

UNIVERSIDAD DE LAS CIENCIAS INFORMÁTICAS



FACULTAD 5

REPRESENTACIÓN GRÁFICA DE ÍNDICES TOPOGRÁFICOS HÍBRIDOS PARA ÁTOMOS

Trabajo de Diploma para optar por el título de Ingeniero en Ciencias Informáticas

Autor: Alvaro Luis Maceo Pixa

Tutor: Dr. Ramón Carrasco Velar

Co-Tutor: Ing. Luis Guillermo Silva

Co-Tutor: Ing. Rubén Alcolea Núñez

La Habana, junio 2012

FRASE

“Que escriban, pues la historia, su historia, los hombres, del Playa Girón”.

Silvio Rodríguez

DECLARACIÓN DE AUTORÍA

Declaro ser autor de la presente tesis y reconozco a la Universidad de las Ciencias Informáticas los derechos patrimoniales de la misma, con carácter exclusivo.

Para que así conste firmo la presente a los ____ días del mes de _____ del año 2012.

Firma del Autor
Alvaro Luis Maceo Pixa.

Firma del Tutor
Dr. Ramón Carrasco Velar.

DATOS DE CONTACTO

Tutor: Dr. Ramón Carrasco Velar.

Edad: 66.

Ciudadanía: Cubano.

Institución: Universidad de las Ciencias Informáticas (UCI).

Título: Dr. Ciencias Químicas

Categoría Docente: Auxiliar

E-mail: rcarrasco@uci.cu

Co-Tutor: Ing. Luis Guillermo Silva Rojas

Edad: 24.

Ciudadanía: Cubano.

Institución: Universidad de las Ciencias Informáticas (UCI).

Título: Ingeniero en Ciencias Informáticas.

E-mail: lgsilva@uci.cu

Graduado de la UCI, con cuatro años de experiencia en el tema de la Gráfica Computacional y líder de un proyecto de Realidad Virtual en la Universidad de las Ciencias Informáticas.

Co-Tutor: Ing. Rubén Alcolea Núñez

Edad: 24.

Ciudadanía: Cubano.

Institución: Universidad de las Ciencias Informáticas (UCI).

Título: Ingeniero en Ciencias Informáticas.

E-mail: ralcolea@uci.cu

Graduado de la UCI, con cuatro años de experiencia en el tema de la Gráfica Computacional

AGRADECIMIENTOS

Aunque este es un momento cumbre, no es el fin, este es el comienzo del futuro, las palabras no alcanzarían para agradecerle a todos aquellos que de una forma u otra han influido no solo en el desarrollo de este trabajo sino además en mi carrera a lo largo de estos diecinueve años de estudio, a todos aquellos compañeros de aula, que de todos ellos aprendí algo para la vida, a todos mis maestros, profesores y amigos.

A mis maestros y profesores

Por no solo enseñarme las materias, sino educarme y soportar tantas malcriadeces de muchacho, a ellos, Nurcy, Ilvia, Vicki, Liset, Hilda a todas ellas un agradecimiento especial.

A mis compañeros de tantos años

Luisín, Chamizo, Rolexis, René, Roberto, Elmer, Oslandy (El zurdo), Orlando, Yadira, Lietel, Arianna, Liritza y en especial para Ayleivis, Franklin, Nelsito y Leo.

A mis compañeros de universidad

Para estos amigos no puedo tratarlos tan poético porque somos una familia. Aunque son muchos no puedo dejar de mencionar a amigos como El Tony, y todos los que estuvimos en el 75204, al Migue (Plana), y el resto de los cuatro Fantásticos: Ernesto (El oso), Marcos, y en especial para el DJ Orestes (compañero de lucha), a los sobrevivientes Enrique, Oscar, Arlan, El flotador Leitniz, al baterista Martín, a Tejeda(El bienvenido), a Carlos Pupo, a mis compañeros de aula de todos estos años, a Yanet, Dayana y en especial a Lianet, al Juan Carlos, el Urra, Rubén y especialmente a Yaniel(el enmallado). Y a todos los demás que compartieron conmigo en estos años tan maravillosos.

A mi tutor y co-tutores

Mi tutor ha sido una pieza fundamental para poder realizar este trabajo en un tiempo record, debo agradecerle eternamente toda la ayuda que me ha dado y la confianza que tuvo en mí, a mis co-tutores que además fueron mis compañeros de aula y del proyecto, al Guille no solo agradecerle su ayuda en este trabajo sino también haberme dado las primeras clases en la guitarra.

A mi familia

A mi familia, gracias por forjarme y enseñarme las partes bellas de la vida.

A mi familia venezolana

A Eva, Nairi, mi cabezoncito Dilan, Yane (una más de la familia) y Luis por haberme acogido como uno más de su familia.

Muy especial a Lisete y a Serguey y su bella niña Anna y a toda su familia por haber sido tan maravillosa y especial, siempre será mi familia.

A amigos como Víctor, Vanessa, Germán, Egda, Jeison, Guanipa, Contreras que siempre estarán ahí.

A todas esas maravillosas amistades de mi mamá que me acogieron como a mi madre, para ellas Karina, Edith Luz, Maritza, Noris, Morela, el Sr Héctor.

A Marlene y Yarlens por saber acoger con tanto cariño a ese grupo de cubanos tan alborotados pero de buenos corazones.

Muy muy especial a Lourdes Márquez por estar ahí día a día, en las buenas y en las malas, por ser esa bella persona capaz de mostrarme la vida desde otro punto de vista, eres y serás siempre muy especial para mí.

A mis compañeros de misión.

A mis compañeros UCI Katia, Yune, Diannys, Zamaris, Yordania, Luis, por haber hecho una excelente tropa.

A mi gran tropa del CAT “Rafael Urdaneta”

Ariankis, Sandra, Mayda, Yorgel, Yisandra, Taydi, Lester (sin sustón), Héctor, Sixto, Lili, Espinosa, Gladys, Edith, Giannis, Niubis, Eudis, Nuvia, Idania, Víctor.

Para mi vieja querida, “Mi Gran Tere”, no alcanzan mis palabras, como mi madre en los momentos difíciles y malos, donde la vida no tiene problemas y está llena de felicidad, donde no hay espacio para los malos momentos y las malas caras, ¡GRACIAS GRACIAS GRACIAS!, ya no eres otra cosa para mí que mi segunda madre. Siempre seguiremos en combate como los hombres del playa girón.

A mi guitarra

Por ser esa guitarra del joven soldado, que no duerme si no lo hago, eres mi mejor fusil.

DEDICATORIA

Para mi bella familia:

Para lo más bello del mundo “mi hermanita”, que siempre está a mi lado para llamarme “puchi” y darme una gota de alegría, a la viejita más buena del mundo (mi abuelita) que siempre estuvo ahí cuando mi mamá me faltaba, eres la madre de la familia y la que con sus virtudes y defectos nos ha llevado a ser, uno por uno, lo que somos, no seríamos nada sin ti, ¡gracias por existir! A mi madre, ni las palabras y adjetivos podrían describir lo que significas para mí, gracias por darme la vida y seguir adelante en momentos tan difíciles que pasamos, creo que eres el ejemplo a seguir, la constancia, la seriedad, la ejemplaridad trato día a día de ser tu espejo aunque este demasiado lejos, GRACIAS MAMI ¡GRACIAS! , tus hijos te daremos alegría y felicidad te amo. Para Rafelito, padre no es quien hace sino quien da de comer y enseña, cuida, protege da amor y cariño. Para Iris, mi tía de la vida solo te pido algo: “no quiero limpiar más el jardín”. Para Graciela, mi otra tía querida, a pesar de las distancias nunca olvidaré que ahí estabas en todas las crisis... A mis primos Rosy y Popi, ¡Hay Rosa! ¡La gran Rosa!, ¿Popi?, Popi será famoso, recuérdenlo.

23/6/2012

RESUMEN

En este trabajo se presenta la visualización computacional de tres índices topográficos desarrollados en el proyecto Minería de Grafos, el cual se ejecuta en el Centro de Desarrollo de Informática Industrial (CEDIN), con la participación del Centro de Informatización de Seguridad Ciudadana (ISEC) y el Centro de Tecnologías de Gestión de Datos (DATEC). La visualización tridimensional de índices topográficos híbridos de una molécula se realiza por primera vez y posee la característica de la simpleza del método de cálculo y la capacidad de mostrar cómo estos índices revelan las deformaciones de la molécula al ser representados cada uno de ellos. Se ha logrado desarrollar un prototipo de aplicación basado en el procedimiento logrado. Los resultados obtenidos han sido los esperados y constituyen una herramienta, para el análisis estructural de moléculas a partir de las propiedades químico-físicas representadas. Pueden emplearse como instrumento didáctico para la enseñanza de la química y ciencias afines al nivel medio y superior.

Palabras claves: grafos moleculares, índices topográficos, índices híbridos, propiedades químico-físicas.

ÍNDICE

FRASE	I
DECLARACIÓN DE AUTORÍA	II
DATOS DE CONTACTO	III
AGRADECIMIENTOS	V
DEDICATORIA	VII
RESUMEN	VIII
ÍNDICE	IX
ÍNDICE DE FIGURAS	XI
ÍNDICE DE TABLAS	XII
INTRODUCCIÓN	1
Capítulo 1: Fundamentación teórica	4
1.1. Índices híbridos	4
1.2. La visualización	5
1.3. Visualización en la química	7
1.3.1. Visualización molecular 2D.....	8
1.3.2. Visualización molecular 3D.....	9
1.4. Software	10
1.4.1. Discovery Studio.....	11
1.4.2. RasMol	11
1.4.3. PyMol	12
1.4.4. HyperChem	13
1.5. Consideraciones parciales	14
Capítulo 2: solución propuesta	15
2.1. Datos preliminares	15
2.1.1. Ficheros.....	15
2.1.2. Otros datos	15
2.2. Métodos de interpolación:	16
2.2.1. Interpolación Estándar	16
2.2.2. Interpolación lineal.....	17
2.3. Metodologías y herramientas de desarrollo	18
2.3.1. Metodología de Desarrollo de Software	19
2.3.2. Herramientas de desarrollo.....	19
2.3.3. Lenguaje de modelado	20

2.3.4. Lenguaje de programación	21
2.4. ILUMINACIÓN SOBRE GPU.....	21
2.5. Consideraciones parciales.....	21
CAPÍTULO 3: CARACTERÍSTICAS DEL SISTEMA	22
3.1. Reglas del Negocio.....	22
3.2. Modelo de Dominio.....	22
3.3. Captura de Requisitos.....	23
3.3.1. Requisitos Funcionales.....	23
3.3.2. Requisitos no Funcionales.....	24
3.4. Modelo de Casos de Uso.....	25
3.4.1. Actores del Sistema.....	25
3.4.2. Diagrama de Casos de Uso del Sistema.....	26
3.4.3. Descripción de los Casos de Uso del Sistema.....	27
3.5. Patrones de diseño.....	38
3.6. Diseño del Sistema.....	41
3.6.1. Diagrama de Clases del Diseño.....	41
3.6.2. Diagramas de Secuencia del Diseño	43
CAPÍTULO 4: Resultados y discusión	46
4.1. Implementación	46
4.2. Diagrama de componentes	46
4.3. Resultados	47
4.3.1. Interpolación estándar.	50
4.3.2. Interpolación lineal.....	51
4.3.3. Resultados de la iluminación sobre GPU.....	53
CONCLUSIONES.....	56
RECOMENDACIONES.....	57
BIBLIOGRAFÍA.....	58
GLOSARIO DE TÉRMINOS.....	61
ANEXOS.....	62

ÍNDICE DE FIGURAS

<i>FIGURA 1 REPRESENTACIÓN UNA ESTRUCTURA QUÍMICA POR EL MÉTODO DEL TABLERO.</i>	8
FIGURA 2. REPRESENTACIÓN ESQUEMÁTICA DE UNA ESTRUCTURA QUÍMICA.	8
FIGURA 3. A) ALAMBRE. B) CILINDROS Y BOLAS. C) CÍRCULOS SOLAPADOS. D) ESFERAS SOLAPADAS.	9
FIGURA 4. ESFERAS SOLAPADAS CON EFECTOS DE ILUMINACIÓN.	10
FIGURA 5. IMAGEN FORMADA EN EL DISCOVERY STUDIO.	11
FIGURA 6. IMAGEN FORMADA EN EL RASMOL.	12
FIGURA 7. IMAGEN FORMADA EN EL PYMOL.	12
FIGURA 8. IMAGEN FORMADA EN EL HYPERCHEM.	13
FIGURA 9. MODELO DE DOMINIO.	23
FIGURA 10. DIAGRAMA DE CASOS DE USO DEL SISTEMA.	27
FIGURA 11. DIAGRAMA ILUSTRATIVO DEL PATRÓN DE DISEÑO ESTADO.	40
FIGURA 12. DIAGRAMA DE CLASES DEL DISEÑO.	42
FIGURA 13. DIAGRAMA DE SECUENCIA DEL CASO DE USO CARGAR DATOS.	43
FIGURA 14. DIAGRAMA DE SECUENCIA DEL CASO DE USO VISUALIZAR MOLÉCULA SIMPLE.	43
FIGURA 15. DIAGRAMA DE SECUENCIA DEL CASO DE USO VISUALIZAR MOLÉCULA VAN DER WAALS.	44
FIGURA 16. DIAGRAMA DE SECUENCIA DEL CASO DE USO VISUALIZAR ÍNDICES TOPOGRÁFICOS.	44
FIGURA 17. DIAGRAMA DE SECUENCIA DEL CASO DE USO APLICAR NORMALIZACIÓN LINEAL A ÍNDICE TOPOGRÁFICO.	44
FIGURA 18. DIAGRAMA DE SECUENCIA DEL CASO DE USO APLICAR NORMALIZACIÓN ESTÁNDAR A ÍNDICE TOPOGRÁFICO.	45
FIGURA 19. DIAGRAMA DE SECUENCIA DEL CASO DE USO ESCALAR ÍNDICE TOPOGRÁFICO.	45
FIGURA 20. DIAGRAMA DE COMPONENTES.	47
FIGURA 21. REPRESENTACIÓN MOLECULAR SIMPLE.	48
FIGURA 22. REPRESENTACIÓN ATÓMICA DEL RADIO DE VAN DER WAALS.	48
FIGURA 23. REPRESENTACIÓN GRÁFICA DEL ÍNDICE ESTADO ELECTROTOPOGRÁFICO	50
FIGURA 24. REPRESENTACIÓN GRÁFICA DEL ÍNDICE DEL ESTADO REFRACTOTOPOGRÁFICO.	51
FIGURA 25. REPRESENTACIÓN GRÁFICA DEL ÍNDICE DEL ESTADO LIPOTOPOGRÁFICO	51
FIGURA 26. REPRESENTACIÓN GRÁFICA DE LOS TRES ÍNDICES SEGÚN LA EXTRAPOLACIÓN DE LOS RADIOS ENTRE 1-2. A) ELECTROTOPOGRÁFICO B) REFRACTOTOPOGRÁFICO C) LIPOTOPOGRÁFICO	52
FIGURA 27. REPRESENTACIÓN DE LOS ÍNDICES TOPOGRÁFICOS HÍBRIDOS.	53
FIGURA 28. REPRESENTACIÓN GRÁFICA CON NORMALIZACIÓN ESTÁNDAR SOBRE GPU.	54
FIGURA 29. REPRESENTACIÓN GRÁFICA CON NORMALIZACIÓN LINEAL SOBRE GPU. A) ELECTROTOPOGRÁFICO B) LIPOTOPOGRÁFICO C) REFRACTOTOPOGRÁFICO.	54
<i>FIGURA 30 REPRESENTACIÓN DEL ÍNDICE DEL ESTADO ELECTROTOPOGRÁFICO.</i>	55
<i>FIGURA 31. VENTANA PRINCIPAL DE LA APLICACIÓN.</i>	62
<i>FIGURA 32. VISUALIZACIÓN DE UNA MOLÉCULA MEDIANTE SU RADIO DE VAN DER WAALS Y SUS TRES DESCRIPTORES TOPOGRÁFICOS HÍBRIDOS.</i>	63
<i>FIGURA 33. VISUALIZACIÓN DEL MENÚ DE OPCIONES.</i>	64
<i>FIGURA 34. VISUALIZACIÓN DE LAS FUNCIONALIDADES CARGAR Y SALVAR.</i>	65
<i>FIGURA 35. VISUALIZACIÓN DE UNA MOLÉCULA TRANSPARENTE.</i>	66

ÍNDICE DE TABLAS

TABLA 1. ACTORES DEL SISTEMA.....	26
TABLA 2 DESCRIPCIÓN DEL CASO DE USO CARGAR DATOS.	28
TABLA 3. DESCRIPCIÓN DEL CASO DE USO VISUALIZAR MOLÉCULA SIMPLE.....	29
TABLA 4 DESCRIPCIÓN DEL CASO DE USO VISUALIZAR MOLÉCULA VAN DER WAALS.	30
TABLA 5. DESCRIPCIÓN DEL CASO DE USO VISUALIZAR ÍNDICES TOPOGRÁFICOS.	31
TABLA 6. DESCRIPCIÓN DEL CASO DE USO INTERACTUAR CON LA MOLÉCULA.	34
TABLA 7. DESCRIPCIÓN DEL CASO DE USO APLICAR NORMALIZACIÓN LINEAL A ÍNDICE TOPOGRÁFICO.....	35
TABLA 8. DESCRIPCIÓN DEL CASO DE USO APLICAR NORMALIZACIÓN ESTÁNDAR A ÍNDICE TOPOGRÁFICO.....	36
TABLA 9. DESCRIPCIÓN DEL CASO DE USO ESCALAR ÍNDICE TOPOGRÁFICO HIBRIDO.	37
TABLA 10. DESCRIPCIÓN DEL CASO DE USO SALVAR IMAGEN.....	38
TABLA 11. VALORES DE LOS ÍNDICES TOPOGRÁFICOS DE LA MOLÉCULA TOMADA COMO MUESTRA.	49

INTRODUCCIÓN

Con la aparición de los potentes ordenadores y el desarrollo paulatino de la realidad virtual, llegan aparejado con ella los sistemas de visualización para juegos, para la medicina, la economía, la exploración espacial, así como para la creación de laboratorios virtuales para diferentes disciplinas, ya sea con fines experimentales o educativos. En este último aspecto es necesario destacar la importancia que ha tomado la representación gráfica de múltiples experimentos, de ahí que esta ha servido como un medio de comunicación para aquellos profesionales vinculados a las ciencias exactas debido a que las representaciones visuales de los datos son importantes para el análisis e interpretación de los mismos. Además, la visualización resalta las tendencias y patrones que de otra forma pueden no resultar tan evidentes, de ahí que interpretar gráficos y otras formas visuales de representación de los datos resulta clave para el personal dedicado a esta actividad. Una de las ciencias para las cuales las representaciones gráficas han tenido un significado de gran envergadura es la química. La forma visual, incluida la gráfica, es el modo convencional de comunicación de los químicos entre sí. Existen muchos software para el modelado molecular [1], para la mecánica cuántica [2], para la visualización y edición molecular [1], y otras aplicaciones químicas como para la espectroscopia [3] y la cristalografía [4] entre otros. Las moléculas se pueden representar también como la matriz de adyacencia o de distancia de los vértices o las aristas del grafo, entre otras formas de representación matricial. Por el tratamiento relativamente sencillo que esto implica, la teoría de grafos aplicada a la química, o química grafo-teórica, constituye una potente herramienta para la representación esquemática de la estructura química y el establecimiento de relaciones entre la estructura y la propiedad.

La visualización de moléculas y determinadas propiedades químico-físicas asociadas constituye uno de los temas del proyecto Minería de Grafos perteneciente a la Universidad de las Ciencias Informáticas (UCI), siendo desarrollado el mismo en conjunto entre los centros Centro de Desarrollo de Informática Industrial (CEDIN), Centro de Informatización de Seguridad Ciudadana (ISEC) y Centro de Tecnologías de Gestión de Datos (DATEC). En el enfoque de trabajo del proyecto, los vértices del grafo molecular se ponderan con propiedades químico-físicas, moduladas por el valor de índices topográficos híbridos de cada uno de los átomos de la molécula definidos en el propio proyecto, por lo cual es necesario crear un

software capaz de representar gráficamente dichos índices topográficos híbridos para poder revelar gráficamente la diferencia entre átomos de un mismo elemento de la tabla periódica. Los software existentes en el mundo actual no están concebidos para representar este tipo de índices. Al no tenerse información visual de estos valores, resulta difícil percibir las diferencias de comportamiento de las propiedades que reflejan los índices, tanto al nivel de los átomos como de la molécula.

Teniendo en cuenta la situación problemática anterior, se plantea como **problema científico**: ¿Cómo representar gráficamente las posibles distorsiones de la molécula estimadas a partir del valor de estos índices nuevos? De esta manera se define como **objeto de estudio** la visualización de moléculas, y como **objetivo general**: Desarrollar un procedimiento para la visualización tridimensional de índices topográficos híbridos de una molécula orgánica y como **campo de acción** la visualización de grafos moleculares ponderados. Para dar respuesta a los objetivos planteados se realizarán las siguientes **tareas de investigación**:

- Actualización del Estado del Arte en Visualización Molecular.
- Elaborar el marco teórico a partir del estado del arte en Visualización Molecular.
- Seleccionar la metodología, herramientas de software y lenguajes de programación para el desarrollo del procedimiento.
- Desarrollar un procedimiento para la visualización de los índices.
- Implementar los procedimientos de los índices.
- Valorar los efectos gráficos logrados.

Para darle cumplimiento a las tareas de investigación propuestas se hará uso de los métodos científicos de investigación:

Método teórico:

Análisis histórico-lógico: Este método permitirá realizar un análisis de las características y evolución histórica de los diferentes conceptos y herramientas que se usarán en la realización de este trabajo.

Métodos Empíricos:

Observación: Este método se aplicará en distintos momentos del proceso de investigación con el objetivo de evaluar los resultados parciales obtenidos en las distintas fases de la visualización, para así escoger la más apropiada de acuerdo a los resultados esperados.

Aporte y novedad

En el trabajo se presentan por primera vez, de forma visual, tres descriptores topográficos basados en la teoría del grafo químico y en la partición de propiedades químico-físicas sobre cada átomo. Esta herramienta constituye un aporte a la investigación y a la docencia de la química pues permite visualizar, de manera rápida, fenómenos descritos por un nuevo tipo de descriptores atómicos.

CAPÍTULO 1: FUNDAMENTACIÓN TEÓRICA

En este capítulo se realiza un estudio de aspectos relacionados con la Visualización como disciplina científica, se presentan algunos enfoques de análisis y se describen las relaciones que se establecen entre sus ramas fundamentales, se describe su importancia en varias ciencias, especialmente en la Química. Como parte de la descripción del estado de arte se abordarán algunas soluciones existentes alrededor del objeto de estudio como la visualización de moléculas en segunda y tercera dimensión, algunos software existentes en el mundo utilizados como visores de moléculas, sus diferentes formas de representación y modelación de características químico-físicas. Se presentan también los índices topográficos híbridos (ITH) y su modelación.

1.1. Índices híbridos

Para la mejor comprensión del Capítulo es necesario, conocer e identificar algunos términos relacionados con lo que se desea graficar. Esos aspectos son los índices híbridos, que han sido definidos dentro del proyecto y uno estructural reportado previamente.

Los índices topológicos y topográficos constituyen una herramienta ampliamente utilizada en la química medicinal para el establecimiento de relaciones entre la estructura y la propiedad. Existen numerosos programas que los calculan, de los cuales, el más popular es el Dragon [5]. Sin embargo existe otro tipo de índices, denominados híbridos, que poseen contenido de información topográfica y de propiedades químico-físicas los cuales se denominan híbridos por esta razón. Los descriptores topológicos y topográficos clásicos no poseen otra forma de representación gráfica que la típica del grafo. Sin embargo, los descriptores híbridos, poseen la capacidad de brindar información dual (estructural y de propiedad), pueden y deben ser representados visualmente.

¿Cuáles son los descriptores híbridos reportados en la literatura? Se han reportado dos índices de este tipo, el de Partición de la Refractividad Molecular [6] y el Índice del Estado Refractotopológico para Átomos [6]. Éste último ha alcanzado una relativa difusión y demostrado su aplicabilidad en estudios de relación estructura-actividad [5] [6] [7].

En la actualidad están definidos otros índices híbridos que complementan el anterior que les dio origen. Estos son, el Índice del Estado Refractotopográfico para Átomos, el Índice del Estado Lipotopológico para

Átomos y el Índice del Estado Lipotopográfico para Átomos. El reporte de estos trabajos se encuentra en fase de revisión en una revista internacional [8].

Un índice, que aunque no es de naturaleza híbrida está incluido en este trabajo es el Índice del Estado Electrotopográfico para Átomos [9], que es la versión topográfica de su homólogo topológico desarrollado por Kier y Hall [6]. El algoritmo de este último índice es el punto de partida para los índices híbridos que se mencionan. Otra diferencia sustancial entre estos es que los híbridos están basados en la matriz de conectividad del grafo completo [10] y no del grafo desprovisto de hidrógeno, como es usual en los índices topológicos.

1.2. La visualización

A pesar de que la visualización ha estado siempre presente en cualquier esfuerzo que implique comprender, analizar y explicar fenómenos de la vida cotidiana, asociada fundamentalmente con los procesos de abstracción del ser humano, la historia más reciente ha mostrado cómo el acelerado desarrollo tecnológico y computacional ha contribuido a un renacimiento de los gráficos, mediante la generación de múltiples herramientas innovadoras y la aplicación de enfoques provenientes de distintas disciplinas. Estas soluciones se han hecho particularmente atractivas para la educación, entrenamiento y nuevos análisis en distintas ciencias, a partir de la creación de poderosas representaciones de fenómenos científicos y un contenido de información compleja.

La visualización se considera un método informático, que "transforma lo simbólico en lo geométrico", y que estudia además los mecanismos en humanos y computadoras, que les permiten percibir, usar y comunicar la información visual. La tecnología de la visualización se considera vital y altamente prometedora para los procesos científicos. Apoyada por los avances en la computación gráfica, se han desarrollado muchos métodos, técnicas y sistemas. En este sentido, Friedhoff y Benzón (1989) la caracterizaron como la Segunda Revolución de la Computación, porque fue más allá del uso convencional de la computación y se expandió hacia el dominio cognitivo. Como consecuencia del desarrollo tecnológico e informático, el problema de contar con un volumen creciente de información compleja de difícil interpretación sigue vigente, y mantiene a la visualización como un importante recurso y ayuda para solucionarla.

La visualización ha adquirido una importancia creciente en diferentes áreas de aplicación y disciplinas científicas que no puede dejar de considerarse. En ellas tiene el objetivo de lograr una mejor comprensión de los procesos y sus relaciones complejas así como mejorar la interacción hombre-máquina. Este

desarrollo multidisciplinar ha contribuido a la formalización de un campo de investigación distintivo, dedicado a investigar los procesos de visualización, sus reglas y sus principios. [11]

Subcampos de la visualización.

El campo de conocimiento relacionado con la visualización suele clasificarse de acuerdo con un enfoque de aplicación, donde las categorías no son mutuamente excluyentes y tienen fronteras sumamente borrosas y superpuestas. Esto puede deberse en parte a la existencia de objetivos comunes relacionados con la comunicación visual, la presentación y exploración de los datos, conceptos, relaciones y procesos. Las categorías que mayormente se mencionan son:

Visualización científica: destinada a comprender de manera más eficiente los fenómenos físicos a partir de grandes volúmenes de datos. Parte generalmente de datos cuyas variables son intrínsecamente espaciales.

Visualización del software: dirigida a comprender y utilizar el software con efectividad. Comprende dos tipos fundamentales:

las herramientas de visualización de programas (código fuente) —para mantener, comprender, perfeccionar y depurar el software— y los algoritmos de animación, empleados fundamentalmente en la educación para motivar el aprendizaje.

Visualización de información: para identificar patrones, correlaciones o agrupamientos de un volumen grande de información compleja, estructurada o no.

Ahondar en los fundamentos de cada subcampo de la visualización y estudiar las relaciones y sinergias que entre ellos se establecen, podrían ayudar a comprender los alcances y fronteras (todavía difusas) que permiten realizar una distinción de la visualización de la información.

La visualización científica se centra en la visualización de datos científicos no abstractos; sin embargo, no se puede decir que no sea informativa, ni que la visualización de información no sea científica. La distinción de nombres tal vez se relacione con la propia evolución histórica de ambos campos, que delimitó de alguna forma alcances y propósitos de la investigación de cada uno por separado. La visualización científica ha tenido mayor interés en la representación de fenómenos físicos y ha estado, por tanto, más cercana al campo de los gráficos y de los datos, con interpretaciones espacio-temporales de los problemas investigados. La visualización de información, por su parte, se ha interesado más por los

temas cognitivos al interactuar con grandes volúmenes de información, y ha estado más cerca de los estudios de la interacción hombre-computador (Human Computer Interaction, HCI por sus siglas en inglés), de la recuperación de la información y de los estudios cognitivos. [11]

La visualización del software no se relaciona hasta el momento con la visualización de información, pues se encuentra más cercana a la visualización de datos, por la esquemática en su representación, por la integración visual con las bases de datos y por las propias características de los lenguajes de programación.

La visualización de datos investiga esencialmente la minería visual de datos, y aporta a la visualización de la información, las técnicas y algoritmos provenientes de la estadística relacionados con la minería de datos. La visualización de la información, por su parte, enriquece las investigaciones sobre la integración de la visualización con las bases de datos, y posibilita nuevas dimensiones de análisis a los grandes volúmenes de información contenidos en ellas, a partir de nuevas posibilidades de interacción, navegación y exploración. [11]

La visualización es un fenómeno inherente al ser humano, que se estudia por distintas ciencias, y en general, puede ser analizado desde diferentes perspectivas. En la presente contribución, se muestran distintas perspectivas de análisis: cognitiva, tecnológica y comunicativa, que reflejan la naturaleza multidisciplinar del campo.

La visualización tienen tres grandes objetivos: describir, explorar, y analizar los datos, en función de descubrir o amplificar conocimiento. Obtener claridad es uno de los propósitos fundamentales. En su estudio, este se puede analizar cómo proceso, método, tecnología o disciplina. [11]

1.3. Visualización en la química

El conocimiento de la estructura de las moléculas es fundamental para la comprensión de muchos conceptos necesarios en el campo de las ciencias químicas, donde la información contenida en las moléculas es de especial importancia. Una buena forma para conocer la estructura de las moléculas es mediante la creación de modelos que las representen. La representación de las moléculas en dos o tres dimensiones (2D) y (3D) respectivamente, por medio de los programas informáticos adecuados y de los elementos propios de la realidad virtual, ofrece la imagen más real, completa e interactiva que permite estudiar a profundidad y asimilar con un menor esfuerzo las características estructurales de las que

dependen sus propiedades. Desde el punto de vista docente, los sistemas de visualización molecular constituyen una poderosa ayuda para el proceso de enseñanza aprendizaje en las asignaturas donde se estudia la estructura molecular o en las investigaciones científicas.

El uso de herramientas de visualización molecular es muy conveniente en las clases de química y en todos aquellos cursos en los que puedan ser útiles los modelos moleculares. La visualización molecular utiliza un enfoque práctico que complementa el método convencional del tablero (Figura 1) y el libro de texto, y ofrece así una imagen más rica, llamativa e interactiva, que se puede recordar más fácilmente.

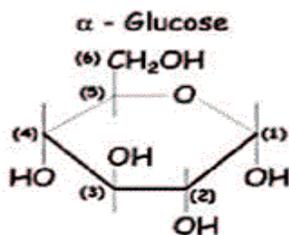


Figura 1 Representación de una estructura química por el método del tablero.

1.3.1. Visualización molecular 2D.

La forma más sencilla de representar una molécula es a partir de las coordenadas cartesianas de sus vértices o átomos y los enlaces existentes entre ellas (Figura 2). En esta forma de representación se han incluido los átomos de hidrógeno no aromáticos. Es una forma de visualización muy común y ampliamente utilizada, no solo en la literatura científica sino con fines didácticos. Tiene como limitación principal, que no puede captarse la imagen de la estructura en términos de volumen.

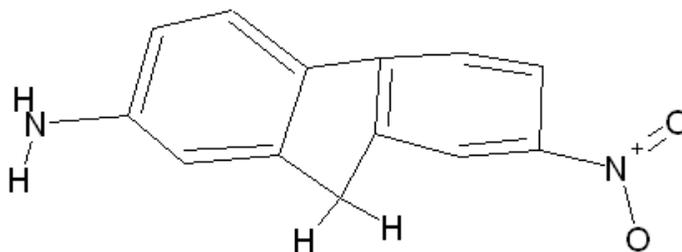


Figura 2. Representación esquemática de una estructura química.

Hoy día es posible brindar gráficas de alta calidad con gran contenido de información. Las técnicas de la computación gráfica han creado otras formas de representar la molécula y diferentes aspectos de ella, como por ejemplo, las imágenes mostradas en la (Figura 3).

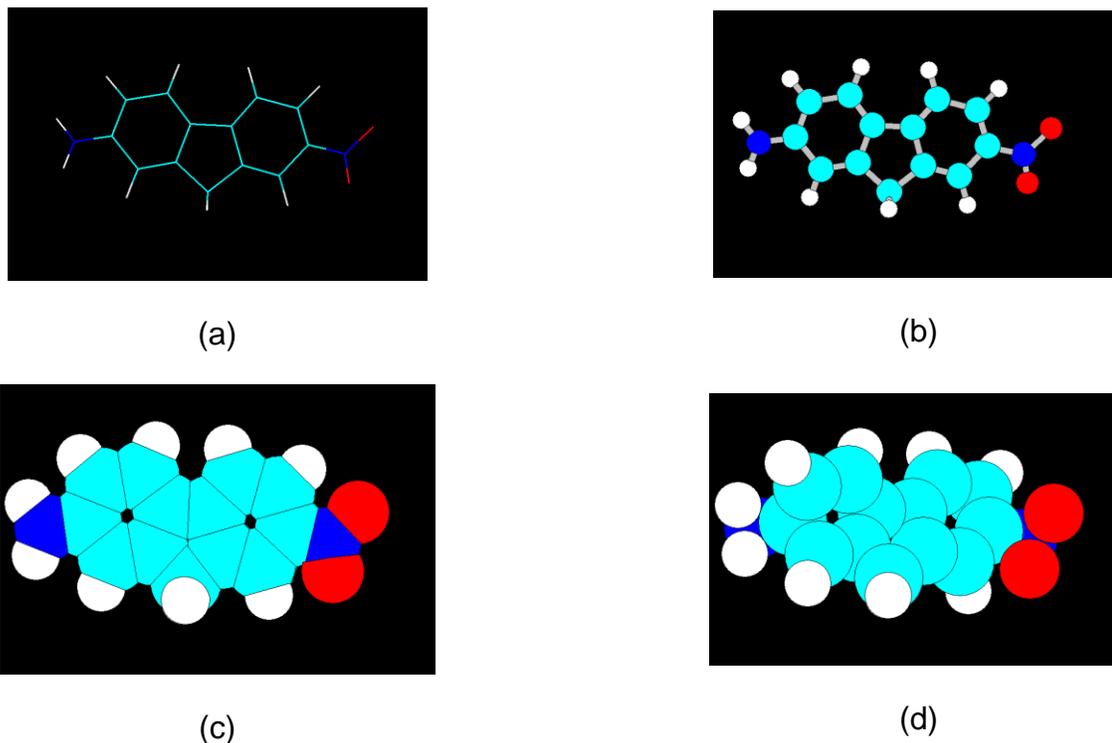


Figura 3. a) Alambre. b) Cilindros y bolas. c) Círculos solapados. d) Bolas.

1.3.2. Visualización molecular 3D

La tecnología de visualización molecular 3D ofrece infinitas posibilidades de apreciar mejor el tamaño, el volumen y la disposición relativa de los átomos en el espacio; poder seleccionar partes de la molécula en tiempo real, girarlas, cambiar colores y colorear determinadas estructuras; cambiar el tipo de representación molecular: alambre, cilindros, bolas y varillas, esferas de Van der Waals, cintas, superficies de solvatación, entre otras; permite también resaltar ciertas partes de una molécula como grupos funcionales presentes (el grupo amino, el grupo carboxilo, etc.) y en el caso de proteínas, el carbono alfa, la estructura secundaria, o bien colorear grupos de aminoácidos (hidrofóbicos, polares, básicos o ácidos); activar o desactivar ciertas partes de la representación visual para ver distintas cadenas, subunidades y

tipos de moléculas; medir ángulos y distancias dentro de la estructura e identificar enlaces sencillos, dobles o triples; ver los puentes de hidrógeno y puentes disulfuro; seleccionar y/o restringir segmentos específicos de la molécula tales como sitios activos, dominios de unión, grupos prostéticos o cofactores e inclusive, construir animaciones moleculares en donde se presentan transformaciones de las moléculas para explicar sus características estructurales y la relación con su actividad biológica

La visualización de las moléculas en tres dimensiones es muy conveniente cuando los alumnos están estudiando las estructuras y funciones de las moléculas. Este método tridimensional les ofrece ventajas sobre los métodos de enseñanza convencionales. Este proceso de aprendizaje se puede enriquecer al ver estas moléculas tridimensionalmente

La forma de representación que se muestra en la (figura 4), se basa en la asignación del radio de Van der Waals, que se toma a partir de valores reportados y únicos para cada átomo de la tabla periódica pero por lo tanto, no establece diferencia entre átomos de un mismo tipo.

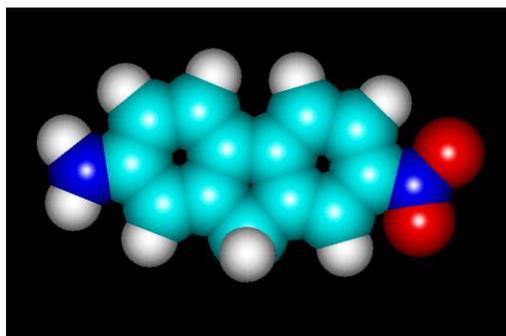


Figura 4. Esferas solapadas con efectos de iluminación.

1.4. Software

Actualmente es posible acceder a un gran número de programas de visualización molecular (Discovery Studio, RasMol, PyMol, HyperChem, etc.), algunos de ellos comerciales, otros distribuidos bajo licencias de software abierto o con licencias para su uso gratuito con fines académicos. De manera general, todos ellos llevan a cabo el mismo propósito: la visualización de estructuras moleculares y la representación de diversas propiedades asociadas a estas. Por este motivo, dada la amplia oferta de software disponible, la elección del software más adecuado dependerá de la experiencia previa del usuario con este tipo de programas y de las necesidades de análisis y de visualización que se tengan.

1.4.1. Discovery Studio

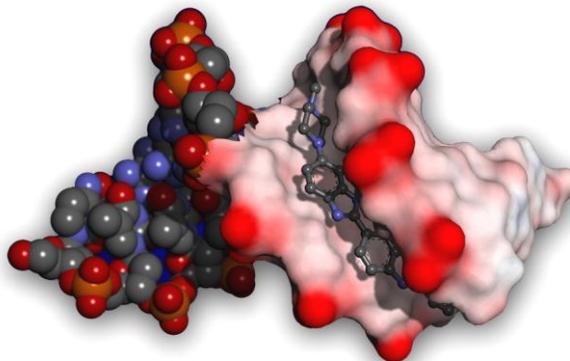


Figura 5. Imagen formada en el Discovery Studio.

Discovery Studio es una suite de software para soluciones de cálculo computacional molecular para los químicos y biólogos. Discovery Studio hace que sean más fáciles de examinar las propiedades de moléculas grandes y pequeñas, además de identificar oportunidades de optimización. Discovery Studio permite a los científicos automatizar las tareas rutinarias con rapidez, integrar aplicaciones de terceros, e incluso implementar los modelos de investigación. En conjunto, este estudia únicamente posiciones. Discovery Studio es una solución integral de investigación en colaboración, tanto para expertos y equipos de proyectos por igual. [12]

Esta suite de software, permite además investigar y poner a prueba alguna hipótesis previa a su aplicación experimental, lo que reduce el tiempo y gastos involucrados en la investigación. Aprovechar una plataforma abierta y escalable para automatizar los procesos, crear e implementar flujos de trabajo personalizados, integrando tipos de datos, bases de datos y herramientas de terceros. Mejorar la productividad personal y aumentar la colaboración en equipo, permitiendo a los investigadores compartir los datos y tomar mejores decisiones. [12]

1.4.2. RasMol

RasMol es un programa de computadora escrito para la visualización de gráficos moleculares que permite y se utiliza principalmente para la representación y la exploración de estructuras de macromoléculas biológicas, como las que se encuentran en el Protein Data Bank.

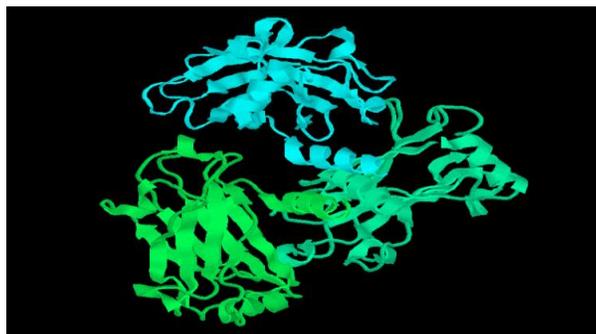


Figura 6. Imagen formada en el RasMol.

Históricamente, fue una herramienta importante para los biólogos moleculares ya que el programa está optimizado y permite que el software funcione en los ordenadores personales de bajas prestaciones. Antes de RasMol, algunos software de visualización molecular utilizaban gráficos que, debido a su costo, eran menos accesibles a los estudiosos. RasMol se ha convertido en una importante herramienta educativa, así como sigue siendo una herramienta importante para la investigación en la biología estructural. [13]

1.4.3. PyMol

PyMol es un visor molecular de código abierto y auspiciado por usuarios creado por Warren Lyford Delano y comercializado por Delano Scientific LLC, una compañía dedicada a la creación de herramientas accesibles universalmente para las comunidades científicas y educacionales. PyMol es apropiado para producir imágenes 3D de alta calidad de moléculas pequeñas y de macromoléculas biológicas, como las proteínas.

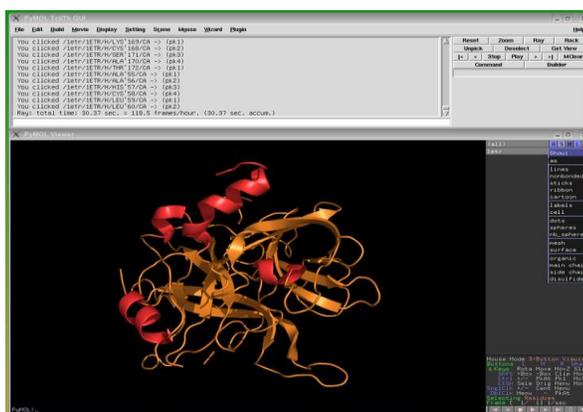


Figura 7. Imagen formada en el PyMol.

PyMol es una de las pocas herramientas de visualización de fuente abierta disponibles para biología estructural. La parte Py de su nombre alude al hecho de que es extensible mediante el lenguaje de programación Python, debido a lo cual puede ser empleado para realizar análisis complejos de estructuras moleculares utilizando bibliotecas disponibles para Python como NumPy. [14]

1.4.4. HyperChem

HyperChem es una suite completa de modelado molecular que lleva hasta su PC todas las herramientas necesarias para la simulación química y el cálculo y visualización de propiedades moleculares. Incluye una amplia selección de métodos de mecánica cuántica, mecánica molecular y dinámica molecular que se complementan con sofisticadas capacidades de visualización 3D y animación.

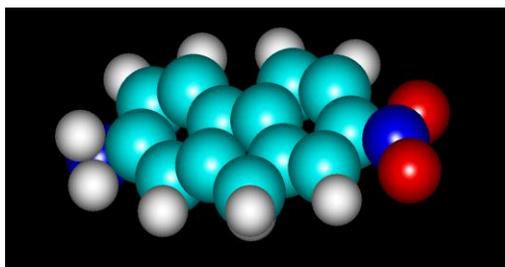


Figura 8. Imagen formada en el HyperChem.

El sistema de representación y visualización molecular de HyperChem se ha convertido en un nuevo modelo creado sobre OpenGL que ofrece una calidad excepcional en las prestaciones gráficas del producto. HyperChem dispone de diferentes opciones para la representación de moléculas, tanto a nivel de átomos y enlaces como de motivos de estructura secundaria en biomoléculas (CPK, bolas y varillas, esferas de Van der Waals, tubos, cilindros, cintas...). Diferentes partes de una misma molécula pueden seleccionarse y destacarse empleando distintos modos de representación o colores (color verdadero, 16 millones de colores, para moléculas, fondos, etc.). Admite además la generación de imágenes “raytraced” para mostrar las moléculas de forma espectacular. Las representaciones 3D, disponibles también para orbitales moleculares, potenciales electrostáticos, densidades de carga y de espín, etc., admiten color de transparencia. Por otra parte, pueden crearse gráficos de energías potenciales 2D o 3D frente a una o dos características estructurales como longitud del enlace, ángulo de torsión, etc. Los resultados de mecánica molecular pueden visualizarse como animaciones que pueden exportarse en un archivo de video *.avi, y

las estructuras, orbitales, espectros y datos pueden guardarse en formato HTML para su publicación y visualización en la web. [15].

1.5. Consideraciones parciales

Se analizaron los conceptos fundamentales sobre los índices topográficos híbridos como forma de sentar las bases necesarias para la comprensión del objeto de estudio y su campo de acción. Se mostraron las principales formas de visualización molecular así como ejemplos de las mismas, seleccionándose la visualización molecular 3D para la realización del presente trabajo. Se analizaron las principales ventajas que ofrece la misma para la implementación del procedimiento a desarrollar.

CAPÍTULO 2: SOLUCIÓN PROPUESTA

En este capítulo se da respuesta al objetivo general del trabajo, proponiendo un procedimiento para la representación gráfica de los índices topográficos híbridos, pudiendo desarrollarse el procedimiento con un mínimo de costo computacional debido a la forma tan sencilla en que este se calcula.

2.1. Datos preliminares

2.1.1. Ficheros

Para visualizar la molécula se cargan ficheros *.mol los cuales contienen la siguiente estructura:

- Información del átomo.
- Matriz de adyacencia.

La información del átomo contiene los elementos siguientes:

#: Número del átomo.

S: Símbolo del elemento correspondiente.

ITL: Índices topológicos.

ITG: Índices topográficos.

La matriz de adyacencia contiene los siguientes elementos:

#: Número del átomo.

#a: Número del átomo adyacente.

cc: Cantidad de enlaces entre los átomos.

2.1.2. Otros datos

Se necesitan otros datos para la visualización de la molécula como el radio de Van der Waals [16] y el radio atómico [17] de cada uno de los elementos de la tabla periódica.

2.2. Métodos de interpolación:

Los valores de los índices topográficos de la molécula pueden llegar a ser negativos, lo cual impide la visualización de la ponderación de la propiedad sobre cada átomo. Un procedimiento previo empleado consistió en transformar todos los valores en positivos empleando la ecuación 1 y utilizar los valores calculados como el radio de la esfera de trazado.

$$R_k = VI_k + |VI_{min}|$$

Ecuación 1

Sin embargo, el resultado de la visualización no fue el esperado porque la imagen que se obtenía no permitía distinguir ni los átomos ni las deformaciones de la molécula. Esto a su vez, impedía valorar correctamente la influencia de los índices en la propiedad.

Para eliminar esta nueva dificultad resultó aconsejable utilizar una función interpoladora no solo capaz de ubicar los valores en la parte positiva del rayo numérico sino también que no se perdiera la proporcionalidad de los mismos. En la práctica, todo se reduce entonces a utilizar el valor de la ponderación como el radio de la esfera de trazado.

2.2.1. Interpolación Estándar.

Para lograr una visualización de estos índices se hizo una normalización del radio de cada átomo utilizando la ecuación 2. Para mantener la proporcionalidad entre los valores se dividió el valor de R_k por el del radio atómico del elemento correspondiente.

$$R_i = \frac{VI_i + |VI_{min}|}{RA_i}$$

Ecuación 2

si $VI_{min} < 0$

ó la ecuación 3,

$$R_i = \frac{VI_i}{RA_i}$$

Ecuación 3

si $VI_{min} > 0$

dónde:

R_i : Radio del átomo i .

VI_i : Valor calculado del átomo i .

VI_{min} : Valor calculado mínimo de la propiedad en la molécula.

RA_i : Radio atómico correspondiente al átomo i .

Función de escalado.

Además de lo anteriormente planteado se necesita hacer una función “escalado” (ecuación 4) para adaptar la imagen final al tamaño y efecto visual deseado.

$$R_e = \frac{R_i}{C}$$

Ecuación 4

dónde el término C es un parámetro ajustable tal que $C \in \mathbf{Z}^+$, en dependencia de las necesidades de visualización del usuario.

2.2.2. Interpolación lineal

Otra forma de normalización del radio de cada átomo que se utilizó fue la interpolación lineal [18], con la que se logra que todos los valores queden acotados entre 1 y 2. Para esto se emplearon las ecuaciones 5 y 6.

$$VN_i = C_{min} + (VI_i - VI_{min}) \left(\frac{C_{max} + C_{min}}{VI_{max} + VI_{min}} \right)$$

Ecuación 5

dónde:

VN_i : Valor normalizado resultante del átomo i .

C_{min} : Cota mínima.

C_{max} : Cota máxima.

VI_i : Valor calculado del átomo i .

VI_{min} : Valor calculado mínimo de la propiedad en la molécula.

VI_{max} : Valor calculado máximo de la propiedad en la molécula.

Luego:

$$R_i = \frac{VN_i}{RA_i}$$

Ecuación 6

dónde:

R_i : Radio del átomo.

RA_i : Radio atómico correspondiente al elemento de la tabla periódica del átomo i .

2.3. Metodologías y herramientas de desarrollo

Los siguientes epígrafes muestran la Metodología de Desarrollo de software empleada durante la realización del presente trabajo, así como las principales herramientas que asistieron el proceso de creación de los diagramas y la programación de la solución propuesta.

2.3.1. Metodología de Desarrollo de Software

Se escogió como metodología de desarrollo de software el Proceso Unificado de Desarrollo (RUP). Esta robusta metodología está preparada para guiar el desarrollo de prácticamente todo tipo de proyectos. Su diseño orientado a objetos facilita la comprensión a alto nivel para su posterior implementación usando este paradigma de programación. Dentro de sus principales características se encuentran:

Dirigido por casos de uso

Los casos de uso reflejan lo que los usuarios futuros necesitan y desean, y se obtienen durante el modelado del negocio. El proceso de desarrollo de software avanza a través de una serie de flujos que parten de los casos de uso. Se puede afirmar que estos proporcionan un hilo conductor y una guía para todo el proceso [10].

Centrado en la arquitectura

La arquitectura muestra la visión común del sistema completo y describe los elementos del modelo que son más importantes para su construcción, los cimientos del sistema que son necesarios como base para comprenderlo, desarrollarlo y producirlo económicamente. La arquitectura debe diseñarse para que el software evolucione, no solo en su desarrollo inicial, sino también a lo largo de las futuras generaciones [10].

Iterativo e incremental

RUP propone que cada proyecto se desarrolle en fases y que cada fase se desarrolle en iteraciones, donde cada iteración resulta en un incremento del proceso de desarrollo, lo cual se realiza de forma planificada y culmina con el cumplimiento del punto de control trazado en la fase.

2.3.2. Herramientas de desarrollo

Como herramienta de modelado se empleó Visual Paradigm, creado para asistir el proceso de Ingeniería de software. Este se encuentra basado en el Lenguaje Unificado de Modelado (UML) y soporta el ciclo de vida completo del desarrollo de software; además, cuenta con funcionalidades más avanzadas que permiten agilizar considerablemente el trabajo. A continuación se describen sus principales características.

- Presenta licencia gratuita y comercial.

- Soporta aplicaciones web.
- Disponible en varios idiomas.
- Compatible entre versiones.
- Entorno gráfico amigable para el usuario.
- Disponible en múltiples plataformas (Windows/Linux/Mac OS X).

Para la creación de la interfaz gráfica de usuario (GUI) se utilizó la plataforma QT. La misma permite la portabilidad de la aplicación hacia diferentes sistemas operativos y facilita en gran medida el desarrollo de nuevos componentes gráficos. Entre sus principales características se encuentran:

- Con el mismo código base, permite desplegar el sistema en múltiples plataformas.
 - GNU/Linux 2.6.x, para versiones de 32 y 64 bits con Qt 4.x instalado. Además hay una versión para Linux con gcc 3.3.
 - Mac OS X 10.4 o superior, requiriendo Qt 4.x.
 - Windows XP y superiores, requiriendo el compilador MinGW y Qt 4.4.3 para MinGW.
- Producir aplicaciones de alto rendimiento con apariencia nativa.
- La concentración de los desarrolladores en la producción de código y no en las particularidades del sistema operativo.
- Acceso total al código fuente para su revisión y modificación.

2.3.3. Lenguaje de modelado

El Lenguaje Unificado de Modelado (UML) es un lenguaje de modelado visual que se usa para especificar, visualizar, construir y documentar artefactos de un sistema de software. Captura decisiones y conocimientos sobre los sistemas que se deben construir. Se usa para entender, diseñar, hojear, configurar, mantener, y controlar la información sobre tales sistemas. Está pensado para usarse con todos los métodos de desarrollo, etapas del ciclo de vida, dominios de aplicación y medios. El lenguaje de modelado pretende unificar la experiencia pasada sobre técnicas de modelado e incorporar las mejores prácticas actuales en acercamiento estándar. UML incluye conceptos semánticas, notación y principios generales. Tiene partes estáticas, dinámicas, de entorno y organizativas. Está pensando para ser utilizado en herramientas interactivas de modelado visual que tengan generadores de código así como generadores de informes. La especificación de UML no define un proceso estándar pero está pensado

para ser útil en un proceso de desarrollo iterativo. Pretende dar apoyo a la mayoría de los procesos de desarrollo orientados a objetos [16].

2.3.4. Lenguaje de programación

Como lenguaje de programación se utilizó C++, el cual hace uso eficiente del paradigma de Programación Orientada a Objetos. Permite un excelente control de la memoria y una buena administración de los recursos de la computadora. Dentro de las principales ventajas que presenta se encuentran:

- **Difusión:** al ser uno de los lenguajes más empleados en la actualidad, posee gran número de usuarios y tiene una excelente bibliografía.
- **Versatilidad:** C++ es un lenguaje de propósito general, se puede emplear para resolver cualquier tipo de problema.
- **Portabilidad:** se encuentra estandarizado, por tanto, el mismo código fuente puede ser compilado en diferentes plataformas.
- **Eficiencia:** C++ es uno de los lenguajes más rápidos en tiempo de ejecución.
- **Herramientas:** existe gran cantidad de compiladores, depuradores y bibliotecas de clases basadas en este lenguaje.

2.4. ILUMINACIÓN SOBRE GPU

Con el objetivo de lograr un mayor rendimiento de la aplicación se le aplicó iluminación a la escena utilizando el algoritmo de Phong [17] implementado sobre GPU (Graphics Processing Unit) con lenguaje GLSL [18]. Los costosos cálculos de la iluminación se harán sobre GPU quitándole esta responsabilidad al CPU (Central Processing Unit) del ordenador, permitiendo resaltar con mayor nivel de detalles los colores de cada uno de los átomos y la estructura molecular así como la iluminación de la escena en general y por consiguiente los efectos visuales logrados son de mayor calidad.

2.5. Consideraciones parciales.

En este capítulo se propuso la solución científico-técnica al problema planteado. Esta reside en la implementación de las normalizaciones consideradas. Se describieron los pasos necesarios para la implementación de las mismas así como la metodología y herramientas necesarias el desarrollo de la solución propuesta.

CAPÍTULO 3: CARACTERÍSTICAS DEL SISTEMA

Este capítulo describe el sistema desde la perspectiva de Ingeniería de Software, usando RUP (Proceso Unificado de Desarrollo) como metodología. Se presentan las reglas específicas del negocio y el modelo de dominio del problema. Posteriormente se muestran los requisitos funcionales y no funcionales detectados durante la Captura de Requisitos y el modelo de Casos de Uso del Sistema; dentro de este último, los Actores del Sistema, los Casos de Uso y sus respectivas descripciones. Del flujo de trabajo diseño del sistema se muestra el Diagrama de Clases del Diseño y los Diagramas de Secuencia correspondientes a los Casos de Uso.

3.1. Reglas del Negocio

Para la realización del presente trabajo se tuvieron en cuenta las siguientes reglas del negocio:

1. El fichero de la molécula que se deseen visualizar deben estar en el formato *.mol
2. Los ficheros con el formato *.mol deben tener la estructura original, los que no cumplan con este requisito no podrán ser visualizadas de forma correcta.

3.2. Modelo de Dominio

El modelo del dominio es una representación visual de los conceptos u objetos del mundo real significativos para un problema o área de interés. Representa clases conceptuales del dominio del problema, conceptos del mundo real en lugar de componentes de software [10].

Este se puede describir cuando un usuario (Especialista) carga una molécula de un fichero *.mol, el cual contiene los datos necesarios para que el sistema sea capaz de visualizarla y representarla mediante los índices topográficos de la misma, para que el usuario (Especialista) pueda analizar los resultados de la visualización obtenida.

En la (Figura 9) se muestra la descripción del dominio con el objetivo de facilitar la comprensión del funcionamiento del sistema.

El **especialista** es aquel que esté adecuadamente capacitado en temas como visualización molecular e índices topográficos.

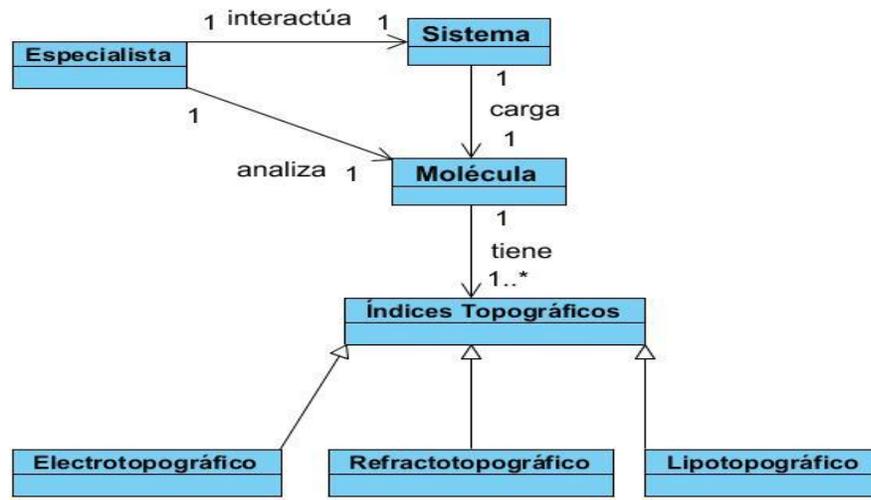


Figura 9. Modelo de Dominio.

3.3. Captura de Requisitos

Un requerimiento es una condición o capacidad que debe tener un sistema o uno de sus componentes para satisfacer un contrato, norma, especificación u otro documento formal, que facilite el entendimiento entre clientes y desarrolladores [10]. Seguidamente se exponen los requisitos funcionales y no funcionales, por los cuales se rige el desarrollo del prototipo de software.

3.3.1. Requisitos Funcionales

Los **requisitos funcionales** especifican acciones que debe poder realizar un sistema, sin tener en cuenta las restricciones físicas [10]. Además, definen su comportamiento de salida y entrada, y no alteran la funcionalidad del producto, esto quiere decir que los requerimientos funcionales se mantienen invariables sin importar con qué propiedades o cualidades se relacionan [19]. A continuación se presentan los requerimientos funcionales tomados en cuenta durante el desarrollo del presente trabajo.

RF1. Cargar Datos.

RF2. Visualizar Molécula Simple.

RF3. Visualizar Molécula Van Der Waals.

RF4. Visualizar Índices Topográficos.

RF4.1 Electrotopográfico.

RF4.2 Refractotopográfico.

RF4.3 Lipotopográfico.

RF5. Interactuar con la molécula.

RF5.1 Centrar molécula.

RF5.2 Trasladar molécula.

RF5.3 Rotar molécula.

RF5.4 Aplicar transparencia a la molécula.

RF5.5 Maximizar o Minimizar molécula.

RF6. Aplicar Normalización Lineal a Índice Topográfico.

RF7. Aplicar Normalización Estándar a Índice Topográfico.

RF8. Escalar Índice Topográfico.

RF9. Salvar imagen.

3.3.2. Requisitos no Funcionales

Los **requisitos no funcionales** sólo describen atributos del sistema o atributos del entorno del sistema [10]. Los requisitos no funcionales tomados en cuenta en el presente trabajo son los que se describen a continuación:

1. De Software

Sistema Operativo Windows XP, Windows 7, Ubuntu 10.04 o superior.

2. De Hardware

Microprocesador Intel Pentium IV a 3.0 GHz o superior.

Memoria RAM de 256 MB o superior.

Tarjeta Gráfica NVidia GeForce 9800 GT de 256 MB o superior (opcional).

3. De Seguridad

Fiabilidad: Las moléculas visualizadas deben representar con alta precisión los modelos tridimensionales cargados.

Integridad: Los datos originales no deben sufrir pérdidas durante su representación.

4. De Apariencia o Interfaz Gráfica de Usuario

La interfaz gráfica de usuario debe proporcionar, de forma coherente y sencilla, interactividad para todas las funcionalidades de la aplicación.

5. De soporte

Se brindará soporte para los sistemas operativos Windows XP, Windows 7 y Ubuntu 10.04 o superiores.

6. De restricciones en el Diseño e Implementación

Se empleará el lenguaje de programación C++ bajo el paradigma de Programación Orientada a Objetos.

3.4. Modelo de Casos de Uso

La forma en que los actores usan el sistema se representa a través de los Casos de Uso. Estos son artefactos narrativos que describen, bajo la forma de acciones y reacciones, el comportamiento del sistema desde el punto de vista del actor. En los siguientes epígrafes se muestran los actores y los Casos de Uso identificados en el presente trabajo.

3.4.1. Actores del Sistema

Los actores de un sistema son agentes externos, roles que las personas, sistemas o dispositivos juegan cuando interactúan con el software[20]. En este caso particular, quien hará uso del sistema será el Especialista con conocimientos en la visualización molecular, en química y en química computacional.

Actores	Justificación
Especialista	Interactúa con el sistema durante la ejecución de sus funcionalidades. Carga los ficheros pertenecientes a una molécula

	orgánica, para luego ser visualizada por el sistema de forma tridimensional y posteriormente realizar las operaciones pertinentes para el estudio estructural comparativo con la misma.
--	---

Tabla 1. Actores del Sistema.

3.4.2. Diagrama de Casos de Uso del Sistema

El Diagrama de Casos de Uso del Sistema (DCUS) representa gráficamente los casos de uso y su interacción con los actores. Los Casos de Uso tomados en cuenta en el presente trabajo están fuertemente relacionados, por ejemplo, para la ejecución de cualquiera de los Casos de Uso es necesario ejecutar previamente el Caso de Uso Cargar Datos. A su vez, para poder ejecutar los Casos de Uso Aplicar Normalización Estándar a IT y Aplicar Normalización Lineal debe estar ejecutado el Caso de Uso Visualizar IT. Por otra parte, el Caso de Uso Escalar solo puede ejecutarse si se está ejecutando el Caso de Uso Aplicar Normalización Estándar a IT, y el Caso de Uso Interactuar con la Molécula, puede ejecutarse a todos los modelos de visualización y contribuye a que el usuario logre una visualización que le permita establecer comparaciones entre cada una de las imágenes, con el mayor nivel de detalle posible. Por último el Caso de uso Salvar Imagen crea una foto con la imagen reflejada en uno de los cuatro visores. Es necesario aclarar que el actor interactúa directamente con todos los casos de uso.

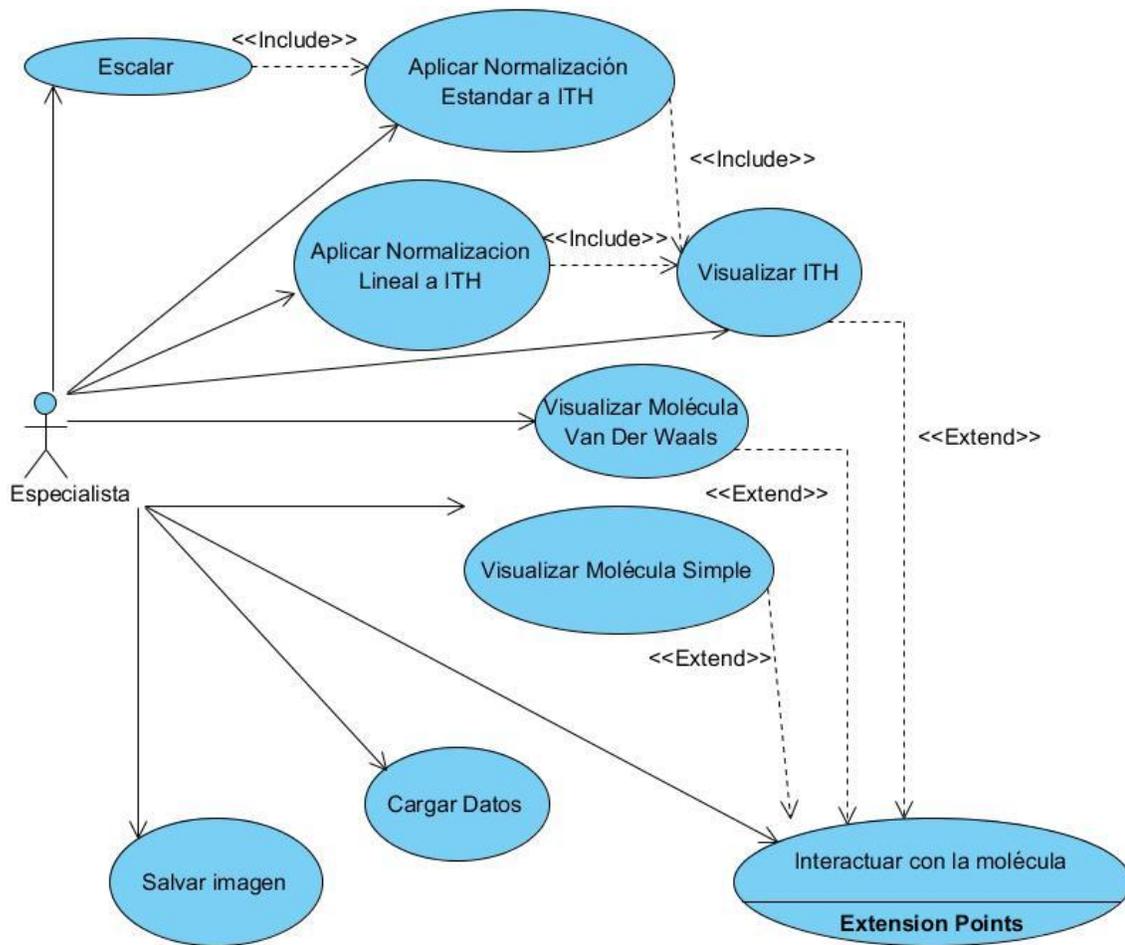


Figura 10. Diagrama de Casos de Uso del Sistema.

3.4.3. Descripción de los Casos de Uso del Sistema

Cada caso de uso posee una descripción de las acciones que realizará el sistema como respuesta a las peticiones del usuario. A continuación se relacionan las tablas correspondientes a las descripciones de los casos de uso y se argumentan los flujos operacionales de cada uno. Los casos de uso más complejos se dividen en sesiones.

Caso de Uso:	Cargar Datos	
Actores:	Especialista	
Resumen:	Se inicia cuando el actor selecciona la opción de cargar ficheros. Se selecciona el directorio donde están los ficheros o el fichero *.mol. Finaliza con la carga del fichero seleccionado para su posterior visualización.	
Referencia:	RF1.	
Flujo Normal de Eventos:		
Acción del Actor:	Respuesta del Sistema:	
1. Selecciona la opción Cargar Fichero.	2. Muestra un cuadro de diálogo que le permite al usuario seleccionar el fichero que desea cargar.	
3. Selecciona el directorio y el fichero que desea cargar.	4. Procede a cargar el fichero seleccionado.	
	5. Termina el Caso de Uso.	
Post condiciones:	Se cargó el fichero seleccionado.	
Prioridad:	Crítico.	

Tabla 2 Descripción del Caso de Uso Cargar Datos.

Caso de Uso:	Visualizar Molécula Simple
Actores:	Especialista
Resumen:	Se inicia cuando el actor selecciona en el visor activo la opción Visualizar Molécula Simple y finaliza con la visualización de la misma.
Referencia:	RF2.
Precondición:	Los datos deben estar cargados

Flujo Normal de Eventos:	
Acción del Actor:	Respuesta del Sistema:
1. Selecciona el visor deseado.	2. Activa el visor seleccionado
3. Escoge la opción visualizar molécula simple.	4. Visualiza la molécula en su forma simple.
	5. Termina el Caso de Uso
Post-condiciones:	Se visualiza la molécula simple.
Prioridad:	Crítico.

Tabla 3. Descripción del Caso de Uso Visualizar Molécula Simple.

Caso de Uso:	Visualizar Molécula Van Der Waals
Actores:	Especialista
Resumen:	Se inicia cuando el actor selecciona en el visor activo la opción Visualizar Molécula Van Der Waals y finaliza con la visualización de la misma.
Referencia:	RF3.
Precondición:	Los datos deben estar cargados
Flujo Normal de Eventos:	
Acción del Actor:	Respuesta del Sistema:
1. Selecciona el visor deseado.	2. Activa el visor seleccionado
3. Escoge la opción visualizar molécula Van Der Waals.	4. Visualiza la molécula en su forma Van Der Waals.
	5. Termina el Caso de Uso.
Post-condiciones:	Se visualiza la molécula Van Der Waals.

Prioridad:	Crítico.
------------	----------

Tabla 4 Descripción del Caso de Uso Visualizar Molécula Van Der Waals.

Caso de Uso:	Visualizar Índices Topográficos.
Actores:	Especialista.
Resumen:	Se inicia cuando el actor selecciona en el visor activo la opción para visualizar uno de los Índice Topográficos. Finaliza con la visualización del índice topográfico seleccionado.
Referencia:	RF4.
Precondición:	Los datos deben estar cargados
Flujo Normal de Eventos:	
Acción del Actor:	Respuesta del Sistema:
1. Selecciona el visor deseado.	2. Activa el visor seleccionado.
3. Escoge la opción visualizar Índice Topográfico Híbrido.	4. Realiza una de las siguientes acciones: a) Si el usuario escoge la opción Electrotopográfico, ir a la sesión Electrotopográfico. b) Si el usuario escoge la opción Refractotopográfico, ir a la sesión Refractotopográfico. c) Si el usuario escoge la opción Lipotopográfico, ir a la sesión Lipotopográfico.
Sesión:	Electrotopográfico.
Flujo Normal de Eventos:	

Acción del Actor:	Respuesta del Sistema:
	5. Busca los datos electrotopográficos y los visualiza.
Post-Condiciones	Se visualizó el Índice Electrotopográfico.
Prioridad:	Crítico.
Sesión:	Refractotopográfico.
Flujo Normal de Eventos:	
Acción del Actor:	Respuesta del Sistema:
	5. Busca los datos refractotopográficos y los visualiza.
Post-Condiciones	Se visualizó el Índice Refractotopográfico
Prioridad:	Crítico.
Sesión:	Lipotopográfico.
Flujo Normal de Eventos:	
Acción del Actor:	Respuesta del Sistema:
	5. Busca los datos lipotopográficos y los visualiza.
Post-Condiciones	Se visualizó el Índice Lipotopográfico.
Prioridad:	Crítico.
	6. Termina el Caso de Uso
Post-condiciones:	Se visualiza el Índice Topográfico seleccionado.
Prioridad:	Crítico.

Tabla 5. Descripción del Caso de Uso Visualizar Índices Topográficos.

Caso de Uso:	Interactuar con la molécula
--------------	-----------------------------

Actores:	Especialista
Resumen:	Se inicia cuando el actor realiza alguna operación con la molécula visualizada. Y finaliza con actualización de la molécula en cuestión.
Referencia:	RF5.
Precondición:	Los datos deben estar cargados.
Flujo Normal de Eventos:	
Acción del Actor:	Respuesta del Sistema:
1. Selecciona el visor deseado.	2. Activa el visor seleccionado.
3. Interactúa con los componentes de la interfaz gráfica de usuario.	4. Realiza alguna de las siguientes acciones: a) Si decide centrar la molécula, ir a la sesión Centrar Molécula. b) Si decide trasladar la molécula, ir a la sesión Trasladar Molécula. c) Si decide rotar la molécula, ir a la sesión Rotar Molécula. d) Si decide aplicarle transparencia a la molécula, ir a la sesión Aplicar Transparencia a la Molécula. e) Si decide maximizar o minimizar molécula, ir a la sesión Maximizar o Minimizar Molécula.
Sesión: Aplicar Transparencia a Molécula	
Flujo Normal de Eventos:	
Acción del Actor:	Respuesta del Sistema:
	5. Calcula las coordenadas polares de la esfera atómica y visualiza puntos pertenecientes a la esfera y los enlaces de la molécula.
Post-condiciones:	Se visualizó la molécula de forma transparente.

Prioridad:	Secundario.
Sesión: Trasladar Molécula	
Flujo Normal de Eventos:	
Acción del Actor:	Respuesta del Sistema:
	5. Calcula las nuevas coordenadas cartesianas en los ejes de coordenadas y visualiza la molécula trasladada.
Prioridad:	Secundario.
Post-condiciones:	Se visualizó la molécula trasladada.
Sesión: Rotar Molécula	
Flujo Normal de Eventos:	
Acción del Actor:	Respuesta del Sistema:
	5. Calcula el valor a rotar en los ejes de coordenadas cartesianas visualiza la molécula rotada.
Prioridad:	Secundario
Post-condiciones:	Se visualizó la molécula rotada.
Sesión: Centrar Molécula	
Flujo Normal de Eventos:	
Acción del Actor:	Respuesta del Sistema:
	5. Calcula los valores centrales de la molécula en los ejes de coordenadas cartesianas y visualiza la molécula con centro en estas coordenadas.
Prioridad:	Secundario.
Post-condiciones:	Se visualizó la molécula centrada.

Sesión: Maximizar o Minimizar Molécula	
Flujo Normal de Eventos:	
Acción del Actor:	Respuesta del Sistema:
	5. Verifica el estado de la molécula. 6. Maximiza la molécula.
Prioridad:	Secundario.
Post-condiciones:	Se visualizó la molécula Maximizada o Minimizada.
Flujo Alternativo de Eventos:	Molécula Maximizada.
Acción del Actor:	Respuesta del Sistema.
	5a. Minimiza la molécula.
	6. Termina el Caso de Uso.
Prioridad:	Secundario.
Post-condiciones:	Se visualiza la molécula con los datos actualizados.

Tabla 6. Descripción del Caso de Uso Interactuar con la molécula.

Caso de Uso:	Aplicar Normalización Lineal a Índice Topográfico Híbrido.
Actores:	Especialista.
Resumen:	Se inicia cuando el actor selecciona en el visor activo la opción para normalizar la visualización del Índice Topográfico analizado mediante una interpolación lineal. Finaliza con la visualización del Índice Topográfico seleccionado con una normalización lineal.
Referencia:	RF6.
Precondición:	Los datos deben estar cargados y visualizados el índice topográfico

	correspondiente.
Flujo Normal de Eventos:	
Acción del Actor:	Respuesta del Sistema:
1. Selecciona el visor deseado.	2. Activa el visor seleccionado.
3. Escoge la opción aplicar normalización lineal al Índice Topográfico Híbrido.	4. Aplica la interpolación lineal al índice topográfico de cada átomo y visualiza la molécula en cuestión con los valores normalizados linealmente.
	5. Termina el Caso de Uso.
Post-Condiciones	Se visualizó la molécula respondiendo al Índice Topográfico normalizado linealmente.
Prioridad:	Crítico.

Tabla 7. Descripción del Caso de Uso Aplicar Normalización Lineal a Índice Topográfico.

Caso de Uso:	Aplicar Normalización Estándar a Índice Topográfico.
Actores:	Especialista
Resumen:	Se inicia cuando el actor selecciona en el visor activo la opción para normalizar la visualización del Índice Topográfico analizado mediante una normalización estándar. Finaliza con la visualización del Índice Topográfico seleccionado con una normalización estándar.
Referencia:	RF7.
Precondición:	Los datos deben estar cargados y el índice topográfico correspondiente visualizado.
Flujo Normal de Eventos:	

Acción del Actor:	Respuesta del Sistema:
1. Selecciona el visor deseado.	2. Activa el visor seleccionado.
3. Escoge la opción aplicar normalización estándar al Índice Topográfico Híbrido.	4. Aplica la interpolación estándar al Índice Topográfico de cada átomo y visualiza la molécula en cuestión con los valores normalizados de forma estándar.
	5. Termina el Caso de Uso.
Post-Condiciones	Se visualizó la molécula respondiendo al Índice Topográfico normalizado de forma estándar.
Prioridad:	Crítico.

Tabla 8. Descripción del Caso de Uso Aplicar Normalización Estándar a Índice Topográfico.

Caso de Uso:	Escalar Índice Topográfico
Actores:	Especialista.
Resumen:	Se inicia cuando el actor selecciona en el visor activo la opción para escalar la visualización del Índice Topográfico analizado. Finaliza con la visualización de la molécula mediante Índice Topográfico en cuestión escalado.
Referencia:	RF8.
Precondición:	Los datos deben estar cargados y estar utilizando una normalización estándar para el Índice Topográfico en cuestión.
Flujo Normal de Eventos:	
Acción del Actor:	Respuesta del Sistema:
1. El usuario selecciona el visor	2. El sistema activa el visor seleccionado.

deseado.	
3. Escoge la opción aplicar escalar Índice Topográfico.	4. Abre un cuadro de dialogo que permite al usuario introducir el nuevo valor de la escala.
5. El usuario introduce el nuevo valor escalar.	6. Escala el valor del Índice Topográfico en cuestión y visualiza la molécula respondiendo a los nuevos valores escalados.
	7. Termina el Caso de Uso.
Post-Condiciones	Se visualizó la molécula atendiendo al Índice Topográfico escalado.
Prioridad:	Crítico.

Tabla 9. Descripción del Caso de Uso Escalar Índice Topográfico Híbrido.

Caso de Uso:	Salvar Imagen.
Actores:	Especialista.
Resumen:	Se inicia cuando el actor selecciona la opción Salvar Imagen y finaliza con la creación de una imagen *.jpg de la molécula seleccionada.
Referencia:	RF9.
Precondición:	Los datos deben estar cargados.
Flujo Normal de Eventos:	
Acción del Actor:	Respuesta del Sistema:
1. Selecciona el visor deseado.	2. Activa el visor seleccionado.
3. Escoge la opción Salvar Imagen.	4. Abre un cuadro de dialogo que permite al usuario escoger el directorio y el nombre a la imagen a salvar.

5. Introduce el nombre y escoge el directorio donde va a salvar.	6. Obtiene la imagen del visor seleccionado y guarda la misma en el directorio y con el nombre especificado por el usuario.
	7. Termina el Caso de Uso.
Post-Condiciones	Se guardó la imagen del visor seleccionado.
Prioridad:	Secundario.

Tabla 10. Descripción del Caso de Uso Salvar Imagen.

3.5. Patrones de diseño.

En la actualidad se pueden encontrar muchos patrones definidos. Resulta por lo tanto, casi imposible para un programador conocerlos todos, por lo que tampoco será viable realizar una valoración amplia. Así que resulta aconsejable una clasificación sencilla para poder realizar una correcta elección. Una clasificación muy empleada por su sencillez es la dada por la Microsoft [20]:

Patrones de Arquitectura: Soluciones probadas para estructurar los componentes, como son Modelo-Vista-Controlador, arquitectura en tres capas, peer to peer, arquitectura orientada a servicios, etc.

Patrones Web: Soluciones probadas para la creación de sitios web, como son la maquetación en tres columnas, efectos de rollover y estructuras de blog entre otras.

Patrones de Diseño: Son soluciones probadas para el diseño de software, como los patrones Constructor, Decorador, Estado, etc. En la solución propuesta se aplicaron diferentes patrones de diseño para dar respuesta a cada problema planteado.

Patrones de Programación: Soluciones específicas para algoritmos y estructuras de control, como son algoritmos de ordenación, procedimientos de recursión e iteración, etc.

Patrones de Refactorización: Soluciones para simplificar el código, como la variable explicativa, extracción de métodos, sobrecarga de constructores, etc.

Los patrones de diseño son el esqueleto de las soluciones a problemas comunes en el desarrollo de software. En otras palabras, brindan una solución ya probada y documentada a problemas de desarrollo de software que están sujetos a contextos similares. Se deben, tener presentes los siguientes elementos

de un patrón: su nombre, el problema (cuando aplicar un patrón), la solución (descripción abstracta del problema) y las consecuencias (costos y beneficios).

Los patrones de diseño se pueden agrupar según el problema que aborden:

Creacionales: Abordan problemas de creación de objetos.

Estructurales: Abordan problemas sobre relaciones entre entidades.

De Comportamiento: Abordan problemas de comunicación entre entidades.

Como las clasificaciones anteriores pueden ser muy discutibles y se encontrarían patrones ubicables en diferentes categorías o que den lugar a algunas nuevas, es preferible en ocasiones, utilizarlos por el origen de cada uno.

Para ello existen dos grupos GRASP y los patrones GOF. GRASP es un acrónimo de General Responsibility Assignment Software Patterns (patrones generales de software para asignar responsabilidades) mientras que GOF es un acrónimo de Gang-of-Four (pandilla de los cuatro). A continuación se describen algunos de ellos empleados en el desarrollo de la solución.

Patrones GRASP:

Son guías o principios que sirven para asignar responsabilidades a las clases.

Patrón Experto: La clase MainWindow es la encargada de controlar todas las acciones del programa ya que es la que contiene todas las instancias e informaciones necesarias para llevar la lógica del programa en general.

Patrón Creador: La clase Reader es la encargada de crear la clase Atom ya que contiene los datos de inicialización que se pasarán a un objeto de Atom cuando sea creado.

Patrones GOF:

Estado: Permite que un objeto modifique su comportamiento cada vez que cambia su estado interno, dando así la impresión de que el objeto “cambia de clase”.

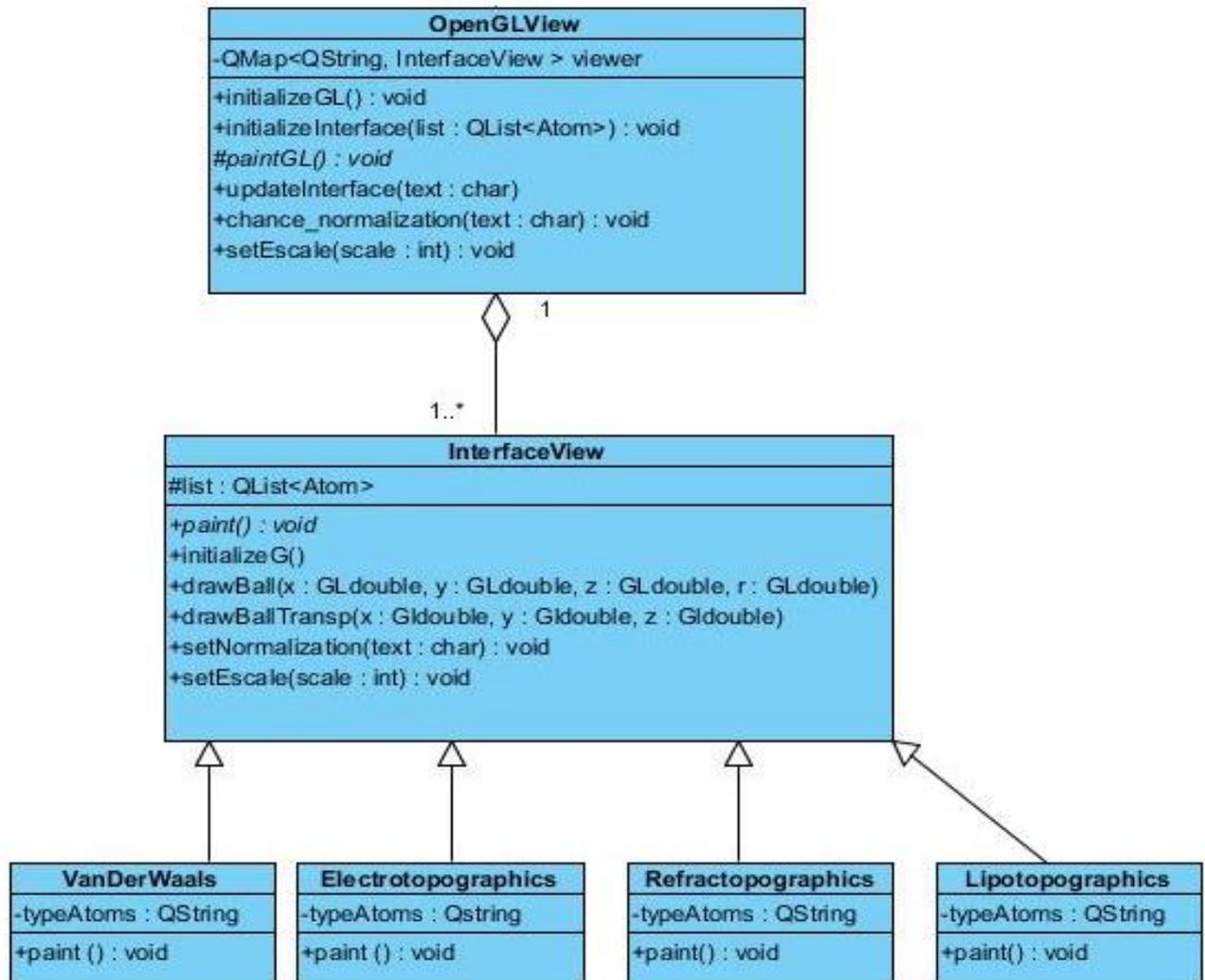


Figura 11. Diagrama ilustrativo del patrón de diseño Estado.

Como se muestra en la (Figura 11) la clase OpenGLView puede cambiar su forma de visualización a través de la clase InterfaceView cada vez que esta se comporte como uno de sus hijos, Van der Waals, Electrotopographics, Refractopographics y Lipotopographips.

3.6. Diseño del Sistema

En el flujo de trabajo de Diseño, la elaboración de los diagramas de clases de diseño juega un papel fundamental, pues estos muestran las clases finales para la realización de los Casos de Uso modelados con anterioridad.

Los diagramas de clases de diseño muestran las clases con sus atributos y métodos y la forma en que se relacionan entre sí. En este flujo también se realizan los diagramas de interacción que muestran la comunicación y las relaciones entre los objetos.

3.6.1. Diagrama de Clases del Diseño

En la (Figura 12) se muestra el Diagrama de Clases del Diseño correspondiente al sistema desarrollado, nótese que la implementación de cada una de las visualizaciones se hace en las clases hijas de `InterfaceView` donde cada una de ellas muestra de forma diferente su propia forma de visualización. La clase que se refiere a la Interfaz Gráfica de usuario es `MainWindow` y sólo se encarga de coordinar las acciones que realiza el actor y transmitir las hacia el núcleo del sistema.

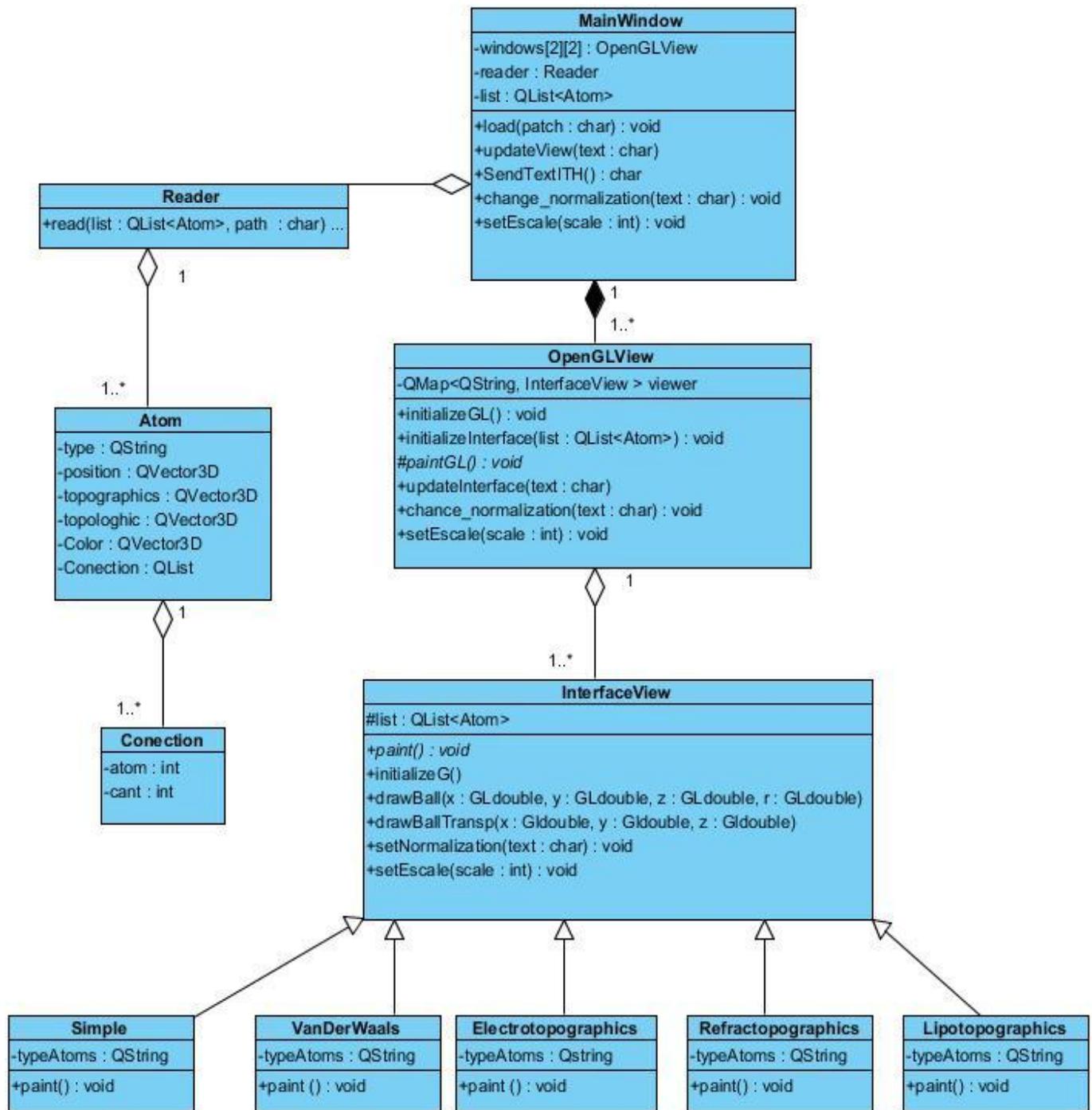


Figura 12. Diagrama de Clases del Diseño.

3.6.2. Diagramas de Secuencia del Diseño

A continuación se muestran los diagramas de secuencias de los casos de uso críticos empleados en el diseño del sistema.

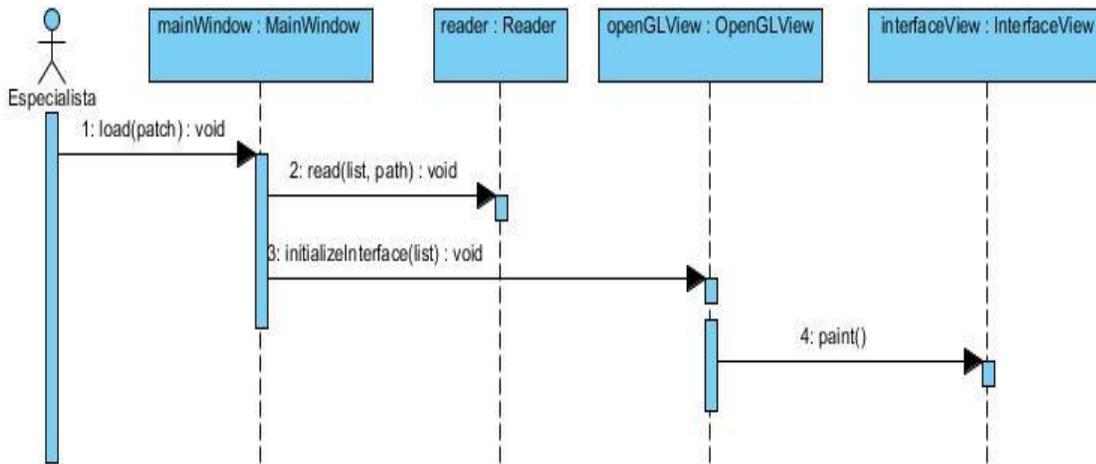


Figura 13. Diagrama de Secuencia del Caso de Uso Cargar Datos.

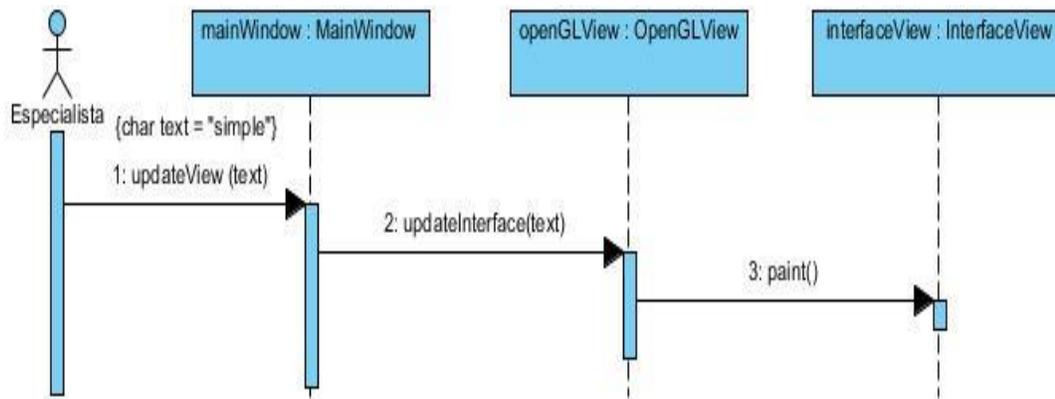


Figura 14. Diagrama de Secuencia del Caso de Uso Visualizar Molécula Simple.

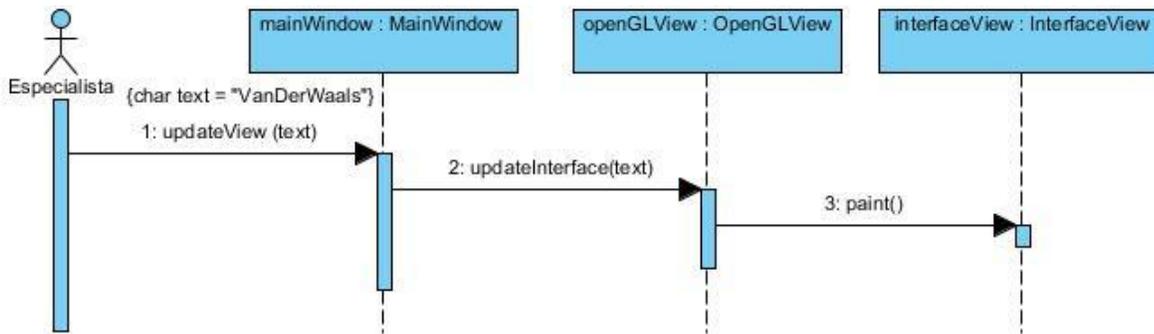


Figura 15. Diagrama de Secuencia del Caso de Uso Visualizar Molécula Van Der Waals.

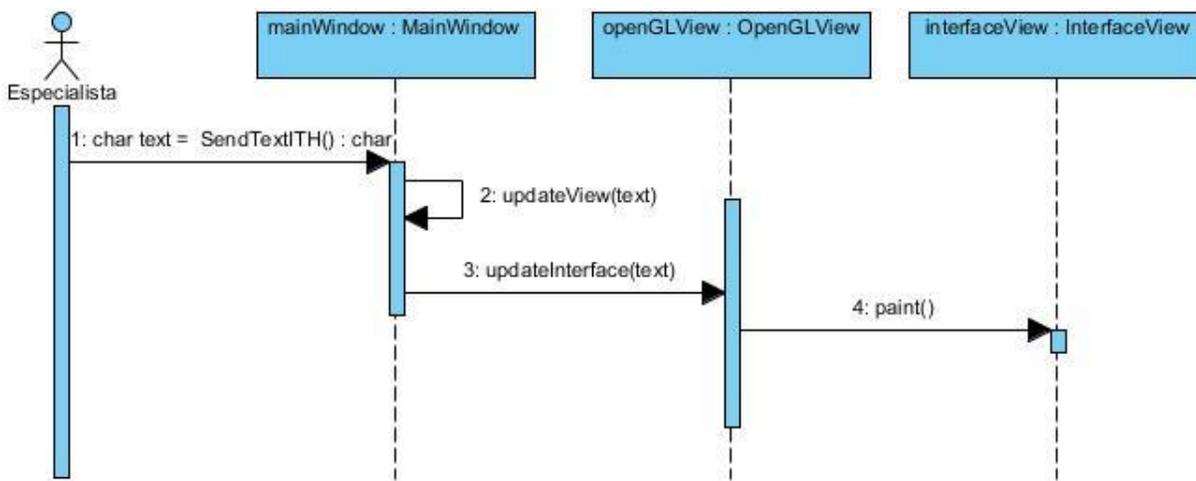


Figura 16. Diagrama de Secuencia del Caso de Uso Visualizar Índices Topográficos.

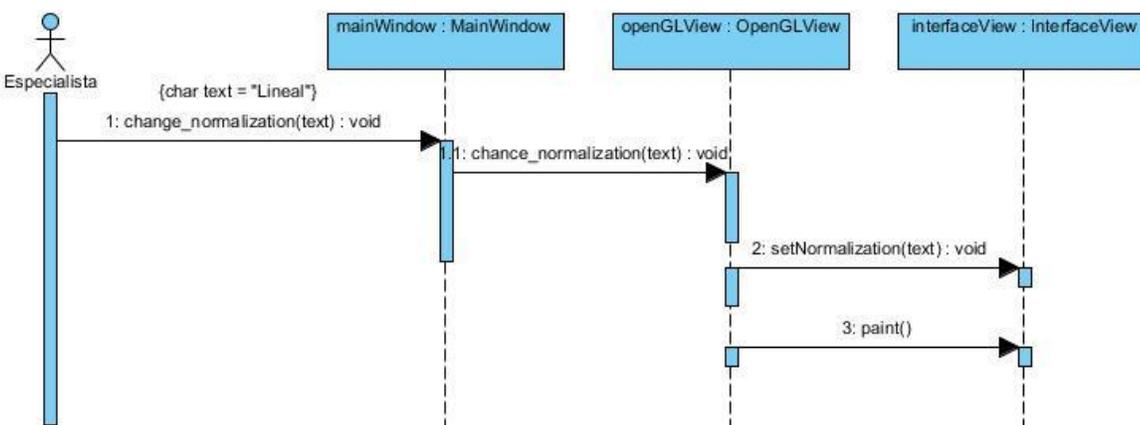


Figura 17. Diagrama de Secuencia del Caso de Uso Aplicar Normalización Lineal a Índice Topográfico.

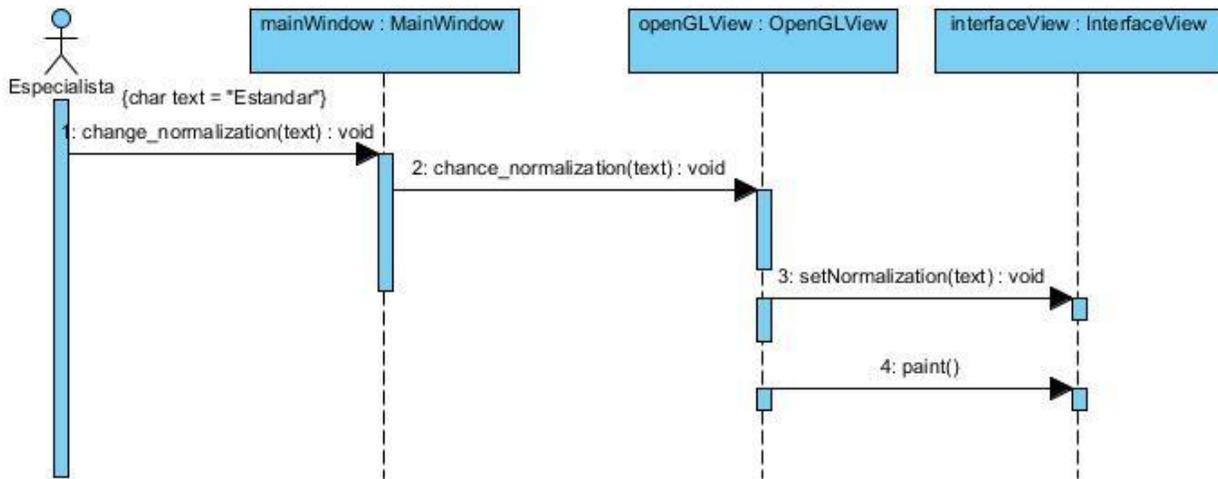


Figura 18. Diagrama de Secuencia del Caso de Uso Aplicar Normalización Estándar a Índice Topográfico.

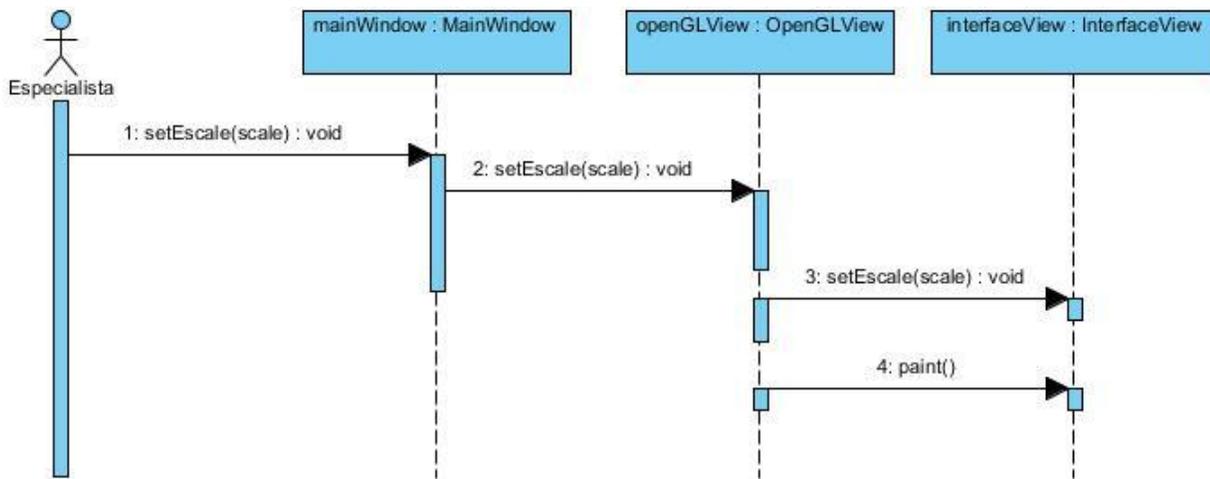


Figura 19. Diagrama de Secuencia del Caso de Uso Escalar Índice Topográfico.

CAPÍTULO 4: RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En este capítulo se abordan los temas relacionados con la implementación del sistema. El mismo se basa en el trabajo desarrollado en los capítulos anteriores y centra su contenido en el diagrama de componentes del sistema desarrollado. Posteriormente se toman casos de prueba para validar los resultados alcanzados, relacionados principalmente con la calidad de la representación. Estos resultados se expresan mediante imágenes comparativas de la aplicación obtenidas mediante diferentes técnicas utilizadas para el mejoramiento de la calidad de la imagen.

4.1. Implementación

El resultado principal de la implementación, es la obtención de componentes, dentro de los que se incluyen ficheros, ejecutables y las dependencias existentes entre estos. Además, este flujo especifica cómo van a estar ubicadas físicamente las distintas partes del sistema [10].

4.2. Diagrama de componentes

Un componente representa una parte física del sistema, por ejemplo, una biblioteca de clases, un ejecutable, una tabla, etc., que engloba la implementación de un grupo de clases del diseño. Cada componente define una interfaz que describe su funcionalidad y forma de empleo. El diagrama de componentes, permite conocer a los desarrolladores y clientes la estructura física que tiene el sistema y cómo se relacionan sus partes (Figura 20).

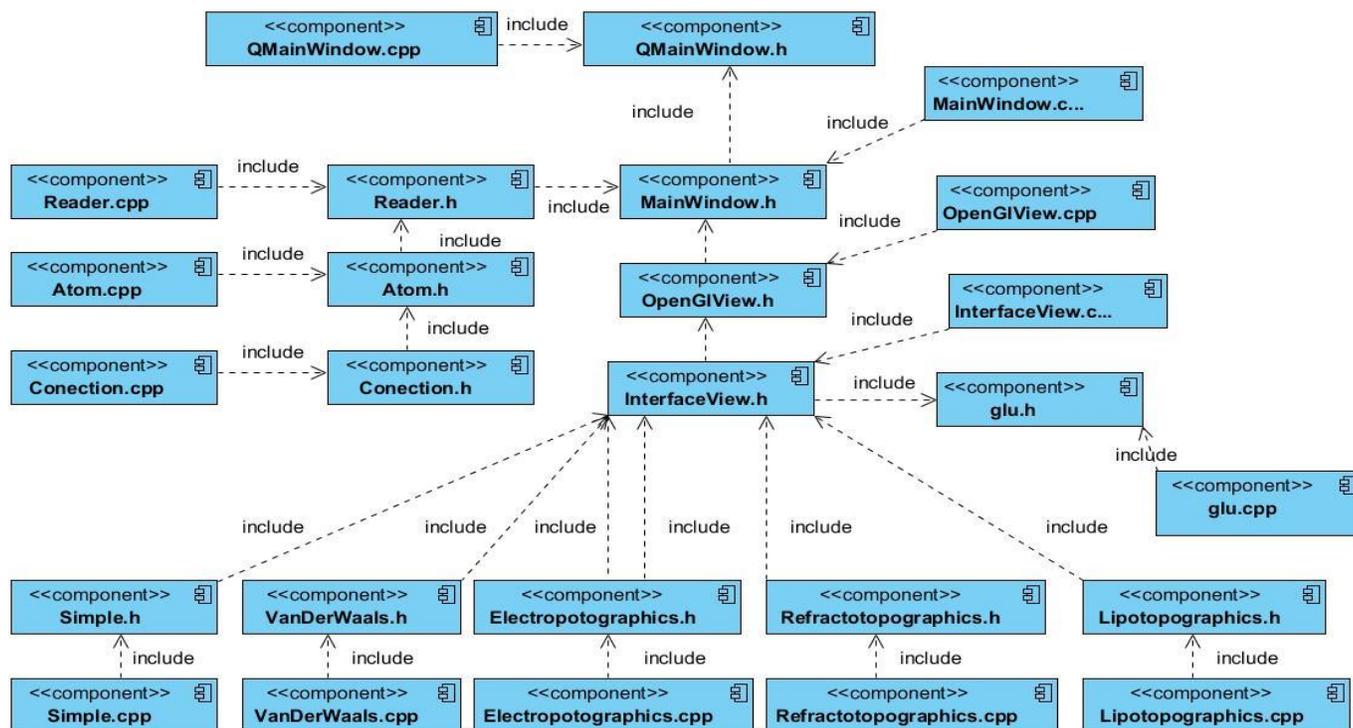


Figura 20. Diagrama de Componentes.

4.3. Resultados

Con el empleo de las herramientas mencionadas se obtuvieron diferentes imágenes de la molécula modelo (Figuras 21-29.) con una calidad comparable a la obtenida con el software profesional HyperChem, mostradas anteriormente (Figura 3, 4, 8).

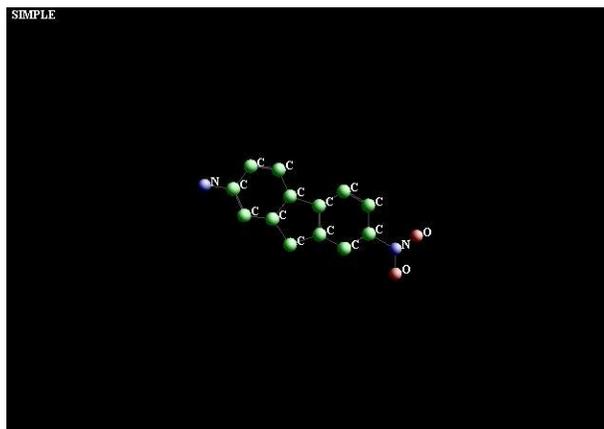


Figura 21. Representación Molecular Simple.

Existen muchas formas convencionales de representar las características atómicas como por ejemplo, a partir del Radio de Van der Waals (Figura 8).

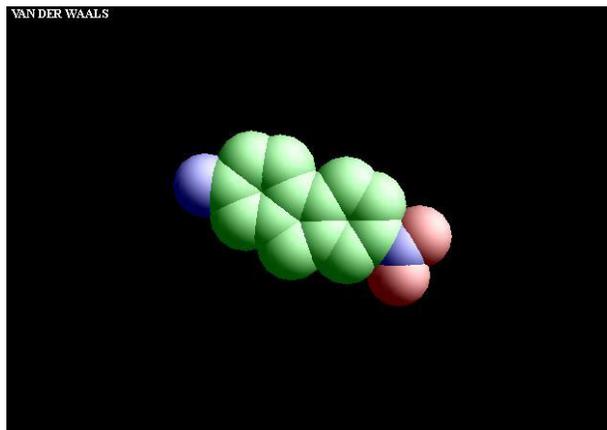


Figura 22. Representación Atómica del Radio de Van Der Waals.

Como se puede observar, en esa forma de representación de la molécula (Figura 7 y 21) el volumen correspondiente a los elementos de un mismo tipo en la tabla periódica es constante. También pueden distinguirse con claridad cada uno de los anillos formados en la estructura molecular, formados por átomos de carbono considerados visualmente idénticos. Se observan en azul los dos átomos de nitrógeno y en rojo los dos átomos de oxígeno. Al igual que con los átomos de carbono, los radios que los definen son iguales. El gráfico se representó a partir de la molécula desprovista de átomos de hidrógeno y por eso el átomo de nitrógeno de la izquierda (tiene enlazados dos átomos de hidrógeno) es aparentemente más grande que el de la derecha que soporta dos átomos de oxígeno (en rojo). Este átomo de nitrógeno parece más pequeño por el efecto de la intersección de las esferas.

Sin embargo, según el resultado del cálculo de los valores de cada índice para cada uno de los átomos de la molécula, estos difieren los unos de los otros (tabla 11). De acuerdo a estos valores, es de esperar que el comportamiento de la propiedad no se distribuya de manera uniforme a lo largo de toda la molécula, lo cual queda evidenciado en las (Figuras 23, 24, 25).

#	Símbolo	Índice del Estado Electrotopográfico	Índice del Estado Refractotopográfico	Índice del Estado Lipotopográfico
1	O	2,0093	2,1363	4,2281
2	O	5,3265	2,1363	4,2281
3	N	-0,6611	-12,0646	-9,8037
4	N	8,1706	8,0498	-2,2609
5	C	4,7269	7,2612	1,5558
6	C	-0,7357	3,0604	-0,3217
7	C	-0,8438	2,5501	-0,3193
8	C	-0,3452	3,1562	-0,1785
9	C	-0,3773	2,9899	-0,1755
10	C	4,7602	7,1565	0,9499
11	C	4,2417	5,5473	0,8969
12	C	4,1352	5,9823	0,7089
13	C	3,9407	5,3401	0,7011
14	C	-0,8550	6,8651	0,9303
15	C	-2,7501	0,8384	0,5202
16	C	3,9798	6,7726	0,8237
17	C	3,4441	5,1015	0,7716

Tabla 11. Valores de los Índices Topográficos de la molécula tomada como muestra.

4.3.1. Interpolación estándar.

En las Figuras 23, 24 y 25 se presenta el resultado de la visualización a partir del modelo planteado en las ecuaciones [1](#), [2](#) y [3](#). Resulta evidente que la representación molecular alcanzada permite distinguir claramente como para las diferentes propiedades, los átomos presentan comportamientos diferentes y el método desarrollado revela las deformidades moleculares atribuibles a la propiedad representada. La representación del estado electrotopográfico (Figura 23) muestra una molécula dividida prácticamente en dos partes, que separan los dos anillos reduciendo el anillo interior de 5 átomos de carbono al puente que los une, dando la idea de que la propiedad que representa este índice, se desplaza por dicho puente y no por enlace directo entre los anillos de seis miembros. Es evidente la diferencia entre los dos átomos de oxígeno y la notable diferencia entre los átomos de nitrógeno, uno de los cuales se observa casi totalmente *sumergido* (con un radio mucho menor), cubierto por los átomos de carbono y de oxígeno enlazados, independientemente de la intersección de las esferas.

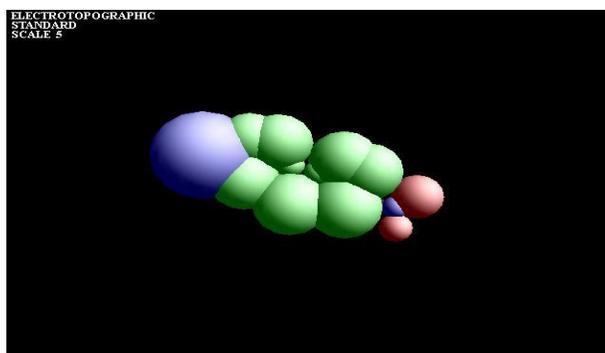


Figura 23. Representación gráfica del Índice Estado Electrotopográfico

Por otra parte, en la (Figura 24), correspondiente al Índice del Estado Refractotopográfico, es evidente como el nitrógeno unido a los dos átomos de oxígeno queda *atrapado, sumergido*, bajo el *campo* de los anillos, y el nitrógeno libre, en azul, aparece mucho más en la superficie. Los dos átomos de oxígeno quedan también *casi sumergidos* dentro de los átomos de carbono.

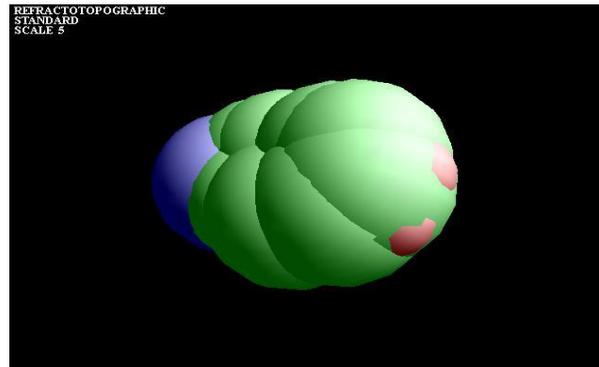


Figura 24. Representación gráfica del Índice del Estado Refractotopográfico

Por último, en la representación del Índice del Estado Lipotopográfico (Figura 25), se distingue la influencia de los átomos de carbono anulares sobre la propiedad, así como el comportamiento equivalente de los dos átomos de oxígeno. En esta representación se observa como el nitrógeno de la derecha está *sumergido* mientras el de la izquierda está más hacia la superficie.

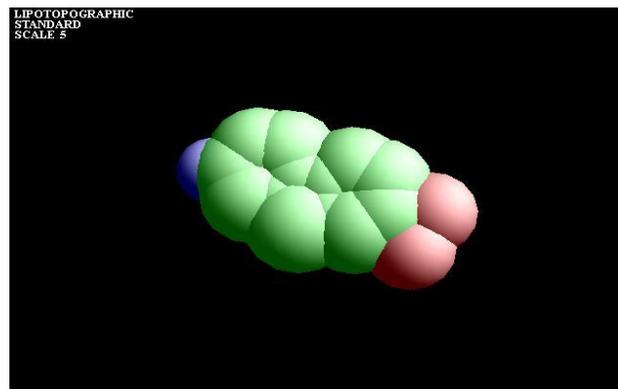


Figura 25. Representación gráfica del Índice del Estado Lipotopográfico

4.3.2. Interpolación lineal.

Durante la investigación se experimentó con otra forma de normalización del radio de cada átomo utilizando una interpolación lineal logrando de esta forma que todos los valores quedasen acotados entre 1 y 2. Para esto se emplearon las ecuaciones [4](#) y [5](#).

Los resultados obtenidos se presentan en la (Figura 26). En este caso, las diferencias son menos marcadas debido a la normalización utilizada sin embargo, se evidencia nuevamente la diferencia existente entre los átomos de un mismo elemento de la tabla periódica de acuerdo al índice que se esté analizando.

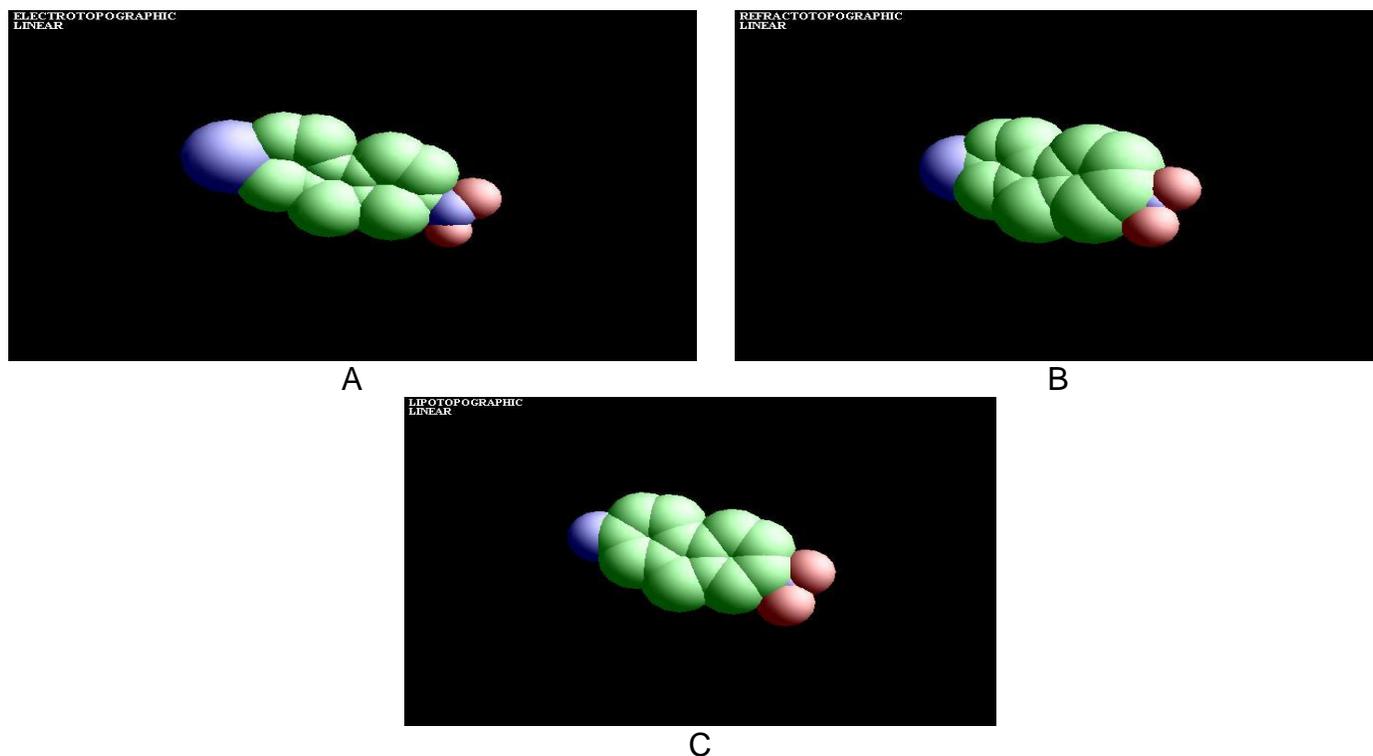


Figura 26. Representación gráfica de los tres índices según la extrapolación de los radios entre 1-2. A) Electrotopográfico B) Refractotopográfico C) Lipotopográfico

Como contribución a la realización de estudios comparativos, a la aplicación se le incorporó la posibilidad de presentar los resultados en una pantalla múltiple que se presenta en la Figura 27. Con esta forma de representación, el especialista puede disponer a voluntad de las diferentes formas de representación de los índices, con lo cual se facilita el análisis y discusión de las relevancias relativas. Esto puede constituir a su vez, un elemento didáctico útil para la impartición de docencia.

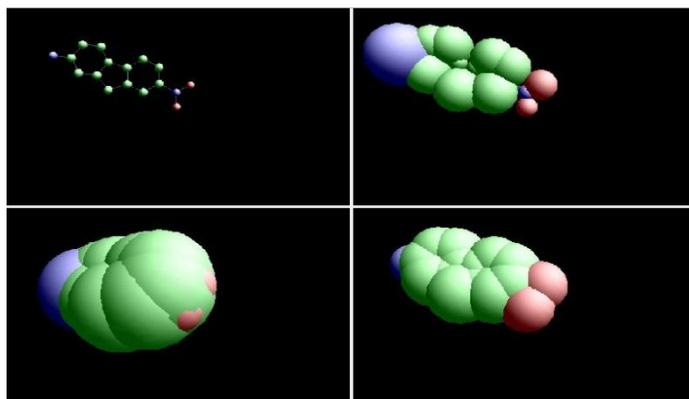
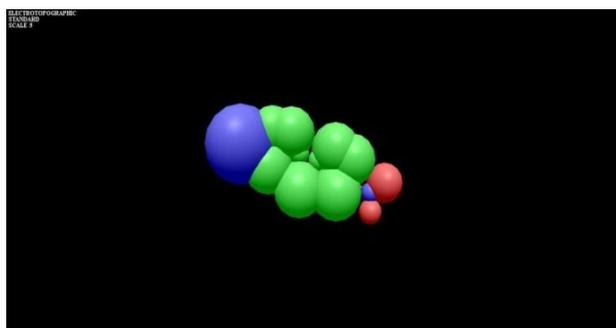


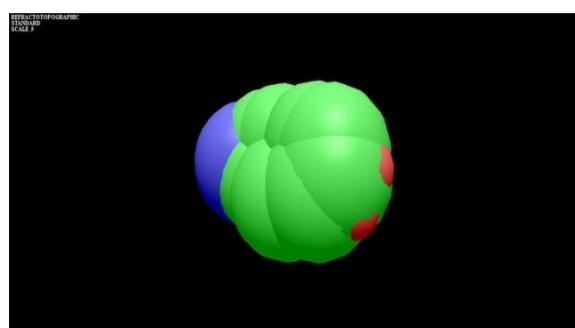
Figura 27. Representación de los índices topográficos híbridos

4.3.3. Resultados de la iluminación sobre GPU.

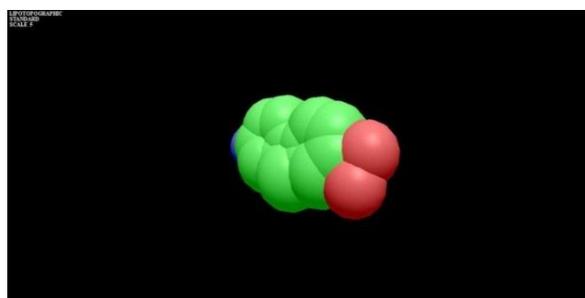
Otra contribución al trabajo en cuestión fue la implementación del cálculo del algoritmo de Phong [17] sobre GPU, este algoritmo se utilizó para modelar la iluminación de la molécula. Los resultados se muestran en las Figuras 27 y 28 con interpolación estándar y lineal respectivamente.



A

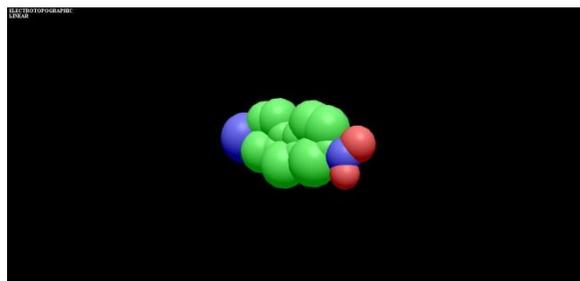


B

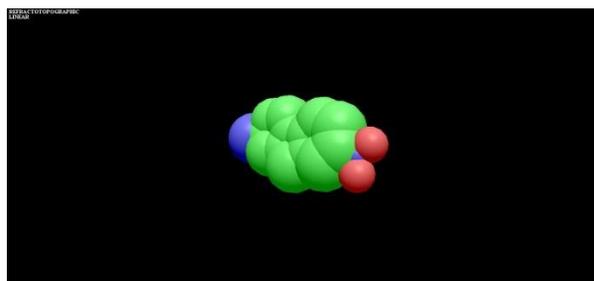


C

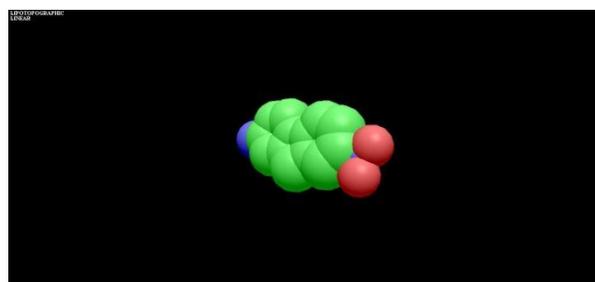
Figura 28. Representación gráfica con normalización estándar sobre GPU.
A) Electrotopográfico B) Lipotopográfico C) Refractotopográfico



A



B



C

Figura 29. Representación gráfica con normalización lineal sobre GPU. A) Electrotopográfico B) Lipotopográfico C) Refractotopográfico.

Iluminación sobre CPU

Iluminación sobre GPU

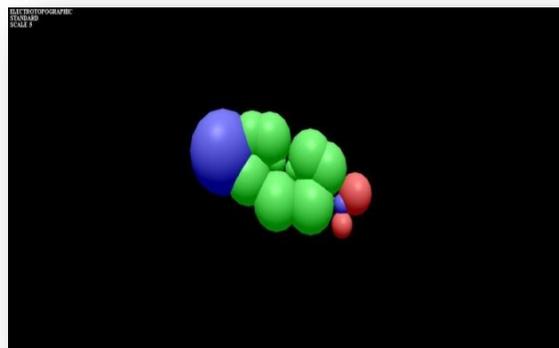
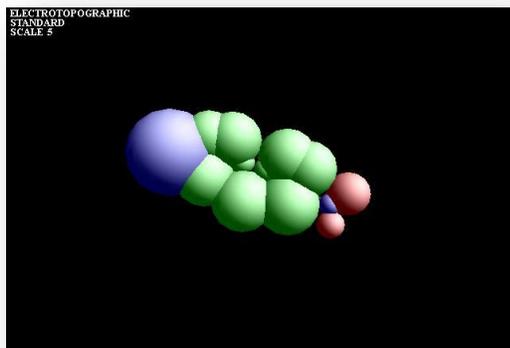


Figura 30 Representación del Índice del Estado Electrotopográfico.

La (Figura 30) muestra la misma imagen de la molécula representada por su Índice del Estado Electrotopográfico, en la imagen de la izquierda la iluminación se hace sobre CPU y en la de la derecha sobre GPU. La ganancia en calidad de las imágenes se evidencia en el nivel de detalle con que se representa la estructura logrando visualizar la misma con colores más nítidos, lo cual facilita la interacción con el usuario que analizará la estructura molecular visualizada.

CONCLUSIONES

- Se logró desarrollar un procedimiento para la visualización de los Índices de Estado Electrotopográfico, Refractotopográfico y Lipotopográfico, definidos en el proyecto de Visualización y Minería de Grafos que se desarrolla en los centros CEDIN, DASTEC e ISEC. No se encontraron en la literatura consultada, reportes de visualización de índices basados en la química grafo-teórica. La representación visual confirma la capacidad de estos índices de mostrar las diferencias de comportamiento de cada uno dentro del grafo molecular.
- Se desarrolló una aplicación prototipo desktop que incluye la visualización y manipulación de las estructuras, así como la capacidad para reconocer el hardware y hacer uso de tarjeta gráfica para incrementar la calidad visual.

RECOMENDACIONES

- Perfeccionar y potenciar el software con imágenes estereoscópicas y hacia otros campos de la visualización molecular como por ejemplo, a macromoléculas, estáticas y en movimiento.
- Ampliar los estudios a la visualización de interacciones entre grafos basada en los índices topográficos estudiados.

BIBLIOGRAFÍA

1. http://www.science.oas.org/RLQ/graficas_moleculares.html . [Online]
2. http://www.science.oas.org/RLQ/mecanica_cuantica.html . [Online]
3. <http://www.science.oas.org/RLQ/espectroscopia.html> . [Online]
4. <http://www.science.oas.org/RLQ/cristalografia.html> . [Online]
5. **Mauri A., Consonni V., Pavan M. Todeschini R.** *DRAGON software: an easy approach to molecular descriptors calculations.* . 2006.
6. **Hall LH, Mohney B y Kier LB.** *The Electrotopological State: Structure Information at the Atomic Level for Molecular Graphs.* 1991.
7. **Nilanjan Adhikaria, Milan K. Maitia and Tarun Jha.** *Predictive comparative QSAR modelling of (phenylpiperazinyl-alkyl) oxindoles as selective 5-HT_{1A} antagonists by stepwise regression, PCRA, FA-MLR and PLS techniques.* 2010.
8. *J.Pharm.Pharmaceut.Sci.* **www.ualberta.ca.**
9. **Rivero, N, Llorente, B and Carrasco, R.** "*Estudio de relación cuantitativa estructura-actividad en un grupo de quinolonas empleando el índice del estado electrotopológico modificado*". *Revista CNIC. Ciencias Químicas.* 28 (1): 25-29, 1997. .
10. **Booch, Grady, Jacobson, Ivar y Rumbaugh, James.** *El Proceso Unificado de Desarrollo de Software.* s.l. : Addison Wesley, 2000. 0-201-57169-2.
11. [Online] Déborah Torres Ponjuán.
http://scielo.sld.cu/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1024-94352009001200005&lng=es&nrm=iso&tlng=es.
12. [Online] <http://accelrys.com/products/discovery-studio/>.
13. [Online] <http://www.umass.edu/microbio/rasmol/>.

14. [Online] 4 28, 2012. www.pymol.org.
15. [Online] 5 1, 2012. <http://www.addlink.es/productos.asp?pid=54>.
16. [Online] [Cited: 4 24, 2012.] <http://www.lenntech.es/tabla-peiodica/radiovanderwaals.htm>.
17. [Online] [Cited: 4 25, 2012.] <http://www.lenntech.es/tabla-peiodica/radio-atomico.htm>.
18. [Online] [Cited: 5 6, 2012.] <http://www.oocities.org/es/annadugarte/ads1/UML.htm>.
19. **Nuñez, Ruben Alcolea.** *Módulo de Iluminación para Visualización Directa de Volumen.* 2011.
20. **John Kessenich, Dave Baldwin, Randi Rost.** *The OpenGL® Shading Language.*
21. [Online] [Cited: 5 7, 2012.] http://rielac.cujae.edu.cu/index.php/riecac/article/viewFile/83/pdf_77.
22. [Online] [Cited: 5 8, 2012.] <http://es.tldp.org/Tutoriales/doc-modelado-sistemas-UML/doc-modelado-sistemas-uml.pdf>.
23. [Online] [Cited: 6 8, 2012.] <http://msdn.microsoft.com/es-es/library/bb972240.aspx>.
24. **Padrón JA, Carrasco R y Pellón RF.** *Molecular descriptor based on a molar refractivity partition using Randic-type graph-theoretical invariant.* 2002.
25. **R. Carrasco, J. A. Padrón and J. Gálvez.** *Definition of a novel atomic index for QSAR: the refractotopological state.* 2004.
26. **S. Samanta, Sk. M. Alam, P. Panda and T. Jha.** *Pharmacophore Mapping of Tricyclic Isoxazoles for Their Affinity Towards Alpha-2 Adrenoreceptors.* 2006.
27. **T. Jha, S. Samanta, S. Basu, A. K. Halder, N. Adhikari, and M. K. Mait.** *QSAR Study On Some Orally Active Uracil Derivatives as Human Gonadotropin-Releasing-Hormone Receptor Antagonists.* 2008.
28. **Ramón Carrasco-Velar, Julio Omar Prieto-Entenza, Aurelio Antelo-Collado, Juan Alexander Padrón-García, Gonzalo Cerruela-García.** *Hybrid Reduced Graph for SAR Studies.* 2011.

29. http://www.science.oas.org/RLQ/mecanica_molecular.html. [Online]
30. <http://www.science.oas.org/RLQ/edmol.html> . [Online]
31. [Online] [Cited: 6 8, 2012.] <http://mit.ocw.universia.net/6.170/6.170/f01/pdf/lecture-12.pdf>.
32. [Online] [Cited: 5 6, 2012.] http://www.scribd.com/cesarmarcano_ve/d/8963147-lenguaje-unificado-de-modelado.
33. [Online] [Cited: 5 6, 2012.] <http://www.oocities.org/es/annadugarte/ads1/UML.htm>.

GLOSARIO DE TÉRMINOS

A

Algoritmo: Es una lista que, dado un estado inicial y una entrada, propone pasos sucesivos para arribar a un estado final obteniendo una solución.

I

IT: Índices Topográficos.

ITH: Índices Topográficos Híbridos.

Interpolación: algoritmo matemático que a partir de varios puntos en el espacio, describe una función que contiene a los puntos intermedios.

R

Realidad Virtual: Simulación generada por computadora de imágenes o ambientes tridimensionales interactivos con cierto grado de realismo físico o visual.

S

Shader: Conjunto de instrucciones capaces de ser ejecutadas por un procesador gráfico.

ANEXOS

ANEXO: IMÁGENES DE LA APLICACIÓN

A continuación se muestran diferentes imágenes del prototipo de software.

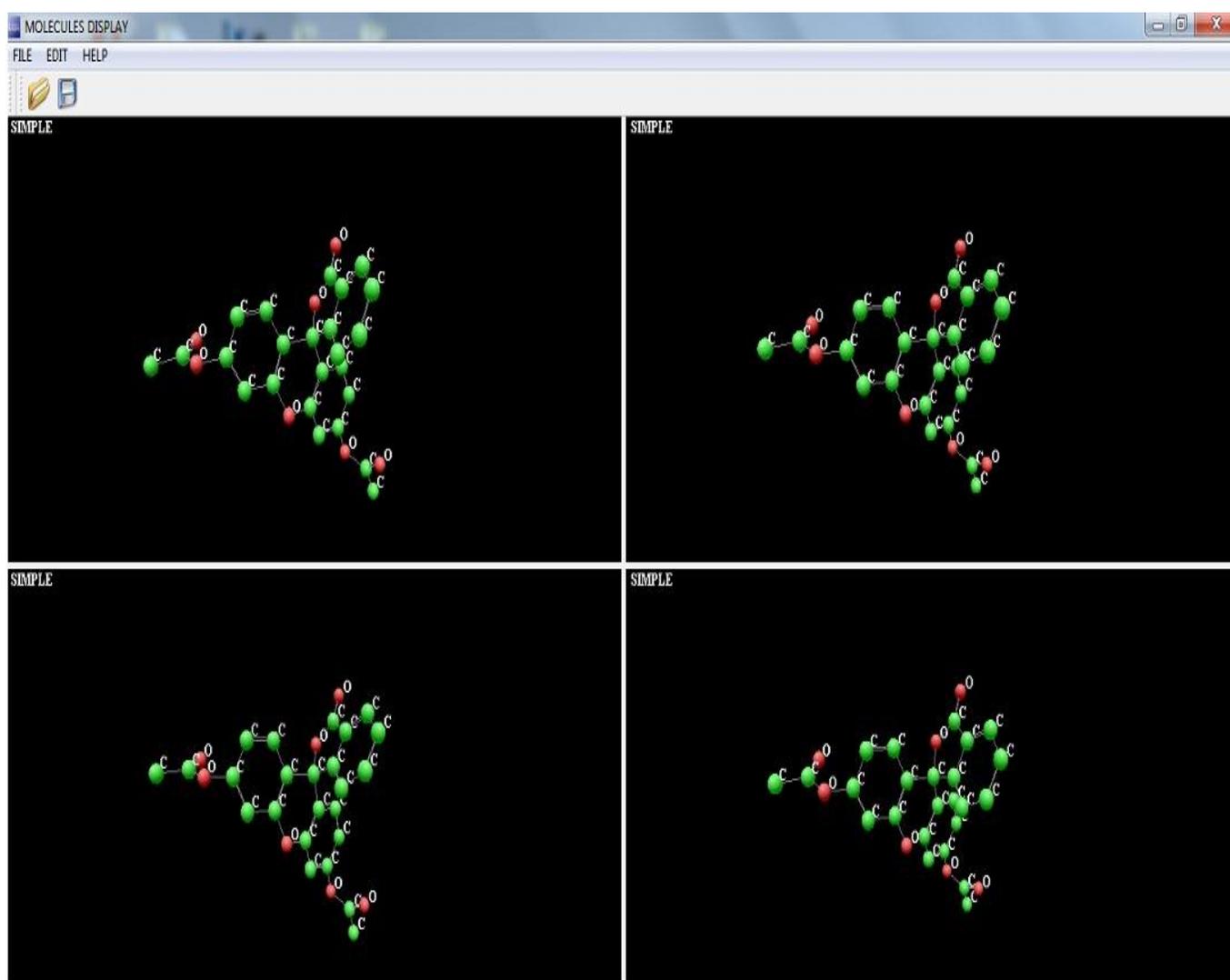


Figura 31. Ventana Principal de la Aplicación.

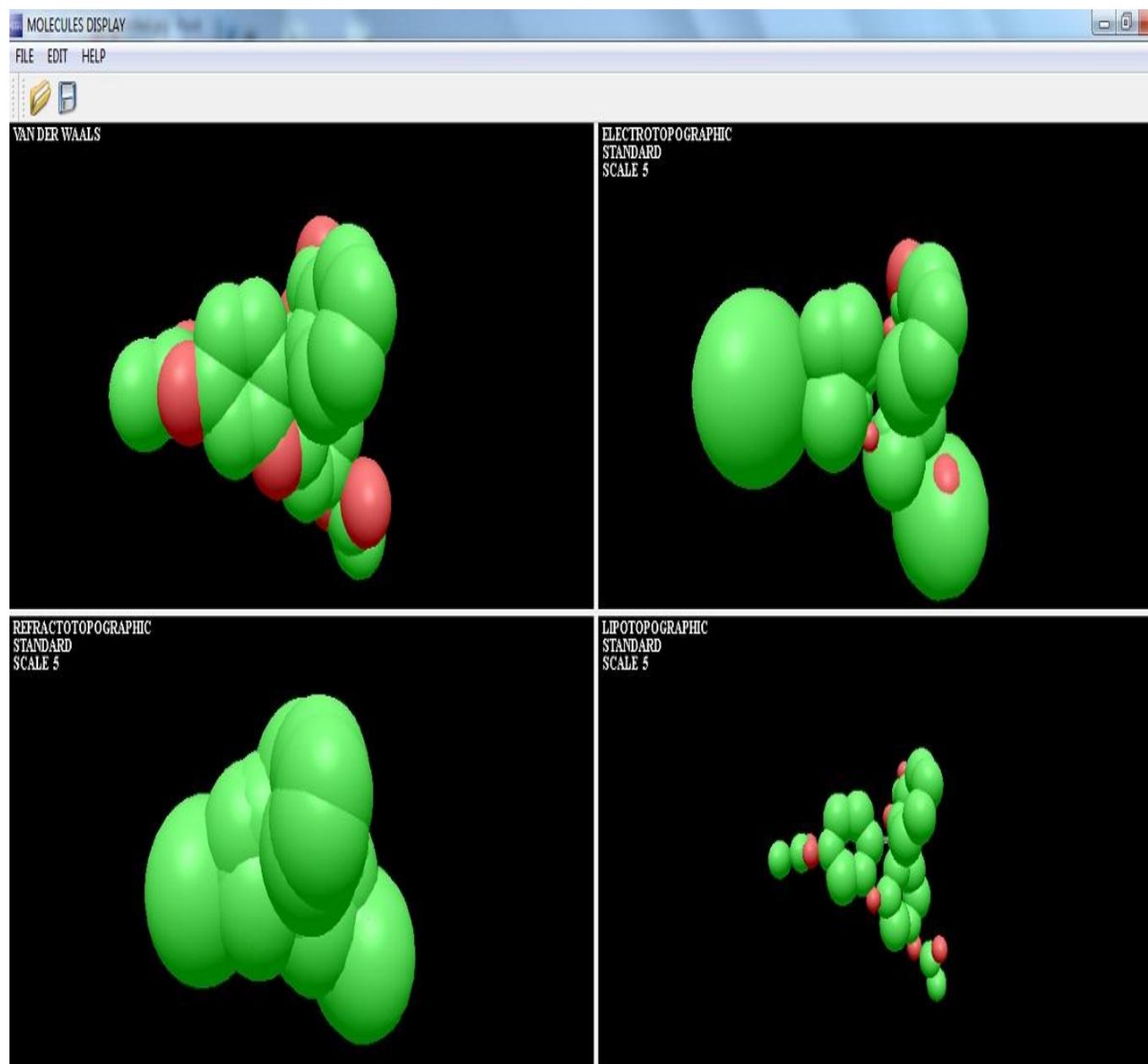


Figura 32. Visualización de una molécula mediante su radio de Van Der Waals y sus tres descriptores topográficos híbridos.

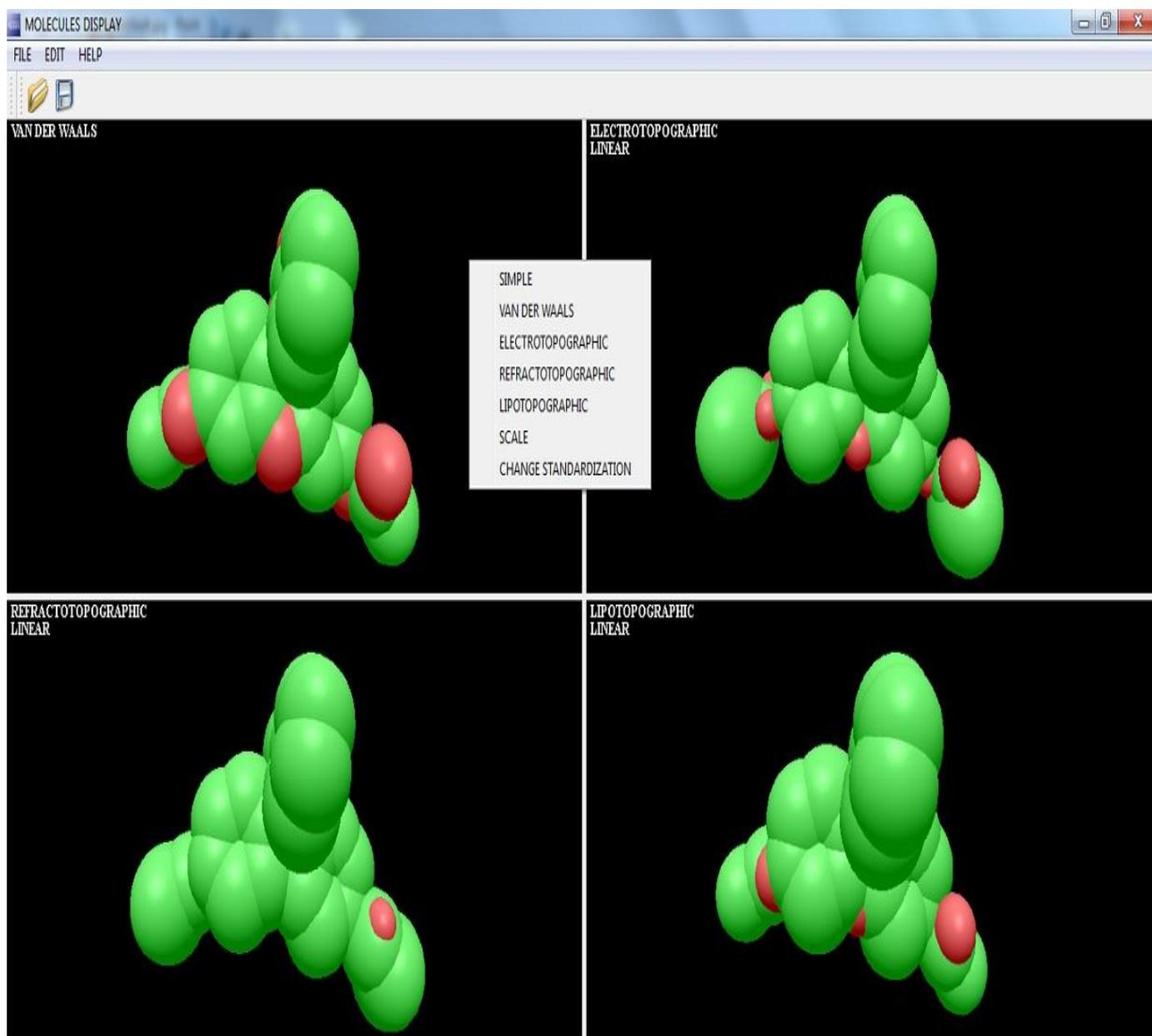


Figura 33. Visualización del menú de opciones.

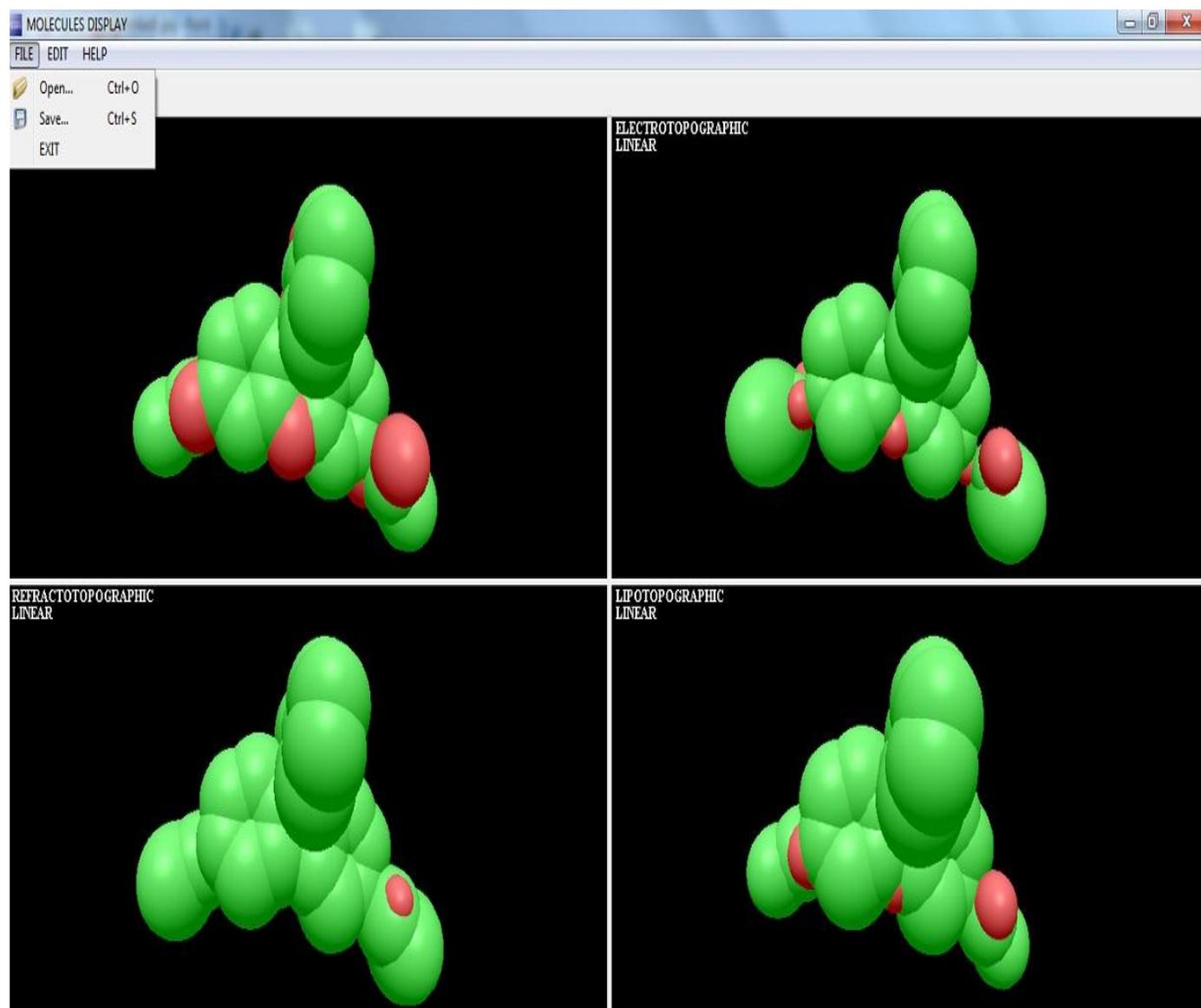


Figura 34. Visualización de las funcionalidades Cargar y Salvar.

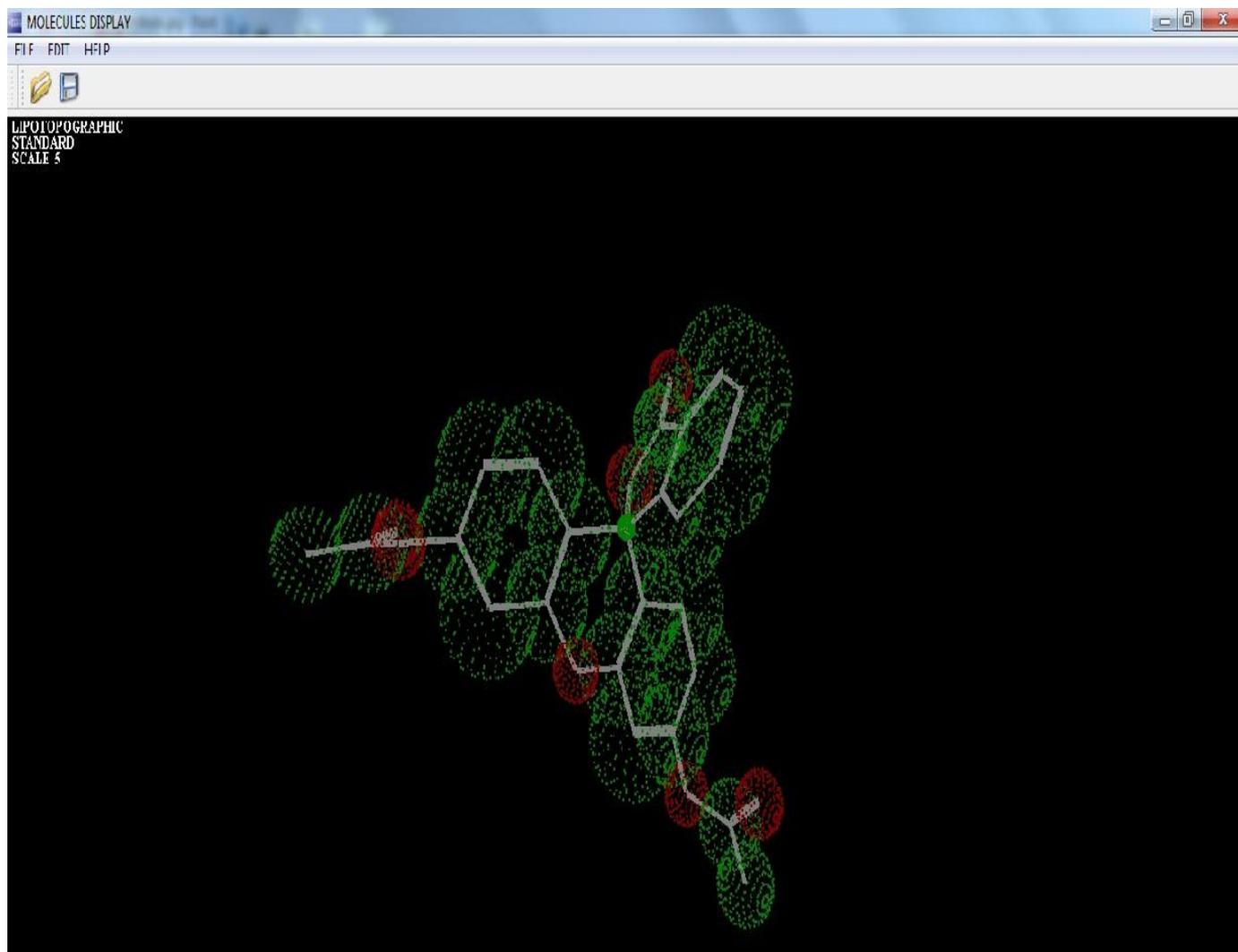


Figura 35. Visualización de una molécula transparente.