

Modelado orientado a objetos del problema de balanceo de ecuaciones químicas y su resolución con métodos algebraicos

Object oriented modeling for solving the chemical equation balancing problem and its resolution using algebraic methods

Leticia Palos-Sánchez,¹ Mario Iván Jaen-Márquez,² Rafael Rivera-López^{3*}

¹ Dirección de Operación y Soporte de Tecnologías de Información, Tecnológico de Monterrey.
Eugenio Garza Sada 2501, col. Tecnológico. Monterrey, Nuevo León, México.

² Departamento de Ciencias de la Computación, Centro de Investigación en Matemáticas (CIMAT).
Jalisco s/n, col. Valenciana, Guanajuato, México

³ Departamento de Sistemas y Computación, Instituto Tecnológico de Veracruz
Calzada Miguel Ángel de Quevedo. Veracruz, México. CP 2779

* Correo-e: rrivera@itver.edu.mx

PALABRAS CLAVE:

balanceo de ecuaciones químicas,
diseño orientado a objetos,
algoritmos

RESUMEN

En este artículo se plantea una propuesta de modelado orientado a objetos del problema de balanceo de ecuaciones químicas. Este modelo se utiliza para desarrollar un conjunto de clases que aplican métodos algebraicos basados en manejo de matrices para encontrar los coeficientes estequiométricos que balancean una ecuación química. También se define una gramática utilizada en la validación de la ecuación y se describe la aplicación de tres algoritmos algebraicos para resolver un conjunto de ecuaciones químicas. Adicionalmente, se describe el diseño de una página web que pretende ser un banco de prueba para este tipo de problemas. En este artículo se presenta el modelo de clases, así como los resultados experimentales de la aplicación de los algoritmos algebraicos.

KEYWORDS:

balancing chemical equations, object
oriented design, algorithms

ABSTRACT

This paper presents an object oriented model for solving the chemical equation balancing problem. This model consists of a group of classes that apply algebraic methods based on matrix computations to find the stoichiometric coefficients needed for balancing a chemical equation. A context-free grammar for validating chemical equations is defined and three algebraic algorithms are applied to solve a set of chemical equations. A web page that is intended to be a repository for testing chemical equations for this type of problems is described. In this article the class diagram and the experimental results of the application of algebraic algorithms are presented.

1 INTRODUCCIÓN

El balanceo de ecuaciones químicas (BEQ) ocupa un lugar muy importante tanto en el ambiente académico como en la industria química, ya que es una herramienta para el modelado de reacciones químicas. El BEQ se utiliza tanto en aplicaciones cuantitativas como cualitativas, como el estudio y análisis de los procesos químicos; la estimación de reactantes y productos, y la determinación de las condiciones de una reacción química. Este problema ha atraído la atención de los investigadores desde el siglo XIX, quienes lo han estudiado desde varios enfoques. En la actualidad existen diferentes procedimientos para resolver este problema, los cuales se pueden agrupar en: métodos de inspección o tanteo [1], método oxi-reducción [2] y métodos algebraicos [3]. El problema de BEQ consiste en encontrar los coeficientes para cada compuesto o elemento químico presente en una ecuación, con intención de obtener el mismo número de átomos en cada uno de los elementos, ya sean reactivos o productos.

Todos los métodos de BEQ existentes tienen ventajas y desventajas. Por ejemplo, en las ecuaciones con gran cantidad de compuestos químicos aumenta la complejidad de balanceo al realizarlo por el método de tanteo. Por otro lado, para balancear ecuaciones por el método algebraico se debe cumplir con la condición de que el número de elementos debe ser igual al número de compuestos más uno. Finalmente, una desventaja para balancear ecuaciones por métodos matriciales es que la matriz producida por el problema generalmente no es cuadrada ni es invertible de forma directa.

En los últimos años se han desarrollado aplicaciones para computadora que emplean diferentes enfoques para el BEQ. Kumar [4] realiza un estudio de las aplicaciones en computadora para el BEQ, donde presenta métodos con diferentes procedimientos basándose en matrices, en programas interactivos o en diseño de ingeniería. En [5-8] todos los métodos de resolución propuestos para el BEQ resuelven una formulación matemática. Ristesky utiliza la misma formulación en [5, 6]; por otro lado, Zou *et al.* [7], emplean la formulación propuesta por Sen [8] para aplicar una metaheurística basada en búsqueda de armonías.

En este artículo se presenta el modelado orientado a objetos del problema de BEQ, que sirve como base para aplicar cualquier método de resolución para este

problema. En particular se presenta la aplicación de métodos algebraicos para demostrar la utilidad de la modelación. Asimismo, debido a que no existe un banco de datos común para realizar pruebas de los diferentes enfoques de BEQ, se implementó un portal de descarga de ejemplos de ecuaciones químicas y un método para verificar el acierto de la ecuación introducida al algoritmo.

Este documento se organiza en varias secciones: primero define el problema del balanceo de ecuaciones y se ofrece una descripción de los métodos tradicionales para su resolución; después presenta el diagrama de clases de la modelación del problema y los métodos que se implementaron para probar dicho modelado; luego se describe el formato de escritura de una ecuación química y el portal de descarga; finalmente, se presentan las pruebas realizadas y se expone una serie de conclusiones.

2 PROBLEMA DE BALANCEO DE ECUACIONES QUÍMICAS

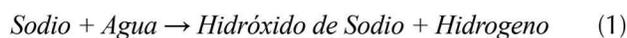
Según lo definido en [9], una reacción química es un proceso mediante el cual una o más sustancias (elementos o compuestos) denominados reactivos sufren una transformación para dar lugar a sustancias diferentes conocidas como productos. En [10] se indica que, en una escala microscópica, una reacción química muestra una modificación de enlaces entre átomos por el desplazamiento de electrones, enlaces que se rompen y otros que se forman, pero los átomos implicados se conservan antes y después de la reacción química. Con base en la ley de la conservación de la masa establecida por Lavoisier, una reacción química no puede modificar la cantidad de elementos químicos.

De acuerdo con [11], el término estequiometría se usa para hacer referencia a la relación entre los elementos que constituyen las sustancias. Se dice que una sustancia es estequiométrica cuando tiene una composición atómica definida. Del mismo modo, una reacción química es estequiométrica cuando existe una correspondencia definida entre la composición y cantidad de las sustancias reaccionantes y las que se forman en la reacción.

La importancia del estudio de las reacciones químicas se puede apreciar en el desarrollo industrial. Considerando lo expuesto en [12], para que las industrias puedan surgir y vivir son necesarias las materias primas, que en pocos casos pueden

emplearse sin ser modificadas sustancialmente; estas modificaciones se pueden lograr solamente por medio de transformaciones químicas adecuadas, debido a que cualquier tratamiento que no las produzca sólo es capaz de modificar la forma o el aspecto exterior de los materiales sin influir sobre la constitución de las sustancias.

Un ejemplo de reacción química se describe en [13]: el sodio es un metal blando y brillante que reacciona vigorosamente con el agua. Cuando se coloca una pequeña cantidad de sodio en un recipiente de agua, se forma rápidamente gas hidrógeno e hidróxido de sodio en la solución; dicha reacción se describe en la ecuación (1) y se representa simbólicamente en la ecuación (2).



Una ecuación química no está completa si no respeta la ley de conservación de la materia. Por lo tanto, se puede entender que el problema es balancear una ecuación química, y el algoritmo por desarrollar buscará los coeficientes estequiométricos que cumplan la ley de la conservación de la materia, donde los coeficientes serán el resultado al problema.

A continuación se describen los enfoques utilizados para resolver este problema actualmente, que se pueden agrupar en métodos de inspección o tanteo, el método oxi-reducción y los métodos algebraicos.

2.1 Método de inspección o tanteo

Como se indica en [14], el método más elemental empleado para BEQ es la simple inspección de la ecuación para proceder a igualar el número de átomos de cada elemento, tanto en los reactivos como en los productos. Este método es especialmente útil para reacciones simples, pues presenta ecuaciones poco complicadas. Para realizar el proceso de BEQ se sigue una serie de pasos, donde generalmente se debe:

1. Escribir la ecuación sin balancear usando la fórmula química correcta.
2. Identificar los elementos cuyo número de átomos no esté igualado en ambos lados de la ecuación química.

3. Proponer coeficientes para los reactivos o productos que contengan estos elementos para buscar que exista el mismo número de átomos en ambos lados de la ecuación.
4. Expresar los coeficientes con los números enteros más bajos posibles.
5. Verificar su contestación, determinando si la cantidad de átomos es igual para todos los elementos químicos que intervienen en la ecuación. De no ser así, se debe repetir el proceso y proponer otros valores para los coeficientes.

2.2 Método oxi-reducción (redox)

Una reacción de óxido-reducción representa una pérdida y ganancia de electrones; es decir, desprendimiento o absorción de energía (presencia de luz, calor electricidad, etc.). En una reacción, si un elemento se oxida, debe existir un elemento que se reduzca. Según [15], el número de oxidación representa la carga eléctrica que asumiría un elemento si los electrones del enlace estuviesen distribuidos, de modo que se le atribuye el par de electrones del enlace al átomo más electronegativo. Los pasos generales para aplicar el método de oxi-reducción son los siguientes:

1. Calcular los números de oxidación.
2. Identificar los elementos que cambian su estado de oxidación o carga y escribir semi-reacciones con esos elementos.
3. Efectuar el balance de masa en las semi-reacciones.
4. Efectuar el balance de carga en las semi-reacciones.
5. Balancear los electrones intercambiados (perdidos y ganados) en las semi-reacciones balanceadas.
6. Introducir los coeficientes obtenidos a la reacción global.
7. Ajustar los coeficientes de los elementos que no cambiaron.

2.3 Métodos algebraicos

Un método algebraico requiere construir un sistema de ecuaciones de varias variables y resolverlas simultáneamente. El número de pasos para balancear una

ecuación por el método algebraico puede variar en función del grado de complejidad de la ecuación. Los pasos generales para aplicar el método algebraico, tomados de [16], se presentan a continuación:

1. Escribir una reacción utilizando n diferentes símbolos (letras) para representar los coeficientes estequiométricos desconocidos.
2. Identificar los $n-1$ elementos involucrados en la reacción.
3. Para cada elemento, construir una ecuación lineal algebraica que iguale el número de átomos del elemento en ambos lados de la reacción:

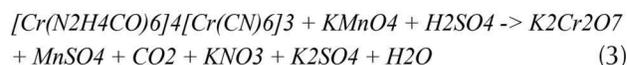
 - Para cada molécula en la ecuación química en la cual el elemento aparece, multiplicar el subíndice del elemento por el coeficiente desconocido de la molécula.
 - Para cada elemento, sumar el producto de los subíndices y los coeficientes de las moléculas de ambos lados de la ecuación e igualar las sumas.

4. Seleccionar una de las incógnitas y asignar algún valor conveniente.
5. Resolver las n ecuaciones con n incógnitas.
6. Si existen factores comunes en los coeficientes, dividir cada coeficiente entre ellos para reducir los coeficientes al mínimo conjunto de enteros. Si existe un coeficiente fraccionario, multiplicar todos los coeficientes por un valor indicado de forma que todos sean enteros.
7. Verificar los coeficientes encontrados.

3 MODELADO ORIENTADO A OBJETOS DE UNA ECUACIÓN QUÍMICA

Para resolver el problema de BEQ es necesario identificar el número de elementos químicos presentes en cada compuesto, tanto de los reactivos como de los productos. Estos valores normalmente se representan a través de una matriz de reacción. Por ejemplo, la ecuación química mostrada en la ecuación (3) se representa con la matriz de reacción de la figura 1. Las filas se asocian a los elementos que participan en la ecuación y las columnas representan cada compuesto químico. El valor m_{ij} de cada celda de la matriz es el número de átomos del i -ésimo elemento en el j -ésimo compuesto. Los valores del número de átomos correspondientes a los compuestos químicos en el lado derecho de la ecuación química, que corresponden a los productos, se representan cambiando su signo para

poder determinar si el elemento está balanceado cuando se suman dichos valores y el resultado es cero.



Compuestos

	[Cr(N ₂ H ₄ CO) ₆] ₄ [Cr(CN) ₆] ₃	KMnO ₄	K ₂ Cr ₂ O ₇	MnSO ₄	CO ₂	KNO ₃	K ₂ SO ₄	H ₂ O
Cr	7	0	-2	0	0	0	0	0
N	66	0	0	0	0	-1	0	0
H	96	0	2	0	0	0	0	-2
C	42	0	0	0	-1	0	0	0
O	24	4	4	-7	-4	-2	-3	-4
K	0	1	0	-2	0	0	-1	-2
Mn	0	1	0	-1	0	0	0	0
S	0	0	1	0	-1	0	0	-1

Elementos

Matriz de Reacción

Figura 1. Matriz de reacción de una ecuación química

Para modelar una ecuación química como un grupo de clases, se considera que dicha ecuación es una agrupación de compuestos químicos. Por lo anterior, en el modelo propuesto se manejan dos clases, la primera representa la ecuación y la segunda a los compuestos que la conforman. La figura 2 muestra el diagrama de clases que representa una ecuación química. La tabla 1 describe los métodos más importantes de la clase *EcuaciónQuímica* y la tabla 2 presenta los métodos más importantes de la clase *Compuesto*.

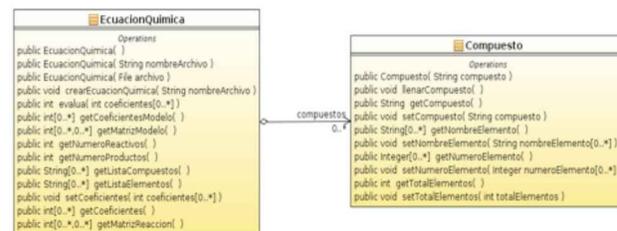


Figura 2. Clases que modelan una ecuación química

4 ANÁLISIS SINTÁCTICO DE LA ECUACIÓN POR BALANCEAR

Para poder aplicar algún método de BEQ es necesario que la ecuación química esté representada correctamente, para lo cual precisa un formato de escritura. En este

Tabla 1. Métodos de la clase EcuaciónQuímica

MÉTODO	DESCRIPCIÓN
crearEcuacionQuimica ()	Se encarga de analizar sintácticamente la ecuación química y construir la matriz de reacción. También identifica tanto a los compuestos como a los elementos químicos que forman la ecuación química.
evalua ()	Determina si la ecuación se encuentra balanceada aplicando los coeficientes a la ecuación química. Devuelve 0 si la ecuación está balanceada o un número diferente si no lo está.
getListaCompuestos ()	Devuelve la lista de compuestos que forman la ecuación química.
getListaElementos ()	Devuelve la lista de elementos que forman la ecuación química.
setCoeficientes ()	Permite asignar valores a los coeficientes estequiométricos de la ecuación.
getCoeficientes ()	Devuelve el arreglo de coeficientes estequiométricos de la ecuación.
getMatrizReaccion ()	Devuelve la matriz de reacción.

Tabla 2. Métodos de la clase Compuesto

MÉTODO	DESCRIPCIÓN
llenarCompuesto ()	Determina la cantidad de elementos en el compuesto.
getNombreElemento ()	Obtiene la lista de elementos químicos en un compuesto.
getNumeroElemento ()	Obtiene la lista de ocurrencias de un elemento químico en un compuesto.

trabajo se utiliza el formato que comúnmente se presenta en la literatura, donde los compuestos están separados por '+'. Los productos están separados de los reactivos por '->', '=>' o '≡'. Los compuestos pueden utilizar signos de agrupación como paréntesis o corchetes. Para agregar comentarios que brinden información acerca de la ecuación, deben empezar con ';'. Para garantizar la correcta escritura de una ecuación química se diseñó una gramática que permite su análisis sintáctico. La figura 3 muestra la gramática diseñada para este proyecto, utilizando la notación BNF.

Para implementar esta gramática y poder utilizarla en la verificación de la escritura de una ecuación química se utiliza JavaCC [17], que al compilar la gramática genera un conjunto de clases que son incluidas en el programa para evaluar la ecuación proporcionada. La figura 4 muestra las clases generadas

```

<ecuacion> := (<comentario>)* <reactivos> <produce> <productos>
              (<comentario>)*
<reactivos> := <productos>
<produce> := '='> | '>' | '≡' | '≡'
<productos> := <compuesto> ( '+' <compuesto> )*
<compuesto> := ( <numero> )? ( <subcompuesto> )+
<subcompuesto> := <parentesis> | <corchetes> | <elemento> ( <numero> )?
<parentesis> := '(' <subcompuesto> ')' ( <numero> )?
<corchete> := '[' <subcompuesto> ']' ( <numero> )?
<numero> := [1-9] ([0-9])*
<elemento> := 'H' | 'B' | 'C' | 'N' | 'O' | 'F' | 'P' |
              'S' | 'K' | 'V' | 'Y' | 'I' | 'W' | 'U' |
              'N'e' | 'N'a' | 'M'g' | 'A'l' | 'S'i' | 'C'l' |
              'A'r' | 'H'e' | 'L'i' | 'B'e' | 'C'a' | 'S'c' |
              'T'i' | 'C'r' | 'M'n' | 'F'e' | 'C'o' | 'N'i' |
              'C'u' | 'Z'n' | 'G'a' | 'G'e' | 'A's' | 'S'e' |
              'B'r' | 'K'r' | 'R'b' | 'S'r' | 'Z'r' | 'N'b' |
              'M'o' | 'T'c' | 'R'u' | 'R'h' | 'P'd' | 'A'g' |
              'C'd' | 'I'n' | 'S'n' | 'S'b' | 'T'e' | 'X'e' |
              'C's' | 'B'a' | 'L'a' | 'C'e' | 'P'r' | 'N'd' |
              'P'm' | 'S'm' | 'E'u' | 'G'd' | 'T'b' | 'D'y' |
              'H'o' | 'E'r' | 'T'm' | 'Y'b' | 'L'u' | 'H'f' |
              'T'a' | 'R'e' | 'O's' | 'I'r' | 'P't' | 'A'u' |
              'H'g' | 'T'l' | 'P'b' | 'B'i' | 'P'o' | 'A'i' |
              'R'n' | 'F'r' | 'R'a' | 'A'c' | 'T'h' | 'P'a' |
              'N'p' | 'P'u' | 'A'm' | 'C'm' | 'B'k' | 'C'y' |
              'E's' | 'F'm' | 'M'd' | 'N'o' | 'L'r' | 'R'f' |
              'D'b' | 'S'g' | 'B'h' | 'H's' | 'M't' | 'D's' |
              'R'g' | 'C'n' | 'U'u' | 'U'u' | 'U'u' | 'U'u' |
              'U'u'h' | 'U'u's' | 'U'u'o'
<comentario> := ';' ([a-z][A-Z])* '\n'
    
```

Figura 3. Gramática para reconocer una ecuación química

por JavaCC, y la tabla 3 presenta la descripción de dichas clases.

5 MÉTODOS BASADOS EN MATRICES

Estos métodos generalmente utilizan una matriz aumentada para resolver el sistema de ecuaciones. En la mayoría de los casos se podrá utilizar este tipo de métodos, si se cumple con la condición de que el número de compuestos sea igual o menor al número de elementos más uno. Por el contrario, cuando el número de compuestos es mayor al número de elementos más uno, estos métodos no podrán utilizarse.

En [18] se describen los métodos de Gauss y de Gauss-Jordan. El método de Gauss, conocido también como eliminación gaussiana, consta de dos fases: la primera reduce el sistema de ecuaciones lineales a una matriz triangular superior mediante operaciones básicas de renglón; la fase ulterior utiliza un esquema de sustitución para encontrar los valores de las incógnitas del sistema de ecuaciones.

El método de eliminación gaussiana para resolver el sistema de ecuaciones lineales expresado como $Ax = b$ inicia considerando la matriz aumentada $[A|b]$. A ella

Tabla 3. Clases generadas por JavaCC para el analizador sintáctico de ecuaciones químicas

MÉTODO	DESCRIPCIÓN
AnalizadorConstants	Conjunto de constantes utilizadas en la gramática.
AnalizadorTokenManager	Clase que representa al analizador sintáctico (<i>parser</i>).
ParseException	Clase que modela los errores de parseo que se encuentren al analizar la entrada.
Token	Clase que representa a los tokens. Cada token tiene un atributo int que representa el tipo de token y un campo String que representa la secuencia de caracteres que representan al token.
SimpleCharStream	Es una clase adaptadora que libera caracteres al analizador léxico.
TokenMgrError	Clase que modela los errores del analizador léxico.

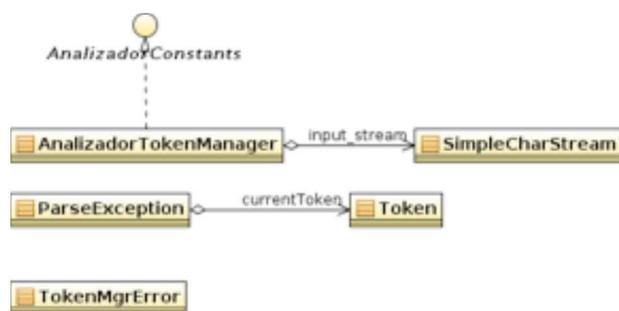


Figura 4. Clases generadas por JavaCC para evaluar una ecuación química a balancear

se le aplican operaciones elementales entre renglones para transformarla y conseguir una matriz equivalente por renglones $[C|d]$; donde C es una matriz triangular superior. Una vez que se escribe la matriz $[C|d]$ en la forma $Cx = d$, se debe utilizar una sustitución hacia atrás, para obtener de esta forma el conjunto x solución del sistema.

El método de Gauss-Jordan es similar a la eliminación gaussiana, la diferencia radica en la matriz solución $[C|d]$, donde C debe ser una matriz identidad y la solución al sistema de ecuaciones es el vector d .

El método de Montante, definido en [19], trabaja bajo el supuesto principio de que la matriz es sólo de números enteros y que no se generarán elementos

fraccionarios durante el proceso intermedio de solución. Este método procede de una forma semejante al de Gauss-Jordan, pero sin hacer los pivotes y forzando a que los elementos que se harán cero sean múltiplos del pivote.

Siguiendo el enfoque orientado a objetos, en este trabajo se diseñaron las clases para modelar tres métodos algebraicos: el método de Gauss, el de Gauss-Jordan y el desarrollado por Montante. La figura 5 muestra el diagrama de clases de estos algoritmos. Se observa en este diagrama que los métodos de Gauss y de Gauss-Jordan utilizan una clase denominada fracción para evitar los errores de precisión en sus cálculos.

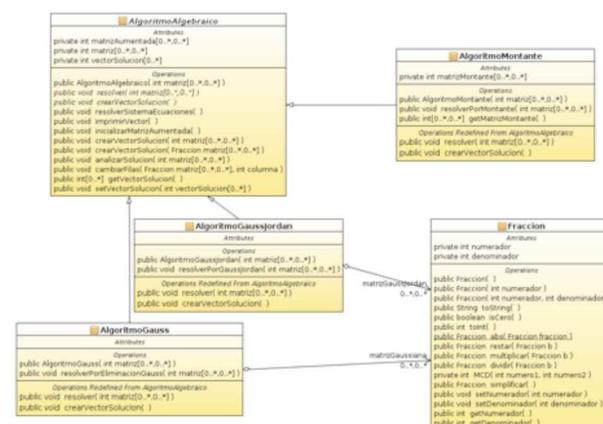


Figura 5. Clases que modelan los métodos algebraicos para balanceo de ecuaciones químicas

6 PORTAL DE DESCARGA

Aunque se ha desarrollado mucho trabajo acerca de diferentes enfoques para resolver el problema de BEQ, no existe un lugar donde se encuentren ecuaciones químicas para probar algoritmos. Lo mismo sucede con otros problemas, como el del agente viajero, el de satisfactibilidad booleana, etc. Para resolver esta necesidad se implementó un portal *web* para descargar ecuaciones químicas. Este sitio se denominó ECUlib (figura 6), y actualmente se encuentra alojado en <http://eculib.ethscape.com/>. En esta página *web* se encuentra disponible un acervo de ecuaciones químicas cuya descarga es posible para cualquier persona.

El propósito de este sitio *web* es ofrecer un acceso sencillo a aquellas personas que necesiten ecuaciones



Figura 6. Página inicial de ECULib



Figura 7. Listado de ecuaciones químicas a balancear

para probar algoritmos. Como ejemplo se muestra una captura de pantalla del sitio web en la figura 7. En la actualidad, este portal cuenta con 65 ecuaciones químicas por balancear.

7 PRUEBAS Y ANÁLISIS DE RESULTADOS

Para probar el funcionamiento del modelo orientado a objetos de una ecuación química y el de los algoritmos algebraicos, se implementaron conjuntos de clases utilizando el lenguaje de programación Java y JavaCC para el analizador de ecuaciones químicas. Se desarrollaron pruebas sobre 24 ecuaciones químicas con diferentes características. La tabla 4 resume las características de las ecuaciones consideradas en las pruebas. En esta tabla se observa que las ecuaciones 1, 2, 8, 12, 13 y 20 tienen dos compuestos más que el número de elementos, por lo que los métodos fallan en calcular los coeficientes estequiométricos. Se puede decir que estas ecuaciones tienen un número de soluciones infinito. Por otro lado, no es posible balancear las ecuaciones 19 y 21, puesto que, de acuerdo con la literatura, son ecuaciones imposibles.

8 CONCLUSIONES

A pesar de que existen muchas implementaciones de los métodos algebraicos para resolver sistemas de ecuaciones lineales, la aportación de este trabajo es la modelación de una ecuación química como un conjunto de clases, así como el uso de un mecanismo para verificar la correcta escritura de la ecuación química por balancear. Esta modelación servirá para resolver una ecuación química por otros enfoques, ya que es de todos conocido que el método algebraico tiene sus limitantes. También constituye un aporte al proporcionar un portal web donde se encuentra un conjunto de ecuaciones químicas a las que se pueden aplicar diferentes métodos de resolución.

Tabla 4. Resultados de aplicar los métodos algebraicos a las ecuaciones químicas

#P	DIMENSIÓN DE LA MATRIZ	ECUACIÓN QUÍMICA	MONTANTE	GAUSS	GAUSS JORDAN
0	8x9	$[Cr(N2H4CO)6]4[Cr(CN)6]3 + KMnO4 + H2SO4 \rightarrow K2Cr2O7 + MnSO4 + CO2 + KNO3 + K2SO4 + H2O$	✓	✓	✓
1	5x7	$ClO3 + As2S3 + H2O \rightarrow H2AsO4 + SO4 + Cl + H$	✓	✗	✗
2	4x6	$CH3CH2OH + Cr2O7 + H \rightarrow CH3CO2H + Cr + H2O$	✗	✗	✗
3	9x8	$CuSCN + KIO3 + HCl \rightarrow CuSO4 + KCl + HCN + ICl + H2O$	✓	✓	✓
4	6x7	$Ag3AsO4 + Zn + H2SO4 \rightarrow AsH3 + Ag + ZnSO4 + H2O$	✓	✓	✓
5	5x6	$PbN6 + CrMn2O8 \rightarrow Pb3O4 + NO + Cr2O3 + MnO2$	✓	✓	✓
6	7x7	$K4Fe(CN)6 + SO4H2 + H2O \rightarrow SO4K2 + SO4Fe + (NH4)2SO4 + CO$	✓	✓	✓
7	7x8	$Cu(NH3)4Cl2 + KCN + H2O \rightarrow NH3 + NH4Cl + K2Cu(CN)3 + KCNO + ClK$	✓	✓	✓
8	5x9	$KNO3 + C + S \rightarrow K2CO3 + K2SO4 + K2S2 + CO2 + CO + N2$	✗	✗	✗
9	19x20	$H3PO4 + MgSiO3 + CF2Cl2 + NaAlF4 + KI + PbCrO4 + FeSO4 + BrCl + Ca(CN)2 + SO2 + H2 \rightarrow PI3 + MgCO3 + Na2SiO3 + PbBr2 + CrCl3 + KAl(OH)4 + Fe(SCN)3 + CaF2 + H2O$	✓	✓	✓
10	5x6	$As2S3 + H2O + HNO3 \rightarrow NO + H3AsO4 + H2SO4$	✓	✓	✓
11	4x5	$KClO3 + HCl \rightarrow KCl + Cl2 + H2O$	✓	✓	✓
12	4x7	$C2H5NO2 + C3H7NO3 + C6H14N4O2 + C5H9NO2 + C9H11NO2 \rightarrow H2O + C50H73N15O11$	✗	✗	✗
13	4x7	$C5H9NO2 + C5H11NO2 + C6H13NO2 + C9H11NO2 + C5H12N2O2 \rightarrow H2O + C60H92N12O10$	✗	✗	✗
14	4x5	$KNO3 + C2 \rightarrow K2CO + CO + N2$	✓	✓	✓
15	3x4	$NH3 + O2 \rightarrow NO + H2O$	✓	✓	✓
16	3x4	$C3H6 + O2 \rightarrow CO2 + H2O$	✓	✓	✓
17	3x4	$CaCO3 + C \rightarrow CaC2 + CO2$	✓	✓	✓
18	4x5	$FeCrO4 + C \rightarrow Cr + Fe + CO$	✓	✓	✓
19	4x4	$NO2 + HClO \rightarrow HNO3 + HCl$	✗	✗	✗
20	4x6	$KClO3 + HCl \rightarrow KCl + ClO2 + Cl2 + H2O$	✗	✗	✗
21	4x3	$(NH4)2SO4 \rightarrow NH4OH + SO2$	✗	✗	✗
22	4x5	$Al + HNO3 \rightarrow Al(NO3)3 + NO + H2O$	✓	✓	✓
23	4x5	$NO2 + HClO + H2O \rightarrow HNO3 + HCl$	✓	✓	✓

REFERENCIAS

- Toth, Z. Balancing Chemical Equations by Inspection. *Journal of Chemical Education*. 1997, 74 (11), 1363-1364.
- Petrusevki, M. V. A Fast Solution to the Problem of Balancing Redox Equations: Numbers introducing formal balance. *Bulletin of the Chemists and Technologists of Macedonia*. 1998, 17(2), 141-145.
- Olson, J.A. An Analysis of the Algebraic Method for Balancing Chemical Reactions. *Journal of Chemical Education*- 1997, 74(5), 538-542.
- Kumar, D. D. Computer Applications in Balancing Chemical Equations. *Journal of Science Education and Tecnology*. 2001, 10(4), 347-350.
- Risteski, I. B. A New Generalized Matrix Inverse

- Balancing Chemical Equations and Their Stability. *Sociedad Química de México*. 2008, 2(3), 104-115.
6. Risteski, I. B. A New Singular Matrix Method for Balancing Chemical Equations and Their Stability. *Journal of the Chinese Chemical Society*. 2009, 2(3), 65-79.
 7. Zou, D., Ge, Y., Gao, L. y Wu, P. A Novel Harmony Search Algorithm for Chemical Equation Balancing. *Proceedings of the International Conference on Computer Design and Applications (ICCD)*. 2010, 2, 1-5.
 8. Sen, S. K., Agarwal, H. y Sen, S. Chemical Equation Balancing: An Integer Programming Approach. *Mathematical and Computer Modelling*. 2006, 44(7-8), 678-691.
 9. Becker, R. S. y Wentworth, W. E. *Química general*. Barcelona: Reverté, 1977.
 10. Monsalvo Vázquez, R., Miranda Pascual, M. G., Romero Sánchez, M. R. y Muñoz Perez, G. *Balace de materia y energía: procesos industriales*. México: Grupo Editorial Patria, 2014.
 11. Gutiérrez Ríos, E. *Química*. Barcelona: Reverté, 1986.
 12. Angiolani, A. *Introducción a la química industrial: fundamentos químicos y tecnológicos*. Santiago de Chile: Andrés Bello, 1960.
 13. Atkins, P. W. y Jones, L. *Principios de química: los caminos del descubrimiento*. Buenos Aires: Médica Panamericana, 2006.
 14. Correa Maya, C. A. *Fenómenos químicos*. Medellín: Fondo Editorial Universidad EAFIT, 2002.
 15. Bolaños Chombo, V. *Química analítica cualitativa: reacciones en solución*. Toluca: UAEMex, 2003.
 16. McLaughlin, D. *Chemistry Concepts*. Mew York: McGraw-Hill, 1994.
 17. Dos Reis, A. J. *Compiler Construction Using Java, JavaCC and Yacc*. Nueva York: Wiley-IEEE Computer Society Press, 2011.
 18. Guerra González, A. A. *Propuesta para la enseñanza de sistemas de ecuaciones lineales*. Trabajo final de Maestría, Universidad Nacional de Colombia, 2012.
 19. [19] Méndez Cavazos, M. A. *Validación matemática de un nuevo método para solución de algunos tipos de problemas relacionados con álgebra lineal*. Tesis de Maestría, Universidad Autónoma de Nuevo León, 1978.

Acerca de los autores



Leticia Palos Sánchez es Ingeniera en Sistemas Computacionales por el Instituto Tecnológico de Veracruz desde 2011. Está próxima a obtener el título de la Maestría en Administración de Tecnologías de Información por el Instituto Tecnológico y de Estudios Superiores de Monterrey. Actualmente se desempeña como Especialista en Operaciones de Sistemas de Apoyo de la Dirección de Tecnologías de Información del Tecnológico de Monterrey. Sus áreas de interés incluyen la programación orientada a objetos y optimización.



Rafael Rivera López es Ingeniero en Sistemas Computacionales por el Instituto Tecnológico de Veracruz desde 1989. Obtuvo el grado de Maestro en Ciencias de la Computación por el Instituto Tecnológico y de Estudios Superiores de Monterrey en 2000. Actualmente es Profesor Investigador en el Departamento de Sistemas y Computación del Instituto Tecnológico de Veracruz. Sus áreas de interés incluyen la programación orientada a objetos y la optimización.



Mario Iván Jaen Márquez es Ingeniero en Sistemas Computacionales por el Instituto Tecnológico de Veracruz desde 2013. Actualmente es estudiante de la Maestría en Ciencias de la Computación y Matemáticas Industriales en el Centro de Investigación en Matemáticas (CIMAT) con sede en Guanajuato. Su área de especialización se centra en el cómputo evolutivo y la optimización estocástica.