116

Pages: 12

RNA: 03-2010-032610115700-14

### ECORFAN-México, S.C.

143 – 50 Itzopan Street  
La Florida, Ecatepec Municipality  
Mexico State, 55120 Zipcode  
Phone: +52 1 55 6159 2296  
Skype: ecorfan-mexico.s.c.  
E-mail: contacto@ecorfan.org  
Facebook: ECORFAN-México S. C.

Twitter: @EcorfanC

[www.ecorfan.org](http://www.ecorfan.org)

### Holdings

Mexico	Colombia	Guatemala
Bolivia	Cameroon	Democratic
Spain	El Salvador	Republic
Ecuador	Taiwan	of Congo
Peru	Paraguay	Nicaragua



# ECORFAN® 4to- International –

*Congreso Interdisciplinario de Energías Renovables, Mantenimiento Industrial,  
Mecatrónica e Informática*



Universidad Tecnológica  
de Jalisco  
Innovación y Excelencia

ECORFAN®

## Introducción

La resolución de reacciones químicas tiende a ser un proceso complicado, e incluso, puede llegar a ser confuso al tratar con reacciones que involucran muchos elementos, así como difícil de imaginar el fascinante comportamiento que tienen las reacciones químicas a nivel molecular. Por otro lado, las herramientas computacionales para estos fines, tales como “Chemical Predictor”, resultan ser insuficientes para esta labor, dado que se enfocan en un sólo tipo de reacciones, además de presentar representaciones poco interactivas. Por lo que se inició con el desarrollo e implementación de una suite de aplicaciones informáticas conformadas de módulos que permiten resolver escenarios como los antes mencionados, y contar así con una herramienta complementaria construida a través de una diversidad de librerías que ayudan al modelado 2D (dos dimensiones) y 3D (tres dimensiones) como lo son SDL (Simple DirectMedia Layer) y OpenGL (Open Graphics Library), y la facilidad con la que trabajan juntas.



# ECORFAN® 4to- International –

*Congreso Interdisciplinario de Energías Renovables, Mantenimiento Industrial,  
Mecatrónica e Informática*



Universidad Tecnológica  
de Jalisco  
Innovación y Excelencia

ECORFAN®

## Metodología

El proyecto se desarrolló en dos periodos semestrales comprendidos entre los meses de Enero del 2018 a Enero del 2019, siendo la primera acción, la selección de Scrum como metodología de desarrollo, ya que permite abordar proyectos complejos, se basa en entregas parciales de manera regular y permite realizar el desarrollo con mayor rapidez.



# ECORFAN® 4to- International –

Congreso Interdisciplinario de Energías Renovables, Mantenimiento Industrial, Mecatrónica e Informática



ECORFAN®

## Metodología

### Análisis

Número de requisito	R1.11
Nombre de requisito	Mostrar simulación de cada elemento utilizando el modelo Bohr
Tipo	<input checked="" type="checkbox"/> Requisito <input type="checkbox"/> Restricción
Fuente del requisito	Entrevista 28/03/2018, registro 12
Prioridad del requisito	<input checked="" type="checkbox"/> Alta/Esencial <input type="checkbox"/> Media/Deseado <input type="checkbox"/> Baja

Número de requisito	R1.13
Nombre de requisito	Crear módulo de reconocimiento óptico de compuestos
Tipo	<input checked="" type="checkbox"/> Requisito <input type="checkbox"/> Restricción
Fuente del requisito	Entrevista 28/03/2018, registro 12
Prioridad del requisito	<input checked="" type="checkbox"/> Alta/Esencial <input type="checkbox"/> Media/Deseado <input type="checkbox"/> Baja

Número de requisito	R1.14
Nombre de requisito	Resaltar elementos de acuerdo a su clasificación
Tipo	<input checked="" type="checkbox"/> Requisito <input type="checkbox"/> Restricción
Fuente del requisito	Entrevista 28/03/2018, registro 12
Prioridad del requisito	<input checked="" type="checkbox"/> Alta/Esencial <input type="checkbox"/> Media/Deseado <input type="checkbox"/> Baja

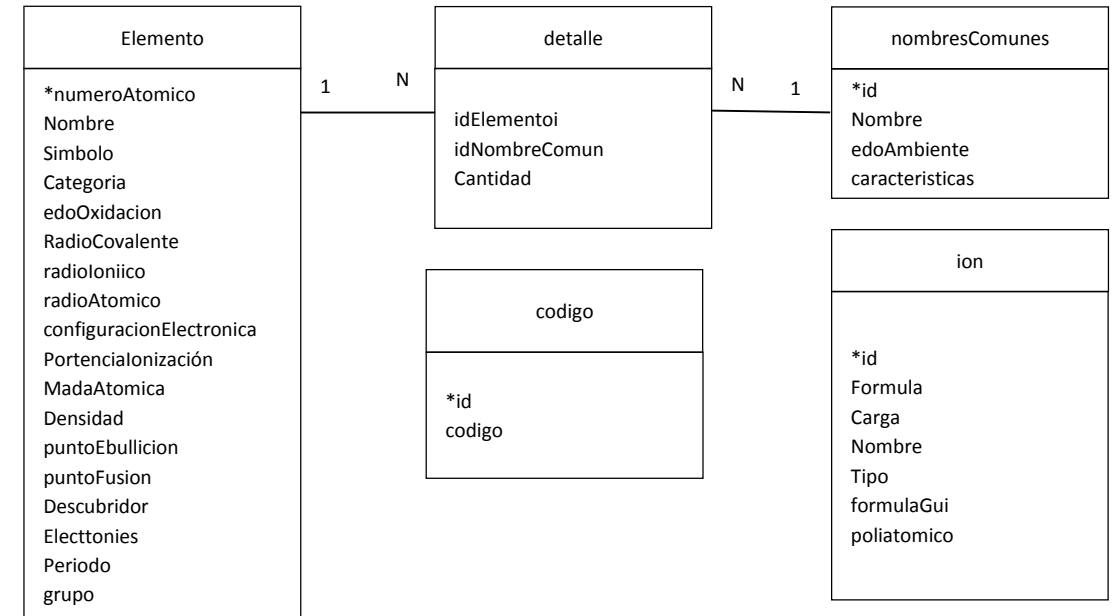


Figura 1. Modelo relacional. (Elaboración propia).

Tabla 1. Especificación de requerimientos. (Elaboración propia).



# ECORFAN® 4to- International –

Congreso Interdisciplinario de Energías Renovables, Mantenimiento Industrial, Mecatrónica e Informática

ECORFAN®

## Metodología

Diseño

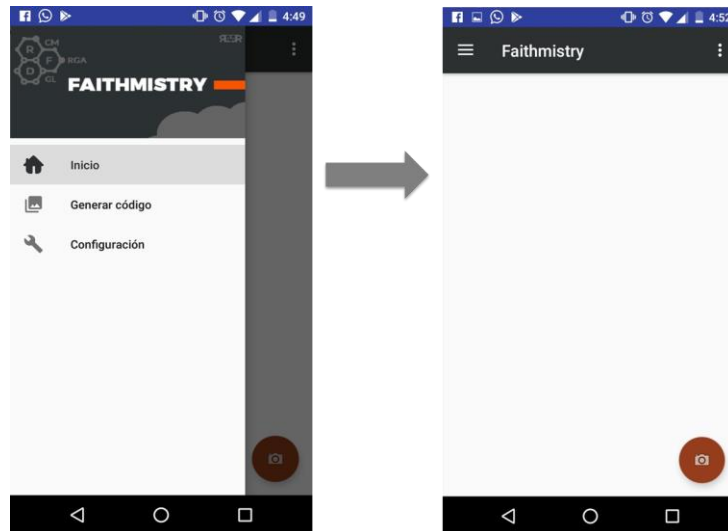


Figura 2. Interfaz de inicio móvil. (Elaboración propia).

ID	Nombre	Formula	Fromulagui	Carga	Tipo
1	Nitrato	NO <sub>3</sub>	NO3	-1	Anión
2	Nitrito	NO <sub>2</sub>	NO2	-1	Anión
3	Fosfito	PO <sub>3</sub>	PO3	-3	Anión
4	Fosfato	PO <sub>4</sub>	PO4	-3	Anión
5	Borato	BO <sub>3</sub>	BO3	-3	Anión
6	Perborato	BO <sub>4</sub>	BO4	-3	Anión
7	Carbonito	CO <sub>2</sub>	CO2	-2	Anión
8	Carbonato	CO <sub>3</sub>	CO3	-2	Anión
9	Bicarbonato	HCO <sub>3</sub>	HCO3	-1	Anión
10	Metarsenito	AsO <sub>2</sub>	AsO2	-3	Anión

Figura 3. Interfaz de visualizar iones. (Elaboración propia).



ECORFAN®

## Metodología

Simulación de reacciones

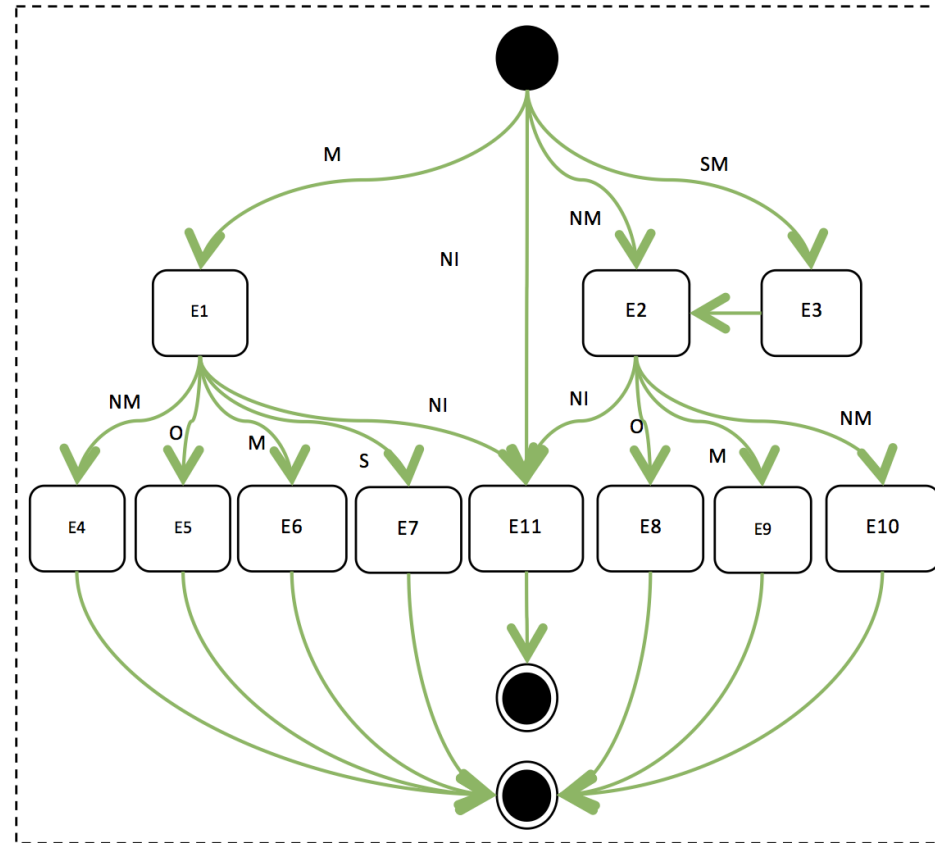


Figura 5. Máquina de estados para compuestos compatibles. (Elaboración propia).



# ECORFAN® 4to- International –

Congreso Interdisciplinario de Energías Renovables, Mantenimiento Industrial,  
Mecatrónica e Informática

ECORFAN®

## Metodología

Síntesis

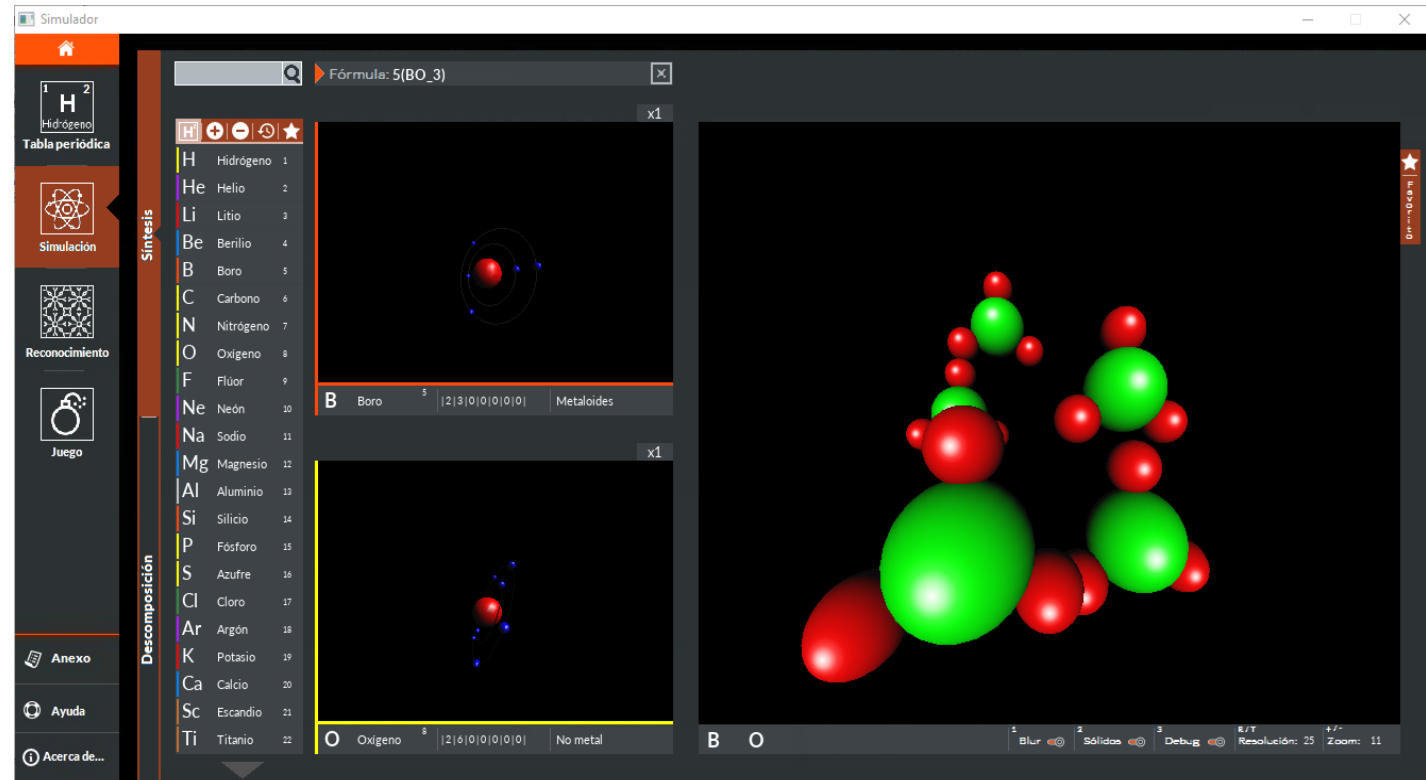


Figura 10. Simulación de reacción de 5 moléculas del anión Borato. (Elaboración propia).



# ECORFAN® 4to- International –

*Congreso Interdisciplinario de Energías Renovables, Mantenimiento Industrial,  
Mecatrónica e Informática*



Universidad Tecnológica  
de Jalisco  
Innovación y Excelencia

ECORFAN®

## Metodología

### Pruebas

Se realizaron a través del plan de pruebas, casos que contemplaron aspectos de conectividad, rendimiento, interfaz y funcionalidad; para los cuales se comprobó efectivamente la conexión simultánea de 135 usuarios y sus respectivas peticiones como clientes, así como las salidas de los procesos, con estadística descriptiva se determina la coincidencia en un 97.75% con los resultados esperados en los casos de prueba. El resto de las salidas que no cumplieron los criterios de aceptación se documentaron y se reprocesaron.





# ECORFAN® 4to- International –

*Congreso Interdisciplinario de Energías Renovables, Mantenimiento Industrial,  
Mecatrónica e Informática*



Universidad Tecnológica  
de Jalisco  
Innovación y Excelencia

ECORFAN®

## Conclusiones

La técnica de simulación ayuda a experimentar con nuevas situaciones, sobre las cuales se tiene poca o ninguna información; anticipando lo mejor posible a resultados no previstos.

Generando entonces, un canon para el desarrollo de futuros proyectos bajo el umbral de la estequiometría, con la intención de añadir más módulos como reacciones de desplazamiento ya sea simple o doble según su estructura, incluso reacciones de acuerdo a la energía que es intercambiada como calor, luz y energía eléctrica, lo que permitirá ampliar el alcance del proyecto, impactando en una cantidad mayor de asignaturas y Programas Educativos que requieren en su mapa curricular el estudio de reacciones químicas.



ECORFAN®

# ECORFAN® 4to- International –

*Congreso Interdisciplinario de Energías Renovables, Mantenimiento Industrial,  
Mecatrónica e Informática*



Universidad Tecnológica  
de Jalisco  
Innovación y Excelencia

## Referencias

Andrea Rueda (2006). Introducción a 3D Transformaciones 3D, Introducción a la Computación Gráfica. Universidad Javeriana, Depto. de Ingeniería de Sistemas.

BITSAdmin Tool Recuperado el 25 de septiembre de 2017 de: [https://msdn.microsoft.com/en-us/library/windows/desktop/aa362813\(v=vs.85\).aspx](https://msdn.microsoft.com/en-us/library/windows/desktop/aa362813(v=vs.85).aspx)

Bracho J, El plano euclidiano. Recuperado el día 15 de agosto de 2017 de: <http://www.matem.unam.mx/~rgomez/geometria/Capitulo1.pdf>.

Chang, R. (2002). Química General. (7 Ed). McGraw-Hill.

Corey, R. B., & Pauling, L. (1953). Molecular models of amino acids, peptides, and proteins. Review of Scientific Instruments, 24(8), 621-627.

Cortez Roberto (2002) Introducción Al Análisis de Sistemas Y la Ingeniería de Software. Editorial Universidad Estatal a Distancia.

D. Hearn, M.P. Baker (2006). Gráficos por computadora con OpenGL, 3a edición. Pearson Prentice Hall.

Didact S,L (2005) Manual de programación Lenguaje C++ Primera edición Editorial MAD.

Escolano, F., Cazoria, M., Pardo, M. G., & Lozano, M. (2003). Inteligencia Artificial . Thomson.

Flórez R, Fernández J.M. (2008). Las Redes Neuronales Artificiales. Netbiblio, S.L.

García González, C. A., Ayala Armijos, J., & Martínez Mora, O. (2015). Química inorgánica.



# ECORFAN® 4to- International –

*Congreso Interdisciplinario de Energías Renovables, Mantenimiento Industrial,  
Mecatrónica e Informática*



Universidad Tecnológica  
de Jalisco  
Innovación y Excelencia

## ECORFAN®

Gillespie R., Hargittai I., (2012) The VSEPR model of molecular geometry Ed. Dover.

Grupos y periodos Recuperado el 19 de agosto de 2017 de: [http://recursostic.educacion.es/secundaria/edad/4esofisicaquimica/4quincena8/4q8\\_contenidos\\_3c\\_ampliacion.htm](http://recursostic.educacion.es/secundaria/edad/4esofisicaquimica/4quincena8/4q8_contenidos_3c_ampliacion.htm).

Hargittai, I., & Chamberland, B. (1986). The VSEPR model of molecular geometry. In Symmetry (pp. 1021-1038).

Hearn-Baker (2006). Gráficos por computadora con OpenGL. Tercera edición, Indiana University, PEARSON Prentice Hall.

Hernández, F. G., Granados, A. P., & Gallegos, S. R. (2009). Química I. Santillana.

IUPAC. Compendium of Chemical Terminology, 2nd ed. (the "Gold Book"). Compiled by A. D. McNaught and A. Wilkinson. Blackwell Scientific Publications, Oxford (1997).

IEEE. (1998). IEEE Std 830-1998 - IEEE Recommended Practice for Software Requirements Specifications. mayo 20, 2017, de C - IEEE Computer Society Sitio web: <https://standards.ieee.org/findstds/standard/830-1998.html>.

Izquierdo, J. F., Cunil, F., Tejero, J., Iborra, M., & Fité, C. (2004). Cinética de las Reacciones Químicas. Edicions de la Universitat de Barcelona.

J.D. Foley, A. van Dam, S.K. Feiner, J.F. Hughes (1996). Computer graphics: principles and practice, 2nd edition in C. Addison-Wesley.

Kenneth Connors (1990). Chemical Kinetics, VCH Publishers.

Kernighan B.W, Ritchie M.D.(1991). The C Programming Language. (2 ed.) Pearson.

Koltun, W. L. (1965). U.S. Patent No. 3,170,246. Washington, DC: U.S. Patent and Trademark Office.

Klein, C., & Hurlbut, C. S. (1996). Manual de mineralogía (Vol. 2). Reverté.



# ECORFAN® 4to- International –

*Congreso Interdisciplinario de Energías Renovables, Mantenimiento Industrial,  
Mecatrónica e Informática*



Universidad Tecnológica  
de Jalisco  
Innovación y Excelencia

## ECORFAN®

Kotz, J. C., Treichel, P. M., & Townsend, J. R. (2009). Chemistry & Chemical Reactivity. Thomson Books /Cole.

Laínez Fuentes José Rubén (2015) Desarrollo de Software Ágil Extreme Programming y Scrum (2nd edition) Ed. IT Campus Academy.

Leigh, G. J. (Ed.). (1990). Nomenclature of inorganic chemistry: recommendations 1990. Oxford: Blackwell scientific publications.

León, A., Daniel, J., & Tabares Hurtado, J. D. (2019). Desarrollo de un simulador de control automático de procesos en Microsoft Excel para ser utilizado en el laboratorio virtual de control y simulación de procesos.

Morales, J. P., Hurtado, J. I., Mejía, A. T., & Cuartas, J. H. (2019). Metodología de Ajuste de un NMPC con Sistema de Inferencia Borrosa Takagi Sugeno y Conjuntos Borrosos Multidimensionales para Aplicaciones en Procesos Químicos no Lineales. Revista Iberoamericana de Automática e Informática industrial, 16(1), 100-113.

Morris Hein y Arena Susan (2014). Foundations of collage chemistry (14 ed.). John Wiley & Sons Inc.

Muñoz, J. C. M. (2014) Aplicación de una estrategia didáctica que permita la comprensión de la estequiometría a partir de un aprendizaje significativo. Universidad Nacional de Colombia.

Parry Robert (1974). Chemistry, Experimental Foundations, Prentice-Hall, Inc.

Pilone, D., Pitman, N. (2005). UML 2.0 in a Nutshell. O'Reilly Media, Inc.



# ECORFAN® 4to- International –

*Congreso Interdisciplinario de Energías Renovables, Mantenimiento Industrial,  
Mecatrónica e Informática*



Universidad Tecnológica  
de Jalisco  
Innovación y Excelencia

ECORFAN®

Ríos, A. (2019). Implementación de un modelo hidrodinámico tridimensional en el embalse de Paso Severino. Aportes para la modelación de calidad de agua.

Romero J. Especificación de Requisitos Software según el estándar IEEE 830. Recuperado el día 8 de agosto de 2017 de: <https://www.fdi.ucm.es/profesor/gmendez/docs/is0809/ieee830.pdf>

Russell, S., & Norving, P. (2002). Inteligencia Artificial: Un enfoque moderno . Pearson.

San Fabián, J. Aguado, A. y de Ema, I., Estequiometria. Recuperado el día 15 de agosto de 2017 de: <http://www.qfa.uam.es/qq/tema1i.pdf>

Scott, F. H. (2001). Elementos de Ingeniería de las Reacciones Químicas. (tercera, Ed.) Mexico: Person Educación .

Sommerville, I. (2011). Software Engineering (9 ed.). Person.



**ECORFAN®**

© ECORFAN-Mexico, S.C.

No part of this document covered by the Federal Copyright Law may be reproduced, transmitted or used in any form or medium, whether graphic, electronic or mechanical, including but not limited to the following: Citations in articles and comments Bibliographical, compilation of radio or electronic journalistic data. For the effects of articles 13, 162,163 fraction I, 164 fraction I, 168, 169,209 fraction III and other relative of the Federal Law of Copyright. Violations: Be forced to prosecute under Mexican copyright law. The use of general descriptive names, registered names, trademarks, in this publication do not imply, uniformly in the absence of a specific statement, that such names are exempt from the relevant protector in laws and regulations of Mexico and therefore free for General use of the international scientific community. BCIERMMI is part of the media of ECORFAN-Mexico, S.C., E: 94-443.F: 008- ([www.ecorfan.org/](http://www.ecorfan.org/) booklets)