

Software de evaluación de datos de espectrometría infrarroja

Trabajo Terminal No. 2016-B015

Alumnos: *Díaz Delgado Daniel Elihu, Mata Ramírez Verónica

Directores: Dr. Tonáhtiu Arturo Ramírez Romero, Miguel Hesiquio Garduño

e-mail: exprogramacion@gmail.com

Resumen – Este trabajo tiene la finalidad de crear un software que proporcione información de cierta sustancia química que se quiera analizar, mediante el análisis de la señal emitida por un instrumento de espectrometría infrarroja¹ que será representada en una gráfica de intensidad contra longitud de onda, en la cual se da énfasis a su grado de concentración, así como los grupos funcionales en los que se clasifica.

Palabras clave – Análisis de señales, espectrometría infrarroja, interpretación de datos

1. Introducción

Existen diferentes técnicas de espectrometría que sirven para identificar la cantidad determinada de sustancias químicas, dentro de estas técnicas las más utilizadas son: espectrometría infrarroja, rayos x, absorción, de masas [1] por mencionar algunas. Este sistema se va a enfocar en la espectrometría infrarroja, en el contexto de esta técnica existen programas computacionales comerciales, que presentan algunas características básicas de la sustancia analizada, sin embargo, dichos programas permiten un análisis cualitativo y no uno cuantitativo, además de que restringe el estudio a un área del espectro.

Cabe mencionar que existen diversas investigaciones que usan la espectrometría infrarroja, como el análisis de: una sustancia específica [2], un material [3] o detección de un problema determinado [4], estos cuentan con un análisis cuantitativo, sin embargo, estos se enfocan únicamente en encontrar ciertos máximos de manera automática sin que el usuario pueda modificar dicha búsqueda.

Algunos de los sistemas computacionales que desempeñan funciones en este ámbito se presentan en la Tabla 1.

Programas	Características	Precio en el mercado
Fullprof Perkin-Elmer	Está formado por un conjunto de programas cristalográficos desarrollados principalmente para análisis de Rietveld [5] de neutrones o una radiografía de datos de difracción de polvo recogidas en el paso constante o variable en el ángulo de dispersión 2θ . [6]	US\$ 978. 00
KnowItAll Vibrational Spectroscopy Edition	KnowItAll espectroscopia vibracional edición de Bio-Rad ofrece soluciones de software para la espectroscopia infrarroja, así como cerca de IR y Raman. [7]	Licencia de suscripción
TOPAS-Academic	Su enfoque principal es en la cristalografía, química del estado sólido y optimización. Programa de Rietveld totalmente funcional para laboratorio de difracción de rayos	1500 € para la primera licencia

¹ El instrumento de espectrometría infrarroja Perkin-Elmer Spectrum 300 es el que va a usar en la elaboración de este sistema que nos será permitido utilizar en ESIQIE (Escuela Superior de Ingeniería Química e Industrias Extractivas).

	x, sincrotrón, de cristal único y longitud de onda fija de neutrones y los datos de TOF. [8]	500 € por cada licencia adicional
Optica Software	Este software se enfoca en la polarización trazado de rayos, no secuencial trazado de rayos, los cálculos de energía, y la optimización de sistemas ópticos en el espacio tridimensional. También lleva a cabo el modelado de sistemas ópticos, la difracción, interferencias frente de onda, y los cálculos de propagación del haz de Gauss. [9]	US\$ 1996.00

Tabla 1. Resumen de productos similares.

2. Objetivo

Crear un software eficiente que permita hacer los respectivos cálculos para la determinación de las características cualitativas y cuantitativas de un mineral a partir de la interpretación de los resultados obtenidos de un espectrómetro infrarrojo, analizando un área general y específica.

Objetivo secundario

- 1.-Optimizar los procesos de análisis de la información obtenida por el espectrómetro infrarrojo en la distinción de los materiales que componen la sustancia analizada.
- 2.-Lograr que el usuario tenga oportunidad de elegir entre analizar un área específica o general del espectro según convenga es decir que además del área que el software de por default, esta se pueda cambiar si así se requiere.
- 3.-Lograr tener ventajas sobre el software comercial y visualizar estas con evaluación comparativa

3. Justificación

Actualmente existen varias técnicas de espectrometría, no obstante, se eligió la técnica de espectrometría infrarroja porque las aplicaciones en el mercado no son elaboradas en México, es decir, aún no se cuenta con un amplio desarrollo en la obtención de resultados útiles para alguna experimentación con los materiales. Es por lo anterior que se pretende que esta técnica tenga la tecnología necesaria en software para manipular los datos, de tal manera que el tratado de la sustancia, utilizando dicho método, tenga resultados de impacto en la eficiencia de los procesos y pueda ser de mayor interés y beneficio para los usuarios, así como también sería un aporte tecnológico en nuestro país.

Debido a que los tipos de software dedicados a la interpretación de datos de la espectrometría infrarroja actuales, no dejan al usuario tener una mayor interacción con los resultados más que el de opciones limitadas al criterio de las aplicaciones y que estas sólo arrojan resultados cualitativos, como solución se propone el desarrollo de un sistema que le dé oportunidad al operador de intervenir en la interpretación de los resultados.

Si bien es cierto que el análisis de un espectro de infrarrojo no es nuevo, y existen sistemas para este fin, los resultados que muestran no son suficientes para determinar la concentración que tiene la sustancia, este es uno de los desperfectos que se pretender eliminar en el sistema propuesto.

La novedad del software que se propone es que podrá además de lo que ya hacen los sistemas existentes, cubrir estas deficiencias que se han identificado, dándole a la espectrometría infrarroja una mayor oportunidad de ser utilizada para sacar un análisis cuantitativo a un menor costo.

El sector al que está dirigido este sistema es la Ingeniería Química, será útil en aquellos lugares donde se necesite hacer un análisis profundo de sustancias o materiales desde un laboratorio en una escuela donde se requiera estudiar una muestra, hasta la industria minero-metalúrgica y petroquímica por mencionar algunas, cuya funcionalidad sería comparar los resultados de dos o más muestras para determinar cuál es el que más conviene emplear en la creación de algún producto.

4. Productos o Resultados esperados

Los productos a entregar

1. Software.
2. Manual técnico del sistema.
3. Manual de usuario.
4. Resultados obtenidos por el sistema.
5. Benchmarking contra el software comercial

A continuación, se muestra un diagrama del sistema.

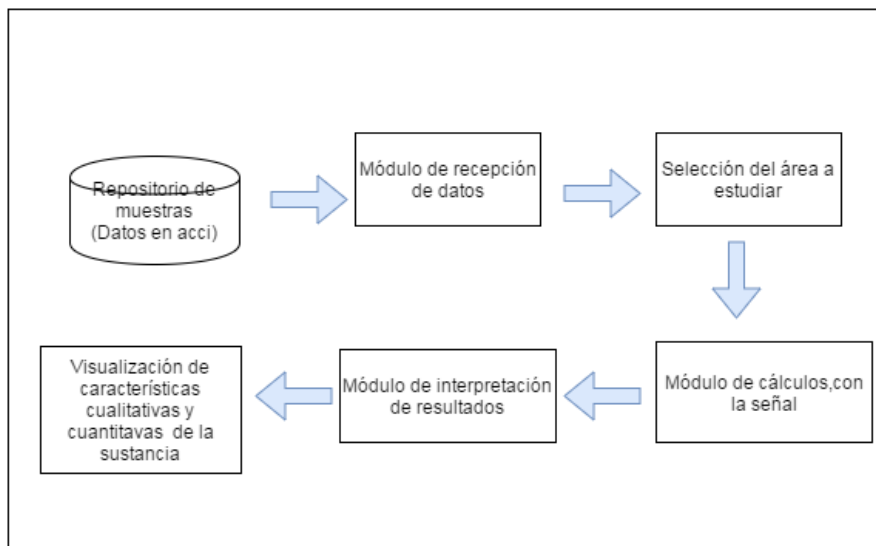


Figura 1. Arquitectura del sistema.

5. Metodología

En la realización del sistema se propone una metodología de desarrollo ágil, debido a que se asume que va a haber cambios en el contexto del proyecto y este tipo de metodologías se adecuan a mantener el control del proyecto con base en los resultados obtenidos de las fases que seguirá y en función de ellos hacer las adaptaciones necesarias. [9]

Scrum es la metodología que se tiene contemplada ya que esta es indicada a utilizar cuando se quiere trabajar utilizando un proceso especializado en el desarrollo de producto, los requisitos son cambiantes o poco definidos y donde la innovación, la flexibilidad y la productividad son fundamentales además de que es necesario que exista una retroalimentación constante de los posibles cambios o adaptaciones que se requieran y Scrum permite identificarlos al poner en marcha cada iteración.

Las fases a seguir con la metodología Scrum, son las siguientes:

- 1.-Planificación de la iteración

Esta es la primera fase de la metodología y es donde se va a recolectar los requisitos más prioritarios y con base su análisis elaboraremos una lista de tareas de las iteraciones necesarias para desarrollarlos y el tiempo que destinado a cada una además de decidir con cual se va a comenzar.

2.-Ejecución de la iteración

Una vez teniendo la planificación de iteraciones entonces se a comenzará el desarrollo donde se realizará una reunión de sincronización en cada ejecución con el objetivo de que uno inspeccione el trabajo que el otro está realizando para poder hacer las adaptaciones necesarias que permitan cumplir con el compromiso adquirido.

En la reunión se deberá responder a tres preguntas:

¿Qué he hecho desde la última reunión de sincronización?

¿Qué voy a hacer a partir de este momento?

¿Qué impedimentos tengo o voy a tener?

3.-Inspección y adaptación

En esta etapa que ocurre en el último día designado a cada iteración se presentan los requisitos completados para analizarlos y revisar si se requiere alguna adaptación o cambio también se analizará cómo ha sido la manera de trabajar y cuáles son los problemas que pudieran haber ocurrido a lo largo de la iteración e impidieron que hubiera un progreso adecuado. [10]

6. Cronograma

El desarrollo de este sistema tomará un periodo de 12 meses de realización. El esquema del trabajo a realizar puede ser apreciado de manera anexa a este documento.

7. Referencias

1. Tipos de espectrometría, Disponible en: http://www.espectrometria.com/tipos_de_espectrometra. Consultado: Septiembre 2016.
2. Shuifang Li, Xin Zhang, Yang Shan, Donglin Su, Qiang Ma, Ruizhi Wen, Jiaojuan Li, “Qualitative and quantitative detection of honey adulterated with high-fructose corn syrup and maltose syrup by using near-infrared spectroscopy,” Agosto 2016. [online] Disponible en: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0308814616313450>
3. Alan J. McCue, Greg A. Mutch, Andrew I. McNab, Steven Campbell, James A. Anderson, “Quantitative determination of surface species and adsorption sites using Infrared spectroscopy”, Abril 2015, Disponible en: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0920586115002229>
4. François Le Naour, Laurent Gadea, Mélanie Danulot, Ibraheem Yousef, Eric Vibert, Mathieu Wavelet, Slávka Kašćáková, Denis Castaing, Didier Samuel, Paul Dumas, Catherine Guettier, “Quantitative Assessment of Liver Steatosis on Tissue Section Using Infrared Spectroscopy”, Noviembre 2014, Disponible en: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0016508514014735>
5. Ramón García Ma. Luisa, Introducción al Método Rietveld, Septiembre 2007, Disponible en: http://xml.ier.unam.mx/xml/ms/Doctos/Manual_RietveldML1.pdf

6. Perkin Elmer, Spectrum 10™ Software, Disponible en: <http://www.perkinelmer.com/product/spectrum-10-software-kit-lx108873>
7. Bio Rad, KnowItAll Vibrational Spectroscopy Edition, Disponible en: <http://www.bio-rad.com/es-pe/category/products/spectroscopy-software>
8. Coelho Software, TOPAS-Academic, Disponible en : <http://www.topas-academic.net#whatisit>
9. Ann Williamson, Optica Software, Disponible en: <http://www.opticasoftware.com>
10. Schenone Marcelo Hernán, Diseño de una Metodología Ágil de Desarrollo de Software, Fiuba,2004, Disponible en : <http://materias.fi.uba.ar/7500/schenone-tesisdegradoingenieriainformatica.pdf>
11. Juan Palacio,Claudia Ruata, Metodología Scrum, TFC, Disponible en : <http://openaccess.uoc.edu/webapps/o2/bitstream/10609/17885/1/mtrigasTFC0612memoria.pdf>

8. Alumnos y Directores

Daniel Elihu Díaz Delgado.- Alumno de la carrera de Ingeniería en sistemas computacionales de la Escuela Superior de Cómputo, Boleta: 2014630122, Tel. 55-25021634 , email: exprogramacion@gmail.com

CARÁCTER: Confidencial

FUNDAMENTO LEGAL: Art. 3, fracc. II, Art. 18, fracc. II y Art. 21, lineamiento 32, fracc. XVII de la L.F.T.A.I.P.G.

PARTES CONFIDENCIALES: No. de boleta y Teléfono.

Firma:_____

Verónica Mata Ramírez.- Alumna de la carrera de Ingeniería en sistemas computacionales de la Escuela Superior de Cómputo, Boleta: 2014630635, Tel.55-62100817 , email: correo.ipn.trabajo@gmail.com

Firma:_____

Dr. Tonáhtiu Arturo Ramírez Romero.- Doctor en ingeniería de sistemas, profesor investigador. Áreas de interés: Inteligencia artificial, bases de datos, desarrollo de sistemas web y sistemas complejos. Publicaciones en congresos nacionales e internacionales, así como en revistas científicas arbitradas.

Departamento de Ciencias e Ingeniería de la Computación, Escuela Superior de Cómputo, Tel. 57296000, ext 52052 email: tonahtiu@yahoo.com

Firma:_____

Título del TT: Software de evaluación de datos de espectrometría infrarroja

TT No.:

Nombre del alumno(a): Daniel Elihu Díaz Delgado

# Actividad	Actividad	ENE	FEB	MAR	ABR	MAY	AGO	SEPT	OCT	NOV
1	Análisis de obtención de datos del espectro									
2	Interpretación de datos									
3	Construcción de un generador de espectro Comenzar a programar el entorno gráfico									
4	Construcción de un generador de espectro • Generar el espectro partir de los datos obtenidos									
5	Documentación del sistema									
6	Reconocimiento de picos del espectro • Ubicar los picos en el entorno gráfico									
7	Documentación del sistema									
8	Calibración del software									
9	Evaluación de TT1									
10	Primeros reconocimientos características básicas de la sustancia • Obtener bases de datos patrón									
11	Documentación del sistema									
12	Añadir el reconocimiento al entorno gráfico									

Título del TT: Software de evaluación de datos de espectrometría infrarroja

TT No.:

Nombre del alumno(a): Verónica Mata Ramírez

# Actividad	Actividad	ENE	FEB	MAR	ABR	MAY	AGO	SEPT	OCT	NOV
1	Análisis de obtención de datos del espectro									
2	Análisis de los parámetros obtenidos									
3	Comenzar documentación del sistema									
4	Construcción de un generador de espectro <ul style="list-style-type: none"> Relacionar los datos obtenidos con el entorno gráfico 									
5	Documentación del sistema									
6	Reconocimiento de picos del espectro <ul style="list-style-type: none"> Empezar a reconocer los picos por medio de los datos 									
7	Documentación del sistema									
8	Calibración del software									
9	Evaluación de TT1									
10	Primeros reconocimientos características básicas de la sustancia <ul style="list-style-type: none"> Obtener bases de datos patrón 									
11	Documentación del sistema									
12	Primeros reconocimientos características básicas de la sustancia									

