

## **EL SOFTWARE SIMKINET: UNA HERRAMIENTA DE USO SENCILLO PARA RESOLVER ECUACIONES DIFERENCIALES ASOCIADAS A UN ESQUEMA CINÉTICO QUÍMICO EN GRADOS DE CIENCIAS**

The software SimKinet: a simple tool to solve differential equations associated to a kinetic chemical scheme in scientific degrees

MANUEL CARAVACA GARRATÓN

Profesor Doctor

Centro Universitario de Defensa, Universidad Politécnica de Cartagena

[manuel.caravaca.upct@hotmail.es](mailto:manuel.caravaca.upct@hotmail.es)

PILAR SÁNCHEZ-ANDRADA

Profesora Doctora

Centro Universitario de Defensa, Universidad Politécnica de Cartagena

[pilar.sanchez@cud.upct.es](mailto:pilar.sanchez@ cud.upct.es)

ANTONIO SOTO MECA

Profesor Doctor

Centro Universitario de Defensa, Universidad Politécnica de Cartagena

[antonio.soto@cud.upct.es](mailto:antonio.soto@cud.upct.es)

### **Resumen**

La resolución de las ecuaciones diferenciales correspondientes a un esquema cinético químico complejo requiere conocimientos de programación en métodos numéricos o uso de software especializado, ambos propios de los saberes adquiridos tras los estudios superiores en grados científico-tecnológicos. Plantear estas ecuaciones sí ha de formar parte de los objetivos de aprendizaje a este nivel educativo. El software SimKinet resuelve, a modo de caja negra, estos esquemas cinéticos químicos sin más que introducir las ecuaciones diferenciales asociadas, sin necesidad de conocimientos de programación, y en un entorno accesible y sencillo. El programa es libre, rápido y eficiente y, dada su gran versatilidad, puede emplearse tanto para propósitos educacionales como de investigación. Asimismo, puede extenderse su uso al estudio de otros problemas de diferente índole descritos por ecuaciones diferenciales.

**Palabras clave:** cinética química; ecuaciones diferenciales; métodos numéricos; PSpice.

### **Abstract**

The resolution of the differential equations corresponding to a complex kinetic chemical scheme requires some specific programming skills in numerical methods or specialized software, both proper to the knowledge acquired after the academic studies in scientific or technological degrees. Writing these equations has to be part of the learning objectives at this

educational level. The software SimKinet solves, as a black box, these kinetic chemical schemes after only introducing the associated differential equations, without requiring programming skills, in a friendly-user and simple environment. The program is open access, fast and efficient and, due to its versatility, can be employed both for educational and research purposes. Moreover, the software can be used to study other kind of problems described by differential equations.

**Keywords:** chemical kinetics; differential equations; numerical methods; PSpice.

## 1. INTRODUCCIÓN

La analogía matemática entre problemas científicos de diferente índole está reconocida como una muy útil y atractiva materia de carácter educacional, y constituye un estándar educativo en los libros de texto a nivel universitario (Marion, 1998; Goldstein, 2000; González-Fernández et al., 2002). Un ejemplo clásico, correspondiente a la asignatura de Mecánica de segundo curso del grado de Física, consiste en resolver la ecuación diferencial de segundo orden asociada a un oscilador amortiguado no forzado mediante el diseño de un circuito eléctrico equivalente (Marion, 1998). Una vez construida la analogía, la dinámica del problema original se obtiene mediante la resolución del circuito a través de las conocidas leyes de Kirchhoff. Este problema, sin embargo, es de estricto ámbito académico, pues es fácilmente resoluble a través de la ecuación diferencial original. Su interés radica en su empleo como herramienta educacional.

No obstante, en otras ocasiones, la analogía se convierte en una poderosa herramienta de investigación como, por ejemplo, la existente entre los procesos de transporte químico y las redes eléctricas (Caravaca et al., 2014). En este caso, la equivalencia se produce entre transporte de masa, propio de las reacciones químicas, y transporte de carga, propio de los circuitos eléctricos. Como se demuestra en este tipo de estudios, si el esquema cinético químico es lo suficientemente complejo, el diseño equivalente de la red eléctrica facilita considerablemente la labor de cálculo.

Con este doble propósito en mente, el educacional y el investigador, los autores han desarrollado un software libre, SimKinet, basado en el método de simulación por redes (González-Fernández et al., 2002), que permite a los alumnos universitarios de los diferentes grados de ciencias desarrollar ambas vertientes. El programa es general, en tanto en cuanto puede analizar cualquier tipo de analogía pero, en este artículo, trataremos únicamente el caso de la analogía química para el estudio de la cinética de las reacciones. SimKinet, por un lado, se convierte en una atractiva herramienta para la enseñanza en el aula dado que puede utilizarse, por ejemplo, para estudiar ecuaciones diferenciales de esquemas cinéticos de distinta índole en la asignatura de Química de los diferentes grados de Ingeniería. En esta asignatura, estos estudios suelen hacerse de manera teórica, lo que restringe mucho el rango de problemas

que se pueden analizar. Si se quisiera resolver un problema más complejo probablemente sería necesario el empleo de métodos numéricos, que demandan un alto dominio de algún lenguaje de programación o de software especializado. La sencillez de uso de SimKinet, que no requiere manipulación de código de programación, lo convierte en una herramienta ideal para solucionar este problema. Por otro lado, SimKinet puede emplearse para iniciar a los alumnos universitarios en el mundo de la investigación. En concreto, en el Centro Universitario de la Defensa de San Javier se está utilizando este software para el estudio de esquemas cinéticos químicos complejos, y para el análisis de trayectorias de persecución de sistemas autopropulsados, como misiles y aviones, ambos en el marco de los Trabajos de Fin de Grado. En estos problemas, la necesidad de realizar continuas simulaciones numéricas abarcando un amplio rango de parámetros hace que minimizar el tiempo de computación sea una tarea esencial. La sencillez de manejo y rapidez frente a otros algoritmos numéricos clásicos hacen de SimKinet una herramienta fundamental, que ha empezado a emplearse también el departamento de Física de la Universidad Politécnica de Cartagena.

En el contexto de la cinética química, el objetivo del programa es resolver, de manera rápida y eficiente, un conjunto de ecuaciones diferenciales acopladas correspondiente a un esquema cinético químico determinado. Para ello, SimKinet construye una red eléctrica equivalente al sistema de ecuaciones diferenciales, y resuelve el problema empleando un software de simulación de circuitos. Aunque a priori parece un proceso complicado, SimKinet emplea una interfaz muy sencilla, donde casi únicamente hay que definir las ecuaciones diferenciales que entran en juego en el proceso. El resto es tarea automática del programa. El software, como se ha indicado, está orientado a alumnos de los diferentes grados de ciencias, pero su empleo es extensible a la educación secundaria dada su facilidad de manejo, la variedad de problemas que puede analizar y, por supuesto, su carácter gratuito. En este último caso, la guía del profesor resulta fundamental, dado que los alumnos no poseen conocimientos de ecuaciones diferenciales. Aun así, el programa resulta útil para visualizar gráficamente la variación con el tiempo de la concentración de las diferentes especies de una reacción química, dado que estudio de la cinética química en secundaria es, como es lógico, muchísimo más restringido que en la enseñanza universitaria. Es por ello que, aunque aún no se ha empleado en dicho contexto educativo, se recomienda que se utilice como herramienta auxiliar en el aula.

Como objetivo fijo proponemos en este trabajo la familiarización del usuario con el entorno SimKinet, y la aplicación directa al estudio de la cinética química, a través de un problema típico de la asignatura de Química, correspondiente a un primer curso de Grado en Ingeniería. Para ello, en la sección 2 introduciremos el software y explicaremos, pantalla a pantalla, su empleo a través de una reacción química prototípica.

### 1.1. Ecuaciones diferenciales asociadas a un esquema cinético químico

El estudio cinético completo de un proceso químico comprende un conjunto de ecuaciones diferenciales acopladas de primer orden (Bertrán y Núñez, 2002). Cada especie  $x_i$  tiene asociada una ecuación, donde se relaciona la variación temporal de su concentración,  $[x_i]$ , con las del resto de especies y el conjunto de las constantes cinéticas,  $\{k_j\}$ ,  $j= 1, m$ . De este modo:

$$\frac{d [x_i]}{dt} = f([x_1], [x_2] \dots [x_n])$$

Frecuentemente, la resolución analítica del conjunto de ecuaciones diferenciales correspondiente a un esquema cinético complejo resulta una tarea inabordable, por lo que se opta por realizar una serie de aproximaciones en el modelo teórico o se recurre a métodos numéricos. En este último caso, los algoritmos tradicionales de cálculo, como el método de Runge-Kutta (DeVries y Hasbun, 2011), ofrecen buenos resultados en la mayoría de los problemas (Neumann et al., 2010), pero es necesario cierto dominio en algún lenguaje de programación.

Existe una serie de esquemas cinéticos asociados a procesos químicos complejos donde las constantes cinéticas poseen órdenes de magnitud muy diferentes. En estos casos los algoritmos tradicionales pueden resultar ineficaces. Se conoce como *rate limiting step* (RSL) a la etapa más lenta de una serie de reacciones químicas. El RSL establece la velocidad de una reacción en múltiples pasos, y generalmente posee la mayor energía de activación. Para ilustrar la relación entre la constante cinética asociada al RSL,  $k_R$ , y el tiempo de ejecución de una simulación, si esta constante tiene unidades de frecuencia ( $s^{-1}$ ), el correspondiente proceso solamente ocurrirá una vez cada  $1/k_R$  segundos. Si el valor de  $k_R$  es muy pequeño, los algoritmos estándar de simulación consumen un tiempo de CPU muy elevado para alcanzar, por ejemplo, el estado estacionario del sistema. Por ello, resulta conveniente emplear otros algoritmos numéricos que proporcionen una simulación eficiente. Este problema se acentúa cuando se opera a bajas temperaturas, dado que las moléculas poseen menor energía térmica para poder superar las barreras energéticas del perfil de reacción (Caravaca et al., 2014).

### 1.2. Método de simulación por redes

El método de simulación por redes (*Network Simulation Method*, NSM) (González-Fernández et al., 2002), que empleamos en el software SimKinet, es capaz de resolver el conjunto de ecuaciones diferenciales asociado a un proceso químico en un tiempo órdenes de magnitud menor que los algoritmos tradicionales. Está basado, como se ha indicado, en una analogía eléctrica de los procesos de transporte, y debe ser implementado en un software adecuado de simulación de circuitos, tal

como PSpice (PSpice 6.0 manual, 1994), que posee una versión gratuita, y que utilizamos de manera implícita en el programa.

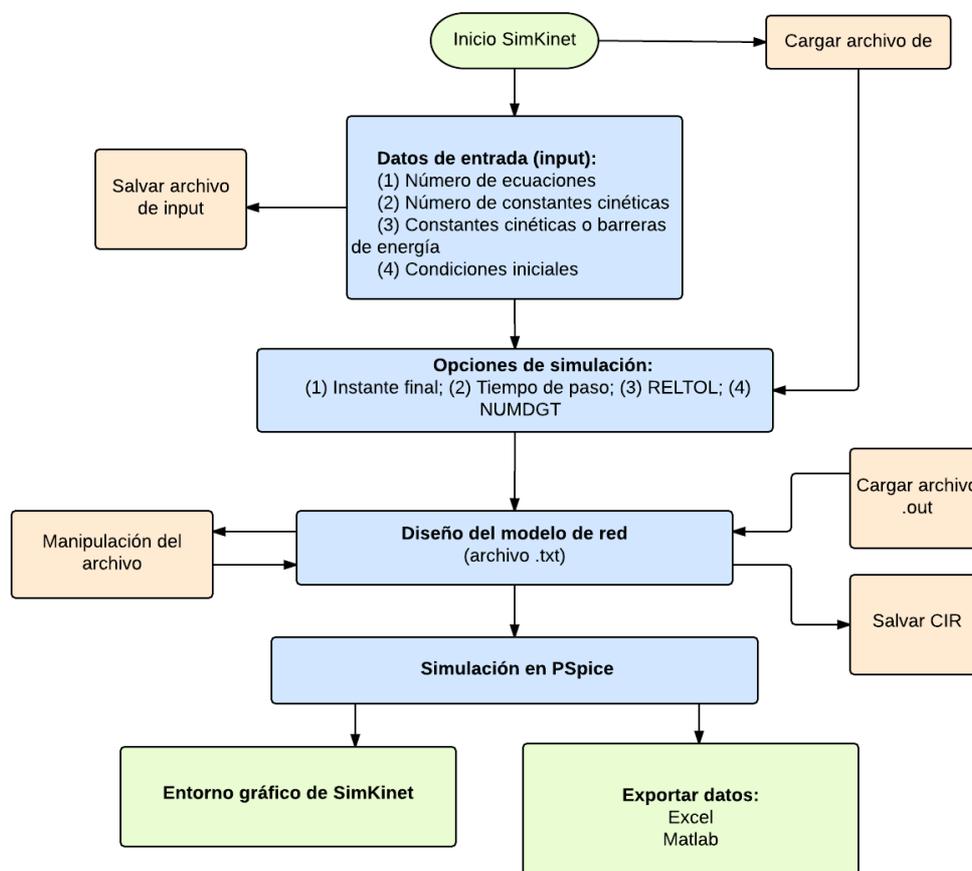
Construir una red eléctrica equivalente a un conjunto de ecuaciones diferenciales resulta una tarea complicada para un alumno de primer curso de Grado, e inabordable para un alumno, por ejemplo, de secundaria. El programa SimKinet se encarga de la construcción de dicha red, de manera interna. El usuario solamente tiene que introducir las ecuaciones, definir unos pocos parámetros y ejecutar. En ese aspecto, SimKinet funciona a modo de caja negra, no importa lo complicadas que sean las ecuaciones diferenciales. Tal y como veremos, el programa contiene un entorno gráfico propio, pero otra de las ventajas que posee es que los datos son fácilmente exportables para su posterior análisis, por ejemplo, en programas conocidos, como Excel u Origin.

## 2. METODOLOGÍA

El contexto de este estudio es el Centro Universitario de la Defensa de la Academia General del Aire de San Javier, la Universidad Politécnica de Cartagena y la Universidad de Murcia. Los participantes son profesores-tutores y alumnos de Trabajos Fin de Grado de la titulación de Grado de Ingeniería de Organización Industrial en el Centro Universitario de la Defensa, y alumnos de la asignatura de Química en distintos grados de las mencionadas universidades.

Un adiestramiento muy sencillo del alumno en el uso de este software permite que autónomamente haga frente a los problemas objeto de estudio. Siguiendo esta metodología, los alumnos de Trabajo Fin de Grado son capaces de realizar las tareas de investigación correspondientes de manera exitosa, como lo demuestran los resultados obtenidos en el Centro Universitario de la Defensa de San Javier. Por su parte, los profesores de los alumnos de Química de primer curso constatan que los talleres en los que emplean dicha metodología facilitan su proceso de aprendizaje. Para efectuar dicha evaluación se llevan a cabo periódicamente reuniones de profesores entre departamentos y entre universidades, en las que se encuentra presente una representación de los alumnos. Asimismo, se efectúan entrevistas de tipo personal con el alumnado.

A continuación, describiremos el entorno SimKinet, para ilustrar su funcionamiento y algunas de las aplicaciones que puede tratar. Se pretende además, que sirva de guía para nuevos usuarios. Para empezar, mostramos el diagrama de flujo de SimKinet en el siguiente cuadro:

**Figura 1:** diagrama de flujo del funcionamiento del software SimKinet.

Como se desprende del gráfico, el software posee una sencilla columna vertebral, articulada con opciones colaterales de modificación, carga o salvado de archivos, así como de manipulación.

Ilustremos, a continuación, el empleo de SimKinet a través del ejemplo prototípico de carácter académico, orientado a alumnos de Química de primer curso de Grado en Ingeniería, extensible a otros grados de ciencias. El objetivo es visualizar el estado estacionario de una reacción química sencilla, del tipo:



donde **R** es el reactante, y **A** y **B** son los productos. Un ejemplo es la conversión de *N*-(2-formilvinil) cetenimina en 1,3-oxazina y (2-aza-1,3-butadienil)cetena.

Las ecuaciones diferenciales asociadas a este tipo de reacciones son las siguientes:

$$\frac{d[\mathbf{R}]}{dt} = -k_1[\mathbf{R}] - k_2[\mathbf{R}] + k_3[\mathbf{A}] + k_4[\mathbf{B}]$$

$$\frac{d[\mathbf{A}]}{dt} = k_1[\mathbf{R}] - k_3[\mathbf{A}]$$

$$\frac{d[\mathbf{B}]}{dt} = k_2[\mathbf{R}] - k_4[\mathbf{B}]$$

Las condiciones iniciales se establecen, a tiempo cero, como:

$$[\mathbf{R}] = 1 \text{ M}; [\mathbf{B}] = [\mathbf{A}] = 0$$

Antes de comenzar a definir las ecuaciones diferenciales en SimKinet es conveniente hacer notar que, durante todo el proceso, nos moveremos por las ventanas del programa con los botones "Anterior" y "Siguiete", que aparecen siempre en la esquina inferior derecha de la ventana. Asimismo, podremos salir del programa si pinchamos "Cancelar":

**Figura 2:** botones de control de movimiento por las ventanas de SimKinet.



Ejecutamos SimKinet y, en primer lugar, definimos el número y nombre de cada especie de la reacción prototipo indicada anteriormente, que se mantendrá a lo largo de todo el programa. La ventana correspondiente se denomina "Especies":

**Figura 3:** ventana de definición de las especies que gobiernan el proceso químico.

**Especies**

Determine las especies involucradas en el proceso químico

Número de especies que gobiernan el proceso químico:

Nombre de las especies:

Specie 1	<input type="text" value="R"/>
Specie 2	<input type="text" value="A"/>
Specie 3	<input type="text" value="B"/>

La siguiente ventana, "Constantes de velocidad", permite determinar las constantes cinéticas de la reacción química de dos maneras, que se escogen en el menú desplegable que se recuadra en rojo en la primera de las dos figuras siguientes. Si se selecciona "constantes", que está marcado por defecto, se puede definir el nombre y valor de cada constante directamente, tal y como se muestra. Si se selecciona la pestaña "Barreras de Energía" hemos de introducir los valores de las barreras de

energía libre del perfil cinético, como se observa en la figura inferior. Se puede personalizar el nombre de las barreras (recuadro verde) y, una vez introducido su valor, las constantes cinéticas se calculan en tiempo real y se muestran en pantalla (recuadro naranja). En este ejemplo escogeremos este último esquema, y emplearemos los valores numéricos que se muestran en la figura inferior. Es importante resaltar que para introducir los decimales emplearemos siempre punto.

**Figura 4:** ventana de definición de las constantes cinéticas de la reacción química para la opción "constantes".

### Constantes de velocidad

Configure las constantes involucradas en el proceso químico

Número de ctes. de velocidad que gobiernan el proceso químico: 4

Método de cálculo de constantes: **Constantes**

Constantes (por defecto llamadas ki)  
(utilice comas decimales)

k1	=	691.61
k2	=	396.16
k3	=	0.37
k4	=	0.02

**Figura 5:** ventana de definición de las constantes cinéticas de la reacción química para la opción "Barreras de Energía".

### Constantes de velocidad

Configure las constantes involucradas en el proceso químico

Número de ctes. de velocidad que gobiernan el proceso químico: 4

Método de cálculo de constantes: **Barreras de Energía**

Barreras de Energía  $\Delta G$  (J/Mol) (por defecto llamadas deltaGi)  
(utilice punto decimal)

Temperatura	=	350	(K)
deltaG1	=	67500	k1 = 615.573537537344
deltaG2	=	69000	k2 = 367.639208668877
deltaG3	=	90000	k3 = 0.270027597081237
deltaG4	=	97000	k4 = 0.0243633457283304

A continuación, en las siguientes ventanas, definiremos el sistema de ecuaciones diferenciales. Aparecerán tantas ventanas como especies se hayan seleccionado inicialmente. La correspondiente a la primera especie, en nuestro caso denominada **R**, se denomina "Ecuación 1: R", y tiene la siguiente forma:

**Figura 6:** vista típica de la ventana de definición de una ecuación diferencial asociada al esquema químico. En este caso, corresponde a la primera ecuación de la reacción prototípica empleada como ejemplo.

### Ecuación 1: R

Añada los términos para definir la ecuación 1

Vista previa de la ecuación

$$d[R]/dt = -k_1*[R] - k_2*[R] + k_3*[A] + k_4*[B]$$

Sumandos

-k1*[R]	▶	[x]
-k2*[R]	▶	[x]
k3*[A]	▶	[x]
k4*[B]	▶	[x]

[Añadir otro sumando](#)

Valor inicial

Concentración inicial (M/L):

En "Vista previa de la ecuación" podemos visualizar en todo momento la apariencia de la ecuación diferencial correspondiente. Para añadir sumandos a la ecuación debemos pinchar en "Añadir otro sumando". Cada casilla puede corresponder, o no, a un sumando aislado. En la figura anterior se configura la primera ecuación con cuatro sumandos, y se muestra cómo afecta el resultado a la vista previa. Además, se ha seleccionado una concentración inicial del compuesto **R** igual a 1 mol/l.

Las ventanas correspondientes a las otras dos especies del ejemplo son las siguientes (se accede a ellas pulsando el botón "Siguiente"):

**Figura 7:** ventana de definición de la segunda ecuación diferencial asociada al esquema químico de la reacción prototípica de ejemplo.

**Ecuación 2: A**

Añada los términos para definir la ecuación 2

---

Vista previa de la ecuación

$$d[A]/dt = k1*[R] - k3*[A]$$

Sumandos

[\[x\]](#)

[\[x\]](#)

[Añadir otro sumando](#)

Valor inicial

Concentración inicial (M/L):

**Figura 8:** ventana de definición de la tercera ecuación diferencial asociada al esquema químico de la reacción prototípica de ejemplo.

**Ecuación 3: B**

Añada los términos para definir la ecuación 3

---

Vista previa de la ecuación

$$d[B]/dt = k2*[R] - k4*[B]$$

Sumandos

[\[x\]](#)

[\[x\]](#)

[Añadir otro sumando](#)

Valor inicial

Concentración inicial (M/L):

Una vez definido el sistema de ecuaciones diferenciales, podemos revisar cada ecuación en la siguiente ventana, "Resumen", pero no podremos modificar ningún parámetro. En caso de error, deberemos dar marcha atrás con el botón "Anterior". El resumen de nuestro sistema definido como ejemplo es el siguiente:

**Figura 9:** vista general de la ventana "Resumen", que recoge el sistema de ecuaciones diferenciales definido por el usuario. En este caso se aplica a la reacción prototípica tomada como ejemplo.

### Resumen

Este es el sistema de ecuaciones diferenciales que ha introducido

$$\text{Ec. 1: } d[R]/dt = -k_1*[R] - k_2*[R] + k_3*[A] + k_4*[B]$$

$$\text{Ec. 2: } d[A]/dt = k_1*[R] - k_3*[A]$$

$$\text{Ec. 3: } d[B]/dt = k_2*[R] - k_4*[B]$$

Sin embargo, es posible guardar todos los pasos efectuados hasta el momento pulsando en esta misma ventana, en la esquina inferior izquierda, el botón "Guardar sistema". La extensión del archivo guardado es **.eq**, y se puede cargar en una siguiente ejecución del programa desde la ventana "Especies", pulsando el botón "Cargar desde archivo", que se encuentra en la esquina inferior izquierda. Una vez abierto el archivo, todos los parámetros se cargarán, y sólo tendremos que avanzar por las ventanas pulsando el botón "Siguiente", hasta llegar de nuevo a "Resumen".

En la siguiente ventana, "Opciones de simulación", se seleccionan los parámetros que empleará Pspice en la simulación. Se puede consultar su significado pulsando en el símbolo de interrogación de ayuda. Los que se han escogido para esta simulación son:

**Figura 10:** vista típica de la ventana que define las opciones de simulación, una vez definido el modelo de red.

### Opciones de simulación

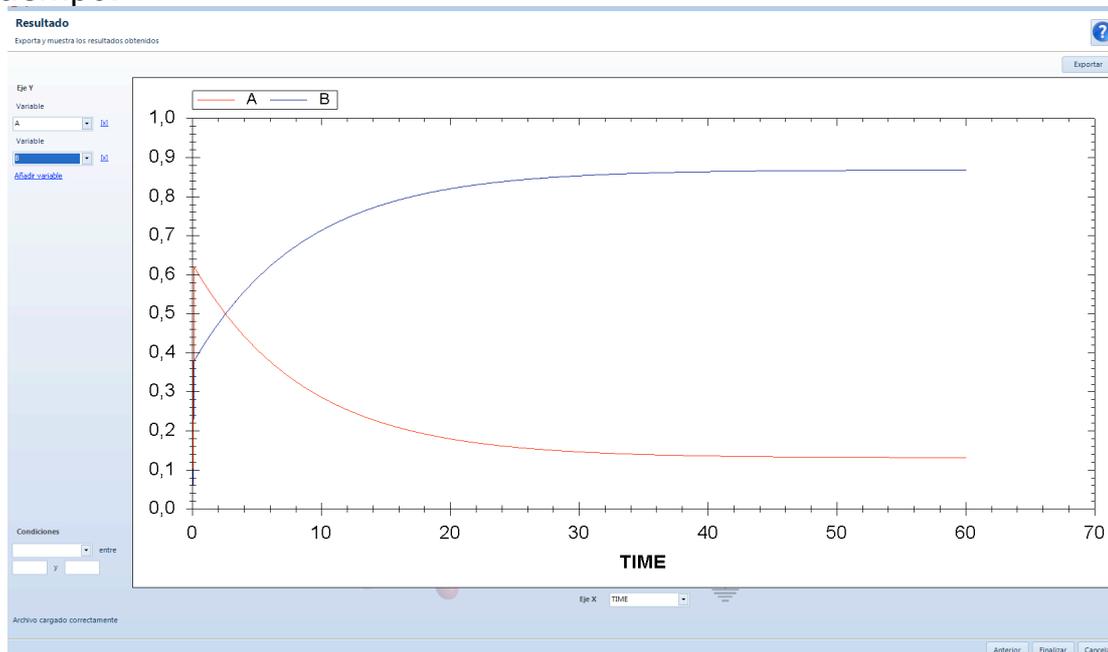
Condiciones iniciales, tiempos, y parámetros de simulación

Ventana de simulación		Precisión	
Instante final	<input type="text" value="60"/>	RELTOL	<input type="text" value="0.001"/>
Tiempo de paso	<input type="text" value="0.1"/>	NUMDGT	<input type="text" value="4"/>

En la siguiente ventana, "Código CIR" (no se muestra aquí), se recomienda no cambiar nada, a menos que el usuario tenga conocimientos de PSpice. Es posible guardar el CIR en "Guardar CIR" o cargar un archivo *out* de PSpice para el modelo actual pulsando "Cargar OUT".

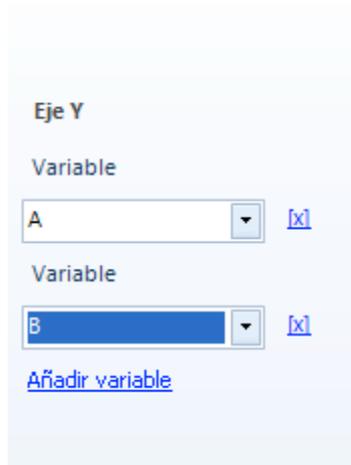
Si pulsamos ahora "Siguiente" se procede a la simulación. El resultado obtenido para nuestro ejemplo se muestra en la ventana final que, en el caso presente, tiene la siguiente apariencia:

**Figura 11:** vista típica de la ventana de resultados de SimKinet, donde se muestra el entorno gráfico propio del software. En este caso se muestra gráficamente la concentración de las especies A y B en función del tiempo.

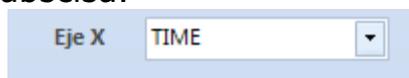


En la esquina superior izquierda, bajo la leyenda "Eje Y", se puede seleccionar qué variables representar frente a la abscisa correspondiente. En nuestro caso hemos escogido representar las especies **A** y **B**. Además podemos cambiar la variable que hará el papel de abscisa bajo la gráfica, en el menú desplegable "Eje X". Por defecto se toma la variable tiempo:

**Figura 12:** detalle de la ventana "Resultado", donde se muestran las pestañas de selección de variables, que se mostrarán en la ordenada de la representación gráfica.

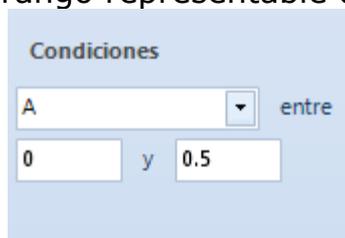


**Figura 13:** detalle de la ventana "Resultado", donde se muestra la pestaña de selección de abscisa.



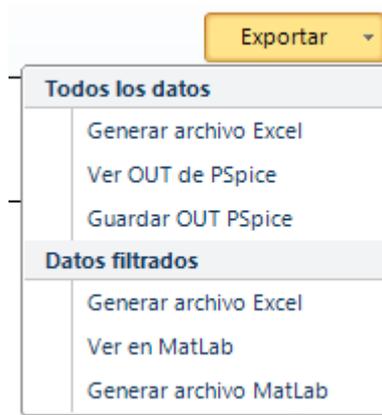
En la sección inferior izquierda, "Condiciones", podemos limitar el valor de alguna de las variables entre los valores que indiquemos. Aunque en nuestra representación gráfica no hemos ejecutado dicha operación, valga el siguiente ejemplo gráfico:

**Figura 14:** detalle de la ventana "Resultado", donde se muestra un ejemplo de la selección del rango representable de la variable escogida.



Por último, podemos utilizar la función "Exportar" (zona superior derecha) para exportar los datos en múltiples formatos, a gusto del usuario:

**Figura 15:** detalle de la ventana "Resultado", donde se muestran las opciones de exportación de datos.



Para los nuevos usuarios del programa se recomienda intentar reproducir este ejemplo y comparar los resultados con los de la representación gráfica. Aunque el programa resuelve de manera genérica cualquier sistema, se sugiere tener control continuo sobre los valores de las constantes y sobre la apariencia de las ecuaciones para evitar intentos infructuosos.

Como nota final valga añadir que, una vez presentada la gráfica con los resultados en la ventana final, no podremos retroceder con el objeto de efectuar una nueva representación. Para ello hay que ejecutar el programa nuevamente, pero podemos cargar el sistema previamente guardado en archivo .eq y avanzar por las ventanas hasta obtener la nueva solución, realizando los cambios que resulten pertinentes.

### 3. DISCUSIÓN

En esta sección se discute la eficiencia y versatilidad de SimKinet, y el tipo de problemas que puede tratar. Aunque el software fue desarrollado en el entorno de la cinética química, es fácilmente extrapolable a otros

problemas que involucren ecuaciones diferenciales, sin importar de qué índole sean.

En la sección anterior representamos la evolución temporal de las concentraciones de las especies **A** y **B**. El tiempo de ejecución del programa fue de 0,1 segundos de CPU. A través de la gráfica podemos deducir que el tiempo para que la reacción alcance el estado estacionario es, aproximadamente, 50 segundos. El problema tipo que hemos presentado, sin embargo, posee solución analítica, que puede obtenerse sin demasiada dificultad. Aun así, la resolución del problema puede llevarse a cabo en un tiempo récord con el empleo de SimKinet y, lo que es más importante, puede emplearse para tratar problemas potencialmente más complejos, donde los esquemas cinéticos no sean tan sencillos. Un ejemplo es la conversión de 1,3-oxatiano-ceteniminas en los productos *cis*- y *trans*- espiroquinoleínas (Alajarín et al., 2012), cuyo estudio por parte de los autores ha dado lugar a publicaciones de alto impacto (Caravaca et al., 2014). En este estudio, se determina, a diferentes temperaturas, el tiempo de cruce entre los dos productos, denominado *switching time*. El tratamiento teórico de las ecuaciones diferenciales acopladas asociadas al esquema cinético químico de este problema es prácticamente intratable. Por ello, se requiere de tratamiento numérico para su resolución. En ocasiones, sobre todo a temperaturas bajas, el tiempo de *switch* es tan grande que los algoritmos de simulación tradicionales, tales como Runge-Kutta o Bulirsch-Stöer (Press et al. 2007), se vuelven ineficientes. A través del software SimKinet obtenemos unos tiempos de simulación órdenes de magnitud menores, con la ventaja de obviar la manipulación inherente al tratamiento numérico de las ecuaciones diferenciales. Por ello, el potencial del programa abre plenamente la ventana de la investigación de alto nivel.

El software libre SimKinet proporciona un entorno sencillo y directo para la resolución numérica del conjunto de ecuaciones diferenciales acopladas correspondientes a un esquema cinético químico. El programa construye automáticamente la equivalencia con una red eléctrica empleando los principios de operación del *Network Simulation Method*. Su versatilidad es tal que puede emplearse para resolución de otros tipos de ecuaciones diferenciales acopladas, incluso fuera del ámbito de la química, que contengan términos no lineales, involucren dinámica caótica, etc. En concreto, en el Centro Universitario de la Defensa de San Javier, los alumnos lo emplean dentro del entorno de los Trabajos de Fin de Grado para resolver ecuaciones tanto químicas como de carácter aeronáutico.

Aunque la vertiente académica e investigadora a nivel universitario resulta importante y atractiva, no hay que obviar que SimKinet puede emplearse con propósitos educativos incluso en educación secundaria. Un ejemplo es el estudio, en cinética química, de las reacciones de distinto orden. La ecuación diferencial general que describe el proceso es la siguiente (Ansley y Dougherty, 2006):

$$\frac{d[A]}{dt} = -k[A]^n$$

donde consideramos que **A** es la especie química en cuestión, y  $n$  es el orden de la reacción. El empleo de SimKinet puede ofrecer, en un tiempo muy corto, un visionado directo de la variación de la concentración de **A** con el tiempo, sea la reacción del orden que se desee, únicamente cambiando el parámetro  $n$ . Además, el profesor podrá emplear el programa para no limitar el estudio a este tipo de reacciones, y determinar gráficamente qué sucedería cuando otra especie **B** estuviera involucrada en el proceso y el problema se convirtiera en un sistema de ecuaciones diferenciales, con o sin acople.

#### 4. CONCLUSIONES

SimKinet, software desarrollado por los autores, presenta las siguientes contribuciones significativas a nivel educativo e investigador:

Resuelve cualquier tipo de sistema de ecuaciones diferenciales asociadas a un esquema cinético químico. Es extensible, además, a cualquier problema que contenga ecuaciones diferenciales.

Es órdenes de magnitud más rápido que la mayoría de algoritmos numéricos tradicionales. Depende del problema en cuestión, pero se ha encontrado que en reacciones químicas que involucren esquemas cinéticos complejos, puede ser incluso 1000 veces más rápido que algoritmos estándar de simulación, tales como Runge-Kutta (de paso fijo o adaptativo) y Bulirsch-Stöer.

Posee una interfaz directa y muy sencilla, apta para cualquier tipo de usuario. Como se ha indicado, no es necesario manipular códigos de programación ni seleccionar el paso discreto de la simulación numérica. Puede tratarse como caja negra, y sólo es necesario definir las ecuaciones del proceso. Por ello, se convierte en una herramienta óptima para alumnos de los primeros cursos universitarios, que por lo general poseen escasos conocimientos de programación.

Posee un alto componente educativo, dada la gran variedad de aplicaciones que cubre y lo sencillo de su manejo. En el ámbito educativo universitario, puede emplearse para estudiar sistemas que no poseen solución analítica porque, además de ser muy sencillo de usar, es extremadamente rápido, lo que garantiza la inmediatez que se busca en el aula para que no se vea afectada la dinámica de la clase. En secundaria puede utilizarse para resolver problemas de diversa índole, que necesiten la resolución de cualquier ecuación diferencial. Como ejemplo: las reacciones químicas de diferente orden, en Química, o la caída de un cuerpo con resistencia del aire proporcional a su velocidad, en Física.

Es software libre.

Puede emplearse para trabajos de investigación que involucren esquemas cinéticos más complejos, y extenderse a otros sistemas descritos por ecuaciones diferenciales. Como ejemplos que están tratando

en la actualidad, citamos: problemas de persecución-evasión, movimiento de servomecanismos, dinámica de nano fluidos, y superconductores (uniones Josephson), entre otros.

## 5. BLIBIOGRAFÍA

- Alajarin, M., Bonillo, B., Marin-Luna, M., Sanchez-Andrada, P., Vidal, A., y Orenes, R.A. (2012). *Tetrahedron*, 68, 4672-4681.
- Anslyn, E.V., y Dougherty, D.A. (2006). *Modern Physical Organic Chemistry*. California: University Science Books.
- Bertran, J., y Núñez, J. (2002). *Química Física, Vol 2*. Barcelona: Ariel.
- Caravaca, M., Sanchez-Andrada, P., Soto, A., y Alajarin, M. (2014). *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 16, 25409-25420.
- Devries, P.L., y Hasbun, J.E. (2011). *A First Course In Computational Physics*. Massachusetts: Jones And Barlett Publishers, Llc.
- Goldstein, H. (2000). *Mecánica clásica*. Barcelona: Reverté.
- Gonzalez-Fernandez, C.F., Alhama, F., Horno, J., y Lopez-Garcia, J.J. (2002). *Newtork Simulation Method*. Trivandrum: Research Singpost.
- Marion, J.B. (1998). *Dinámica clásica de las partículas y sistemas*. Barcelona: Reverté.
- Neumann, W., David, R., y Zuo, Y. (2010). *Applied Surface Thermodynamics*. Ed. Crc Press.
- Press, W. H., Teukolsky, S., Vetterlin, W.T., y Flannery, B.P. (2007). *Numerical Recipes. The Art Of Scientific Computing*. New York: Cambridge University Press.
- Pspice 6.0 (1994). Microsim Corporation Fairbanks. Irvine, California.