



UNIVERSIDAD DE BURGOS  
ESCUELA POLITÉCNICA SUPERIOR  
Grado en Ingeniería Informática



**TFG del Grado en Ingeniería  
Informática**

**Visor de espectros  
Documentación Técnica**



Presentado por Iván Iglesias Cuesta  
en Universidad de Burgos — 28 de junio  
de 2018

Tutor: Dr. José Francisco Díez Pastor  
Cotutor: Dr. César Ignacio García Osorio



---

# Índice general

---

Índice general	I
Índice de figuras	III
Índice de tablas	V
Apéndice A Documentación de usuario	1
A.1. Introducción . . . . .	1
A.2. Requisitos de usuarios . . . . .	1
A.3. Instalación . . . . .	2
A.4. Manual del usuario . . . . .	2

---

# Índice de figuras

---

A.1. Bienvenida . . . . .	2
A.2. Bienvenida después de iniciar sesión . . . . .	3
A.3. Mis ficheros . . . . .	3
A.4. Página para subir un dataset . . . . .	4
A.5. Mensaje de espera al subir un dataset . . . . .	4
A.6. Página para subir un espectro . . . . .	5
A.7. Mensaje de espera al subir un espectro . . . . .	5
A.8. Visualización de dataset . . . . .	6
A.9. Visualización de dataset con espectros . . . . .	7
A.10. Visualización de espectro . . . . .	7
A.11. Página de creación de modelos . . . . .	8
A.12. Formulario de creación de modelos . . . . .	9
A.13. Mensaje de espera en la creación de modelos . . . . .	9
A.14. Resultados de la evaluación . . . . .	10

---

# Índice de tablas

---



## Apéndice A

---

# Documentación de usuario

---

### A.1. Introducción

En este apéndice se explica los requisitos que debe cumplir el usuario para ejecutar la aplicación, como lanzarla y como usarla.

### A.2. Requisitos de usuarios

Al tratarse de una aplicación los requisitos que debe cumplir el usuario son los siguientes:

- Navegador web instalado.
- Cuenta de Google activa.
- JavaScript activo en el navegador.
- *Cookies* activas en el navegador.

La aplicación se ha probado en los siguientes navegadores y se certifica que funciona:

- Google Chrome 67.0.3396.99.
- Chromium 66.0.3359.181.
- Mozilla Firefox 60.0.2.

Aunque la aplicación funciona en dispositivos móvil no se recomienda hacerlo debido a que la visualización sería demasiado pequeña y no estarían disponibles las acciones sobre los gráficos.

### A.3. Instalación

Debido a que se proporciona una aplicación web no es necesario instalarla para poder usarla. Sin embargo, si se quiere proceder a la instalación se pueden seguir las instrucciones en la sección ??.

De cara a probar la aplicación con ejemplos ya cargados se proporciona un cuenta con ejemplos cargados para su uso. El usuario proporcionado es `tfg.visor.ejemplos@gmail.com` y su contraseña es `tfg_visor_ejemplos`.

Hay que tener en cuenta que al ser una **cuenta de prueba** la pueden usar varias personas por lo que se recomienda encarecidamente **no borrar los espectros ni los datasets** que se encuentran subidos.

### A.4. Manual del usuario

En esta sección se enseña al usuario como manejar la aplicación.

#### Inicio

Nada más entrar a la aplicación se muestra la bienvenida. Si no se ha iniciado sesión aparece el mensaje de la imagen A.1.

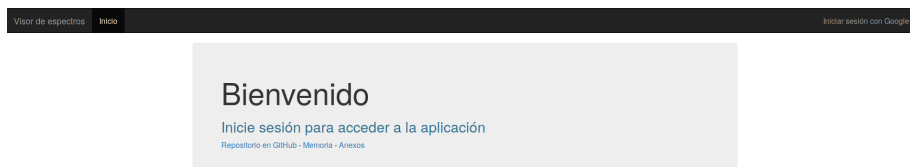


Figura A.1: Bienvenida

Después de iniciar sesión (botón en la esquina superior derecha), o si no se había cerrado sesión anteriormente, se muestra el mensaje de la imagen A.2.





Figura A.2: Bienvenida después de iniciar sesión

Las opciones presentadas en la barra de navegación y en las tarjetas situadas debajo del mensaje son las mismas, con la excepción de que en las tarjetas aparece una pequeña descripción de la acción.

## Mis ficheros

Pulsando en “Mis ficheros” nos aparece la página con todo lo que tenemos asociado en nuestra cuenta (ver figura A.3), organizado en tres columnas, datasets, espectros y clasificadores. Para cada entidad se muestra el nombre, los comentarios y las opciones disponibles.

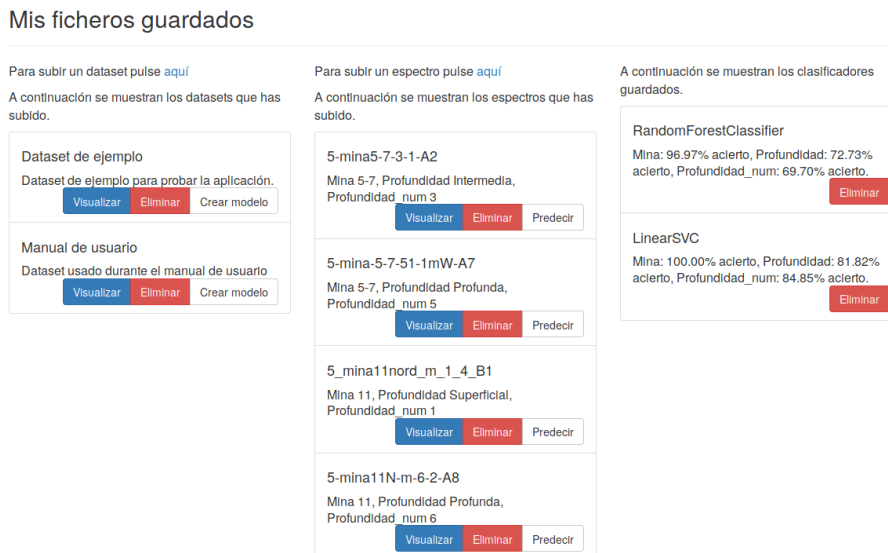


Figura A.3: Mis ficheros

## Subir dataset

Pulsando en “Subir dataset” nos dirigimos a la página en la que podemos subir en conjunto de espectros. A la izquierda se muestran las instrucciones a seguir y unas notas respecto al formulario, presente a la derecha. En la imagen A.4 se puede ver la página con el formulario completo.

### Subida de dataset

#### Instrucciones

1. Pulse [aquí](#) para descargar la plantilla de metadatos.
2. Rellene la plantilla sus los datos, en la columna “Id” escriba el nombre de la carpeta con los ejemplos.
3. Haga un fichero .zip que contenga las carpetas y la plantilla.
4. Seleccione el fichero y complete el resto de datos.
5. Prestione el botón para subir el dataset.

#### Notas

- El nombre de fichero es obligatorio.
- El nombre no puede estar repetido.
- En caso de haber escrito un nombre al seleccionar fichero se usará el nombre del fichero.

#### Nombre del dataset

#### Comentarios sobre el dataset

#### Seleccione un dataset

 todos.zip

Figura A.4: Página para subir un dataset

Después de pulsar el botón “Subir” se muestra un mensaje de espera mientras se procesa la petición (ver figura A.5).



Figura A.5: Mensaje de espera al subir un dataset

Cuando la subida del fichero termine, mostrará la página con los ficheros guardados, indicando que el dataset se ha subido correctamente.

## Subir espectro

Pulsando en “Subir espectro” nos dirigimos a la página en la que podemos subir un espectro. A la izquierda se muestran las indicaciones respecto al formato requerido en el fichero del espectros. En la imagen A.6 se puede ver la página con el formulario completo.

Subida de espectro

**Formato requerido**

- El fichero debe ser del tipo CSV.
- El separador de las columnas tiene que ser punto y coma (;).
- Debe haber dos columnas de datos, la primera con el valor X y la segunda con el valor Y.
- El nombre de fichero es obligatorio.
- El nombre no puede estar repetido.
- En caso de haber escrito un nombre al seleccionar fichero se usará el nombre del fichero.

**Nombre del espectro**

**Comentarios sobre el espectro**

**Seleccione un espectro**

11N-6.1B 8.CSV

Figura A.6: Página para subir un espectro

Después de pulsar el botón “Subir” se muestra un mensaje de espera mientras se procesa la petición (ver figura A.7). Sin embargo, como esta operación suele tardar poco tiempo, el mensaje no llega a leerse.



Figura A.7: Mensaje de espera al subir un espectro

Cuando la subida del fichero termine, mostrará la página con los ficheros guardados, indicando que el espectro se ha subido correctamente.

Eliminado

Cuando se quiera eliminar cualquiera de los elementos guardados, es suficiente con presionar el botón “Eliminar”. A continuación se muestra una ventana para confirmar la acción. Si se acepta la eliminación, se borra el elemento de la cuenta y se muestra un mensaje indicando que la acción se ha completado.

Visualización y procesamiento

Para visualizar un dataset o espectro hay que pulsar en el botón “Visualizar” en el elemento que se desee. Esta acción nos redirige a la vista de visualización.

Datasets

La visualización de datasets se compone de cuatro elementos (figura A.8), la tabla con los espectros contenidos, los controles de procesamiento, la visualización del espectro original y la visualización del espectro procesado.

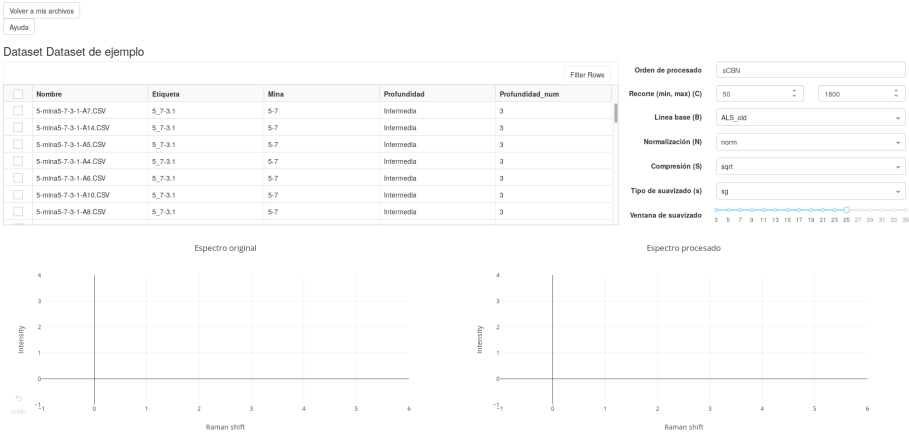


Figura A.8: Visualización de dataset

Para visualizar un espectro hay que seleccionarlo en la tabla. Pasados unos segundos, el espectro original y procesado aparecen en sus gráficos correspondientes. La aplicación soporta la visualización de varios espectros a la vez para poder compararlos (ver figura A.9).



Figura A.9: Visualización de dataset con espectros

El espectro procesado se actualiza automáticamente al modificar las opciones de procesamiento.

## Espectro

La visualización de espectro se compone de tres elementos (ver figura A.10), los controles de procesamiento, la visualización del espectro original y la visualización del espectro procesado. Se proporciona una ayuda integrada en esta vista.

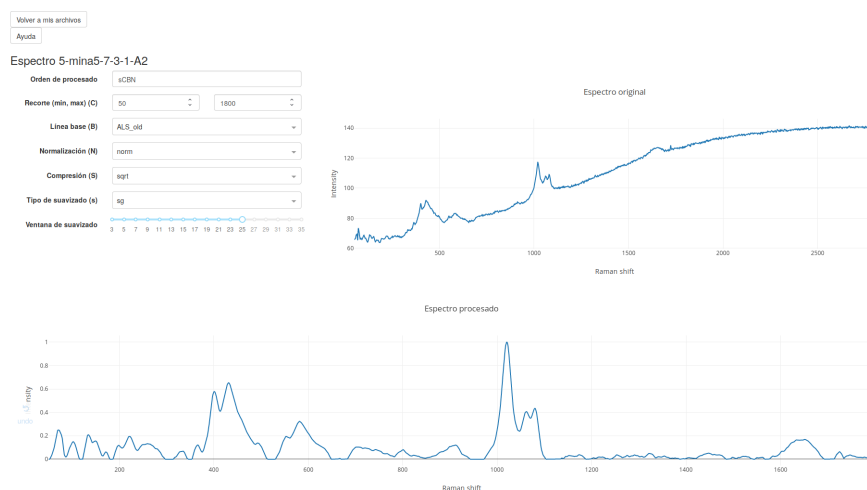


Figura A.10: Visualización de espectro

El espectro procesado se actualiza automáticamente al modificar las opciones de procesamiento.

## Creación de modelos

Para crear un modelo primero hay que escoger que dataset se quiere usar como referencia. Una vez decidido, se pulsa en el botón “Crear modelo”, esto redirige a la página de creación de modelos (ver figura A.11).



Creación de modelo

---

El dataset seleccionado es Manual de usuario

**Consideraciones**

- Los parámetros no introducidos usarán los valores por defecto.
- Dentro de la caja de texto se indica el tipo, los posibles valores y el valor por defecto del parámetro.
- El formulario se genera dinámicamente según el modelo seleccionado a partir de su documentación oficial, por eso los textos aparecen en Inglés.
- Con los errores para lo mismo que en el punto anterior.

**Modelos disponibles**

Selecciona el modelo

Crear y evaluar modelo

Figura A.11: Página de creación de modelos

Para poder crear el modelo hay que seleccionar uno de los disponibles en el desplegable, esta acción hace visible un formulario con los posibles parámetros del modelo (ver figura A.12). El formulario se actualiza cada vez que se cambia el modelo seleccionado.

## Creación de modelo

El dataset seleccionado es Manual de usuario

**Consideraciones**

- Los parámetros no introducidos usarán los valores por defecto.
- Dentro de la caja de texto se indica el tipo, los posibles valores y el valor por defecto del parámetro.
- El formulario se genera dinámicamente según el modelo seleccionado a partir de su documentación oficial, por eso los textos aparecen en inglés.
- Con los errores para lo mismo que en el punto anterior.

**Modelos disponibles**

LinearDiscriminantAnalysis

Crear y evaluar modelo

**solver**

string, optional

Solver to use, possible values: - 'svd': Singular value decomposition (default). Does not compute the covariance matrix, therefore this solver is recommended for data with a large number of features. - 'lsqr': Least squares solution, can be combined with shrinkage. - 'eigen': Eigenvalue decomposition, can be combined with shrinkage.

**shrinkage**

string or float, optional

Shrinkage parameter, possible values: - None: no shrinkage (default). - 'auto': automatic shrinkage using the Ledoit-Wolf lemma. - float between 0 and 1: fixed shrinkage parameter.

**priors**

array, optional, shape (n\_classes,)

Class priors.

**n\_components**

int, optional

Number of components (< n\_classes - 1) for dimensionality reduction.

**store\_covariance**

bool, optional

Additionally compute class covariance matrix (default False), used only in 'svd' solver.

**tol**

float, optional, (default 1.0e-4)

Threshold used for rank estimation in SVD solver.

Figura A.12: Formulario de creación de modelos

Cuando se haya terminado de rellenar el formulario, todos los campos son opcionales, hay que pulsar el botón “Crear y evaluar modelo”. Esto crea el modelo con los parámetros introducidos, lo entrena con el dataset seleccionado y lo evalúa. Mientras se realiza este proceso, se le muestra un mensaje de espera al usuario hasta que se completa la acción (ver figura A.13).

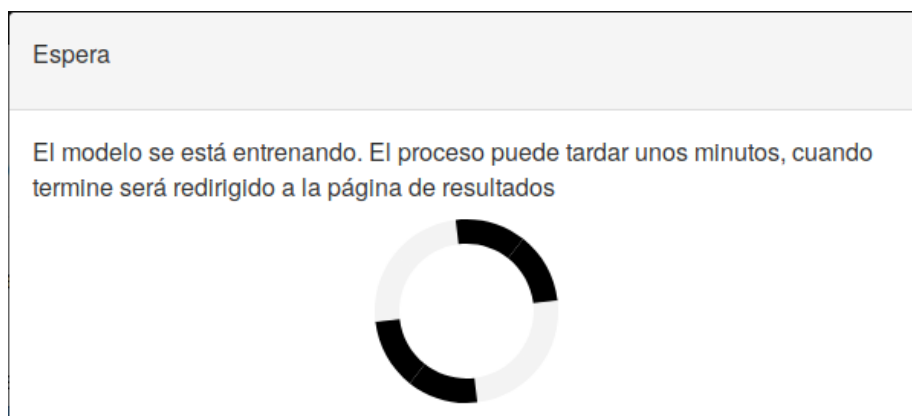


Figura A.13: Mensaje de espera en la creación de modelos

Cuando se termina el entrenamiento, se muestra una página con los resultados de la evaluación y un formulario en caso de querer guardar el clasificador (ver figura A.14). Ambos botones, “Guardar” y “Descartar”, llevan de vuelta a la página con los ficheros guardados, pero al pulsar el de guardar, guarda el clasificador en la cuenta del usuario mientras que pulsar el botón de descarte no.

### Evaluación de resultados

Para el atributo **"Mina"** la exactitud es de 84.85%

Para el atributo **"Profundidad"** la exactitud es de 81.82%

Para el atributo **"Profundidad\_num"** la exactitud es de 84.85%

**Nombre del clasificador**

**Comentarios sobre el clasificador**

Mina: 84.85% acierto, Profundidad: 81.82% acierto, Profundidad\_num: 84.85% acierto.

Guardar

Descartar

Figura A.14: Resultados de la evaluación