

Documento de Preparación y Planificación para la Fase Alpha

Proyecto: ChemsTools

Versión: 0.3.2 (Fin de Pre-Alpha)

Fecha: 18 de julio de 2025

1. Resumen de la Fase Pre-Alpha

Con la finalización de la versión 0.3.1, la fase Pre-Alpha de ChemsTools ha concluido con éxito. Todos los objetivos iniciales han sido alcanzados: se ha establecido una arquitectura robusta, se han implementado las funcionalidades base (autenticación, gestión de moléculas, calculadora, tabla periódica) y se ha creado un entorno de desarrollo estable y automatizado.

Este documento formaliza la transición a la Fase Alpha.

2. Estabilización y Corrección Final de Errores

- **Corrección de Errores Críticos:** Durante las fases 0.3.X, se han identificado y corregido todos los errores críticos de configuración, renderizado (Turbopack), dependencias (Tailwind CSS) y de ejecución (Locust).
- **Estabilización de Funcionalidades:** Todas las funcionalidades implementadas hasta la fecha (Autenticación, CRUD de Moléculas, Calculadora de Masa Molar, Tabla Periódica, Telemetría) han sido probadas y se consideran estables para su propósito actual. El flujo de datos entre el frontend y el backend es consistente.

3. Revisión Completa de la Documentación

Se ha realizado una revisión final de toda la documentación generada para asegurar que esté actualizada y sea útil para la siguiente fase.

- **Documentación Técnica:** Los documentos de arquitectura, guías de integración y manuales preliminares están completos y reflejan el estado actual del proyecto.
- **Documentación de API:** La documentación interactiva generada por drf-spectacular en <http://localhost:8000/api/schema/swagger-ui/> está actualizada y describe todos los endpoints disponibles.
- **Guía de Usuario:** El archivo USER_GUIDE.md proporciona instrucciones claras para que los primeros testers (equipo interno) puedan utilizar todas las funcionalidades de la Pre-Alpha.
- **Changelog:** El archivo CHANGELOG.md ha sido actualizado hasta la versión

0.3.1, proporcionando un historial claro del desarrollo.

4. Preparación del Entorno de Prueba para la Fase Alpha

Para la fase Alpha, necesitaremos un entorno de pruebas más formal que se asemeje a un entorno de producción.

- **Base de Datos de Pruebas Persistente:** Se creará un nuevo archivo `docker-compose.alpha.yml` que utilizará un volumen de Docker nombrado y persistente para la base de datos (`postgres_alpha_data`). Esto permitirá que los datos de prueba no se pierdan entre reinicios y que múltiples testers puedan compartir el mismo estado.
- **Credenciales y Variables de Entorno:** Se creará un archivo `.env.alpha` con variables de entorno específicas para el entorno de pruebas, como `DEBUG=False` para simular de manera más realista el comportamiento en producción.
- **Proceso de Despliegue Simulado:** El equipo utilizará un script para levantar el entorno Alpha (`docker-compose -f docker-compose.alpha.yml up --build`), simulando un proceso de despliegue simple.

5. Planificación Detallada de la Fase Alpha

La fase Alpha se centrará en la implementación de las herramientas químicas que constituyen el núcleo de la propuesta de valor de ChemsTools. Se dividirá en tres sprints principales, incorporando tus sugerencias del documento "ChemsTools Resumen".

Alpha 1.0: Articulaciones - Módulos Básicos y Conexiones

- **Objetivo:** Integrar las primeras herramientas de cálculo y consulta, y mejorar la infraestructura del backend.
- **Frontend:**
 - **Refinar Componentes de UI:** Aunque no integraremos Material-UI para no entrar en conflicto con Tailwind, seguiremos su filosofía creando componentes base reutilizables (botones, inputs, modales) con Tailwind para asegurar una consistencia visual en toda la aplicación.
 - **Nuevas Páginas/Componentes:** Se crearán las interfaces para la Calculadora de Disoluciones y el Glosario.
- **Backend:**
 - **Nuevos Endpoints de API:**
 - Desarrollar un endpoint para la **Calculadora de Disoluciones** que acepte soluto, solvente y concentraciones, y devuelva los cálculos de % m/m y % m/v.

- Crear un endpoint para la **Calculadora de pH/pOH**.
 - Implementar un endpoint para el **Glosario de Términos Químicos**.
- **Infraestructura:**
 - **Instalar y Configurar Redis:** Añadir Redis al docker-compose.yml.
 - **Implementar Caché Básica:** Utilizar Redis para cachear respuestas de API que no cambian frecuentemente, como los datos de la tabla periódica o el glosario, para mejorar el rendimiento.
- **Módulos Principales a Entregar:**
 - **Calculadora de Disoluciones:** Funcionalidad completa.
 - **Glosario de Términos Químicos:** Una página de búsqueda y visualización de términos.

Alpha 2.0: Órganos - Herramientas de Estructura y Reactividad

- **Objetivo:** Implementar herramientas de análisis químico más complejas.
- **Funcionalidades Clave:**
 1. **Generador de Estructuras de Lewis:**
 - **Backend:** Crear un endpoint que, dada una fórmula simple, devuelva la estructura de Lewis.
 - **Frontend:** Implementar un componente visualizador que renderice la estructura de Lewis recibida.
 2. **Simulador Básico de Reacciones:**
 - **Backend:** Desarrollar un endpoint que acepte reactivos y prediga productos de reacciones simples.
 - **Frontend:** Crear una interfaz para introducir reactivos y ver los productos.
 3. **Quizzes Interactivos (Contenido):**
 - **Backend:** Poblar la base de datos con un set inicial de preguntas.
 - **Frontend:** Integrar el contenido en el componente de quiz, mostrando preguntas y validando respuestas.

Alpha 3.0: Músculos - Visualización y Conectividad

- **Objetivo:** Introducir la visualización 3D y la integración con fuentes de datos externas.
- **Funcionalidades Clave:**
 1. **Visualizador 3D Básico:**
 - **Backend:** Crear un endpoint que pueda convertir una estructura 2D (SMILES) a coordenadas 3D.
 - **Frontend:** Implementar un componente utilizando **Three.js** que renderice el modelo 3D de una molécula seleccionada y permita al usuario rotarla y hacer zoom.

2. Integración con APIs Externas (PubChem):

- **Backend:** Desarrollar un servicio para buscar compuestos en la API pública de PubChem por nombre.
- **Frontend:** Crear una nueva página de "Búsqueda" donde el usuario pueda buscar un compuesto y ver los resultados obtenidos de PubChem.