

EDUCACIÓN

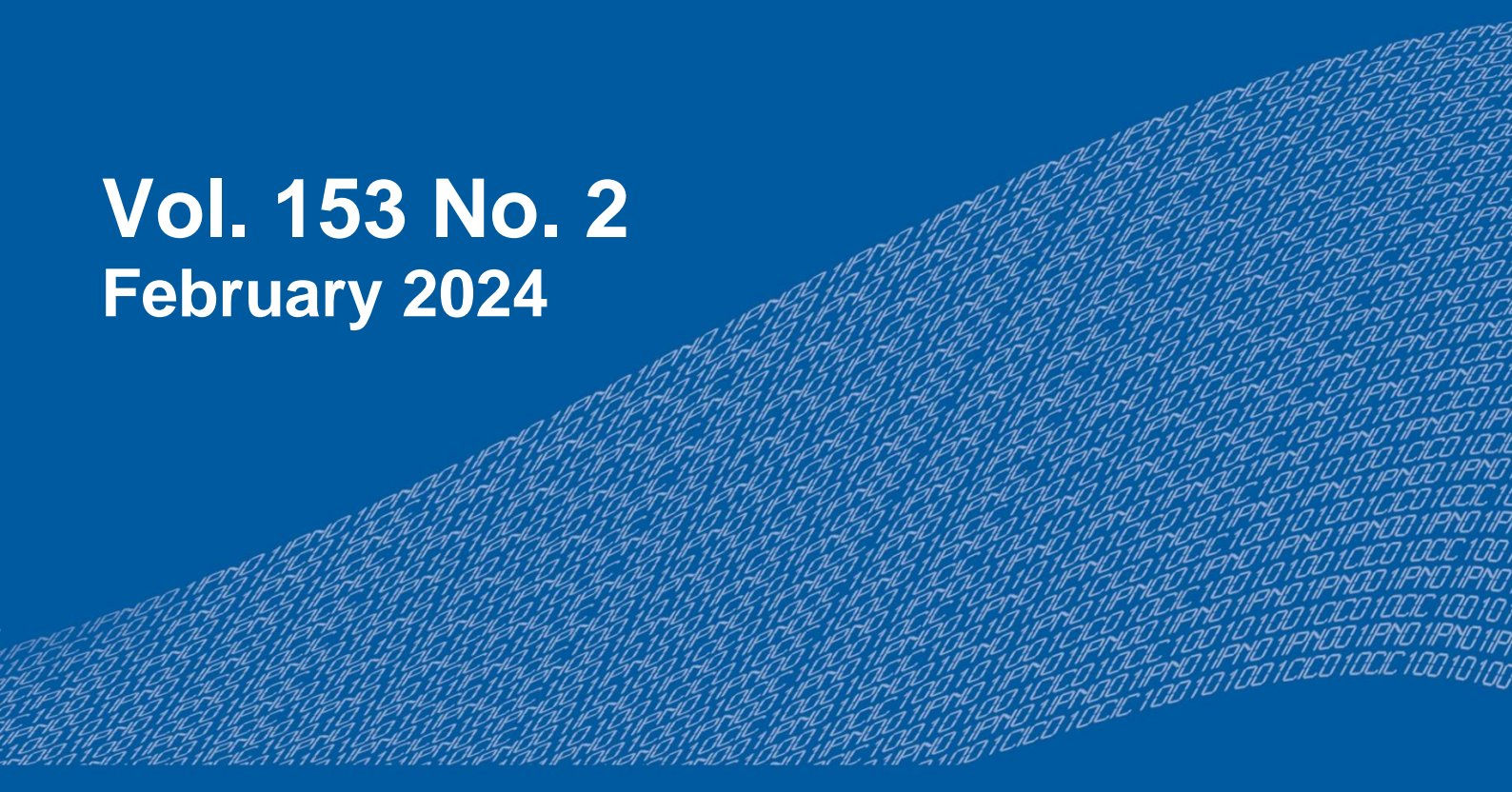
SECRETARÍA DE EDUCACIÓN PÚBLICA



Instituto Politécnico Nacional
"La Técnica al Servicio de la Patria"

Research in Computing Science

Vol. 153 No. 2
February 2024



Research in Computing Science

Series Editorial Board

Editors-in-Chief:

Grigori Sidorov, CIC-IPN, Mexico
Gerhard X. Ritter, University of Florida, USA
Jean Serra, Ecole des Mines de Paris, France
Ulises Cortés, UPC, Barcelona, Spain

Jesús Angulo, Ecole des Mines de Paris, France
Jihad El-Sana, Ben-Gurion Univ. of the Negev, Israel
Alexander Gelbukh, CIC-IPN, Mexico
Ioannis Kakadiaris, University of Houston, USA
Petros Maragos, Nat. Tech. Univ. of Athens, Greece
Julian Padget, University of Bath, UK
Mateo Valero, UPC, Barcelona, Spain
Olga Kolesnikova, ESCOM-IPN, Mexico
Rafael Guzmán, Univ. of Guanajuato, Mexico
Juan Manuel Torres Moreno, U. of Avignon, France
Miguel González-Mendoza, ITESM, Mexico

Associate Editors:

Editorial Coordination:

Griselda Franco Sánchez

Research in Computing Science, Año 23, Volumen 153, No. 2, febrero de 2024, es una publicación mensual, editada por el Instituto Politécnico Nacional, a través del Centro de Investigación en Computación. Av. Juan de Dios Bátiz S/N, Esq. Av. Miguel Othon de Mendizábal, Col. Nueva Industrial Vallejo, C.P. 07738, Ciudad de México, Tel. 57 29 60 00, ext. 56571. <https://www.rcs.cic.ipn.mx>. Editor responsable: Dr. Grigori Sidorov. Reserva de Derechos al Uso Exclusivo del Título No. 04-2019-082310242100-203. ISSN: en trámite, ambos otorgados por el Instituto Politécnico Nacional de Derecho de Autor. Responsable de la última actualización de este número: el Centro de Investigación en Computación, Dr. Grigori Sidorov, Av. Juan de Dios Bátiz S/N, Esq. Av. Miguel Othon de Mendizábal, Col. Nueva Industrial Vallejo, C.P. 07738. Fecha de última modificación 01 de febrero de 2024.

Las opiniones expresadas por los autores no necesariamente reflejan la postura del editor de la publicación.

Queda estrictamente prohibida la reproducción total o parcial de los contenidos e imágenes de la publicación sin previa autorización del Instituto Politécnico Nacional.

Research in Computing Science, year 23, Volume 153, No. 2, February 2024, is published monthly by the Center for Computing Research of IPN.

The opinions expressed by the authors does not necessarily reflect the editor's posture.

All rights reserved. No part of this publication may be reproduced, stored in a retrieval system, or transmitted, in any form or by any means, electronic, mechanical, photocopying, recording or otherwise, without prior permission of Centre for Computing Research of the IPN.

Volume 153(2)

Computing Applications in Modern Industry

Juan Carlos Martínez Espinosa (ed.)



Instituto Politécnico Nacional
"La Técnica al Servicio de la Patria"



Instituto Politécnico Nacional, Centro de Investigación en Computación
México 2024

ISSN: in process

Copyright © Instituto Politécnico Nacional 2024
Formerly ISSNs: 1870-4069, 1665-9899

Instituto Politécnico Nacional (IPN)
Centro de Investigación en Computación (CIC)
Av. Juan de Dios Bátiz s/n esq. M. Othón de Mendizábal
Unidad Profesional “Adolfo López Mateos”, Zacatenco
07738, México D.F., México

<http://www.rcs.cic.ipn.mx>

<http://www.ipn.mx>

<http://www.cic.ipn.mx>

The editors and the publisher of this journal have made their best effort in preparing this special issue, but make no warranty of any kind, expressed or implied, with regard to the information contained in this volume.

All rights reserved. No part of this publication may be reproduced, stored on a retrieval system or transmitted, in any form or by any means, including electronic, mechanical, photocopying, recording, or otherwise, without prior permission of the Instituto Politécnico Nacional, except for personal or classroom use provided that copies bear the full citation notice provided on the first page of each paper.

Indexed in LATINDEX, DBLP and Periodica

Electronic edition

Table of Contents

	Page
Sistema fotovoltaico autónomo (SFA) y monitoreo IoT en la producción de <i>Arthrospira platensis</i> out-door	5
<i>Daniela Michel Baltazar-Navarrete,</i> <i>Andrea Giovanna Lira-Morales, Jennifer Arredondo-Delgado,</i> <i>Juan de Dios Ortiz-Alvarado, Juan Carlos Rodríguez-Sierra</i>	
Programming a Web Interface for Protein-Ligand Docking.....	11
<i>Aldo Hiram Tovar-Domínguez, Adrián Arturo Ayala-Sánchez,</i> <i>Mauricio Carrillo-Tripp, José Marcos Falcón-González</i>	
Kinematics Learning in Engineering Students through Low- Cost Prototypes and 3d Printing.....	15
<i>Fidel Córdoba-Valdés, Carlos Daniel Ramírez-Hernández,</i> <i>Daniel Sánchez-Guzmán, Juan Carlos Martínez-Espinoza</i>	
Evaluación de medios de cultivo para producción de <i>Arthrospira Platensis</i>	23
<i>Alan Eduardo Navarrete-Domínguez, Lisset Soledad Tafoya-López,</i> <i>Juan Carlos Rodríguez-Sierra</i>	
Síntesis de catalizadores de oro-carbón con jugo de granada, y su evaluación en celda de combustible microfluídica de glucosa	29
<i>Uriel Mariscal-Pedraza, Juan Carlos Martínez-Espinosa,</i> <i>Andrés Dector-Espinoza, Juan Manuel Olivares-Ramírez,</i> <i>Raúl Carrera-Cerritos</i>	
Clasificación automática de opiniones de películas usando aprendizaje automático	35
<i>Jesús Andres Sierra-Rangel, Rafael Guzmán-Cabrera</i>	
Disminución de Cr (III) de soluciones acuosas residuales mediante desechos agroindustriales y cárnicos como bioadsorbentes.....	43
<i>Diana Arredondo-Angulo, Ivan Castillo-Montaño,</i> <i>Rosa Hernández-Soto, José Alfredo Hernández-Maldonado</i>	

Sistema fotovoltaico autónomo (SFA) y monitoreo IoT en la producción de *Arthrospira platensis* out-door

Daniela Michel Baltazar-Navarrete, Andrea Giovanna Lira-Morales,
Jennifer Arredondo-Delgado, Juan de Dios Ortiz-Alvarado,
Juan Carlos Rodríguez-Sierra

Instituto Politécnico Nacional,
UPIIG,
México

jurodriguez@ipn.mx

Resumen. Debido a la gran cantidad de metabolitos, el cultivo de microalgas y cianobacterias ha ido ganando importancia en todos los sectores. La producción de biomasa en sistemas abiertos es la más económica, ya que conlleva menores costos de inversión y mantenimiento en comparación con los cultivos en sistemas cerrados. Sin embargo, el rendimiento en la producción es considerablemente menor. En la búsqueda de optimizar dicho proceso a bajo costo, se diseñó y construyó un sistema de invernaderos con tecnología de cubierta en pequeña escala. Además, se desarrolló e implementó un sistema fotovoltaico autónomo (SFA), a través del uso de paneles solares, y el uso de la IoT. El sistema cuenta con un mecanismo de agitación y monitoreo automático, donde se observan los factores ambientales fundamentales para el crecimiento de *A. platensis*. Con las lecturas obtenidas por los sensores se identificó las condiciones de temperatura e intensidad lumínica a nivel invernadero para el desarrollo en producción de biomasa.

Palabras clave: IoT, Cianobacteria, *Arthrospira platensis*.

Autonomous Photovoltaic System (SFA) and IoT Monitoring in the Production of *Arthrospira Platensis* Out-Door

Abstract. Due to the large amount of metabolites, the cultivation of microalgae and cyanobacteria has been gaining importance in all sectors. Biomass production in open systems is the most economical, since it entails lower investment and maintenance costs compared to cultivation in closed systems. However, the production yield is considerably lower. In the search to optimize this process at low cost, a greenhouse system with small scale roof technology was designed and built. In addition, an autonomous photovoltaic system (SFA) was developed and implemented, through the use of solar panels, and the use of IoT. The system has an automatic stirring and monitoring mechanism, where the

fundamental environmental factors for the growth of *A. platensis* are observed. With the readings obtained by the sensors, the conditions of temperature and light intensity at the greenhouse level were identified for the development of biomass production.

Keywords: IoT, cyanobacteria, *Arthrospira platensis*.

1. Introducción

La producción de fuentes alternativas de alimento ha tomado gran relevancia en los países que tienen grandes problemas de desnutrición. La espirulina (*Arthrospira platensis*), es un ejemplo de tales alternativas, ya que, además de sus propiedades nutritivas (bajo contenido calórico y elevado porcentaje de proteínas de 50% a 70%), su cultivo conlleva pocas dificultades [1].

Algunos de los factores que más influyen en la producción de biomasa y deben mantenerse dentro de los rangos son: la intensidad lumínica, la temperatura, el pH, la agitación y contaminación [2]. En el cultivo de micro algas los sistemas cerrados son económicamente más caros que los abiertos, ya que conlleva altos costos de inversión en su diseño, construcción, mantenimiento y operación.

Mientras que el cultivo en sistemas abiertos tiene un coste de instalación y operación bajo, pero no lleva tanto control; lo que trae condiciones de cultivo adversas, contaminación, difícil control de la concentración de nutrientes y de la temperatura. En consecuencia, estas condicionantes traen una producción de biomasa menor [3].

Los invernaderos con túnel geodésicos tienen mayor capacidad para el control de los factores climáticos, buen reparto de la luminosidad en el interior del invernadero y gran resistencia a fuertes vientos [4].

La energía solar fotovoltaica funciona al incidir la radiación del sol sobre una de las caras de una célula fotoeléctrica, que conforman los paneles, se produce una diferencia de potencial eléctrico entre ambas caras que hace que los electrones salten de un lugar a otro, generando así corriente eléctrica. Esta energía eléctrica contribuye al desarrollo sostenible y no contamina [2].

El Internet de las Cosas (IoT) es la tecnología que une la acción de monitorear objetos con el envío a dispositivos de los datos obtenidos. ThingSpeak es una plataforma de IoT, por medio esta podemos almacenar y recolectar datos a través de una red de área local o de Internet.

También nos permite la creación de aplicaciones de localización de posicionamiento, aplicaciones de registro de sensores, y una red social con notificaciones de las actualizaciones de estado. Esta plataforma puede interactuar con programas y paquetes matemáticos como MatLab®, Freescale® y Arduino® [5].

El objetivo de este trabajo es diseñar e implementar un sistema de producción de biomasa con energía fotovoltaica en un invernadero a pequeña escala empleando sistemas de monitoreo IoT.

Tabla 1. Dimensiones de base y biorreactor.

	Base	Biorreactor
Largo(m)	1.37	0.8
Ancho (m)	0.9	0.6
Alto (m)	0.1	0.2

Tabla 2. Dimensiones y elementos del túnel geodésico.

Propiedad		Longitud (cm)	
Altura de la cúpula de túnel		70	
Ancho de la cúpula de túnel		90	
Longitud del perímetro de la cúpula del túnel		4.24	
Cantidad	Tipo de puntal	Color	Longitud (cm)
61	A	Azul	27
26	B	Negro	26
30	C	Rojo	23
8	D	Amarillo	26.2

2. Metodología

2.1. Diseño y construcción del sistema de producción

Base y biorreactor. La base del invernadero consistió en una tarima de madera. Sobre la base, se construyó un estanque de madera recubierta con plástico con un volumen de operación de 90 L como biorreactor de producción de biomasa, ambas medidas se muestran en la Tabla 1.

Túnel geodésico. Se diseñó un túnel de frecuencia 3V. El software Inventor realizó el cálculo de la estructura del invernadero a escala 1:100. La calculadora Zip Tie Domes © 2022 del sitioweb Zip Domes LLC [6] determinó las dimensiones del túnel y los elementos necesarios para la construcción del túnel (ver Tabla 2). Adicionalmente el software también muestra los puntos que se requieren para los triángulos en la cúpula. Con estos datos se reconstruyó la estructura del invernadero del sistema de producción (ver Fig. 1). En cada sistema de producción se le instaló diferente tecnología en su cubierta externa: blanco 50% sombra, térmico 20% sombra y verde clorofila 25% sombra. Adicionalmente todos los sistemas fueron acondicionados internamente con maya sombra al 50%.

2.2. Sistema fotovoltaico autónomo

El sistema fotovoltaico autónomo (SFA) fue incorporado al sistema de producción de acuerdo con [3]. El SFA fue constituido de las siguientes partes: un panel solar, un sistema de agitación, almacenamiento de energía y el sistema de monitoreo. El panel solar tiene una capacidad de 6W el cual suministró la energía para el sistema de agitación y el almacenamiento. El sistema de aireación fue conformado por una bomba de aire de 6V, el cual funcionó únicamente durante el periodo de luz para dar mezclado

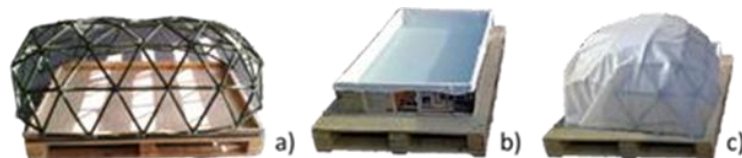


Fig. 1. Fotografía del sistema de producción: a) Estructura del invernadero, b) Biorreactor sobre su base, c) Invernadero con cubierta externa blanca 50% sombra.



Fig. 2. Visualización interfaz gráfica remota de 24 horas en ThingSpeak de 1) Temperatura, 2) pH 3) intensidad lumínica, del sistema de invernadero con cubierta blanca al 50%. (ThingSpeak.com).

neumático al cultivo. En cuanto al sistema de acumulación, este consta de baterías recargables de litio 18650 de 3.7V con un módulo de carga TP4066 para suministrar energía al sistema de monitoreo.

Sistema de monitoreo IoT. Los sensores para monitoreo fueron 3: sensor de temperatura (DS18B20), el sensor de pH (PH-4502C), el sensor de intensidad lumínica (bh1750). El sistema de monitoreo usó el controlador ESP32 para acoplar los sensores, las mediciones y la conexión IoT. Los tres sensores funcionaron las 24 horas. Sin embargo, el controlador operó en estado de bajo consumo y se activó a modo normal por aproximadamente 1 minuto cada media hora para la adquisición y envío de datos.

La adquisición de datos se llevó a cabo cada media hora y durante 21 días se obtuvieron datos para cada sistema de producción. Por medio de la plataforma ThingSpeak de código abierto de internet de los objetos de aplicación (IO) y la API de almacenamiento de datos, se recuperaron los datos y los gráficos para un posterior análisis.

3. Resultados y discusión

Con los datos registrados en la plataforma ThingSpeak se observaron los intervalos de operación de cada sistema, como lo muestra la Figura 2. Las temperaturas máximas que alcanzaron fueron: cubierta blanca al 50% de 38°C, cubierta térmica de 37°C y

cubiertaverde clorofila de 32°C. Los valores observados de pH en los primeros días se encuentran en valores de 8, y conforme el cultivo va progresando el valor se aproxima valores de 11; de acuerdo con Tanaka y colaboradores en 2020 [7] la temperatura óptima de crecimiento de *A. platensis* es de 35°C y el pH no mayor a 11. Dos de los sistemas de producción sobrepasan la temperatura óptima de crecimiento por 2°C, sin embargo, no se afecta el crecimiento del cultivo ya que la producción de *A. platensis* se ve perjudicada a temperaturas mayores a 40°C [3].

Por otro lado, se encontró que los valores de intensidad lumínica máximos que reciben los sistemas de producción son los siguientes: cubierta blanca 50% con 47 kLux, cubierta térmica 20% con 45 kLux y cubierta verdeclorofila 25% con 24 kLux. Con los datos observados podría sugerirse que el mejor sistema de producción es de la cubierta verde clorofila, sin embargo, la iluminación que provee a las células está por debajo de la intensidad lumínica referida como óptima de 30 a 50 kLux de acuerdo con Licett en 2014 [8].

4. Conclusiones

Las tecnologías de cubiertas empleadas son capaces de proveer las condiciones adecuadas de intensidad lumínica requerida por *A. platensis* para su crecimiento. Por las mediciones de temperatura y pH registradas en el sistema de monitoreo IoT, la temperatura que alcanzan los sistemas de invernaderos no llega a ser perjudicial para el cultivo de *A. platensis*. El sistema fotovoltaico autónomo desempeña un papel fundamental en la operación de los sistemas productivos para que el sistema de agitación y el sistema de monitoreo IoT funcionaran correctamente.

Referencias

1. Ramírez-Moreno, L., Olvera-Ramírez, R.: Uso tradicional y actual de *Spirulina* sp. (*Arthrospira* sp.). *Interciencia*, vol. 31, no. 9, pp. 657–663 (2006)
2. Martínez, T., Romantchik, E., Betanzos, F., Contreras, E., Martínez, R., Poblano, E. S.: Metodología para la selección de sistemas fotovoltaicos a invernaderos y su aplicación. *Ingeniería Agrícola y Biosistemas*, vol. 6, no. 1, pp. 15–30 (2014)
3. Kumar, M., Kulshreshtha, J., Singh, G.: Growth and biopigment accumulation of cyanobacterium *Spirulina platensis* at different light intensities and temperature. *Brazilian Journal of Microbiology*, vol. 42, no. 3, pp. 1128–1135 (2020)
4. Rodríguez-Sotelo, J. L., López-Londoño, A., Vega-Botero, C. A., Flores-Hurtado, R. D.: Sistema de monitoreo y control remoto usando IOT para un regulador de presión. *Scientia et Technica*, vol. 22, no. 4, pp. 391–397 (2017)
5. Zip Tie Domes. <https://www.ziptiedomes.com/index.htm>
6. Tanaka, K., Kishi, M., Assaye, H., Toda, T.: Low temperatures in dark period affect biomass productivity of a cyanobacterium *Arthrospira platensis*. *Algal Research*, vol. 52, no. 1 (2020)
7. Licett, B., Guevara, M., Lemus, N., Freitas, L., Romero, L., Lodeiros, C., Arredondo, B.: Crecimiento y composición bioquímica de *Arthrospira platensis* (division cyanophyta) cultivada a diferentes salinidades y fuentes de nitrógeno. *Boletín del Instituto Oceanográfico de Venezuela*, vol. 53, no. 1, pp. 3–13 (2014)

Programming a Web Interface for Protein-Ligand Docking

Aldo Hiram Tovar-Domínguez¹, Adrián Arturo Ayala-Sánchez¹,
Mauricio Carrillo-Tripp², José Marcos Falcón-González¹

¹ Instituto Politécnico Nacional,
Unidad Profesional de Ingeniería Campus Guanajuato,
Mexico

² Instituto Politécnico Nacional,
Centro de Investigación y de Estudios Avanzados Unidad Monterrey,
Mexico

jfalcong@ipn.mx

Abstract. Molecular docking has been widely studied because it seeks to predict the energies and binding modes between ligand and protein, with applications in drug development, the study of diseases, protein design, etc. In the present work, the aim is to automate the docking results through an intuitive and flexible interface, with a view to virtual screening, such that predictive systems are made more efficient, giving a shorter response time. Thus, it is not necessary to install different packages, nor to intervene in each of the intermediate processes, such as the addition of Gasteiger and Kollman charges, and the removal of external molecules to the system, giving a more efficient response time.

Keywords: Docking, interface, affinity.

1 Introduction

Over the years, structural biologists and bioinformaticians have shown interest in the way molecules interact with one another due to its implications for drug design, the study of diseases [7], among other applications. There has been a need to better understand how these complex interactions arise from the topology of the molecules, their physicochemical properties, their environment, and many other factors. Some molecular modeling tools include molecular docking (docking), a very useful technique for predicting the structure of intermolecular complexes established between two or more molecules [9].

Enantiomers are stereoisomers that cannot be superimposed, the importance of which lies in the fact that in biological systems only one of the two possible enantiomers are present for a chiral molecule [3]. Some studies have reported enantiomers can behave as potent and selective inhibitors of matrix metalloproteinases (MMPs), which could be useful for the treatment of diseases such as cancer and arthritis [5]. AR, IR, SIRT-6 have also been reported to be used as prominent target proteins to study the

Table 1. Software used in the development of the interface.

Software/Packages	Use
Open Babel	Geometry optimization for each ligand [10]
Chimera	Removing of all molecules except the chains of interest from .pdb
AutodockFR	Addition of missing hydrogen atoms and Gasteiger (Ligand) and Kollman (Receptor) charges; Keeping of polar hydrogen atoms
P2Rank [2]	Search of pocket coordinates for the first (coarse) docking
Awk	Processing of atom coordinates for the computation of the box
Autodock Vina [7]	Ligand conformers, affinities, and distance from the best conformer (RMSDs upper bound and lower bound)
Python and Visual Studio Code	Python is used as the programming language; VSC is used as a viewer linking to the web server.
Django	Used to make virtual environments and databases.
PHP	In charge of receiving the documents and creating the folder that will later be called with JavaScript.
HTML and CSS	They are used to give structure, format, and declaration of variables to run the script and the documents.
JavaScript	Start the php docs and start the file with the script.
GitHub	Web server where the page is located.

interaction of selected antidiabetic compounds isolated from various medicinal plants through *in silico* detection [4].

The rigid coupling of proteins and ligands is based on Emil Fischer's classic lock and key model. This approach assumes that the ligand and the protein are rigid during their interaction [6]. While this is not the most accurate way to describe these events [1], it makes for computationally inexpensive methods and a starting point for more detailed studies on the subject.

In this case, the preprocessing generally includes three major steps: the deletion of molecules that may interfere with the docking (e.g., buffer molecules and the ligand itself), the addition of charges (since the ligand and the receptor may behave differently at a given pH), and the adjustment of a box which delimits the space for the proposal of several possible ligand locations.

When it comes to docking protein ligand pairs, the process of manual work, which involves working directly with files and issuing commands one by one, can be tedious and error prone. A first approach is to automate these tasks with a shell script or Python and creating a web interface.

2 Methods

When testing the software, all protein and ligand structures were downloaded from RCSB PDB and PubChem, respectively. P2Rank is a tool that predicts pockets in a protein using a machine learning approach. This helps to quickly find places where it

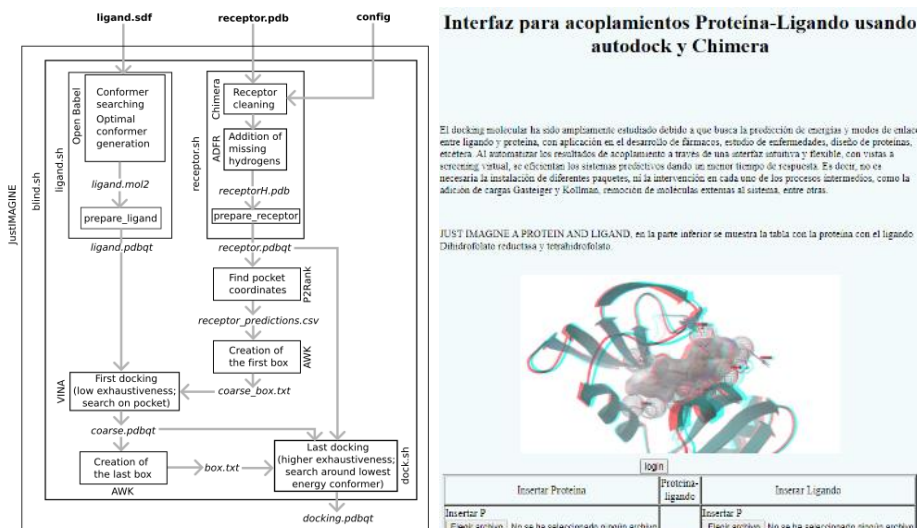


Fig.11. Flowchart of the docking software on the left. On the top right is the main web page and at the bottom is the docking processing.

is more likely for the ligand to bind the protein and thus it cuts down the time required when using Vina with a higher exhaustivity value.

The molecular docking and its previous processes were put together in a Bash script. Figure 1 illustrates the flow of information through the script. In bold format are the input files (given by the user) and in italics are the files given as the output.

3 Results

For the visualization of the coupling, it was decided to use free hosting (GitHub), the GitHub software is used mainly for the creation of source code of computer programs. The script can be downloaded [11] to be executed by simply running `./blind.sh` from the terminal. Before using it this way, however, the user must install the necessary tools (Open Babel, Chimera, AutodockFR, P2Rank and Awk); it is also advisable to work on a UNIX like environment for this.

Protein ligand coupling presents efficient waiting times of less than 10 min (on a machine with 4 GB of RAM and a quad core processor running at 2.10 GHz). For correct operation as shown in Figure 1 in the upper right corner shows the start of the web page, at the bottom of it there is a blue link with the word coupling. In the lower right image is the page to make a link, in which the ligand and protein files must be inserted, later they are uploaded by pressing the upload button and clicking on “click me” to execute the link.

The files are sent to the server which processes them and returns the result (only `.pdb` and `.sdf` files with terminal are accepted). The output given by Autodock Vina consists of a summary of the newfound conformers, their affinities and distances from the best mode (lowest affinity), measured as RMSD lower bound and RMSD upper bound. A short example is given in Table 2.

Table 12 Output given by Autodock Vina.

Mode	Affinity (Kcal/mol)	Dist from best mode	
		Rmsd l.b.	Rmsd u.b.
1	-7.5	0	0
2	-7.3	1.939	2.436
3	-7.1	3.801	6.552

4 Conclusions

The molecular docking automation was achieved in such a way that the user should hardly do more than provide the files representing the ligand and its receptor. The process is standardized and takes considerably less time to complete, which makes it more efficient and lets the user concentrate on any further parts of their investigation.

References

1. Fan, J., Fu, A., Zhang, L.: Progress in molecular docking. *Quantitative Biology*, vol. 7, no. 2, pp. 83–89 (2019) doi: 10.1007/s40484-019-0172-y
2. Krivák, R., Hoksza, D.: P2Rank: machine learning based tool for rapid and accurate prediction of ligand binding sites from protein structure. *Journal of cheminformatics*, vol. 10, no. 1, pp. 1–12 (2018) doi: 10.1186/s13321-018-0285-8
3. Rascón, M. A.: Obtención de alcoholes quirales mediante catálisis asimétrica por complejos de rodio (III) con ligantes tipo base de Schiff (2014)
4. Singh, P., Singh, V. K., Singh, A. K.: Molecular docking analysis of candidate compounds derived from medicinal plants with type 2 diabetes mellitus targets. *Bioinformation*, vol. 15, no. 3, pp. 179 (2019) doi: 10.6026/97320630015179
5. Pochetti, G., Gavuzzo, E., Campestre, C., Agamennone, M., Tortorella, P., Consalvi, V., Gallina, C., Hiller, O., Tschesche, H., Tucker, P. A., Mazza, F.: Structural insight into the stereoselective inhibition of MMP-8 by enantiomeric sulfonamide phosphonates. *Journal of medicinal chemistry*, vol. 49, no. 3, pp. 923–931 (2006) doi: 10.1021/jm050787+
6. Prieto-Martínez, F. D., Medina-Franco, J. L.: Diseño de fármacos asistido por computadora: cuando la informática, la química y el arte se encuentran. *TIP Revista Especializada en Ciencias Químico-Biológicas*, vol. 21, no. 2, pp. 124–134 (2019)
7. Trott, O., Olson, A. J.: AutoDock Vina: improving the speed and accuracy of docking with a new scoring function, efficient optimization, and multithreading. *Journal of computational chemistry*, vol. 31, no. 2, pp. 455–461 (2010)
8. Vargesson, N.: Thalidomide- induced teratogenesis: History and mechanisms. *Birth Defects Research Part C, Embryo Today: Reviews*, vol. 105, no. 2, pp. 140–156 (2015)
9. Velásquez, M., Drosos, J., Gueto, C., Márquez, J., Vivas-Reyes, R. A.: Autodock-PM6 método para seleccionar una mejor pose en estudios de acoplamiento molecular. *Revista Colombiana de Química*, vol. 42, no. 1, pp. 245–261 (2013)
10. Yoshikawa, N., Hutchison, G. R.: Fast, efficient fragment-based coordinate generation for Open Babel. *Journal of cheminformatics*, vol. 11, no. 1, pp. 1–9 (2019)
11. <https://athas1.github.io/A/Docking/Prime.html>

Kinematics Learning in Engineering Students through Low-Cost Prototypes and 3d Printing

Fidel Córdoba-Valdés, Carlos Daniel Ramírez-Hernández,
Daniel Sánchez-Guzmán, Juan Carlos Martínez-Espinoza

Instituto Politécnico Nacional,
UPIIG. Silao de la Victoria Guanajuato,
Mexico

dsanchez@ipn.mx

Abstract. Derived from the reincorporation to activities in person after the confinement situation caused by the SARS-COV-2 virus (COVID-19), an important challenge is to resume learning physical concepts for the training of engineers at the national as international. However, considerable progress has been made in learning through online platforms, and using various software based tools, for example, simulations, virtual reality, augmented reality, virtual laboratories and remote laboratories. The return to a face to face scheme implies new challenges that partially implement technological tools, both in virtual and face to face models, establishing effective hybrid learning. Together, 3D printing has led to an increase in its use and application for the learning process at different educational levels, the foregoing derived from its low cost and easy acquisition. The present work is the proposal for the design of a prototype based on 3D printing to be adapted in Physics laboratory material, which tends to be obsolete over time, and with the aim of promoting engineering students to learn concepts of physics. Kinematics and Dynamics. It consists of a set of sensors and actuators so that students can carry out experiments physically, but with the support of the prototype to carry out measurements in a semiautomatic way. Currently, there is a prototype proposal and an application proposal in a real scenario in a physics laboratory with new students entering an engineering academic program.

Keywords: Kinematics learning, engineering students, 3D printed low cost prototypes.

1 Introduction

The pandemic caused by the SARS-CoV-2 virus (COVID-19) meant a radical change in society in general, because of confinement in most countries worldwide. A social activity, such as education, underwent a revolutionary change, which caused a resonance effect, starting from a total uncertainty in the way that the educational process would be resumed at the beginning of the confinement until the adaptation of the online educational process of most of the academic community, students, teachers, and administrators.

Although students are considered as digital natives for handling electronic devices, such as smartphones, tablets, laptops, etc., this does not mean that they will naturally adapt to the change in the educational model, the foregoing derived from the fact that students learning processes that led prior to confinement were face to face and with direct expository approaches.

During the process of adaptation to a virtual model by students and teachers, all kinds of digital and technological tools were experienced that led to their adoption or rejection to be implemented within the different educational processes. Thus, digital, and technological tools, such as virtual reality, augmented reality, reproducible or interactive simulations, online exams, virtual reality glasses, remote controls for remote laboratories, 3D printing of Physical and Chemical models, etc.

They were incorporated to be applied and demonstrate concepts that were necessary for continuity in learning at different educational levels. UNESCO [1], through the Commission for the Future of Education, presented a report presenting nine ideas for the adaptation of educational processes in a post-COVID-19 era. These ideas in general are:

1. **Commitment to strengthen education as a common good.** Consider the educational process as a development process for society, collectively and individually.
2. **Extend the concept and definition of the Right to Education.** Not only in the field of access as a service but with the right to have the digital resources to be able to be connected.
3. **Value the profession and teaching collaboration.** It is worth noting the extraordinary adaptation that occurred in the teaching communities, both individually and collectively.
4. **Promote the exercise of their rights in youth, students, and children.** A fundamental part of intergenerational relations and democratic principles.
5. **Protect social spaces inside schools.** Not only return to the concept of physical space but also the different school settings that can be developed.
6. **Generate educational technological resources, free and open for teachers and students.** Education is no longer just the face to face and expository process, but sharing knowledge and technology developed to promote meaningful and high impact learning using technological resources.
7. **Ensure scientific literature within the curricula.** With the confinement situation, the prevailing need arose for scientific and well-founded explanations to help society understand what was happening, hence the need to include more scientific content in basic to professional training programs.
8. **Protection of local and international economic resources to ensure the operation of education.** During the pandemic it became evident that the lack of financing for education led to a delay in educational systems, in some cases it is considered a setback in decades, which affected all educational systems. These resources are required to be secured by local governments and international associations to continue the development of society in general.

9. **Advance global solidarity to end current levels of inequality.** COVID-19, evidenced the inequalities and inequities that exist within society, it is the responsibility of governments and non-governmental organizations to support development to achieve greater equity and less inequality for people who suffer from these vulnerabilities.

Starting from these proposed ideas, this research work is framed in ideas 1, 5, 6 and 7. Since through the physical spaces the learning process will be ensured in person; With the development and use of technology at low cost, such as the use of 3D printed prototypes, almost universal technological tools can be promoted and the learning of Physical concepts in students of different levels, allows the vision of what happens around students is something that requires an analysis and reflection regarding the world that surrounds them.

Electronic systems for several decades have been a fundamental part in simplifying tasks that mainly involve a longer execution time. Recently, the incorporation of compact embedded systems and 3D printing designs have led the way in the implementation of low-cost prototypes with aesthetic and functional designs for different applications in various areas of knowledge [2-4].

A particular situation for this research work was that the basic science laboratories, specifically Physics, did not have an update on the Education 4.0 approach or under the requirements of the STEM model (Science, Technology, Engineering and Mathematics), for its acronym in English), promoting technological obsolescence, to mitigate this situation, the design of a prototype was carried out that can be adjusted to the material available and that allows the manipulation and operation of low-cost laboratory devices and with a STEAM or Education 4.0 approach.

Taking into account the scenario presented in this research work, it was possible to identify that there are similar scenarios and similar contexts that allow the proposed action to be implemented in similar scenarios.

1.1 Research Objectives

General Objective

Design, develop and implement a low-cost and 3D-printed prototype to measure time on a laboratory rail, to propose a didactic sequence with an Education 4.0 approach, which efficiently promotes the learning of concepts in Kinematics and Dynamics. in laboratory practices for engineering and science students.

Specific Objectives

1. Design the prototype that will be printed in 3D, both the electronics, the mechanical systems, and the adjustment to a laboratory rail in Physics.
2. Develop and implement the prototype in the testing phase to validate that the adjustment to the rail and the sensors are making the corresponding measurements and calibrations.
3. Propose a didactic sequence that involves the use of the prototype developed to encourage students, newly admitted to an engineering program, to learn concepts in Kinematics and Dynamics.

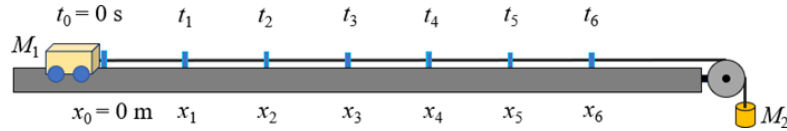


Fig. 1. The experimental set up is shown. The car started at 1 mm just before the optical sensor, located at $x_0 = 0$ m detected it, then a signal was sent to a display. A second sensor was located at different distances. The separations between x_i and x_{i+1} is 10 cm for i from 0 to 5.

2 Methods and Techniques

2.1 Design and 3D Printing of the Molds and Electronic Measuring System

The design of each piece of the proposed system was created using Solid works vx.0 software and transformed into a coordinate system for 3D printing (STL, Stereolithography). For 3D printing, a 1.75 mm PLA filament supplied to a Flashforge finder printer was used under an operating temperature of 210 °C. For the electronic detection system, two reflective optical sensor modules were used, compatible with the embedded Arduino nano system based on the ATmega328P microcontroller. The readings were shown through a 16x2 LCD display.

2.2 Prototype Testing

In Fig. 1. the experimental setup is shown. A $M_1 = 50$ g car was accelerated from rest by a hanging mass of $M_2 = 20$ g, both were connected by a thread of negligible mass. The starting point corresponds to $x_0 = 0$ m where a fixed optical sensor was located.

The car started its movement approximately 1 mm just before the sensor detected it, hence we expected a zero-initial velocity. When the car passed in front of the second optical sensor, located at $x_1 = 10$ cm, the time was read from the display. To analyze the variation among several measurements we repeated the experiment 100 times, obtaining the data set shown in table 1 and its corresponding histogram in fig. 2.

Considering ideal conditions, a movement with constant accelerations is expected. To find out a relationship between position and time, we placed the second optical sensor at positions ranging from x_2 to x_6 which are separated by 10 cm between two successive points. For these positions only 30 measurements were carried out as well as the mean time for every position and its standard deviation were calculated. Fig. 3 shows the car's position as function of time where error bars are defined by the standard deviation of the measurements.

A polynomial function of order 2 was fitted to the data as shown in Fig. 3. As we can see, there is a good agreement between experimental results and theoretical approach given by the kinematic equation for constant acceleration [5]:

$$x = \frac{1}{2}at^2 + v_0t + x_0. \quad (1)$$

able 1. The frequency for 100 measurements. The mean value is 0.293 s with standard deviation of 0.013 s. display is required.

<i>t</i> (s)	Frequency
0.27	5
0.28	24
0.29	35
0.30	20
0.31	6
0.32	10

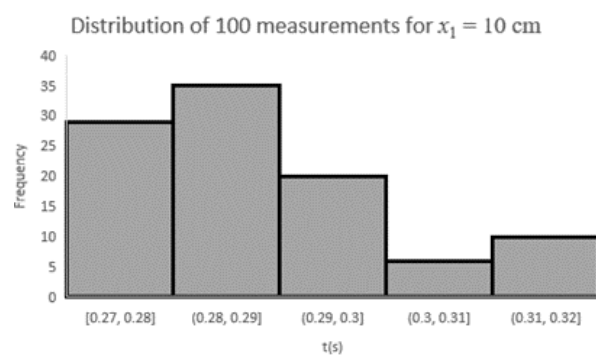


Fig. 2. The distribution of the measurements. A normal distribution is expected, however a better precision in the where $g = 9.81 \text{ m/s}^2$ is the magnitude of the acceleration due to the gravity. If we plug into equation (2) the values of the masses, we get that the acceleration should be $a = 2.80 \text{ m/s}^2$.

Which compared to the numerical fit we conclude that in our experiment there was an average initial position $x_0 = 3.2 \text{ mm}$, an initial velocity $v_0 = 0.0224 \text{ m/s}$ and a constant acceleration $a = 2.18 \text{ m/s}^2$. These values for the initial position and the initial velocity come from the fact that the car was located at a small distance before the first optical sensor. On the other hand, considering ideal conditions like neglecting the effects of friction and the weight of the pulley, the accelerations can be calculated by applying the second Newton law, which lead us to:

$$a = \frac{M_2}{M_1 + M_2} g, \tag{2}$$

where $g = 9.81 \text{ m/s}^2$ is the magnitude of the acceleration due to the gravity. If we plug into equation (2) the values of the masses, we get that the acceleration should be $a = 2.80 \text{ m/s}^2$. This means that in our experiment we underestimated the acceleration roughly 22% below the ideal situation.

More measurements, varying the masses and distances, would let us conclude whether this difference comes uniquely due to factors like friction, discarding the possibility of malfunction of the prototype.

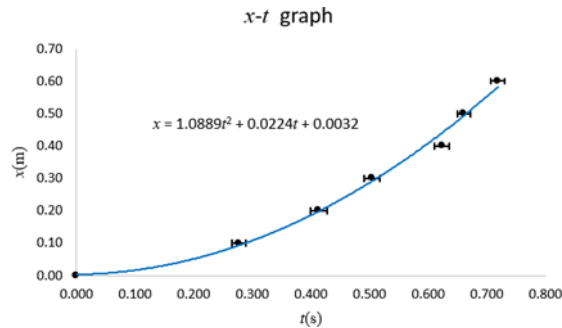


Fig. 3. x-t graph. Dots represent the experimental data. The size of error bars corresponds to the standard deviation for every set of measurements. Solid line represents a polynomial fit of order 2, also the equation obtained from the numerical fit is shown.

2.3 Didactic Sequence Design Proposal for Learning Kinematics and Dynamics

Starting from the developed and manufactured prototype, it can be taken as an element within the learning process for carrying out laboratory practices in Physics subjects, the didactic sequence proposed for the use of the developed prototype would be:

1. Application of pre-test [6, 7] or evaluation instrument that identifies the previous ideas of the students in relation to the concepts of Kinematics, Dynamics, generation, and interpretation of graphs that relate different variables within a physical system.
2. Assembly of the prototype developed based on a laboratory practice reconditioned with the use of the proposed system.
3. Feedback from the teacher regarding the values that must be measured and give continuity to the laboratory practice.
4. Development of the practice by the students with the accompaniment by the teacher or teachers who participate in the learning activity.
5. Application of the post-test or data collection instrument to quantitatively measure the understanding of the concepts addressed within the practice.
6. Application of the corresponding statistics to evaluate the Normalized Conceptual Gain and the Concentration Factor.

3 Conclusions

Derived from the new approaches that must be considered, based on the training of students at the engineering level, from the perspective of Education 4.0 and the STEM model, it can be concluded that this type of development contributes to the training and learning processes in incoming students at the level of an engineering program. The proposal is in accordance with the ideas formulated by UNESCO for the adaptation of educational systems and models in a post-pandemic scenario.

References

1. UNESCO. Education in a Post-COVID World: nine ideas for public action. UNESCO (2019)
2. Axtmann, C., Boxriker, M., Braun, M.: A custom, high-performance real time measurement and control system for arbitrary power electronic systems in academic research and education. In: 2016 18th European Conference on Power Electronics and Applications, EPE'16 ECCE Europe, pp. 1–7 (2016)
3. Takács, G., Gulán, M., Bavlina, J., Köplinger, R., Kováč, M., Mikuláš, E., Saláni, R.: HeatShield: a low-cost didactic device for control education simulating 3D printer heater blocks. In: 2019 IEEE Global Engineering Education Conference (EDUCON), pp. 374–383 (2019) doi: 10.1109/EDUCON.2019.8725201
4. Rúa-Ramírez, E. B., Jimenez-Díaz, F., Gutierrez-Arias, G. A., Villamizar, N. I.: 3D Printing as a didactic tool for teaching some engineering and design concepts. Producción Editorial Universidad Distrital Francisco José de Caldas (2018) doi: 10.14483/23448393.12248
5. Halliday, D., Resnick, R., Walker, J.: Fundamental of physics. 10th Edition, Wiley and Sons, New York (1988)
6. Zavala, G., Tejada, S., Barniol, P., Beichner, R. J.: Modifying the test of understanding graphs in kinematics. Physical Review Physics Education Research, vol. 13, no. 2, pp. 020111 (2017) doi: 10.1103/PhysRevPhysEducRes.13.020111
7. Thornton, R., Sokoloff, D.: Am. J. Phys., vol. 66, no. 4, pp. 338 (1998)

Evaluación de medios de cultivo para producción de *Arthrospira Platensis*

Alan Eduardo Navarrete-Domínguez, Lisset Soledad Tafoya-López,
Juan Carlos Rodríguez-Sierra

Instituto Politécnico Nacional,
UPIIG,
México

jurodriguez@ipn.mx

Resumen. Se ha definido a *Arthrospira platensis* como una cianobacteria filamentosa que forma tricomas cilíndricos multicelulares y forma de espiral. Se han realizado muchos estudios que se centran en el potencial que posee esta cianobacteria en diferentes campos. En este estudio se realizaron experimentos para la comparación de diferentes medios de cultivo a nivel laboratorio en tres niveles de iluminación: 24.06, 16.04 y 8.02 $\mu\text{mol/s}\cdot\text{m}^2$. El muestreo se realizó cada 24 horas, la cual fue visualizada en cámara de Neubauer, además se observó la profundidad con disco Secchi para establecer la concentración. Los datos se analizaron para obtener parámetros cinéticos. Se observó que el medio de cultivo M.E.M tuvo la mejor adaptación de *A. platensis* con valores de hasta 1.2g/L.

Palabras clave: Cianobacteria, medio de cultivo, Spirulina, *Arthrospira*.

Evaluation of Culture Media for Production from *Arthrospira Platensis*

Abstract. *Arthrospira platensis* has been defined as a filamentous cyanobacterium that forms multicellular cylindrical trichomes and a spiral shape. Many studies have been carried out that focus on the potential that this cyanobacterium has in different fields. In this study, experiments were carried out to compare different culture media at the laboratory level at three lighting levels: 24.06, 16.04 and 8.02 $\mu\text{mol/s}\cdot\text{m}^2$. Sampling was carried out every 24 hours, which was visualized in a Neubauer chamber, and the depth was also observed with a Secchi disk to establish the concentration. The data were analyzed to obtain kinetic parameters. It was observed that the M.E.M culture medium had the best adaptation of *A. platensis* with values of up to 1.2g/L.

Keywords: Cyanobacteria, culture medium, spirulina, *Arthrospira*.

1. Introducción

1.1. Cianobacterias

Las cianobacterias, también llamadas cianofitas o algas verdeazuladas, son una de las formas de vida más antiguas que existen en el planeta. Son microorganismos autótrofos, utilizan la energía de la luz solar y CO_2 de la atmósfera, para sintetizar compuestos

orgánicos. El término “*Spirulina*” o “*Espirulina*” ha sido ampliamente utilizado para referirse indistintamente a dos géneros, *Arthrospira* y *Spirulina*, así como a dos especies: *A. platensis* y *A. máxima*. Estas últimas son las que tienen mayor importancia económica, ya que son cultivadas para elaborar una gran cantidad de productos a las que se les atribuye propiedades alimenticias y de salud [1].

Algunos usos y aplicaciones de *A. platensis* son: tratamiento de aguas residuales, biomitigación de CO₂, cosmética y nutracéutica, etc. El objetivo de la investigación es la comparativa de medios de cultivo para determinar el medio más viable para producir *A. platensis*. El ciclo de vida de *A. platensis* se resume en: a) Fragmentación de los tricomas, b) ampliación de los hormogonios celulares, c) proceso de maduración y d) elongación de tricomas. Los tricomas maduros se dividen en filamentos de pequeño tamaño a través de la formación previa de células especializadas, llamados necridios [2].

1.2. Medios de cultivo para crecimiento

El medio de cultivo provee de nutrientes necesarios para el desarrollo de la cianobacteria. El primer medio sintético formulado es conocido como medio Zarrouk, siendo el más común para investigaciones a nivel laboratorio [3]. El medio UTEX, procede a ser un medio comúnmente usado [4]. Medio *Spirulina* Modificado (M.E.M) este medio fué ligeramente modificado de *Spirulina platensis* Medium de Ogawa & Terui (1970).

La *Arthrospira* puede vivir en una amplia gama de composiciones de agua, el medio de cultivo Urea, es de los medios más usados para el cultivo de *A. platensis* a gran escala [5]. Se puede observar en la tabla 1 la comparación de los medios de cultivo. La producción del medio de cultivo tiene que ser realizada con agua destilada y previamente esterilizado antes de realizar el inoculo.

2. Metodología y experimentación

Se realizó inoculo al 30% (v/v) de *A. platensis* en fase de crecimiento exponencial en cuatro medios de cultivo: Zarrouk, UTEX, M.E.M y Urea (ver tabla 1). La cepa utilizada fue la CIB 83 de la colección de microalgas del centro de investigaciones biológicas del noroeste, S.C. El volumen de cada medio de cultivo inoculado se dividió en 6 frascos de vidrio de boca ancha cubiertos tela filtrante con tamaño de poro de 80 micrómetros para permitir el intercambio gaseoso, cada frasco tiene una capacidad de 413 mL y fue utilizado un volumen de 216 mL.

Los frascos por duplicado fueron colocados en diferentes intensidades lumínicas: 24.06 $\mu\text{mol/s}\cdot\text{m}^2$, 16.04 $\mu\text{mol/s}\cdot\text{m}^2$ y 8.02 $\mu\text{mol/s}\cdot\text{m}^2$. Las lámparas led usadas fueron las JLT8-183 de 18W con una densidad de flujo de fotones fotosintéticos (PPFD) de 28 $\mu\text{mol/s}\cdot\text{m}^2$. Los frascos tuvieron una agitación manual tres veces por día, la experimentación se llevó a cabo a 25°C con un fotoperiodo de 12h luz y 12h oscuridad.

Tabla 1. Comparación de componentes en medios de cultivo.

Medios de cultivo utilizados							
Zarrouk		Utex		M.E.M		Urea	
Sustancia	Concentración (g/l)	Sustancia	Concentración (g/l)	Sustancia	Concentración (g/l)	Sustancia	Concentración (g/l)
NaHCO ₃	13.61	NaHCO ₃	13.61	NaHCO ₃	13.61	Carbonato de sodio	5
Na ₂ CO ₃	1.03	Na ₂ CO ₃	4.03	Na ₂ CO ₃	4.03	Cloruro de sodio crudo	5
K ₂ HPO ₄	0.5	K ₂ HPO ₄	0.5	K ₂ HPO ₄	0.5	Nitrato de potasio	2
NaNO ₃	2.5	NaNO ₃	2.5	NaNO ₃	2.5	Bicarbonato de sodio	1
K ₂ SO ₄	1	K ₂ SO ₄	1	K ₂ SO ₄	1	Sulfato de potasio, cristalizado	1
NaCl	0.2	NaCl	1	NaCl	1	Urea	0.02
MgSO ₄ ·7H ₂ O	0.04	MgSO ₄ ·7H ₂ O	0.2	MgSO ₄ ·7H ₂ O	0.2	Sulfato monoamónico cristalizado	0.1
CaCl ₂ ·2H ₂ O	0.01	CaCl ₂ ·2H ₂ O	0.04	CaCl ₂ ·2H ₂ O	0.04	Sulfato de magnesio, cristalizado	0.2
FeSO ₄ ·7H ₂ O	0.05	Na ₂ EDTA·2H ₂ O	0.375	FeSO ₄ ·7H ₂ O	0.01	Oxido de calcio	0.02
H ₃ BO ₃	2.86	FeCl ₃ ·6H ₂ O	0.0485	Na ₂ EDTA·2H ₂ O	0.08	Sulfato de hierro	0.005
MnCl ₂ ·4H ₂ O	1.81	MnCl ₂ ·4H ₂ O	0.0205				

El conteo celular se realizó en cámara de Neubauer, se utilizó los cuadros grandes para la cuantificación y se utilizó la ecuación 1 para el cálculo de densidad celular:

$$Concentraciom = \frac{\text{número de células} \times 10,000}{\text{número de cuadros} \times \text{dilución}} [=] \frac{\text{cel}}{\text{ml}} \quad (1)$$

Para la medición de la concentración se utilizó un disco Secchi. El disco de Secchi tiene escala de profundidad en milímetros y se utilizó la relación concentración (peso seco) vs profundidad de acuerdo con lo reportado por González [6].

3. Resultados y discusión

3.1. Conteo celular en cámara de Neubauer

Se realizó un promedio aritmético de las células en forma de tricomas que se presentaron durante la fase exponencial en los días 5 a 8 para las diferentes muestras y se multiplicaron por el volumen líquido del reactor para determinar la cantidad de organismos presentes en el medio de cultivo.

En la figura 1 se puede observar que el M.E.M a $8.02 \mu\text{mol/s} \cdot \text{m}^2$ fue el que mayor concentración celular obtuvo una cantidad celular máxima de 4.34×10^7 células en forma de tricomas, mientras que la menor concentración celular se obtuvo del medio Zarrouk a 24.06 y $8.02 \mu\text{mol/s} \cdot \text{m}^2$.

Arora [7] realizaron una comparativa del crecimiento de *A. platensis* en el medio Zarrouk y un medio modificado, encontraron que las mejores tasas de crecimiento se mostraron en intensidades de luz entre 35 y $57 \mu\text{mol/s} \cdot \text{m}^2$. sin embargo, no se encuentran estas condiciones en nuestra experimentación, aquí se espera que si se aumenta la intensidad lumínica se deberá de identificar crecimiento en este medio.

Por otro lado, el medio Zarrouk lo utilizaron como un medio estándar de comparación y realizaron sus cultivos en estanque abierto y en reactor cerrado, donde concluyen que el máximo crecimiento obtenido fue en el reactor cerrado con medios modificados [7]. Este comportamiento se puede observar en la figura 2, donde el M.E.M fue el medio de cultivo que obtuvo mayor crecimiento en comparación del Zarrouk.

En la figura 2 también se puede observar que *A. platensis* es capaz de adaptarse a diversos medios de cultivos en un tiempo promedio de cinco días. Se observa, que la mejor adaptación fue para el medio M.E.M con concentraciones finales de $(1.2, 1.2$ y $1)$

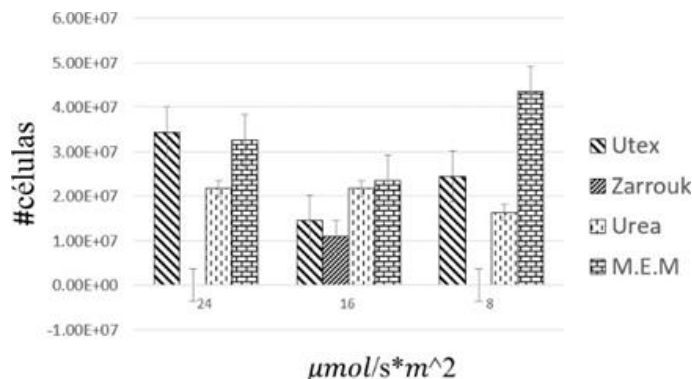


Fig. 1. Conteo celular promedio de *A. platensis*. a diferentes intensidades lumínicas en fase exponencial.

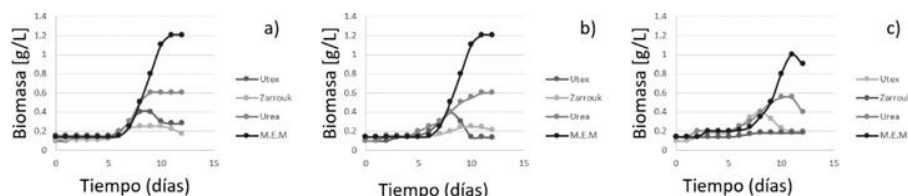


Fig. 2. Crecimiento celular de *A. platensis* a) 24.06 $\mu\text{mol/s}\cdot\text{m}^2$, b) 16.04 $\mu\text{mol/s}\cdot\text{m}^2$ y c) 8.02 $\mu\text{mol/s}\cdot\text{m}^2$.

Tabla 2. Parámetros cinéticos a diferentes intensidades lumínicas y medios de cultivo.

Iluminación $\mu\text{mol/s}\cdot\text{m}^2$	Utex			Zarrouk		
	Velocidad específica de crecimiento (μ) (d^{-1})	Tiempo de duplicación (d)	Productividad ($\text{g/L}\cdot\text{d}$)	Velocidad específica de crecimiento (μ) (d^{-1})	Tiempo de duplicación (d)	Productividad ($\text{g/L}\cdot\text{d}$)
24.06	0.3606	1.9222	0.1543	0.2629	2.6365	0.0720
16.04	0.2132	3.2512	0.0185	0.1307	5.3033	0.0509
8.02	0.1786	3.8810	0.0354	0.0697	9.9447	0.0231
Iluminación $\mu\text{mol/s}\cdot\text{m}^2$	Urea			M.E.M		
	Velocidad específica de crecimiento (μ) (d^{-1})	Tiempo de duplicación (d)	Productividad ($\text{g/L}\cdot\text{d}$)	Velocidad específica de crecimiento (μ) (d^{-1})	Tiempo de duplicación (d)	Productividad ($\text{g/L}\cdot\text{d}$)
24.06	0.3689	1.8790	0.2315	0.4578	1.5141	0.4461
16.04	0.2214	3.1307	0.2104	0.4578	1.5141	0.4461
8.02	0.2393	2.8966	0.1898	0.2942	2.3560	0.3620

g/L de biomasa seca, seguido del medio Urea, Utex y finalmente Zarrouk. Se observó que el medio de cultivo Zarrouk mostró coloración marrón, lo cual puede ser un efecto de atenuación.

Los parámetros cinéticos característicos en el crecimiento de *A. platensis* están dados por la velocidad específica de crecimiento, el tiempo de duplicación y la productividad volumétrica, como se observa en la tabla 2.

El aumento de la producción de la biomasa es proporcional a la intensidad de la luz para *A. platensis* [8]. Sin embargo, no todas las cepas de *Arthrospira* responden de la misma manera, ya que hay más variables de las que depende un óptimo crecimiento de la cepa. Por otro lado, la absorción de la iluminación decrece con el aumento de la

densidad celular durante el cultivo. Un estudio realizado por Álvarez [9] a un intervalo de 8.4 a 30 $\mu\text{mol/s}\cdot\text{m}^2$ se obtuvo un intervalo de biomasa de entre 1.10 a 2.07 g/L, siendo que durante el estudio realizado se encontraron valores de 0.4 a 1.2 g/L.

4. Conclusiones

Es posible cultivar *A. platensis* a bajos niveles de iluminación proveniente de LED's, observando que el medio de cultivo M.E.M tuvo la mejor adaptación de *A. platensis* en intervalos de 24 y 16 $\mu\text{mol/s}\cdot\text{m}^2$. Un siguiente paso para este estudio es el escalado de los medios de con mayor crecimiento para observar el comportamiento de *A. platensis* en condiciones fuera del laboratorio y determinar la viabilidad del medio de cultivo.

Referencias

1. López-Cortes, A., Maya-Delgado, L. Y., Troyo-Dieguez, E., Landa-Hernández, L.: Cianobacterias criptobiotivas: una alternativa de agricultura orgánica, México (2001)
2. Sanchez, M., Bernal-Castillo, J., Rozo, C., Rodríguez, I.: Spirulina (Arthrospira): an edible microorganism: a review. *Universitas Scientiarum*, vol. 8, no. 1, pp. 7–24 (2003)
3. Rodríguez, A., Triana, F.: Evaluación del pH en el cultivo de Spirulina spp (Arthrospira) bajo condiciones de laboratorio. Trabajo de grado para optar a micro biólogo industrial, Pontificia Universidad Javeriana Facultad de ciencias, p. 37 (2006)
4. Utex Spirulina médium. www.utex.org (2006)
5. Jourdan, J.: Grow your own Spirulina. Geneva, Switzerland, pp. 4–6 (2001)
6. Soni, R. A., Sudhakar, K., Rana, R. S.: Comparative study on the growth performance of Spirulina platensis on modifying culture media. *Energy Reports*, vol. 5, pp. 327–336 (2019) doi: 10.1016/j.egy.2019.02.009
7. Ravelonandro, P. H., Ratianarivo, D. H., Joannis- Cassan, C., Isambert, A., Raherimandimby, M.: Influence of light quality and intensity in the cultivation of Spirulina platensis from Toliara (Madagascar) in a closed system. *Journal of Chemical Technology & Biotechnology: International Research in Process, Environmental & Clean Technology*, vol. 83, no. 6, pp. 842–848 (2008) doi: 10.1002/jctb.1878
8. Álvarez, P.: Influencia de la luz sobre la producción y la composición de la biomasa microalgal de Spirulina platensis LMPA55. Escuela de Posgrado-Facultad Regional Buenos Aires (2018)

Síntesis de catalizadores de oro-carbón con jugo de granada, y su evaluación en celda de combustible microfluídica de glucosa

Uriel Mariscal-Pedraza¹, Juan Carlos Martínez-Espinosa¹,
Andrés Dector-Espinoza², Juan Manuel Olivares-Ramírez²,
Raúl Carrera-Cerritos¹

¹ Instituto Politécnico Nacional,
México

² Universidad Tecnológica de San Juan del Río (UTSJR),
División de Química Industrial y Energías Renovables,
México

umariscalpl400@alumno.ipn.mx

Resumen. En el presente estudio se reporta la síntesis verde (con jugo de granada) de catalizadores a base de nanopartículas de oro (Au) y carbón vulcan (XC72R). Los catalizadores sometieron a un tratamiento térmico con la finalidad de estudiar su efecto en las propiedades estructurales y catalíticas del material. La caracterización se realizó por TEM y DRX, y se evaluó el desempeño como ánodo en una celda de combustible microfluídica alimentada con glucosa y sangre humana fresca. Tal desempeño se determinó a través de la densidad de corriente máxima, el voltaje a circuito abierto y la densidad de potencia máxima, calculadas de una curva de polarización.

Palabras clave: Catalizador de oro, síntesis verde, granada, celda microfluídica.

Synthesis of Gold-Carbon Catalysts with Pomegranate Juice, and Its Evaluation in a Glucose Microfluidic Fuel Cell

Abstract. In the present study, the green synthesis (with pomegranate juice) of catalysts based on gold nanoparticles (Au) and vulcan carbon (XC72R) is reported. The catalysts underwent a thermal treatment in order to study its effect on the structural and catalytic properties of the material. The characterization was carried out by TEM and XRD, and the performance as an anode in a microfluidic fuel cell fed with glucose and fresh human blood was evaluated. Such performance was determined through the maximum current density, open circuit voltage and maximum power density, calculated from a polarization curve.

Keywords: Gold catalyst, green synthesis, grenade, microfluidic cell.

1. Introducción

Las crecientes aplicaciones y desarrollo de los catalizadores de oro en áreas de la electrocatálisis, catálisis y biomédica, ha impulsado a explorar síntesis más amigables con el medio ambiente y con sus métodos de purificación, ya que los contaminantes remanentes no solo generan una preocupación por el medio ambiente sino también limitan sus aplicaciones biológicas y catalíticas. Las síntesis verdes emplean extractos de frutas, plantas, microorganismos y/o virus para reducir el oro del HAuCl_4 y convertirlo en nanopartículas, en un solo paso, a comparación de las síntesis químicas que emplean agentes para reducir, estabilizar el tamaño de las partículas y aditivos para el control de forma [1].

Las celdas de combustible microfluídicas son dispositivos electroquímicos capaces de convertir la energía química del combustible alimentado, donde emplean electrodos (cátodo y ánodo) a base de catalizadores, típicamente nanopartículas soportadas en un material conductor como el carbón vulcan (XC72R) [2]. La glucosa es un combustible muy atractivo para estos microdispositivos, por tener un amplio contenido energético, abundancia, fácil producción y extracción, pero, sobre todo, se encuentra presente en algunos de los fluidos del cuerpo, haciendo posible su aplicación en aparatos biomédicos implantables o no (marcapasos, sensores médicos, glucómetros, baterías, biochips) que necesiten de una fuente de energía estable y continua.

Esta tecnología requiere de ánodos altamente activos para electro oxidar la glucosa, por lo que se han explorado materiales a base de oro-carbón por metodologías químicas [3]. Particularmente, se ha reportado que los compuestos fitoquímicos de la planta de granada poseen la capacidad de producir nanopartículas de oro con geometrías anisotrópicas, que son particularmente interesantes porque exponen planos cristalográficos de alta energía que son importantes en reacciones químicas sensibles a la estructura, tal y como la electro oxidación de glucosa [4, 5].

Por esta razón, en el presente estudio se retoman las síntesis reportadas de nanopartículas de oro con glucosa, y se amplía, para producir catalizadores de oro y carbón vulcan (Au/XC72R). Adicionalmente, en el presente trabajo se muestra el efecto de un tratamiento térmico post síntesis, en el desempeño como ánodo en una celda de combustible microfluídica para llevar a cabo la electro oxidación de glucosa.

2. Metodología

Síntesis de los catalizadores. El equivalente al 90% en peso de carbón (Grado reactivo, Fuel Cell Store) y el 10% de Au (solución de AuHCl_4 , Sigma Aldrich, grado reactivo) se dispersaron en un matraz con agua desionizada aforado a un volumen total de 50 ml, una vez alcanzada la temperatura de 60°C se adicionaron 600 ppm de jugo de granada previamente filtrada. Al finalizar el tiempo de síntesis de 6 horas se filtraron las muestras a vacío con papel No. 9 (Whatman).

El catalizador obtenido se dividió en dos lotes para cada una de las síntesis, con el objetivo de estudiar el efecto de la temperatura de calcinado. Para este análisis ambos lotes se dejaron secar a 70°C . Posteriormente, uno de los lotes secos se calcinó en una mufla eléctrica (FELISA AR-340) a 200°C por 2 horas.

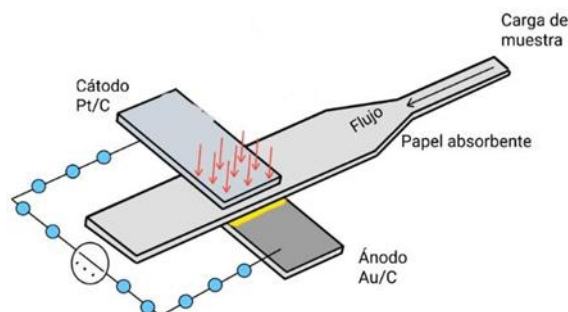


Fig. 1. Diseño estructural de la micro celda utilizada para la experimentación, mostrando cada una de las partes de la celda.

Caracterización. Un miligramo de catalizador se dispersó con 1 ml de alcohol isopropílico en un tubo Eppendorf, se mezcló en ultrasonido por 5 minutos y se extrajo un 1 μ L de mezcla para colocarlo en una rejilla de cobre (Ted Pella). La rejilla se dejó secar y se observó en un Microscopio Electrónico de Transmisión (TEM) (JEOL JEM-1010, Tokyo, Japón) operado a 80 kV, caracterizando y midiendo el tamaño de partículas por medio del programa Digital Micrograph.

La medición XRD se registró en un difractómetro de Rigaku usando una fuente X de $\text{CuK}\alpha$, operada con un tamaño de paso $2\theta = 0.01^\circ$ y un tiempo de paso de 1 s. El equipo de difracción de rayos X que se obtuvo se encuentra en el Centro de Nanociencias y Micro y Nanotecnologías del Instituto Politécnico Nacional (CNMN).

Evaluación en celda de combustible. Para la construcción de la celda microfluídica se emplearon dos electrodos, el platino (Pt) como cátodo y el Au/XC72R como ánodo, preparando las tintas de acuerdo con la metodología [3], donde por cada miligramo de muestra se adicionan 73 μ L de alcohol isopropílico y 7 μ L de nafión, y sonicando por 10 min cada tinta. Depositando las tintas en papel Toray® (Technoquip Co. Inc. TGPH-120) en un área de 0.5x 0.5 cm por medio de un aerógrafo.

Para colocar la muestra se construyó una tira de papel absorbente (GE Healthcare Life Sciences, Whatman No.5) con dimensiones de 1.0 \times 0.5 cm. Al montar la celda se colocó el ánodo en la parte inferior, el papel absorbente en medio y el cátodo en la parte superior, conectando cada uno de los electrodos con los cables del Potenciostato (Zahner Zennium), ver Figura 1. Se midió el OCP (Open Circuit Potencial), la curva de densidad de polarización registradas a 20 mV/s con las muestras de glucosa (5mM, 10mM) en KOH (0.3M) y sangre humana fresca.

3. Resultados y discusión

En la Fig. 2 se muestran los catalizadores sin y con tratamiento térmico (izquierda y derecha, respectivamente). Se observaron nanopartículas de forma esférica y una distribución de tamaño de 80 a 260 nm (promedio de 160 nm) en los catalizadores sin tratamiento térmico, mientras que en el catalizador calcinado se obtuvieron nanopartículas de forma esférica con un promedio de 175 nm.

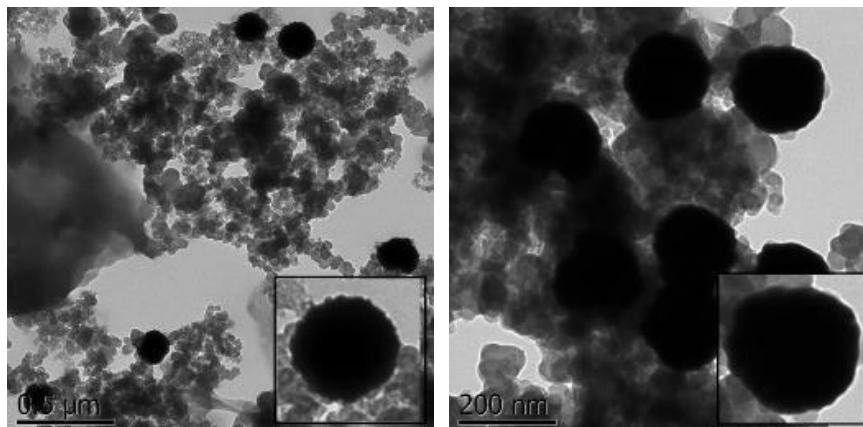


Fig. 2. Micrografía del catalizador Au/XC72R sin tratamiento (Izquierda) y con tratamiento térmico (Derecha). Donde las figuras de color negro son respectivas a las AuNPs de oro y las áreas de grises son el carbón vulcan.

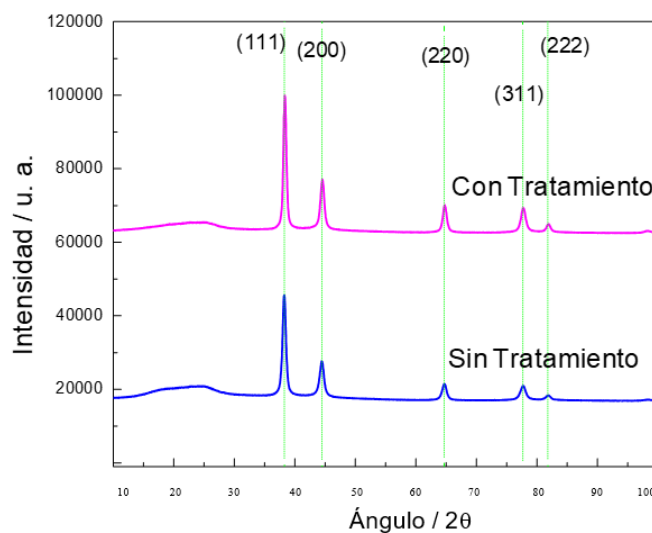


Fig. 3. Patrones de difracción de rayos X del catalizador Au/XC72R sin tratamiento y con tratamiento térmico.

Los componentes fitoquímicos presentes en el jugo de la granada al ser sometidos a estas condiciones de síntesis generaron picos en la superficie de las nanopartículas que le dan una apariencia similar aun virus o erizo de mar. Estos picos superficiales se desvanecieron después de aplicar el tratamiento térmico al catalizador.

En la Fig. 3 se muestran los patrones de difracción de ambos catalizadores. Se identificaron refracciones ubicadas en ángulos correspondientes a los planos (111), (200), (220), (311) y (222), de la estructura CCC (cúbica centrada en las caras) del oro

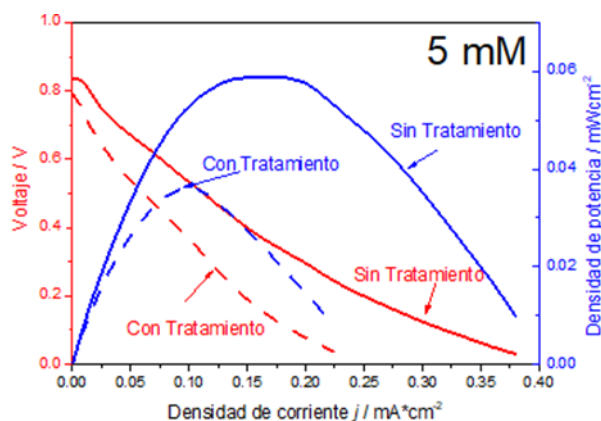


Fig. 4. Curvas de descarga de celda de combustible microfluídica con electrodos de Au/XC72R sintetizado con extracto de granada y alimentada con glucosa 5 mM (no se muestran curvas para 10 mM y sangre por cuestiones de espacio).

(JCPDS 04-0784). Es interesante hacer notar que no se observó alguna estructura cristalina en el catalizador, distinta al oro puro CCC. Esto indica que la metodología verde con jugo de granada genera catalizadores altamente puros, desde el punto de vista de la cristalografía.

El tamaño promedio de los cristales calculado con la ecuación de Debye Scherrer fue de 90.5 y 107.6 nm, para los catalizadores sin y con tratamiento térmico, respectivamente. Estos valores fueron inferiores a los tamaños obtenidos por TEM (160 y 175 nm, respectivamente), lo que indica que las nanopartículas sobre el carbón vulcan tienen una naturaleza policristalina. El tamaño de cristal mayor en el catalizador calcinado confirma la modificación de tamaño y forma que se observó por TEM.

Al comparar los resultados obtenidos en celda de combustible para los catalizadores se observó que el catalizador calcinado mostró un valor menor de OCP para muestras de glucosa a bajas concentraciones; mientras que el OCP fue superior para el catalizador calcinado cuando la alimentación se cambió a sangre humana. La densidad de corriente máxima y la densidad de potencia máxima de los catalizadores fueron mayores para los catalizadores sin tratamiento térmico, independientemente del combustible y la concentración alimentados a la celda.

Este resultado muestra que los catalizadores sin tratamiento térmico poseen mayor actividad electro que los catalizadores con tratamiento térmico. El mejor desempeño en celda de los catalizadores sintetizados con jugo de granada se observó a 10 mM de glucosa, con un OCV de 0.96 V, una densidad de corriente máxima de 0.466 mA/cm² y una densidad de potencia máxima de 0.25 mW/cm².

4. Conclusión

Los compuestos fitoquímicos de la granada han demostrado tener la capacidad de generar AuNPs con tamaño y forma uniformes. Al evaluar las AuNPs como ánodo en las celdas microfluídicas mostraron entrar en rango de los desempeños de celda ya

reportados en la literatura con catalizadores sintetizados por métodos químicos o comerciales; lo cual muestra que esta metodología verde con jugo de granada es igualmente efectiva, y que incluso podría eventualmente ser mejorada, por ejemplo, funcionalizando el carbón para aumentar la interacción con las nanopartículas de oro.

Agradecimientos: Los Autores agradecen a Lourdes Palma Tirado y al CNMN por su contribución con la caracterización de los materiales por TEM y XRD, respectivamente. RCC Agradece a la SIP-IPN por el apoyo con el proyecto SIP20211828 y 20221805.

Referencias

1. Rao, A.: Facile synthesis of size tunable gold nanoparticles by pomegranate (*Punica granatum*) leaf extract: Applications in arsenate sensing. *Materials Research Bulletin*, vol. 48, pp. 1166–1173 (2013) doi: 10.1016/j.materresbull.2012.12.025
2. Espinoza, A. D.: Diseño, construcción y evaluación de celdas de combustible microfluídicas para oxidación de glucosa. Doctoral, Centro de investigación y desarrollo tecnológico en electroquímica (2016)
3. Dillon, R., Srinivasan, S., Aricò, A. S., Antonucci, V.: International activities in DMFC R&D: status of technologies and potential applications. *Journal of Power Sources*, vol. 127, pp. 112–126 (2004) doi: 10.1016/j.jpowsour.2003.09.032
4. Ahmed, S., Anu, Ikram, S., Yudha, S. S.: Biosynthesis of gold nanoparticles: A green approach. *Journal of Photochemistry & Photobiology B: Biology*, vol. 161, pp. 141–153 (2016) doi: 10.1016/j.jphotobiol.2016.04.034
5. Morales-Acosta, D., Rodríguez-G., H., Godínez, L. A., Arriaga, L. G.: Performance increase of microfluidic formic acid fuel cell using Pd/MWCNTs as catalyst. *Journal of Power Sources*, vol. 195, no. 7, pp. 1862–1865 (2010) doi: 10.1016/j.jpowsour.2009.10.007

Clasificación automática de opiniones de películas usando aprendizaje automático

Jesús Andres Sierra-Rangel, Rafael Guzmán-Cabrera

Universidad de Guanajuato,
Departamento de estudios multidisciplinarios,
México

{ja.sierrarangel, guzmanc}@ugto.mx

Abstract. El emitir opiniones sobre productos o servicios en foros y redes sociales se ha convertido en una tarea cotidiana. Cuando el número de opiniones es muy grande se requiere contar con herramientas automáticas que realicen esta tarea eficientemente. En este trabajo se presentan resultados obtenidos al llevar a cabo la clasificación automática de opiniones en distintos escenarios de clasificación y con diferentes conjuntos del corpus “Large movie review dataset”. La idea principal de la configuración experimental propuesta fue mostrar la cantidad de opiniones que se requiere como mínimo para que el sistema de aprendizaje automático pueda aprender las características que distinguen una clase de otra. Los resultados obtenidos nos muestran que dependiendo del método de aprendizaje existe un sobre aprendizaje para métodos como SVM, KNN y Random Forest, mientras que para métodos como Naïve Bayes los mejores resultados son los que deben utilizar un 70-80 de los atributos y solo en Logistic regression debe usarse en crudo para tener los mejores resultados.

Keywords: Gran conjunto de datos de reseñas de películas, SVM, Naïve Bayes, bosque aleatorio, KNN, regresión logística.

Automatic Movie Review Classification Using Machine Learning

Abstract. Expressing opinions about products or services in forums and social networks has become an everyday task. When the number of opinions is very large, it is necessary to have automatic tools that perform this task efficiently. This work presents results obtained by carrying out the automatic classification of opinions in different classification scenarios and with different sets of the “Large movie review dataset” corpus. The main idea of the proposed experimental setup was to show the minimum number of opinions that is required so that the machine learning system can learn the characteristics that distinguish one class from another. The results obtained show us that depending on the learning method there is overlearning for methods such as SVM, KNN and Random Forest, while for methods such as Naïve Bayes the best results are those that must use 70-80 of the attributes and only in Logistic regression should be used raw to have the best results.

Keywords: Large movie review dataset, SVM, Naïve Bayes, random forest, KNN, logistic regression.

1. Introducción

Las tecnologías han evolucionado y se ha encontrado que la gran mayoría de información se encuentra en forma no estructura [1] se estima que entre el 80% y el 90% de los datos de las organizaciones son no estructurados, para obtener esa información es necesario procesarla y tener una estructura que se pueda analizar, para esto tenemos la minería de datos, dentro de la minería de datos, encontramos una rama llamada “text mining” o la minería de texto que [2, 3] es el descubrimiento por computadora de información nueva, previamente desconocida, mediante la extracción automática de información, en esta rama se trabaja con el análisis de sentimientos, se define [4] como minería de opinión o “opinion mining”, se trata de una tarea de clasificación masiva de documentos de manera automática, que se centra, entre otras cosas, en catalogar los documentos en función de la connotación positiva o negativa del lenguaje utilizado en el mismo, [5] el enfoque común para comprender la opinión es verlo desde ambas perspectivas, es decir, positiva y negativa y el proceso se llama análisis de sentimiento [6].

Las opiniones clasificadas se han identificado como tarea primordial del sentimiento. Tradicionalmente, la clasificación de textos se realizaba principalmente mediante tareas de ingeniería manual, como el desarrollo de características artesanales consultando diccionarios, técnicas basadas en el conocimiento o componentes jerárquicos personalizados.

1.1. Corpus “Large Movie Review Dataset”

De acuerdo con [7], dentro del corpus podemos encontrar 50k de opiniones, de las cuales se tiene 25k para entrenamiento y otras 25k de test en la categoría de positiva y negativas, este corpus esta balanceado por lo que tendremos en total 25k de positivas y 25k negativas.

Dentro de los investigadores que han utilizado este corpus, buscan la clasificación a través de diferentes métodos para la selección de características basada en diferentes índices, [8] como el Gini con un clasificador de máquina de vectores de soporte (SVM) para la clasificación de sentimientos, o por medio [9] de características híbridas que se obtiene al concatenar características de aprendizaje automático (TF, TF-IDF) con características de léxico (recuento de palabras positivo-negativo, connotación) con el que obtienen mejores resultados tanto en términos de precisión como de complejidad cuando se prueba, también utilizan [10] modelos híbrido CNN_LSTM que han superado a las redes MLP y singular CNN y LSTM. CNN_LSTM se han informado una precisión del 89,2 %, mientras que CNN ha proporcionado una precisión del 87,7 %, mientras que MLP y LSTM han informado una precisión del 86,74 % y 86,64.

En otros casos usan algoritmos como [11] Word2Vec de Google para la clasificación de texto de manera que se conserve las asociaciones semánticas entre los términos de las palabras para aprender las funciones de aprendizaje del algoritmo, o métodos [12] para abordar el problema de la clasificación de sentimientos a través de arquitecturas de redes neuronales recurrentes, además de una red neuronal recursiva para el análisis a nivel de oración y una red neuronal recurrente.

Muchas veces estos experimentos no los podemos realizar debido al hardware que poseemos y es necesario una reducción del corpus, pero qué tanto es lo necesario de

reducir para obtener los resultados que nos puedan brindar información de características similares o iguales a los que usan el corpus entero.

2. Metodología

En este trabajo se realiza la clasificación del corpus “large movie review dataset”, del cual se utilizaron 5000 instancias balanceadas, los cuales se encuentran etiquetados en cuanto a la polaridad de la opinión como: positiva o negativa, siendo así un 2500 positivas y 2500 negativas, este trabajo de etiquetación fue realizado por los investigadores Andrew L. Maas y su equipo, en 2011.

En nuestro caso utilizamos de clasificación “random sampling”, se entrenó en base a 5 clasificadores Knn, Logistic Regression, Naïve Bayes, SVM, Random Forest, dentro de nuestra metodología se encuentran dos caminos, el primero que incluye preprocesado y un segundo camino que se considera nuestro “baseline”, que son datos en crudo sin realizar preprocesamiento, mientras que en el primero se realiza un preprocesamiento que consiste en eliminar las palabras de paro, también llamadas “stop words”, números y acentos, las cuales se consideran palabras vacíos.

También se realiza la transformación de las palabras en “lowcase” traducido en español palabras minúsculas, las cuales nos produce reducir las diferencias de palabras por alguna mayúscula, crean una cantidad menor de dimensionalidad. Seguido de esto, dentro del preprocesamiento marcamos un número máximo de tokens que definirá el tamaño de nuestra matriz para obtener los mejores resultados, en este proceso se llegó a utilizar el 2.7%-80% de las palabras de mayor relevancia para comparar y saber qué cantidad de palabras son necesarias para obtener los mejores resultados.

En ambos casos se utiliza una bolsa de palabras en donde se selecciona como frecuencia del documento el IDF (Inverse document frequency) que indica la relevancia de las palabras, esto entra al sistema y a partir de los clasificadores nuestro sistema los utiliza de aprendizaje para poder obtener las 3 métricas que buscamos obtener las cuales son F1, Recall y Precision.

3. Estado del arte

En esta sección describimos las técnicas más utilizadas de clasificación de texto y métricas que pueden aplicarse para mejorar los resultados de clasificación.

3.1. Métodos de clasificación utilizados como métodos de aprendizaje

Basado en [13]: Naïve Bayes es un método de clasificación supervisado y generativo que se basa en el teorema de Bayes y en la premisa de independencia de los atributos para obtener la probabilidad de que un documento pertenezca a una determinada clase. Support Vector Machine es un método supervisado de clasificación binaria en el cual el entrenamiento consiste en encontrar un hiperplano que separe los vectores de atributos que representan los documentos del conjunto de datos en dos grupos, siendo esta separación la más grande posible.

Tabla 1. Resultados con KNN.

	F1	Precisión	Recall
Baseline	0.596	0.596	0.596
2.70%	0.626	0.631	0.628
10%	0.618	0.636	0.626
20%	0.598	0.642	0.616

Tabla 2. Resultados con SVM.

	F1	Precisión	Recall
Baseline	0.397	0.618	0.521
10%	0.405	0.624	0.524
20%	0.411	0.617	0.526
30%	0.405	0.622	0.524

Aquellos vectores que definen los márgenes de la máxima separación entre las clases se conocen como support vectors.

Logistic Regression Se define en [14] como un algoritmo de aprendizaje automático de clasificación utilizado para predecir la probabilidad y datos mediante rectas, que requieren que la variable dependiente sea binaria.

Knn (K-Nearest Neighbor): basado en [15] KNN se une al algoritmo clasificador que categoriza nuevos elementos en un conjunto de datos de prueba. Detecta los vecinos más cercanos de cada elemento en un conjunto de datos de entrenamiento a través de una medida de similitud, expresada por una función de distancia (es decir, euclidiana, Manhattan, Minkowski).

Basado en [16] Random forest, el algoritmo del bosque del árbol de decisión se entrena en múltiples árboles de decisión impulsados por subconjuntos de datos ligeramente diferentes. El bosque aleatorio es parte de los métodos de conjuntos familiares que toman el árbol de decisión como un predictor individual, son basado en los métodos deembolsado, aleatorización de salidas y subespacio aleatorio que excusan el impulso.

3.2. Métricas de evaluación

Precisión: Basado en [4] La precisión se define como la relación entre las observaciones predichas correctamente y el número total de observaciones:

$$Precisión = \frac{tp}{tp+fp}, \tag{1}$$

donde tp equivale a un valor verdadero-positivo y fp a un valor falso-positivo. Recall: [4] La recuperación se define como la proporción de observaciones que se predicen positivamente correctas con respecto al número total de observaciones en unaclase real:

$$Recall = \frac{tp}{tp+fn}, \tag{2}$$

donde tp representa un valor verdadero-positivo y fn representa un valor falso-negativo.

F1: [14, 4] es una medida de precisión en una prueba que se calcula a partir de la precisión y el recall de la prueba que se está llevando a cabo, en pocas palabras F1 es la media armónica de la precisión y el recall:

Tabla 3. Resultados con Random Forest.

	F1	Precisión	Recall
Baseline	0.737	0.737	0.737
40%	0.784	0.785	0.784
50%	0.793	0.795	0.793
60%	0.784	0.786	0.785

Tabla 4. Resultados con Logistic Regression.

	F1	Precisión	Recall
Baseline	0.737	0.737	0.737
20%	0.784	0.785	0.784
30%	0.793	0.795	0.793
40%	0.784	0.786	0.785

$$F1 = \frac{tp}{tp + \frac{1}{2}(fp + fn)}, \quad (3)$$

donde tp es un valor verdadero-positivo, fp un valor falso-positivo y fn un valor falso-negativo.

3.3. Muestreo

Basado en [17] Muestreo aleatorio: en este caso se utilizan dos argumentos para definir el muestreo, el primero es el porcentaje que se va a tomar del total de los datos para usar como datos de prueba, el segundo es la cantidad de iteraciones que se van a realizar para entrenar al algoritmo.

4. Resultados

Se puede observar que KNN aumenta las métricas comparado si se utilizara en crudo, también podemos ver que a partir del 20% de los atributos hay disminución de los resultados.

Se puede mencionar que en la precisión en SVM es superior que F1 y Recall, siendo estas muy inferiores para los análisis y que también se puede observar una disminución en las métricas a partir del 30%.

En Random Forest se puede observar que comparado con SVM y KNN es superior por aproximadamente .15, y superior a usarlo que, en base cruda, una desventaja que podemos notar es utilizar el 50% de los atributos lo cual nos lleva más tiempo. En Logistic Regression es el que tiene mejores resultados de los 5 métodos de aprendizaje, pero se debe utilizar en baseline.

Naïve Bayes es muy cercano a Logistic Regression con la ventaja de que dura un poco menos en procesar la información, pero no con una gran diferencia de tiempo si lo comparamos con SVM, KNN o Logistic Regression.

Se puede mostrar que la diferencia más grande que se puede observar de los mejores resultados de este artículo y los referenciados es de 0.023, en comparación de que en estos trabajos utilizan todo el corpus comparado contra la utilización solo del 5k de

Tabla 5. Resultados con Naïve Bayes.

	F1	Precisión	Recall
Baseline	0.857	0.862	0.858
60%	0.85	0.855	0.85
70%	0.862	0.862	0.862
80%	0.862	0.862	0.862

Tabla 6. Resultados comparados con otros trabajos.

Trabajos relacionados [10]	Precisión	Resultados	Precisión
MLP	0.8674	SVM-10%	0.624
LSTM	0.8664	KNN-20%	0.642
CNN_LSTM	0.892	RF- 50%	0.795
CNN	0.877	LR-Baseline	0.869
		NB-70%	0.862

instancias y un escenario de atributos específico reduciendo el tiempo de nuestros ensayos.

5. Discusión

Este trabajo demuestra que podemos encontrar resultados similares si usáramos menos atributos, lo que nos da menos tiempo de procesamiento y que otros equipos con menor capacidad de hardware puedan encontrar resultados buenos, pero hace falta revisar con más configuraciones en el experimento para poder encontrar resultados que puedan superar el margen del 90% en la precisión.

6. Conclusión

La conclusión a la que se llegó con esta investigación es en base a los resultados obtenidos, existe un “sobre aprendizaje” a la hora de agregar más cantidad de atributos en los métodos de aprendizaje como SVM, KNN y Random Forest, ya que como se puede observar en los resultados cuando se utilizan más cantidad de atributos, éstos obtienen menor rendimientos al compararlo con menos palabras, por lo que es significativo no superar en estos métodos de aprendizaje más del 20%, salvo para “Random Forest” es recomendable usar la mitad de los atributos para su mejor rendimiento, en caso de Naïve Bayes se recomienda usar el 70%-80% de los atributos, mientras que para “Logistic regression” es recomendable utilizarlo con datos en crudo.

Para el futuro, consideramos también la posibilidad de utilizar para los algoritmos tradicionales otros tipos de atributos como n-gramas de varios tipos y tamaños (de palabras, de caracteres, de pos tags, mixtos, sintácticos), mismo que utilizar los transformes en el caso de aprendizaje profundo [18].

References

1. Barrera, M. C.: Text mining: a current view. *Biblioteca Universitaria*; vol. 17, no. 2, pp. 129–138 (2014)
2. Gupta, V., Lehal, G. S.: A survey of text mining techniques and applications. *Journal of Emerging Technologies in Web Intelligence*, vol. 1, no. 1, pp. 60–76 (2009)
3. Shah, K., Patel, H., Sanghvi, D., Shah, M.: A comparative analysis of logistic regression, random forest and KNN models for the text classification. *Augmented Human Research*, vol. 5, no. 1, pp. 1–16 (2020). doi: 10.1007/S41133-020-00032-0
4. Sánchez del Hoyo, R.: Análisis de sentimientos con Twitter: turismo y política electoral. *Depósito de Investigación Universidad de Sevilla*, pp. 1–84 (2019)
5. Bhatia, S., Chaudhary, P., Dey, N.: *Opinion mining in information retrieval*. Springer Singapore (2020) doi: 10.1007/978-981-15-5043-0
6. Maas, A., Daly, R. E., Pham, P. T., Huang, D., Ng, A. Y., Potts, C.: Learning word vectors for sentiment analysis. In: *Proceedings of the 49th Annual Meeting of the Association for Computational Linguistics: Human Language Technologies*, pp. 142–150 (2011)
7. Manek, A. S., Shenoy, P. D., Mohan, M. C.: Aspect term extraction for sentiment analysis in large movie reviews using Gini index feature selection method and SVM classifier. *World Wide Web*, vol. 20, no. 2, pp. 135–154 (2017) doi: 10.1007/s11280-015-0381-x
8. Harish, B. S., Kumar, K., Darshan, H. K.: Sentiment analysis on IMDb movie reviews using hybrid feature extraction method. *International Journal of Interactive Multimedia and Artificial Intelligence*, vol. 5, no. 5, p. 109 (2019) doi: 10.9781/IJIMAI.2018.12.005
9. Nehal, M. A., Marwa, A. E., Aliaa, Y.: sentiment analysis for movies reviewsdataset using deep learning models. vol. 9, no. 2/3, pp. 19–27 (2019) doi: 10.5121/ijdkp.2019.9302
10. Timmaraju, A., Khanna, V.: Sentiment analysis on movie reviews using recursive and recurrent neural network architectures. *Semantic Scholar*, pp. 1–5 (2015)
11. Chakraborty, K., Bhattacharyya, S., Bag, R., Hassanien, A. E.: Comparative sentiment analysis on a set of movie reviews using deep learning approach. In: *The International Conference on Advanced Machine Learning Technologies and Applications, AMLTA'18*, Springer International Publishing, vol. 723, pp. 311–318 (2018). doi: 10.1007/978-3-319-74690-6_31
12. Dubiau, L., Ale, J. M.: Análisis de sentimientos sobre un corpus en español: Experimentación con un caso de estudio. In: *XIV Argentine Symposium on Artificial Intelligence (ASAI)-JAIIO* (2013)
13. Morales-Castro, J. C., Ledesma-Carrillo, L. M., Guzman-Cabrera, R.: Identificación de polaridad en twitter usando validación cruzada. *Identidad Energetica*, vol. 4 (2021)
14. https://www.researchgate.net/publication/357860394_Identificacion_de_polaridad_en_Twitter_usando_validacion_cruzada
15. Chatzigeorgakidis, G., Karagiorgou, S., Athanasiou, S., Skiadopoulos, S.: FML-kNN: Scalable machine learning on big data using k-nearest neighbor joins. *Journal of Big Data*, vol. 5, no. 1, pp. 1–27 (2018) doi: 10.1186/S40537-0180115-x
16. Al-Amrani, Y., Lazaar, M., El-Kadiri, K. E.: Random forest and support vector machine-based hybrid approach to sentiment analysis. *Procedia Computer Science*, vol. 127, pp. 511–520 (2018) doi: 10.1016/J.PROCS.2018.01.150
17. Pauli, P. A.: Análisis de sentimiento: comparación de algoritmos predictivos y métodos utilizando un lexicon español (2019)
18. Sidorov, G.: *Syntactic n-grams in computational linguistics*. Springer (2019)

Disminución de Cr (III) de soluciones acuosas residuales mediante desechos agroindustriales y cárnicos como bioadsorbentes

Diana Arredondo-Angulo, Ivan Castillo-Montaño,
Rosa Hernández-Soto, José Alfredo Hernández-Maldonado

Instituto Politécnico Nacional,
Unidad Profesional Interdisciplinaria de Ingeniería Campus Guanajuato,
México

jahernandezma@ipn.mx

Resumen. El estado de Guanajuato, México. Se caracteriza por su actividad curtidora; en consecuencia, existe una alta producción de residuos acuosos provenientes de los procesos de curtido de piel, estos contienen Cr (III) en altas concentraciones, lo cual presenta un riesgo para la salud y el medio ambiente. El objetivo de este trabajo es evaluar la capacidad bioadsorbente de residuos agroindustriales y cárnicos para reducir dicho metal pesado del efluente. La cáscara de naranja y huesos bovinos se trataron para la remoción de Cr (III) en agua residuales. Cada muestra fue analizada con modelos de isothermas, cinéticas, otros que determinaron limitaciones por transferencia de masa externas o internas; se caracterizaron a través de micrografías y espectrometría y con una espectroscopía de infrarrojo por transformada de Fourier se demostró la adsorción del ion. CNTA a pH 2.72 y nDCPD mostraron resultados favorables ajustándose a los modelos Freundlich-Elovich y SIPS-PFO, obteniendo 65% y 95% de remoción de Cr (III), respectivamente.

Palabras clave: Aguas residuales, Cr (III), cáscara naranja, hueso bovino.

Reduction of Cr (III) from Residual Aqueous Solutions Using Agroindustrial and Meat Waste as Bioadsorbents

Abstract. The state of Guanajuato, Mexico. It is characterized by its tanning activity; Consequently, there is a high production of aqueous waste from leather tanning processes, these contain Cr (III) in high concentrations, which presents a risk to health and the environment. The objective of this work is to evaluate the bioadsorbent capacity of agroindustrial and meat waste to reduce said heavy metal from the effluent. Orange peel and bovine bones were treated for the removal of Cr (III) in wastewater. Each sample was analyzed with isotherm, kinetic, and other models that determined limitations due to external or internal mass transfer; They were characterized through micrographs and spectrometry and with Fourier transform infrared spectroscopy the adsorption of the ion was demonstrated. CNTA at pH 2.72 and nDCPD showed favorable results adjusting to the Freundlich-Elovich and SIPS-PFO models, obtaining 65% and 95% Cr (III) removal, respectively.

Keywords: Wastewater, Cr (III), orange peel, bovine bone.

1. Introducción

La presencia de colorantes, metales pesados y otros componentes químicos, como el sulfato de cromo básico usado en la curtiduría, que son altamente tóxicos para cuerpos de agua han causado serios problemas a la salud, dado que, no son degradados naturalmente por lo que se acumulan en el agua, causando que los organismos que la consuman sufran serios problemas cardiovasculares, renales, alteraciones estructurales en la membrana de los eritrocitos entre otros [1].

El Cr (III) mejora la eficiencia de la insulina (FTG), no obstante, concentraciones mayores a 30 ppm pueden ser un factor de riesgo para la salud, debido a que provocan los padecimientos mencionados [2].

El estado de Guanajuato, México, es el principal productor de pieles curtidas a nivel nacional; en consecuencia, es necesario encontrar alternativas que sean capaces de depositar el efluente sin la presencia de este metal [1,2]. La bioadsorción es un método versátil, ecológico, económico y simple que hace uso de residuos orgánicos como cáscara de frutas, vegetales, plantas, etc. Esta alternativa permite el reúso de estos residuos, los cuales tienen una alta eficiencia en la eliminación de metales pesados [1,3].

Este trabajo evaluó la capacidad de 2 bioadsorbentes para eliminar Cr (III) de aguas residuales: la cáscara de naranja (CN) y brushita (nDCPD) obtenida de huesos bovinos.

2. Materiales y métodos

2.1. Tratamiento de cáscara de naranja

La cáscara de naranja de valencia recolectada en puestos de venta de jugos se lavó, cortó y trituró para secar a 90°C por 12 horas. Se tamizó y se emplearon 3 pretratamientos: agua (Cáscara de Naranja Tratamiento Agua, CNTA), metanol (CNTM) y ambos (CNTMA). Para:

- CNTM: 30g del tamizado en 1L de solución de metanol absoluto a 37.5 % (p/v). Se agitó por 72 horas a 200 rpm, 25°C y se filtró. Se guardó el extracto en refrigeración con oscuridad, la masa se secó a 40°C por 24 horas y se realizaron 5 lavados hasta que el agua fue clara.
- CNTA: 30 gramos del tamizado en 1L de agua destilada, se filtró y secó la masa resultante a 40°C por 24 horas y se realizaron 5 lavados hasta que el agua fue clara.
- CNTMA: combinación del tratamiento con metanol al 30% p/v y con agua bajo las mismas condiciones.

2.2. Tratamiento del hueso bovino (Obtención n-DCPD, natural dicalcium phosphate dihydrate, brushita)

El hueso bovino recolectado de carnicería se colocó en agua caliente para eliminar los residuos adheridos. Se procedió a secar a 80°C por 24 horas y se trituró a un tamaño de 104 micras. Se colocó 1 gramo del producto en 50 ml de HCl y NaOH a 30 °C y se secó a 80°C por 24 horas.

2.3. Isotermas de adsorción de Cr (III)

Se colocó 1 g de cada adsorbente (CNTA y n-DCPD) por separado en 50 mL de Cr (III) de 0 ppm a 1000 ppm. Se agitó por 24 horas a 200 rpm y 30°C. Se centrifugó una alícuota y se midió mediante espectrofotometría y FTIR para conocer la concentración de Cr (III) en la solución. Estos datos se trataron para obtener el mejor modelo de isoterma ajustado a ellos.

2.4. Cinéticas de adsorción de Cr (III)

Se colocaron de 0 a 1 g de cada adsorbente por separado en 50 mL de Cr (III) 500 ppm. La muestra se dejó en agitación a 200 rpm y 30°C, se tomaron alícuotas de 5 mL cada 1.5 horas por 9 horas que fueron centrifugadas y se midió la muestra mediante espectrofotometría y FTIR para conocer la concentración de Cr (III) en la solución. En adición, el porcentaje de remoción se determinó mediante el uso de la ecuación:

$$\%R_{Cr} = \frac{(C_p - C)}{C_0} \times 100. \quad (1)$$

3. Resultados y discusión

3.1. Isotermas y cinéticas de adsorción

El mejor ajuste es el modelo de Freundlich independientemente del pH y el pretratamiento, la adsorción es un proceso químico con $n < 1$, y hay una contribución mediante un intercambio iónico con $E > 8$ kJ/mol. Por otro lado, para nDCPD el modelo SIPS indica que la adsorción se lleva en multicapas con una superficie heterogénea y con $n_s > 1$ se tiene un proceso físico donde R_L esta entre 0-1, e indica que el proceso es favorable [4]. La capacidad de adsorción de nDCPD a 30°C es de 120 mg/g.

3.2. Limitación de transferencia de masa externa (TME) e interna (TMI)

CNTA a pH 0.91 y 1.78 y CNTMA a pH 0.91, 1.78 y 2.72 presentaron limitaciones por TME a las 4.5h del proceso cinético, al igual que CNTM a pH 1.78 y 2.72. Sin embargo, a pH 0.91 la limitación para CNTM se presentó al cabo de 3.25h del proceso, mientras que para nDCPD existió la limitación hasta luego de 5h del proceso.

La primera etapa es atribuida a un estado casi instantáneo para capturar los iones de Cr (III), debido a la disponibilidad de los sitios en la superficie de nDCPD y CN [4, 5]. Por lo que, para CNTMA, CNTM a cualquier pH hay limitaciones; CNTA a pH 0.91 y 1.78, pero a pH 2.72 no hay problemas de TME.

Si se considera que dentro del proceso hay 3 etapas: difusión externa, interna y equilibrio, donde k_1 Difusión externa, k_2 Difusión interna y $k_1/k_2 > 1$ indica que la transferencia de masa por difusión externa domina el proceso, con los datos de la tabla 1 se muestra que carece de importancia las limitaciones de TMI en el proceso.

Tabla 1. Relación de las constantes cinéticas para procesos de difusión externa e interna.

C_{ads} , g/L	k_1/k_2
4	3.25
8	3.38
12	6.89
16	5.138
20	2.8

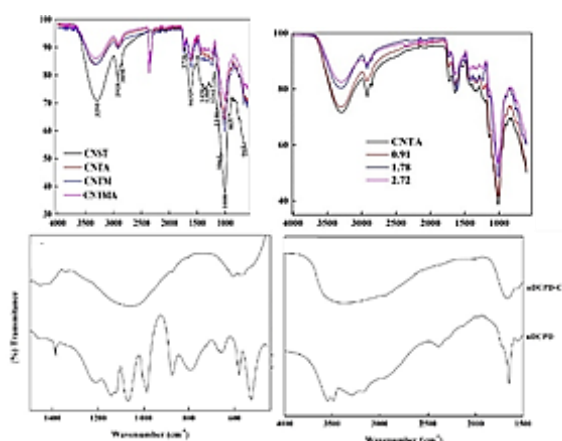


Fig. 1. FTIR: a) Pretratamientos CN, b) CNTA. c) y d) IR nDCPD.

3.3. Caracterización del bioadsorbente

El FTIR para CN muestra disminución de la presencia de los grupos funcionales de la siguiente manera: CNST > CNTM > CNTA > CNTMA, por lo que el pretratamiento afecta su presencia. Para CNTA las bandas a 1367, 865 y 665 cm^{-1} son atribuidas a los grupos C-O de los ácidos carboxílicos y alcoholes, comparando con el FTIR general, se disminuye su intensidad. Para nDCPD, el espectro infrarrojo muestra picos a 3548, 3484, 3278 y 3166 cm^{-1} , por estiramiento OH de la molécula de agua.

La vibración a 1215 cm^{-1} al grupo O-H y en 790 cm^{-1} a P-O-H. En el espectro nDCPD-Cr, varias vibraciones generales desaparecen y/o disminuyen como para OH⁻ y PO₄³⁻ (Fig. 1) [6].

4. Conclusión

Con base en los análisis FTIR se sugiere que la remoción de Cr (III) ocurre realmente con este tipo de materiales, sin embargo, se requiere una mayor comprobación de los resultados para afirmar que se trata de Cr (III), así como atención a los residuos producto de esta investigación para su correcto desecho.

Referencias

1. Bhatnagar, A., Sillanpää, M., Witek-Krowiak, A.: Agricultural waste peels as versatile biomass for water purification: A review. *Chemical Engineering Journal*, vol. 270, pp. 244–271 (2015) doi: 10.1016/j.cej.2015.01.135
2. Varghese, A. G., Paul, S. A., Latha, M. S.: Remediation of heavy metals and dyes from wastewater using cellulose-based adsorbents. *Environmental Chemistry Letters*, vol. 17, pp. 867–877 (2019) doi: 10.1007/s10311-018-00843-z
3. Jacob, J. J., Varalakshmi, R., Gargi, S., Jayasri, M. A., Suthindhiran, K.: Removal of Cr (III) and Ni (II) from tannery effluent using calcium carbonate coated bacterial magnetosomes. *NPJ Clean Water*, vol. 1, no. 1, pp. 1. (2018) doi: 10.1038/s41545-018-0001-2
4. Hernandez-Maldonado, J. A., Torres-García, F. A., Salazar-Hernández, M. M., Hernández-Soto, R.: Removal of chromium from contaminated liquid effluents using natural brushite obtained from bovine bone. *Desalination and Water Treatment*, vol. 95, pp. 262–273 (2017)
5. Patiño-Saldivar, L., Hernández, J. A., Ardila, A., Salazar-Hernández, M., Talavera, A., Hernández-Soto, R.: Cr (III) removal capacity in aqueous solution in relation to the functional groups present in the orange peel (*Citrus sinensis*). *Applied Sciences*, vol. 11, no. 14, p. 6346 (2021) doi: 10.3390/app11146346
6. Mircković, M. M., Pašti, T. D. L., Došen, A. M., Čebela, M. Ž., Rosić, A. A., Matović, B. Z., Babić, B. M.: Adsorption of malathion on mesoporous monetite obtained by mechanochemical treatment of brushite. *RSC Advances*, vol. 6, no. 15, pp. 12219–12225 (2016)

Electronic edition
Available online: <http://www.rcs.cic.ipn.mx>



<http://rcs.cic.ipn.mx>



Centro de Investigación
en Computación