



Universidad de San Carlos de Guatemala
Facultad de Ingeniería
Escuela de Ingeniería en Ciencias y Sistemas

**SOFTWARE CONVERTIDOR DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR MEDIANTE LA
COMBINACIÓN MATRICIAL DE ESPECTROS EN LA FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS
Y FARMACIA, LABORATORIO DE QUÍMICA COMPUTACIONAL, UNIVERSIDAD DE SAN
CARLOS DE GUATEMALA**

Argel Joseph Figueroa Escobar

Asesorado por el Ingeniero Everest Darwin Medinilla Rodríguez

Guatemala, noviembre de 2022

UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMALA



FACULTAD DE INGENIERÍA

**SOFTWARE CONVERTIDOR DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR MEDIANTE LA
COMBINACIÓN MATRICIAL DE ESPECTROS EN LA FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS
Y FARMACIA, LABORATORIO DE QUÍMICA COMPUTACIONAL, UNIVERSIDAD DE SAN
CARLOS DE GUATEMALA**

TRABAJO DE GRADUACIÓN

PRESENTADO A LA JUNTA DIRECTIVA DE LA
FACULTAD DE INGENIERÍA
POR

ARGEL JOSEPH FIGUEROA ESCOBAR

ASESORADO POR EL ING. EVEREST DARWIN MEDINILLA RODRIGUEZ

AL CONFERÍRSELE EL TÍTULO DE

INGENIERO EN CIENCIAS Y SISTEMAS

GUATEMALA, NOVIEMBRE DE 2022

UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMALA
FACULTAD DE INGENIERÍA



NÓMINA DE JUNTA DIRECTIVA

DECANA	Inga. Aurelia Anabela Córdova Estrada
VOCAL I	Ing. José Francisco Gómez Rivera
VOCAL II	Ing. Mario Renato Escobedo Martínez
VOCAL III	Ing. José Milton de León Bran
VOCAL IV	Br. Kevin Vladimir Cruz Lorente
VOCAL V	Br. Fernando José Paz González
SECRETARIO	Ing. Hugo Roberto Rivera Pérez

TRIBUNAL QUE PRACTICÓ EL EXAMEN GENERAL PRIVADO

DECANA	Inga. Aurelia Anabela Córdova Estrada
EXAMINADOR	Inga. Floriza Felipa Ávila Pesquera de Medinilla
EXAMINADOR	Ing. Sergio Leonel Gómez Bravo
EXAMINADOR	Ing. Carlos Alfredo Azurdia Morales
SECRETARIO	Ing. Hugo Roberto Rivera Pérez

HONORABLE TRIBUNAL EXAMINADOR

En cumplimiento con los preceptos que establece la ley de la Universidad de San Carlos de Guatemala, presento a su consideración mi trabajo de graduación titulado:

**SOFTWARE CONVERTIDOR DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR MEDIANTE LA
COMBINACIÓN MATRICIAL DE ESPECTROS EN LA FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS
Y FARMACIA, LABORATORIO DE QUÍMICA COMPUTACIONAL, UNIVERSIDAD DE SAN
CARLOS DE GUATEMALA**

Tema que me fuera asignado por la Dirección de la Escuela de Ingeniería en Ciencias y Sistemas, con fecha 5 de agosto de 2021.



Argel Joseph Figueroa Escobar



Guatemala, 07 de febrero del 2022 .
Ref.EPS.DOC.07.02.2022

Nombre del estudiante: Argel Joseph Figueroa Escobar
CUI: 2407 28580 0101
Registro Académico: 201212849
Carrera: Ingeniería en Ciencias y Sistemas

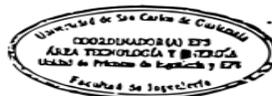
Por este medio se le informa que el día **7 de febrero de 2022** se clausura de forma oficial el programa de EPS, iniciado el **4 de agosto de 2021** y que realizó en el **Laboratorio de Química Computacional, Facultad de Ciencias Químicas y Farmacia, Universidad de San Carlos de Guatemala.**

Se le recuerda, que de acuerdo al normativo vigente:

- a. Artículo 15° literal a, se fija como tiempo máximo para la entrega del informe final de EPS, sesenta (60) días calendario a partir de la fecha de clausura oficial del proyecto.
- b. Artículo 28°. Se establece como tiempo máximo para obtener las cartas de aprobación del informe final del EPS, un año calendario, a partir de la fecha de clausura oficial del programa de EPS, de lo contrario se procederá a invalidar a dicho programa y tendrá que buscar otra alternativa de graduación y/o someterse a un nuevo programa de EPS.

"ID Y ENSEÑAD A TODOS"

Floriza Avila



Inga. Floriza Avila Pesquera de Medinilla
Supervisora del programa de EPS

Original: Control Académico

Guatemala, 2 de mayo de 2022

Ingeniero Oscar Argueta Hernández
Director de la Unidad de Ejercicio Profesional Supervisado -EPS-
Facultad de Ingeniería
Universidad de San Carlos de Guatemala

Estimado Ingeniero Argueta:

Por este medio le informo que después de revisar el trabajo final de EPS titulado “CONVERTIDOR DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR MEDIANTE LA COMBINACIÓN MATRICIAL DE ESPECTROS EN LA FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS Y FARMACIA, LABORATORIO DE QUÍMICA COMPUTACIONAL, UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMALA”, a cargo del estudiante de la carrera de Ingeniería en Ciencias y Sistemas, **Argel Joseph Figueroa**, quien se identifica con el CUI **2407 28580 0101** y con el de Registro Académico **201212849**, hago constar que se ha concluido el informe final y doy por **APROBADO** dicho informe.

Agradeciendo la atención a la presente y quedando a sus órdenes para cualquier información adicional.

Atentamente,



Ing. Everest Darwin Medinilla Rodríguez
Asesor de EPS
Escuela de Ingeniería en Ciencias y Sistemas
Universidad de San Carlos de Guatemala

Everest Darwin Medinilla Rodríguez
Ingeniero en Ciencias y Sistemas
Colegiado 4,332

Universidad de San Carlos de
Guatemala



Facultad de Ingeniería
Unidad de EPS

Guatemala, 09 de mayo de 2022.
REF.EPS.D.163.05.2022.

Ing. Carlos Gustavo Alonzo
Director Escuela de Ingeniería Ciencias y Sistemas
Facultad de Ingeniería
Presente

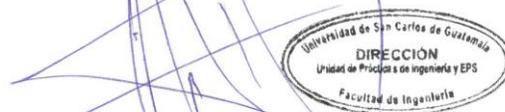
Estimado Ingeniero Alonzo:

Por este medio atentamente le envío el informe final correspondiente a la práctica del Ejercicio Profesional Supervisado, (E.P.S) titulado **SOFTWARE CONVERTIDOR DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR MEDIANTE LA COMBINACIÓN MATRICIAL DE ESPECTROS EN LA FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS Y FARMACIA, LABORATORIO DE QUÍMICA COMPUTACIONAL, UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMALA**, que fue desarrollado por el estudiante universitario **Argel Joseph Figueroa Escobar, Registro Académico 201212849 y CUI 2407 28580 0101** quien fue debidamente asesorado por el Ing. Everest Darwin Medinilla Rodríguez y supervisado por la Inga. Floriza Felipa Ávila Pesquera de Medinilla.

Por lo que habiendo cumplido con los objetivos y requisitos de ley del referido trabajo y existiendo la aprobación del mismo por parte del Asesor y la Supervisora de EPS, en mi calidad de Director apruebo su contenido solicitándole darle el trámite respectivo.

Sin otro particular, me es grato suscribirme.

Atentamente,
"Id y Enseñad a Todos"



Ing. Oscar Argueta Hernández
Director Unidad de EPS

/ra



Universidad San Carlos de Guatemala
Facultad de Ingeniería
Escuela de Ingeniería en Ciencias y Sistemas

Guatemala 18 de mayo de 2022

Ingeniero
Carlos Gustavo Alonzo
Director de la Escuela de Ingeniería
En Ciencias y Sistemas

Respetable Ingeniero Alonzo:

Por este medio hago de su conocimiento que he revisado el trabajo de graduación-EPS del estudiante **ARGEL JOSEPH FIGUEROA ESCOBAR** carné 201212849 y CUI 2407 28580 0101, titulado: “**SOFTWARE CONVERTIDOR DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR MEDIANTE LA COMBINACIÓN MATRICIAL DE ESPECTROS EN LA FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS Y FARMACIA, LABORATORIO DE QUÍMICA COMPUTACIONAL, UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMALA**” y a mi criterio el mismo cumple con los objetivos propuestos para su desarrollo, según el protocolo.

Al agradecer su atención a la presente, aprovecho la oportunidad para suscribirme,

Atentamente,



Ing. Carlos Alfredo Azurdia
Coordinador de Privados
y Revisión de Trabajos de Graduación

UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS
DE GUATEMALA



FACULTAD DE INGENIERÍA

LNG.DIRECTOR.212.EICCSS.2022

El Director de la Escuela de Ingeniería en Ciencias y Sistemas de la Facultad de Ingeniería de la Universidad de San Carlos de Guatemala, luego de conocer el dictamen del Asesor, el visto bueno del Coordinador de área y la aprobación del área de lingüística del trabajo de graduación titulado: **SOFTWARE CONVERTIDOR DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR MEDIANTE LA COMBINACIÓN MATRICIAL DE ESPECTROS EN LA FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS Y FARMACIA, LABORATORIO DE QUÍMICA COMPUTACIONAL, UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMALA**, presentado por: **Argel Joseph Figueroa Escobar**, procedo con el Aval del mismo, ya que cumple con los requisitos normados por la Facultad de Ingeniería.

“ID Y ENSEÑAD A TODOS”



Msc. Ing. Carlos Gustavo Alonzo
Director

Escuela de Ingeniería en Ciencias y Sistemas

Guatemala, octubre de 2022



LNG.DECANATO.OI.695.2022

La Decana de la Facultad de Ingeniería de la Universidad de San Carlos de Guatemala, luego de conocer la aprobación por parte del Director de la Escuela de Ingeniería en Ciencias y Sistemas, al Trabajo de Graduación titulado: **SOFTWARE CONVERTIDOR DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR MEDIANTE LA COMBINACIÓN MATRICIAL DE ESPECTROS EN LA FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS Y FARMACIA, LABORATORIO DE QUÍMICA COMPUTACIONAL, UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMALA**, presentado por: **Argel Joseph Figueroa Escobar**, después de haber culminado las revisiones previas bajo la responsabilidad de las instancias correspondientes, autoriza la impresión del mismo.

IMPRÍMASE:



Inga. Aurelia Anabela Cordova Estrada ★

Decana

Guatemala, noviembre de 2022

AACE/gaoc

ACTO QUE DEDICO A:

Mis padres

Lic. Argelio Figueroa y Licda. Miriam Escobar de Figueroa, por guiarme en este tramo llamado "vida", compartir sus sabios consejos y todo el apoyo brindado desinteresadamente.

Mi hermana

Licda. Miriam Figueroa, por todo, el ser mi cómplice en la vida, brindarme apoyo incondicional y ánimos.

Mis abuelos

Aida Estrada de Escobar, Genaro Figueroa (q.e.p.d), Justa Ravanales de Figueroa (q.e.p.d.), Pedro Escobar (q.e.p.d.), por ser motivadores a la superación.

Mis amigos

Luis Carlos Ávila (q.e.p.d.), Luis Eduardo Peralta, Kevin Barrientos, por la amistad brindada durante todos estos años.

AGRADECIMIENTOS A:

Universidad de San Carlos de Guatemala	Por educarme y mostrarme la necesidad que el pueblo de Guatemala tiene de la ayuda de los Sancarlistas.
Mis amigos	Por brindarme su sincera amistad y apoyo a lo largo de los años.
Ingenieros	Darwin Medinilla y Floriza Ávila de Medinilla, por compartir todo su conocimiento y apoyo durante mi carrera.
PhD	Abraham Vásquez, por el don de enseñanza y paciencia brindada durante todo este proyecto.
Mi esposa	Patricia Bernardini, por su apoyo incondicional y fuerza para continuar.

ÍNDICE GENERAL

ÍNDICE DE ILUSTRACIONES	V
LISTA DE SÍMBOLOS	VII
GLOSARIO	IX
RESUMEN	XI
OBJETIVOS.....	XIII
INTRODUCCIÓN	XV
1. FASE DE INVESTIGACIÓN	1
1.1. Antecedentes de la institución	1
1.1.1. Reseña histórica	1
1.1.2. Misión	2
1.1.3. Visión.....	2
1.1.4. Servicios que realiza.....	2
1.2. Descripción de las necesidades	3
1.3. Justificación	4
2. FASE TÉCNICO PROFESIONAL	7
2.1. Descripción del proyecto	7
2.2. Investigación preliminar para la solución del proyecto	8
2.2.1. Resonancia magnética nuclear.....	8
2.2.2. Metodologías de desarrollo.....	9
2.2.2.1. Metodología ágil	9
2.2.3. Procesamiento de imágenes	10
2.2.4. Arquitectura de software	10
2.2.4.1. Bases de datos relacionales.....	11

2.2.5.	Arquitectura de aplicación	12
2.2.5.1.	Arquitectura Web.....	12
2.2.5.2.	Diseño responsivo	12
2.2.5.3.	Patrón Modelo-Vista-Controlador	13
2.2.6.	Ingeniería de software	13
2.2.6.1.	Software de Ingeniería/Científico	13
2.3.	Presentación de la solución del proyecto	14
2.3.1.	Software del sistema	14
2.3.1.1.	Servidor web de aplicaciones.....	14
2.3.1.1.1.	Gestión de usuarios	14
2.3.1.1.2.	Gestión de comentarios	16
2.3.1.1.3.	Procesamiento de imágenes.....	17
2.3.1.2.	Cliente web.....	20
2.3.1.3.	Base de datos	20
2.3.2.	Componentes del sistema	21
2.4.	Planificación del proyecto.....	22
2.5.	Costos del proyecto.....	23
2.6.	Beneficios del proyecto	23
3.	FASE DE ENSEÑANZA Y APRENDIZAJE	25
3.1.	Capacitación propuesta.....	25
3.1.1.	Videotutoriales.....	25
3.2.	Material elaborado.....	26
3.2.1.	Manual técnico	26
3.2.2.	Videos	27
	CONCLUSIONES.....	29
	RECOMENDACIONES	31

REFERENCIAS 33
APÉNDICES 35
ANEXOS 37

ÍNDICE DE ILUSTRACIONES

FIGURAS

1.	Diagrama de interacción para funcionalidad de gestión de usuarios	15
2.	Diagrama de interacción para funcionalidad de reinicio de contraseña.....	16
3.	Diagrama de flujo de operación de imágenes RMN	18
4.	Diagrama de Entidad-Relación utilizada para la base de datos de la aplicación	21
5.	Diagrama de componentes para el sistema	22

LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolo	Significado
Mb	Megabyte
Q	Quetzal

GLOSARIO

Base de datos	Colección organizada de información estructurada o de datos almacenadas en un sistema computacional controlada por un sistema gestor de base de datos.
Django	Framework web de código abierto de alto nivel para el lenguaje Python que permite un desarrollo limpio de un diseño pragmático.
GIF	Graphic Interchange Format.
JPEG	Joint Photographic Expert Group.
Megapíxel	Unidad de resolución gráfica equivalente a 1,048,576 píxeles.
Nube	Recursos escalables y virtualizados que son proveídos como un servicio en internet.
Píxel	Unidad básica de una imagen digitalizada en pantalla a base de puntos de color o en escala de grises.
PNG	Portable Network Graphics.
Python	Lenguaje de programación orientado a objetos, de alto nivel e interpretado, con semánticas dinámicas.

RMN

Resonancia magnética nuclear.

Streaming

Tecnología que permite ver y oír comentarios que se transmiten desde internet u otra red sin tener que descargar los datos al dispositivo del usuario.

RESUMEN

El software convertidor de Resonancia magnética nuclear(RMN), es un software de tipo científico web que permite combinar espectros RMN heteronuclear para generar espectros homonucleares a partir de imágenes cargadas por el usuario.

En el presente documento se detalla todo el procedimiento para realizar la transformación de espectros RMN heteronucleares a espectros homonucleares, donde, las imágenes cargadas al sitio web por el usuario son convertidas a matrices numéricas, luego se realiza una serie de operaciones numéricas a las matrices, el resultado final es una matriz numérica de un espectro homonuclear. Por último, esta matriz se deconvoluciona a una imagen, teniendo como resultado un espectro homonuclear.

El Laboratorio de Química Computacional del Departamento de Fisicoquímica de la Facultad de Ciencias Químicas y Farmacia de la Universidad de San Carlos de Guatemala, cuenta con un procedimiento manual para realizar la combinación y generación de espectros RMN.

El presente proyecto pretende desarrollar el análisis, diseño y arquitectura de un software que permita automatizar este trabajo manual. Además, la automatización de este procedimiento podrá ser accesible desde cualquier parte del mundo, sin ningún costo para el usuario final.

OBJETIVOS

General

Generar un programa que permita combinar espectros de resonancia magnética nuclear (RMN), heteronuclear para generar espectros homonucleares en el Laboratorio de Química Computacional en la Facultad de Ciencias Químicas y Farmacia de la Universidad de San Carlos de Guatemala.

Específicos

- Cargar imágenes en formato .jpg, .jpeg, .png o .gif, de espectros RMN heteronucleares al sistema web desarrollado por el epesista, de dimensiones no mayores a 2100 x 1500 pixeles y no menores a 300 x 300 pixeles, y tamaño de imagen no mayor a 13 MB.
- Convertir espectros RMN en formato de imagen a matrices numéricas, por medio de algoritmos para conversión de imágenes a matrices, almacenadas en el sistema desarrollado por el epesista.
- Aplicar teoría de grafos a la combinación de espectros RMN convertidos en matrices numéricas, utilizando el algoritmo desarrollado por el epesista para manipular matemáticamente las matrices, obteniendo como resultado una matriz numérica de un espectro homonuclear.
- Decomvolucionar las matrices resultantes, de la combinación de espectros RMN y manipulación matemática, en imágenes, por medio de algoritmos

para conversión de matrices numéricas a imágenes, para mostrar la molécula resultante por medio de la aplicación web desarrollada por el epesista.

INTRODUCCIÓN

El desarrollo de la presente investigación consta de tres capítulos, en ellos se van presentando los temas que la sustentan.

El capítulo uno, es la fase de investigación con el objetivo de obtener información acerca de la institución donde se desarrolló el proyecto. Se investigó acerca de la historia de institución, misión, visión, y las necesidades que esta tiene.

Esta información sirvió para para fundamentar el diseño y arquitectura del proyecto.

El capítulo dos abarca todo lo relacionado con el proyecto, se da una breve descripción del proyecto tomando en cuenta la información obtenida en la fase de investigación, y se detalla el proceso para la selección de las tecnologías y arquitectura a utilizar en el diseño.

Se presenta la solución al proyecto junto con los métodos de planificación para cada actividad que fue desarrollada, se exponen los costos y recursos asociados al desenvolvimiento del proyecto.

El capítulo tres brinda información de la fase de enseñanza aprendizaje, donde se propone una capacitación al usuario final, y se expone el material elaborado para que el producto final pueda ser utilizado por la institución.

1. FASE DE INVESTIGACIÓN

Para poder conocer las principales características del Laboratorio de Química Computacional de la Facultad de Ciencias Químicas y Farmacia de la Universidad de San Carlos de Guatemala se llevó a cabo una fase de investigación. La fase de investigación aportó datos acerca de la institución mencionada anteriormente, tales como la historia, misión, visión, los servicios que realiza y finalmente la necesidad de un software que opere espectros de resonancia magnética nuclear heteronucleares para obtener nuevos espectros homonucleares.

1.1. Antecedentes de la institución

Se presenta una breve descripción de los antecedentes del Laboratorio de Química Computacional de la Facultad de Ciencias Químicas y Farmacia, misión, visión de la institución, los servicios que esta realiza en las diferentes líneas de investigación, y por último, se describen los requerimientos que tiene la institución para realizar el software y la justificación de la creación del software.

1.1.1. Reseña histórica

Fue creado el 20 de marzo de 1990 con el objetivo de coordinar, planificar, supervisar, ejecutar y evaluar las actividades de investigación de la Facultad de Ciencias Químicas y Farmacia. La investigación científica que realiza el sistema de Investigación de la Facultad es coordinada por el Instituto, contando con el apoyo de un Consejo Asesor que representa a cada Escuela o Programa de la Facultad. Así mismo, la Dirección dispone de la Unidad Técnica, Unidad de

Gestión y Vinculación, Unidad de Biometría y Unidad de Apoyo para el cumplimiento de sus funciones.

1.1.2. Misión

Realizar investigación de alto nivel en el área de la Química Teórica y Computacional capaz de generar conocimiento científico y desarrollo tecnológico e innovación y de ser vinculante tanto con la realidad nacional, como con el desarrollo de la Química en general.

1.1.3. Visión

Vincular la investigación de la unidad a la realidad nacional proponiendo alternativas de solución a la problemática nacional mediante la generación de conocimiento científico y desarrollo de nuevas tecnologías.

1.1.4. Servicios que realiza

Entre los servicios que realiza la institución se presentan las siguientes líneas de investigación:

- Complejos de inclusión de supra moléculas para desarrollo de vehículos de fármacos, atrapamiento de moléculas volátiles, reacciones catalizadas y enzimas artificiales.
- Revisión y mejoramiento de algoritmos que involucren cálculos Químico-Computacionales, por medio de Teoría de Pseudoátomos de manera epistemológica y computacional.

- Utilización sistemática y diseño de algoritmos de reconocimiento molecular para predicción de conformaciones de complejos fármaco-Diana, para diseñar nuevos medicamentos o modificar existentes para mejorar su actividad farmacológica.
- Predicción de propiedades físicas y químicas de compuestos orgánicos e inorgánicos, mediante métodos *ab initio*, semi-empíricos, DFT y otros.
- Modelación de propiedades farmacofóricas y derivatización química mediante cálculos iterativos.

1.2. Descripción de las necesidades

En la actualidad el único mecanismo para obtener espectros RMN homonucleares es a través de un experimento que requiere muchas horas de trabajo del equipo RMN consumiendo significativas cantidades de nitrógeno líquido, electricidad y tiempo. Por otro lado, los espectros de correlación heteronuclear se obtienen relativamente en poco tiempo por lo que se ha diseñado un algoritmo que permite combinar espectros heteronucleares para generar teóricamente espectros homonucleares.

Estando ya la matemática desarrollada se necesita de un programa que automatice los procesos. Se detallan los requerimientos de la institución para el desarrollo del software:

- Convertir un espectro de resonancia magnética nuclear digitalizado a una matriz numérica según la intensidad de átomos vecinos representados en la imagen de resonancia magnética nuclear.

- Manipular matemáticamente una matriz numérica resultado de espectros de resonancia magnética nuclear, para obtener un mapa de conectividades atómicas dentro de una molécula nueva y desconocida.
- Convertir una matriz numérica a una imagen representando moléculas nuevas y desconocidas.
- Subir imágenes de resonancia magnética nuclear a un sitio web para ser analizadas.
- Colocar el sistema de conversión de resonancia magnética nuclear en un proveedor de servicios en la nube.
- Publicar comentarios en el sitio web acerca del funcionamiento y posibles usos del resultado obtenido del sistema de conversión de resonancia magnética nuclear.

1.3. Justificación

Este estudio permitirá la automatización de un proceso manual que puede ayudar a descubrir nuevos espectros homonucleares, y los resultados de esta investigación podrán ser utilizados por investigadores, docentes, estudiantes de universidades, hospitales, entidades gubernamentales y no gubernamentales de cualquier parte del mundo.

Por otro lado, el estudio ayudará a evitar errores manuales y a optimizar el tiempo del procedimiento, limitando el tamaño de imágenes para optimizar el tiempo de procesamiento y mejorar la experiencia del usuario. Para optimizar el

rendimiento del servidor, las imágenes serán almacenadas por un tiempo de 7 días y después eliminadas.

La investigación podrá aportar elementos tales como el descubrimiento de nuevos tratamientos para el cáncer, nuevos antibióticos, moléculas que son desconocidas, nuevas aplicaciones, polímeros para plásticos, moléculas del medio interestelar, productos naturales aislados de plantas, organismos marinos, entre otros, y los elementos aportados son de interés para el usuario.

2. FASE TÉCNICO PROFESIONAL

En este apartado se describen los criterios técnicos utilizados para el diseño de la arquitectura y el desarrollo del proyecto, se detallan los costos involucrados, y los beneficios obtenidos de la ejecución del proyecto.

2.1. Descripción del proyecto

Para el proyecto se definió una arquitectura y se desarrolló un sistema que cumpla con los siguientes requerimientos de la parte interesada:

- Convertir un espectro de resonancia magnética nuclear digitalizado a una matriz numérica según la intensidad de átomos vecinos representados en la imagen de resonancia magnética nuclear.
- Manipular matemáticamente una matriz numérica resultado de espectros de resonancia magnética nuclear, para obtener un mapa de conectividades atómicas dentro de una molécula nueva y desconocida.
- Convertir una matriz numérica a una imagen representando moléculas nuevas y desconocidas.
- Subir imágenes de resonancia magnética nuclear a un sitio web para ser analizadas.

- Colocar el sistema de conversión de resonancia magnética nuclear en un proveedor de servicios de la nube.
- Publicar comentarios en el sitio web acerca del funcionamiento y posibles usos del resultado obtenido del sistema de conversión de resonancia magnética nuclear.
- Además, el sistema deberá contar con módulos de autenticación y de reportería.

2.2. Investigación preliminar para la solución del proyecto

Para el desarrollo del proyecto, se realizaron varias investigaciones de conceptos como la combinación matricial de espectros de resonancia magnética nuclear, resonancia magnética nuclear, metodologías de desarrollo, manipulación de imágenes y arquitectura de software. Las investigaciones mencionadas anteriormente aportarían a la solución del proyecto.

2.2.1. Resonancia magnética nuclear

Una espectroscopía de resonancia magnética nuclear (RMN), es una herramienta de determinación estructural para la química orgánica. Mediante el RMN se puede analizar núcleos de elementos de Hidrógeno, Carbono-13, Nitrógeno-15, Fósforo, -31 entre otros. Los más utilizados en la química orgánica son el hidrógeno y el carbono-13, los cuales son los principales componentes de las moléculas orgánicas.

Los espectros RMN de correlación ayudan a establecer la relación posicional y espacial entre dos átomos de una molécula, además son de gran ayuda para establecer una estructura inequívoca de una molécula.

2.2.2. Metodologías de desarrollo

Las metodologías de desarrollo son métodos y técnicas utilizadas para el diseño y creación de un software cuyo objetivo es organizar la forma en que se crea un software de una manera óptima, de esta forma, se reduce la dificultad de la programación de la aplicación, se organizan las tareas y procesos.

2.2.2.1. Metodología ágil

En el desarrollo de software, se refiere a metodologías de desarrollo basadas en el desarrollo iterativo, donde los requerimientos y soluciones van evolucionando debido a la colaboración entre equipos organizados y multi-funcionales.

Los procesos o métodos ágiles generalmente promueven en los procesos de gestión de proyectos, alentar la inspección y adaptación frecuente, una filosofía que alienta al trabajo en equipo, autoorganización y responsabilidades, un conjunto de buenas prácticas de ingeniería, para permitir una entrega rápida y de buena calidad de software, también provee un enfoque de negocio que alinea el desarrollo de software con las necesidades del cliente y los objetivos de la compañía.

En general, el desarrollo ágil se refiere a cualquier proceso de desarrollo que esté alineado con los conceptos del Manifiesto Ágil, el cual indica que enfoques funcionan y cuales no funcionan para el desarrollo de software.

2.2.3. Procesamiento de imágenes

El procesamiento de imágenes se define como un flujo donde el inicio es la lectura de una imagen, el resultado después es procesada utilizando operaciones de bajo o alto nivel. Las operaciones de bajo nivel operan en píxeles individuales. Dichas operaciones incluyen el filtrado, morfología, umbralización, entre otros.

Por otro lado, las operaciones de alto nivel incluyen comprensión de la imagen, reconocimiento de patrones, entre otros. Una vez procesadas las imágenes, estas son guardadas en disco o pueden ser visualizadas. La visualización puede ser realizada durante el procesamiento también.

2.2.4. Arquitectura de software

La arquitectura de software se refiere a las estructuras o componentes fundamentales de un sistema de software, a la creación de las estructuras y sistemas. Cada componente es formado por elementos y relaciones entre ellos, además de las propiedades entre esos elementos y relaciones, como la interacción entre cada elemento.

La arquitectura de software es un modelo del sistema, provee abstracción para poder comprender la complejidad de un sistema, establecer mecanismos de comunicación e interacción entre los componentes.

El objetivo principal de la arquitectura de software es identificar los requerimientos que puedan afectar la estructura de un software.

2.2.4.1. Bases de datos relacionales

Una base de datos es una colección organizada de información estructurada o de datos, generalmente almacenadas en un sistema computacional. Una base de datos es controlada por un sistema gestor de base de datos (DBMS). Junto con los datos y el DBMS, es referido como un sistema de base de datos, normalmente llamado como base de datos.

Usualmente, los datos en una base de datos, son modelados como filas y columnas en una serie de tablas para que el procesamiento y consulta de datos sea eficiente. La información entonces puede ser fácilmente accesada, administrada, manejada, modificada, actualizada, controlada y organizada.

La mayoría de bases de datos utilizan el lenguaje de consultas o SQL (Structured Query Language), por sus siglas en inglés, para escribir y consultar información.

Una base de datos relacional es un tipo de base de datos que almacena y provee acceso a los puntos de información que están relacionados con otro. Las bases de datos relacionales están basados en el modelo relacional, un modelo intuitivo y simple de representar los datos en tablas.

En una base de datos relacional, cada fila en la tabla es un registro con un identificador único llamado llave. Por otro lado, las columnas de la tabla contienen atributos de los datos, y, cada registro usualmente tiene un valor para cada atributo de la información, de esta manera se consigue realizar de forma fácil una relación entre los puntos de la información.

2.2.5. Arquitectura de aplicación

Una arquitectura de aplicación define los patrones y técnicas a utilizar para desarrollar y diseñar aplicaciones. Además, provee de planificación y prácticas recomendadas al momento de diseñar la aplicación y como resultado obtener una aplicación bien estructurada. Los patrones de diseño son soluciones replicables a cierto problema y ayudan a diseñar la aplicación.

2.2.5.1. Arquitectura Web

En la arquitectura web hay servicios de *frontend* y *backend*. El servicio *frontend* se refiere a la experiencia del usuario con la aplicación, el *backend* se refiere a proporcionar acceso a los datos, servicios y otros sistemas que permiten que la aplicación funcione.

La arquitectura web está compuesta por tres componentes, un servidor web, un cliente (navegador), y conexión a internet. El servidor web proporciona vistas con la información que el cliente solicita por medio de una conexión a internet.

2.2.5.2. Diseño responsivo

El diseño responsivo es un enfoque del diseño web que permite que el contenido de una aplicación web se adapte a las diferentes pantallas y tamaños de una gran variedad de dispositivos. El diseño responsivo permite entregar varias capas separadas del contenido web a varios dispositivos dependiendo del tamaño de la pantalla sin afectar la experiencia del usuario.

2.2.5.3. Patrón Modelo-Vista-Controlador

El patrón de arquitectura Modelo-Vista-Controlador (MVC), es un patrón de diseño utilizado para desacoplar la interfaz del usuario (vista), datos (modelo), y lógica de aplicación (controlador). Al utilizar el patrón MVC en aplicaciones web, las peticiones son ruteadas a un controlador, el cual es responsable de trabajar con el modelo para realizar ciertas acciones u obtener información. Luego el controlador elige la vista para ser mostrada y la provee con el modelo, la vista renderiza la página final basada en la información del modelo.

2.2.6. Ingeniería de software

El software es un elemento lógico de los sistemas de información, un conjunto de instrucciones o programas de ordenadores que cuando son ejecutados proveen resultados deseados, funcionalidades y rendimiento. Proveen estructuras de datos que permiten a los programas manipular la información adecuadamente e información descriptiva de forma virtual y física que describen la operación y uso de los programas.

2.2.6.1. Software de Ingeniería/Científico

Es uno de los siete dominios de aplicaciones de software en las categorías de software de computadoras. El software de ingeniería/científico se resume en un conjunto de programas que realizan cálculo de números, que abarcan desde astronomía a vulcanología, análisis de estrés automotriz a dinámicas orbitales, de diseño asistido por el ordenador a biología molecular y análisis genético hasta meteorología. En pocas palabras, es software que realiza operaciones numéricas que puede aportar a cualquier área de la ciencia.

2.3. Presentación de la solución del proyecto

La solución del proyecto está conformada por un conjunto de sistemas de software, reducidos a componentes de sistemas de software, con los procedimientos necesarios para lograr los objetivos de los requerimientos de la parte interesada y los usuarios finales. Se presenta el detalle de cada componente de la solución.

2.3.1. Software del sistema

El diseño del software del sistema expone un alto nivel de abstracción de la solución y describe tanto las aplicaciones como el almacenamiento de datos, utilizados en la solución de tipo científico.

2.3.1.1. Servidor web de aplicaciones

En servidor web de aplicaciones se encuentran las funcionalidades necesarias para cumplir con los requerimientos de la parte interesada.

2.3.1.1.1. Gestión de usuarios

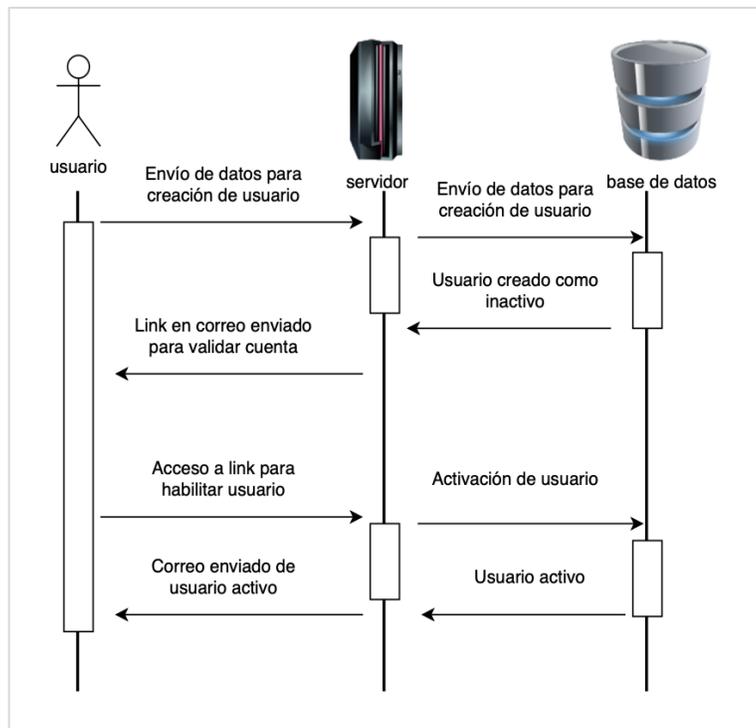
La gestión de usuarios en el sistema incluye operaciones como la creación de usuarios y reinicio de contraseña para que el software pueda ser utilizado.

Para la creación de un usuario se debe de ingresar los siguientes datos: identificador de usuario, correo electrónico, país originario, una contraseña no menor a 8 caracteres que incluyan al menos un carácter en minúscula, en mayúscula, un número y un carácter especial para que sea válido el registro.

Deberá ingresar un código Captcha para poder validar la cuenta, y posteriormente se le enviará un correo para que pueda activar la nueva cuenta.

En la siguiente figura se muestra el flujo de esta operación:

Figura 1. **Diagrama de interacción para funcionalidad de gestión de usuarios**



Fuente: elaboración propia, realizado con draw.io.

Por otro lado, para el reinicio de contraseña únicamente es necesario el correo del usuario, luego, un correo para que reestablezca la contraseña será enviado al correo registrado del usuario.

A continuación, se presenta el flujo para el reinicio de contraseña.

Figura 2. **Diagrama de interacción para funcionalidad de reinicio de contraseña**



Fuente: elaboración propia, realizado con draw.io.

2.3.1.1.2. Gestión de comentarios

El sistema permite realizar comentarios acerca del uso que se le dará al resultado obtenido por el sistema, y opiniones acerca del funcionamiento de este. Esto con el objetivo de poder tener retroalimentación de los usuarios finales y así mejorar el servicio brindado por el software.

2.3.1.1.3. Procesamiento de imágenes

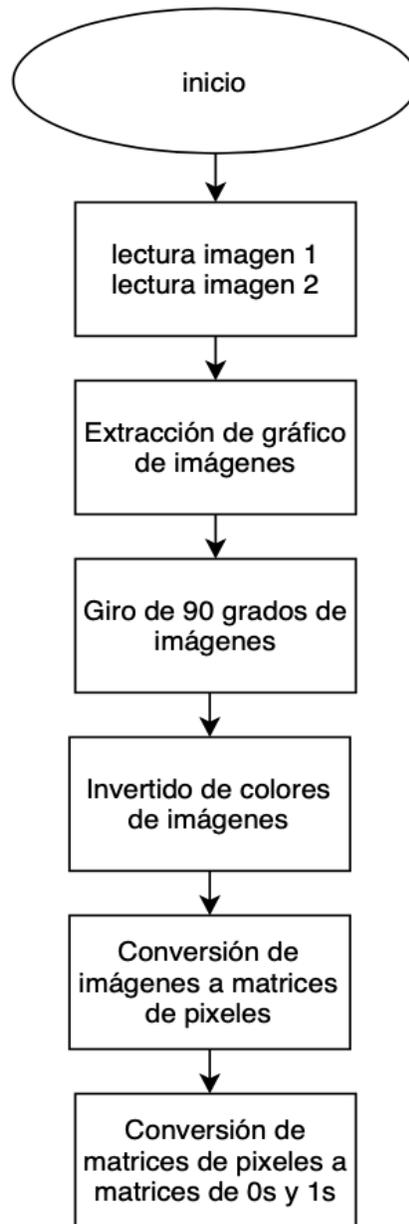
El servidor web de aplicaciones es el encargado de realizar el procesamiento de imágenes cargadas al usuario.

Se utilizaron librerías de Python para la transformación de imágenes a matrices numéricas, operación de matrices numéricas y transformación de matrices numéricas a imágenes.

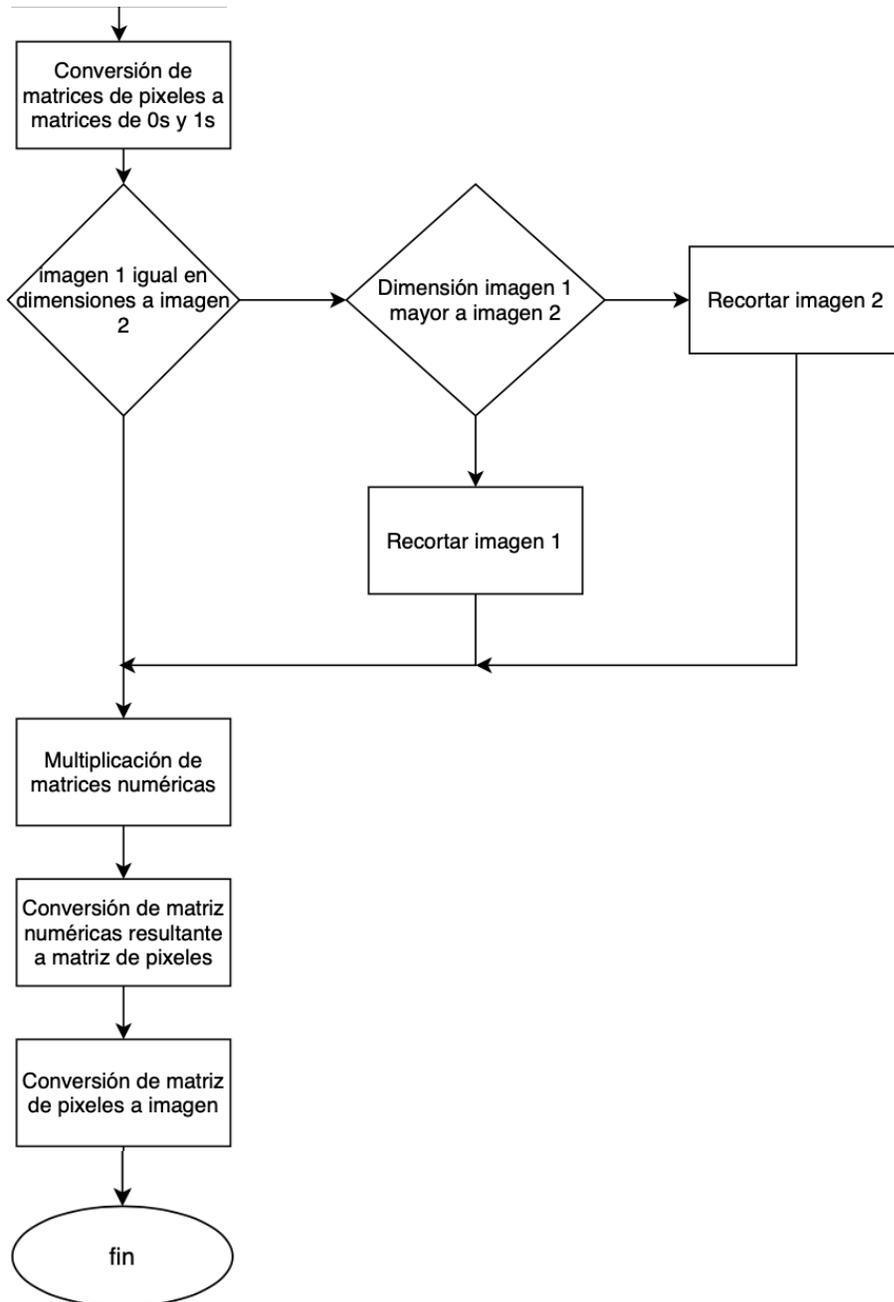
Las imágenes presentadas en la sección de Anexos fueron utilizadas como ejemplo de pruebas, siendo así las operaciones de multiplicación de matrices de imágenes H-H COSY x HMQC, H-H COSY² y H-H COSY² x HMBC.

El flujo en la imagen abajo muestra todo el procedimiento que realiza el servidor web para poder procesar las imágenes cargadas y obtener el resultado final.

Figura 3. Diagrama de flujo de operación de imágenes RMN



Continuación figura 3.



Fuente: elaboración propia, realizado con draw.io.

2.3.1.2. Cliente web

En el cliente web, el usuario final logra utilizar las funcionalidades presentadas en la sección del servidor web de aplicaciones. El cliente web es el encargado de realizar la comunicación con el usuario final y el servidor web.

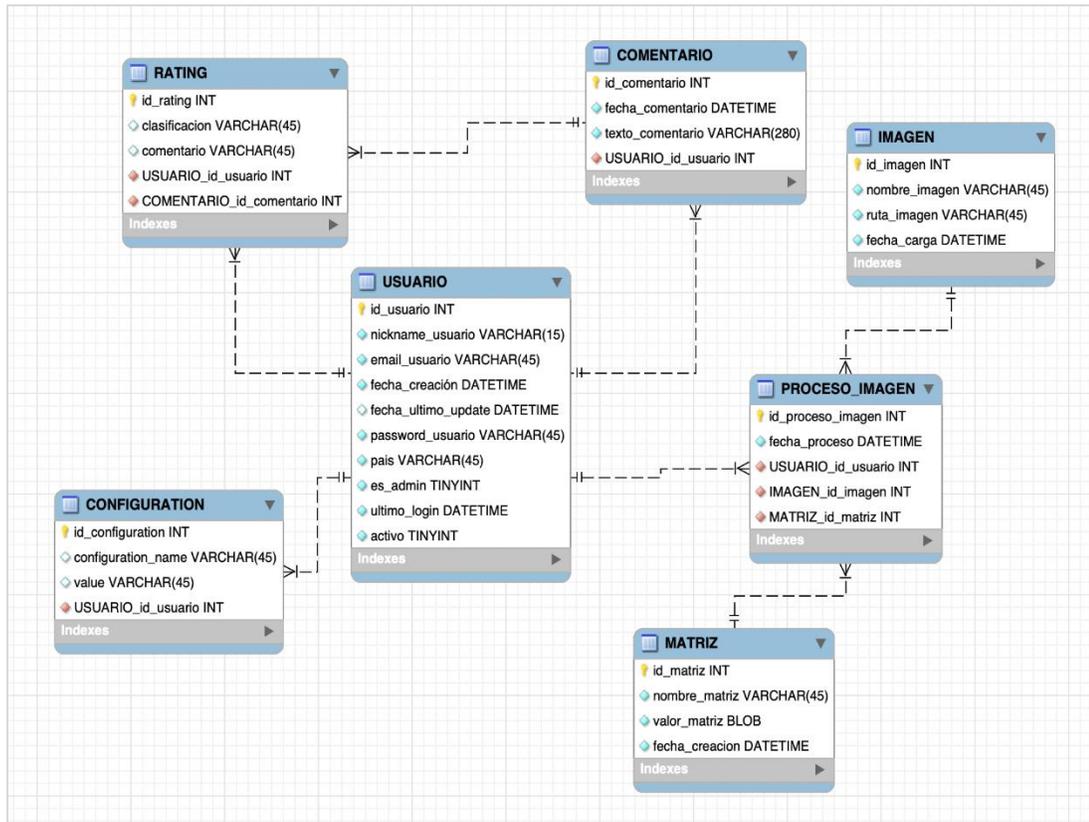
Desde el cliente web el usuario carga las imágenes a ser procesadas, así como descargar un reporte del procedimiento realizado como archivo pdf y el resultado final como una imagen .jpg.

Si el cliente tiene el rol de administrador podrá ver los reportes generados por el componente de reportería que se menciona en el siguiente sub-capítulo.

2.3.1.3. Base de datos

El siguiente diagrama de Entidad Relación fue el modelo utilizado para la construcción de la base de datos de manera que el software convertidor de RMN pueda almacenar todas las estructuras y datos necesarios para el funcionamiento requerido.

Figura 4. Diagrama de Entidad-Relación utilizada para la base de datos de la aplicación

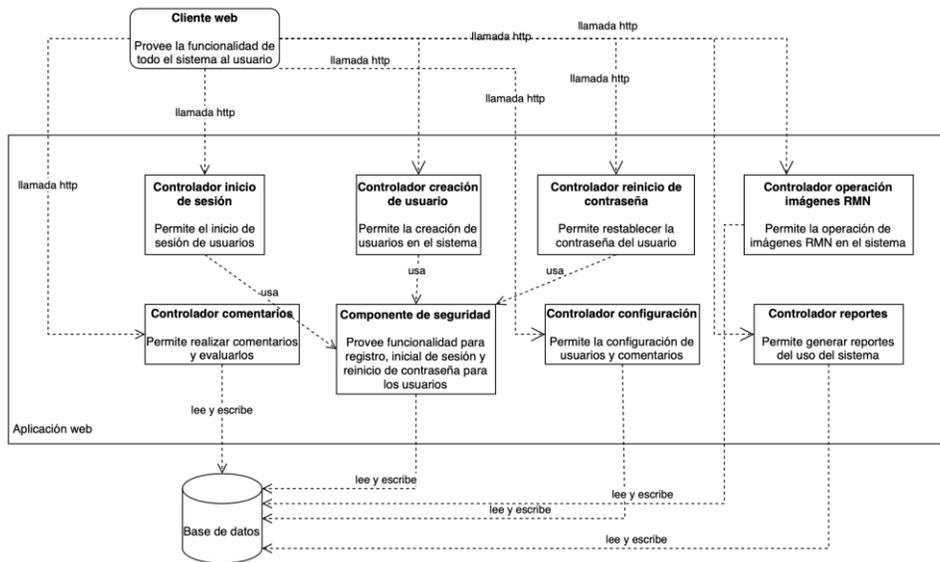


Fuente: elaboración propia, realizado con MySQL Workbench.

2.3.2. Componentes del sistema

En el siguiente diagrama se indican los componentes que conforman el sistema, y se identifica la interacción, responsabilidades y los detalles de implementación para cada componente que se desarrolló para el sistema.

Figura 5. Diagrama de componentes para el sistema



Fuente: elaboración propia, realizado con draw.io.

2.4. Planificación del proyecto

En la planificación del proyecto se utilizó la metodología ágil Scrum. Para ello, se estimó el tiempo de desarrollo de cada componente diseñado del sistema, detallando cada actividad necesaria para el desarrollo de los componentes. Dichas actividades fueron colocadas dentro de ciclos de entrega de una semana, es decir, a cada semana se realizaba la entrega de software que fuera de utilidad para la parte interesada.

Luego de la semana de entrega se revisaba la funcionalidad del software junto con las partes interesadas, en donde se discutía si el desarrollo entregado cumplía con los requerimientos indicados, si no era el resultado esperado o si era

posible realizar mejoras o cambios. Los cambios y mejoras fueron agregados como una nueva actividad en cada ciclo de entrega.

La adopción de esta metodología de desarrollo aportó a entregas de software funcionales a la parte interesada debido a la retroalimentación continua, y ayudó a priorizar las actividades para poder entregar un software de calidad basado en las necesidades de la parte interesada.

2.5. Costos del proyecto

Para que el desarrollo del proyecto se llevara a cabo, se utilizaron los recursos humanos y materiales indicados en el apéndice 1. En el apéndice 2 se detalla los costos para dichos recursos.

2.6. Beneficios del proyecto

Se detallan los beneficios del proyecto:

- Se obtuvo un sitio web para verificar la teoría de operaciones con matrices numéricas a partir de espectros de correlación RMN.
- Se realizó la automatización del procedimiento de generación de espectros de correlación RMN.
- Las personas interesadas en la generación de espectros de correlación RMN podrán tener acceso desde cualquier parte del mundo.
- Nuevas moléculas de interés al usuario serán descubiertas.

3. FASE DE ENSEÑANZA Y APRENDIZAJE

Para la fase de enseñanza y aprendizaje se tomó la decisión de realizar video tutoriales demostrando el uso de la aplicación, arquitectura, y de detalles técnicos. La decisión fue tomada basada debido a que de esa forma sería más fácil el acceso a la información para diferentes grupos sociales. Dichos videos fueron compartidos con la entidad que luego serán publicados en alguna plataforma de streaming.

3.1. Capacitación propuesta

La propuesta sobre como capacitar a los usuarios y administradores del software desarrollado, se definió una capacitación con videotutoriales.

3.1.1. Videotutoriales

Para que los usuarios finales tengan el conocimiento necesario para el uso de la aplicación, se realizó una serie de video tutoriales donde se demuestra cómo utilizar el sistema por cada caso de uso. La utilización del sistema por caso de uso fue demostrada paso a paso en los videos tutoriales y los resultados esperados.

Se realizó una breve explicación del proceso de operación de las imágenes explicando paso a paso los resultados obtenidos de las operaciones de matrices. Con esto, el usuario podrá tener un mejor conocimiento del funcionamiento del software.

La capacitación por medio de video tutoriales fue de gran ayuda para poder optimizar el tiempo de capacitación y reducir la curva de aprendizaje del uso del software ya que el usuario podrá ver los videos la cantidad que considere necesaria para poder utilizar el software.

Por otro lado, los video tutoriales pueden ser compartidos a nuevos usuarios para capacitarse en el uso de la aplicación y con la opción a realizarlo desde cualquier parte del mundo.

3.2. Material elaborado

Se elaboró material para que la parte interesada conociera el funcionamiento del software, las funcionalidades que tiene el software y, las diferentes opciones que se tiene para realizar modificaciones al código del software.

Los materiales elaborados fueron videotutoriales con cada caso de uso del software y manuales sobre el funcionamiento de la aplicación.

3.2.1. Manual técnico

El manual técnico es un documento que contiene información acerca de la aplicación relacionado a configuración, lógica de funcionamiento y mantenimiento del software.

El manual técnico va dirigido a personas con conocimiento de desarrollo de software para que, en un futuro, si se desee modificar la aplicación, se tenga una orientación de cómo está estructurado el software.

3.2.2. Videos

Los videos elaborados son video tutoriales que muestran paso a paso como se debe utilizar la aplicación, entre los videos elaborados se encuentran los siguientes:

- Video de creación de usuario
- Video de reinicio de contraseña
- Video de carga de imágenes
- Video de procesamiento de imágenes
- Video de descarga de resultados
- Video de gestión de usuarios
- Video de gestión de comentarios
- Video de pantalla de comentarios

CONCLUSIONES

1. Se construyó un programa web que logra combinar espectros de resonancia magnética nuclear (RMN), heteronuclear para generar espectros homonucleares en el Laboratorio de Química Computacional en la Facultad de Ciencias Químicas y Farmacia de la Universidad de San Carlos de Guatemala.
2. El sistema desarrollado permite cargar imágenes de espectros RMN en formato .jpg, .jpeg, .png o .gif de dimensiones no mayores a 2100 x 1500 pixeles y no menores a 300 x 300 pixeles, y no mayores a 13 MB. Las imágenes se almacenan en el software desarrollado y son eliminadas.
3. Este trabajo de E.P. S permite la conversión imágenes de espectros RMN a matrices numéricas utilizando algoritmos de manipulación de imágenes, algoritmos matemáticos y librerías de software para manipulación de imágenes, y estas son almacenadas en el sistema desarrollado en formato .jpg.
4. Este trabajo de E.P.S utiliza la teoría de grafos para la combinación de espectros RMN convertidos en matrices numéricas, fue esencial para la manipulación de matrices y como resultado se obtuvo matrices numéricas de un espectro homonuclear.
5. Las imágenes deconvolucionadas a través de algoritmos para conversión de matrices numéricas a imágenes, fue de éxito y se logró mostrar la molécula resultante en la aplicación web desarrollada.

RECOMENDACIONES

1. Incrementar las dimensiones aceptadas para carga de imágenes, y el tamaño, debido a que conforme avanza la tecnología, las imágenes podrían incrementar en dimensiones, de ser así el sistema no podrá aceptar imágenes de ese tipo.
2. Expandir la funcionalidad de la aplicación web, incluyendo la carga de imágenes a color, y el procesamiento de transformación a matriz numérica, para que más usuarios puedan utilizar la aplicación web desarrollada.
3. Evolucionar a otro tipo de imágenes, investigando que otras áreas de estudio podrían hacer uso de este procedimiento.
4. Divulgar en el ambiente académico la aplicación para que pueda ser explotada.

REFERENCIAS

1. Duó, M. (20 de septiembre de 2022). The Beginner's Guide to Responsive Web Design (Code Samples & Layout Examples) [Mensaje en un blog]. Recuperado de <https://kinsta.com/blog/responsive-web-design/>
2. Fuhrt, B. (2010). *Hanbook of Cloud Computing*. Nueva York, Estados Unidos: Springer.
3. Oracle. (2022). *What is a database?* Estados Unidos: Oracle. Recuperado de <https://www.oracle.com/database/what-is-database/>.
4. Sen, J. (2017). *Cloud Computing Architecture and Applications*. Londres, Inglaterra: IntechOpen.
5. Smith, S. (27 de septiembre de 2022). Overview of MVC [Mensaje en un blog]. Recuperado de https://docs.microsoft.com/en-us/aspnet/core/mvc/overview?WT.mc_id=dotnet-35129-website&view=aspnetcore-5.0.
6. Vásquez, A. A. (2004). *Propuesta de un generador teórico de espectros de correlación rmn homonuclear de 13c*. (Tesis de licenciatura). Universidad de San Carlos de Guatemala, Guatemala. Recuperado de <https://biblioteca-farmacia.usac.edu.gt/Tesis/Q160.pdf>.

7. Williams S, V. (2018). *Django for APIs*. Boston, Estados Unidos: WelcomeToCode.

APÉNDICES

Apéndice 1. Recursos humanos y materiales para el desarrollo del proyecto

Recursos	Cantidad
Desarrollador	607 horas
Asesor Facultad Ingeniería	144 horas
Asesor institución	72 horas
Usuarios finales	12 horas
Ordenador portátil	1
Conexión a internet	607 horas
Local	607 horas
Energía eléctrica	607 horas
Micrófono	1

Fuente: elaboración propia.

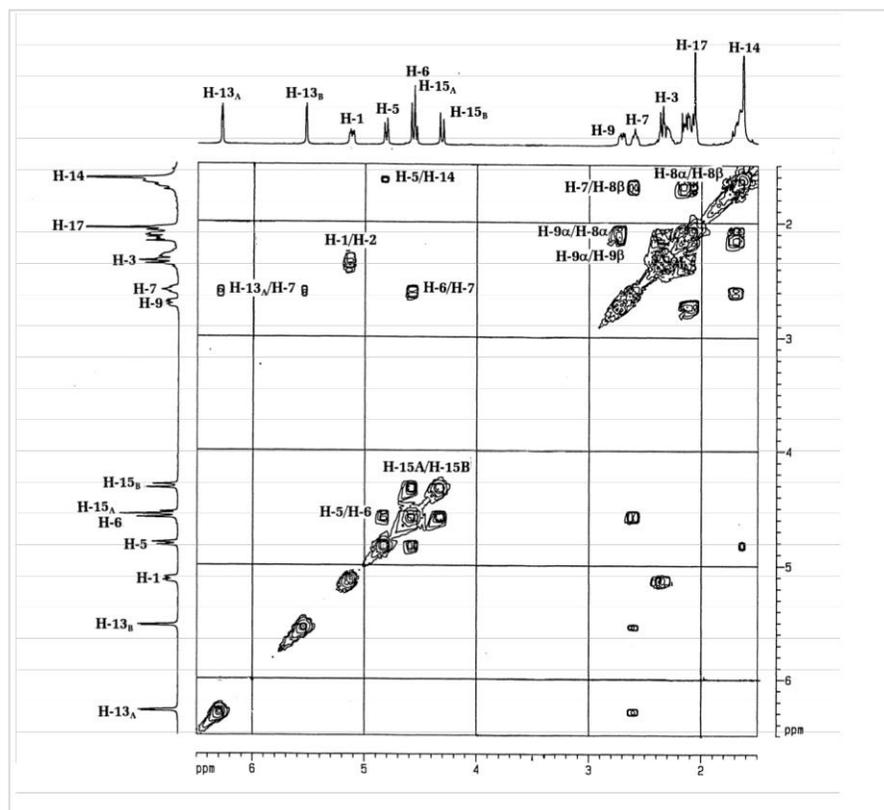
Apéndice 2. **Costo de por recurso para el desarrollo del proyecto**

Recursos	Costo unitario	Subtotal
Desarrollador	Q. 76.25	Q. 46,283.75
Asesor Facultad Ingeniería	Q. 500.00	Q. 72,000.00
Asesor institución	Q. 500.00	Q. 36,000.00
Usuarios finales	0	0
Ordenador portátil	Q. 10,000.00	Q. 10,000.00
Conexión a internet	Q. 0.62	Q. 376.34
Local	Q. 7.63	Q. 4,636.80
Energía eléctrica	Q. 0.41	Q. 248.87
Micrófono	Q. 250.00	Q. 250.00
Total		Q.169,795.30

Fuente: elaboración propia.

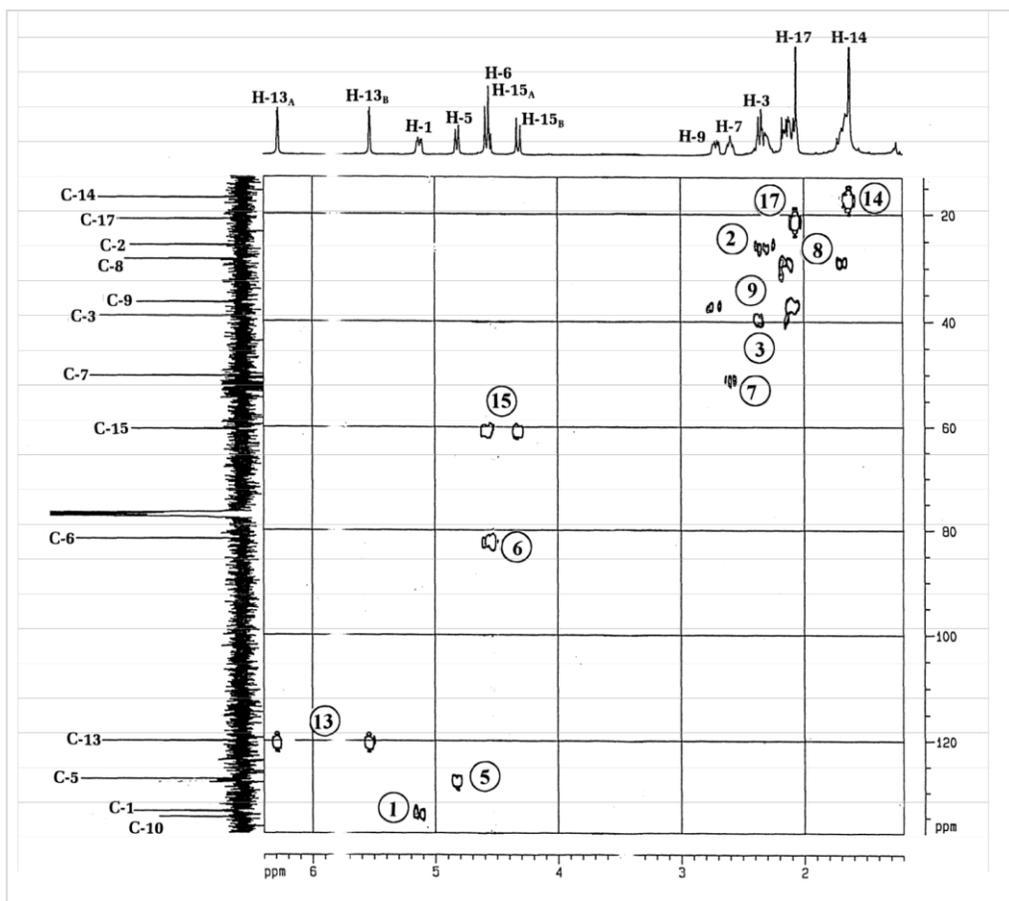
ANEXOS

Anexo 1. Imagen de prueba HHCosY



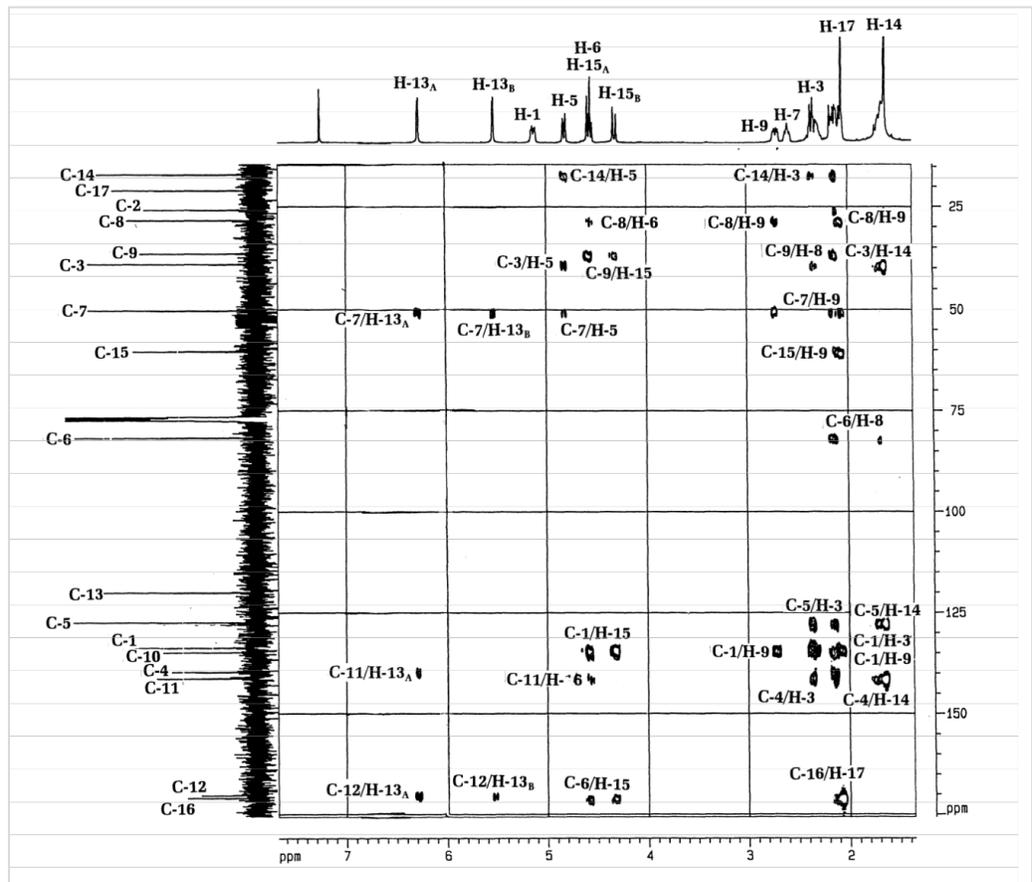
Fuente: Vásquez, A.A. (2004). *Propuesta de un generador teórico de espectros de correlación rmn homonuclear de ^{13}C* . Consultado el 28 de septiembre de 2021. Recuperado de <https://biblioteca-farmacia.usac.edu.gt/Tesis/Q160.pdf> 58.

Anexo 2. Imagen de prueba HMQC



Fuente: Vásquez, A.A. (2004). *Propuesta de un generador teórico de espectros de correlación rnm homonuclear de ¹³C*. Consultado el 28 de septiembre de 2021. Recuperado de <https://biblioteca-farmacia.usac.edu.gt/Tesis/Q160.pdf> 58.

Anexo 3. Imagen de prueba HMBC



Fuente: Vásquez, A.A. (2004). *Propuesta de un generador teórico de espectros de correlación rmn homonuclear de ¹³C*. Consultado el 28 de septiembre de 2021. Recuperado de <https://biblioteca-farmacia.usac.edu.gt/Tesis/Q160.pdf> 58.