

**Profesor:** Jesus Alvarado Huayhuaz  
Universidad Nacional Mayor de San Marcos

# LA QUÍMICA EN LA INGENIERÍA DE SOFTWARE

---

**Desarrollando un programa aplicado a la química**



**Alumno:** De la Cruz Aguilar Gabriel Sonny

**Docente:** Jesús Alvarado Huayhuaz

**Escuela profesional:** Ingeniería de software

**LIMA - 2023**

## **1. Áreas de aplicación**

### **1.1 Áreas de acción en Ingeniería de software**

- Desarrollador de software, administración de base de datos

### **1.2. Áreas de acción de la Química**

- Química medicinal y química orgánica.

### **1.3 Realizar el match entre 1.1 y 1.2**

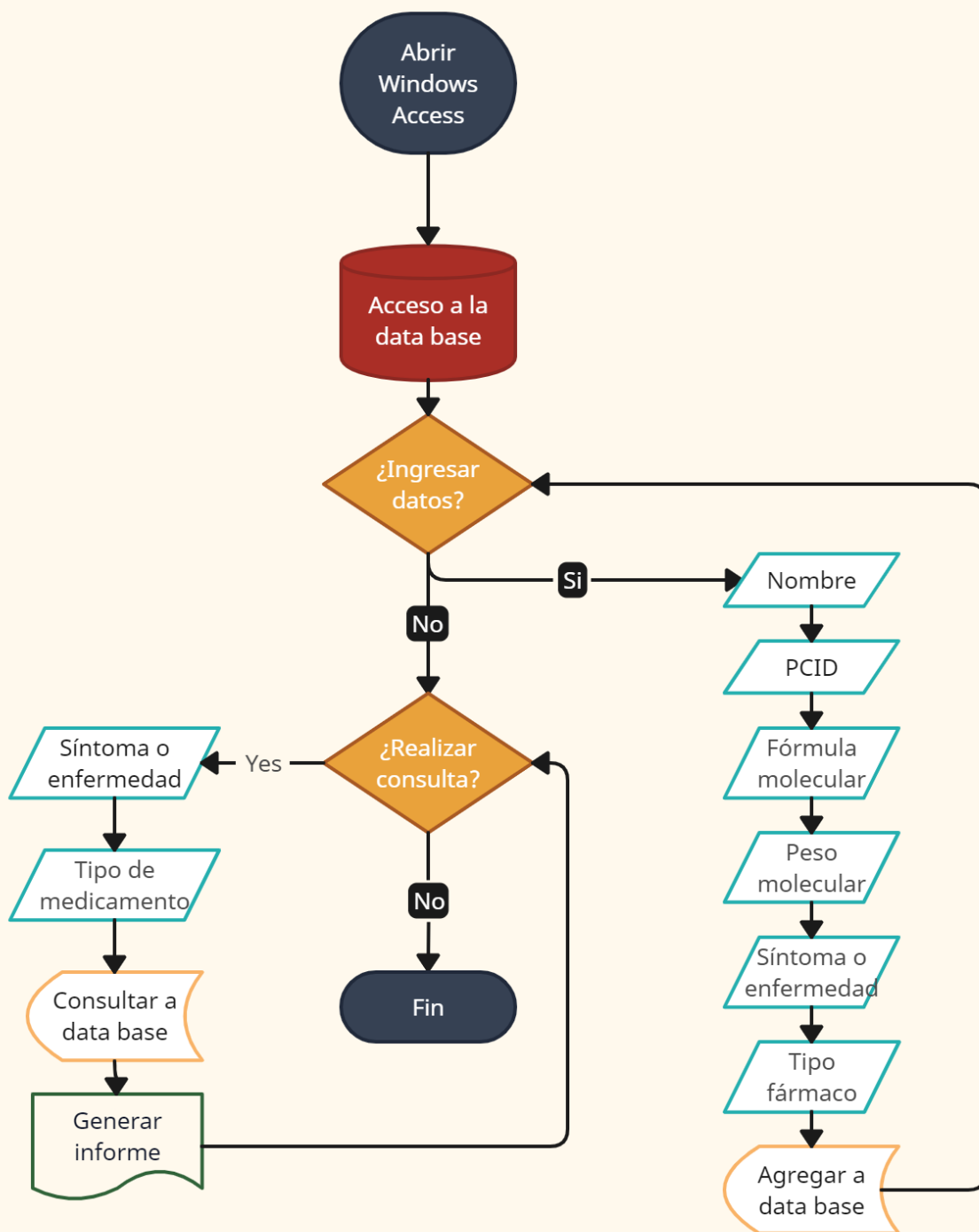
El área de acción del programa desarrollado se basa en la utilización de una base de datos para poder proporcionar información sobre distintos tipos fármacos, que pueden ser útiles para un ingeniero químico. Y por parte de un ingeniero de software, el aprovechamiento de la información al momento de la elaboración de la base de datos.

## **2. Área de tu interés**

Las problemáticas abordadas en este proyecto principalmente se basan en la escasa cantidad de bases de datos de fármacos que están relacionados con enfermedades o síntomas que pueden presentar las personas. Si bien existen bases de datos que proporcionan esta información, muchas de estas están en desarrollo o pueden ser consultadas por medio de un pago. La finalidad de este proyecto es proporcionar información sobre algunos tipos de fármacos comúnmente utilizados para el tratamiento de enfermedades, cabe aclarar que este proyecto está relacionado meramente con un fin educativo y no debe ser utilizado como una fuente de automedicación.

## **3. Metodología**

### **3.1 Diagrama de proceso**



### 3.2 Herramientas (software, hardware, etc)

Durante la elaboración de este proyecto se tuvieron en consideración varios programas como lo son:

- Visual Studio Code
- C++
- Python
- Microsoft Excel
- Microsoft Access
- PubChem
- CSD Symmetry

De los cuales se fueron descartando algunos de ellos y para la elaboración final del proyecto se utilizó

- Microsoft Access
- PubChem
- CSD Symmetry

Para una obtención más segura de los datos de los fármacos se utilizó el vademécum de fármacos, el cual nos proporciona gran cantidad de información, como lo son medicamentos que contienen dichos fármacos, o al tipo de fármaco que pertenece. El aspecto más importante considerado a partir del vademécum de fármacos fueron las enfermedades o síntomas que son tratados con estos.

### 3.3 Glosario de términos

**B.**

**Base de datos:** Programa capaz de almacenar gran cantidad de datos, relacionados y estructurados, que pueden ser consultados rápidamente de acuerdo con las características selectivas que se deseen.

**D.**

**Data base:** Programa capaz de almacenar gran cantidad de datos, relacionados y estructurados, que pueden ser consultados rápidamente de acuerdo con las características selectivas que se deseen.

**F.**

**Fármacos:** Sustancia que sirve para curar o prevenir una enfermedad, para reducir sus efectos sobre el organismo o para aliviar un dolor físico.

### 3.4 Utilice un artículo o repositorio de código (u otro) como referencia.

La base de datos desarrollada está inspirada en un modelo similar de base de datos elaborada con Microsoft Access del siguiente enlace:

<https://www.ccdc.cam.ac.uk/solutions/software/csdsymmetry/>

## 4. Resultados

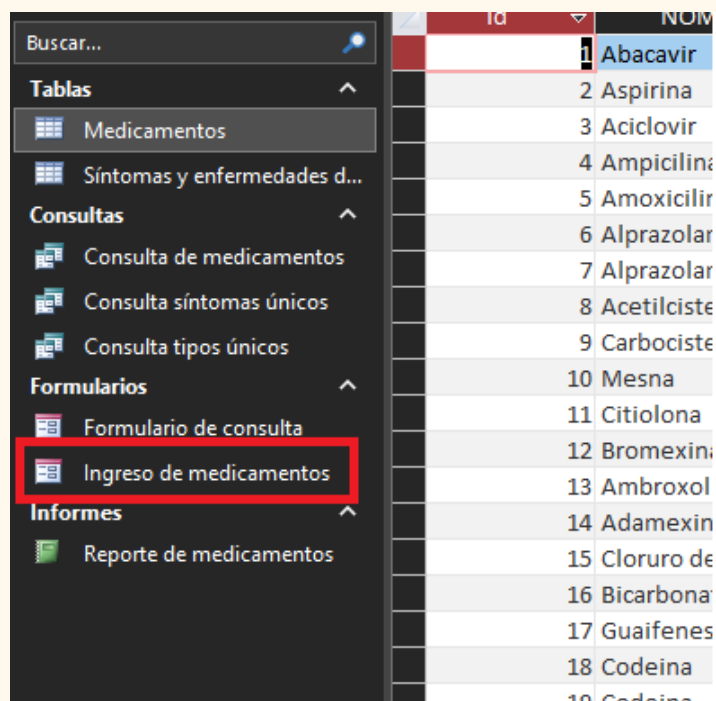
El proyecto realizado, como se definió en el apartado de áreas de interés, fue realizado con el objetivo de proporcionar una base de datos de fármacos la cual proporcione fármacos de acuerdo con el ingreso de ciertos síntomas y enfermedades. A continuación se mostrará el apartado de la base de datos que almacena la información de los diversos fármacos:

| Id | NOMBRE              | PUBCHEM ID | FÓRMULA MOLECULAR | PESO MOLECU  | TIPO                    | SÍNTOMA/ENFERMEDAD |
|----|---------------------|------------|-------------------|--------------|-------------------------|--------------------|
| 1  | Abacavir            | 441300     | C14H18N6O         | 286.33 g/mol | Antiviral               | VIH                |
| 2  | Aspirina            | 2244       | CH3COOC6H4COOH    | 180.16 g/mol | Analgésico              | Malestar general   |
| 3  | Aciclovir           | 135398513  | C8H11N5O3         | 225.20 g/mol | Antiviral               | Herpes             |
| 4  | Ampicilina          | 6249       | C16H19N3O4S       | 349.4 g/mol  | Antibiótico             | Infecciones        |
| 5  | Amoxicilina         | 33613      | C16H19N3O5S       | 365.4 g/mol  | Antibiótico             | Infecciones        |
| 6  | Alprazolam          | 2118       | C17H13ClN4        | 308.8 g/mol  | Sedante Ansiolítico     | Ansiedad           |
| 7  | Alprazolam          | 2118       | C17H13ClN4        | 308.8 g/mol  | Sedante Ansiolítico     | Insomnio           |
| 8  | Acetilcisteína      | 12035      | C5H9NO3S          | 163.20 g/mol | Mucolítico              | Mucosidad          |
| 9  | Carbocisteína       | 193653     | C5H9NO4S          | 179.20 g/mol | Mucolítico              | Mucosidad          |
| 10 | Mesna               | 23662354   | C2H5NaO3S2        | 164.18 g/mol | Mucolítico              | Mucosidad          |
| 11 | Citalopram          | 14520      | C6H9NO2S          | 159.21 g/mol | Mucolítico              | Mucosidad          |
| 12 | Bromexina           | 2442       | C14H20Br2N2       | 376.13 g/mol | Mucolítico/Expectorante | Mucosidad          |
| 13 | Ambroxol            | 108013     | C13H19Br2ClN2O    | 414.56 g/mol | Mucolítico/Expectorante | Mucosidad          |
| 14 | Adamexina           | 173505     | C18H25Br2ClN2     | 464.7 g/mol  | Mucolítico/Expectorante | Mucosidad          |
| 15 | Cloruro de amonio   | 25517      | ClH4N             | 53.49 g/mol  | Expectorante salino     | Mucosidad          |
| 16 | Bicarbonato amónico | 14013      | CH5NO3            | 79.056 g/mol | Expectorante salino     | Mucosidad          |
| 17 | Guaifenesina        | 3516       | C10H14O4          | 198.22 g/mol | Expectorante            | Mucosidad          |
| 18 | Codeína             | 5284371    | C18H21NO3         | 299.4g/mol   | Antitusivo opiáceo      | Dolor moderado     |
| 19 | Codeína             | 5284371    | C18H21NO3         | 299.4g/mol   | Antitusivo opiáceo      | Tos seca           |
| 20 | Cloperastina        | 2805       | C20H24ClNO        | 329.9g/mol   | Antitusivo no opiáceo   | Tos seca           |
| 21 | Oxolamina           | 13738      | C14H19N3O         | 245.32g/mol  | Antitusivo no opiáceo   | Tos seca           |
| 22 | Fominaoben          | 3407       | C21H24ClN3O3      | 401.9g/mol   | Antitusivo no opiáceo   | Tos seca           |
| 23 | Paracetamol         | 1983       | C8H9NO2           | 151.16 g/mol | Analgésico              | Dolor              |
| 24 | Ibuprofeno          | 3672       | C13H18O2          | 206.28 g/mol | Analgésico              | Dolor              |

Esta base de datos es de carácter editable, es decir, se pueden tanto agregar como eliminar fármacos de la base de datos, para que esta tarea se vea mucho más simplificada, se realizó un apartado en el cual se ingresan los medicamentos, con el respectivo síntoma que le corresponda, para lograr llenar todos los espacios se recomienda utilizar la base de datos PubChem y el

vademécum de medicamentos, esto con la finalidad de que los datos proporcionados provengan de una fuente confiable.

A continuación, se mostrará el apartado en el cual se pueden agregar medicamentos:

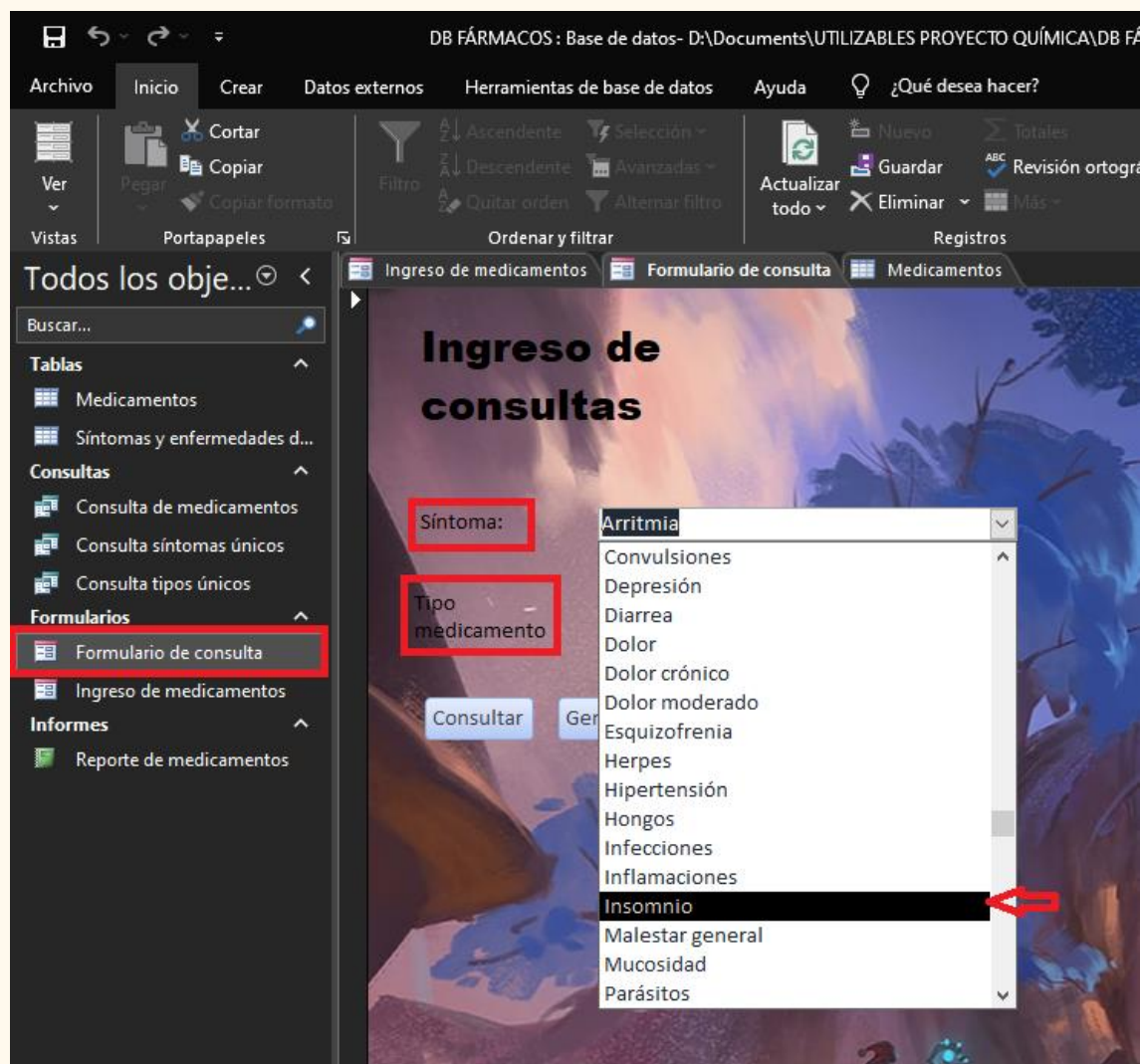


Al abrir este apartado se mostrará un cuadro de datos rellenables, en este cuadro están disponibles las opciones de ver todos los registros, así como ir al último y primer registro. Aparte de estos añadidos la función principal de este apartado es añadir medicamentos. Este proceso de llenado de datos no ha sido realizado de manera automatizada, sin embargo, es una manera más sencilla de ingresar los datos de los fármacos.

| Medicamentos       |  |                 |
|--------------------|--|-----------------|
| Id                 | 58   | <b>Agregar</b>  |
| NOMBRE             | "Nombre del fármaco"   | siguiente       |
| PUBCHEM ID         | "ID localizada en la base de datos de PubChem"               | anterior        |
| FÓRMULA MOLECULAR  | "Fórmula molecular obtenido en la base de datos de PubChem"  |                 |
| PESO MOLECULAR     | "Peso molecular obtenido en la base de datos de Pubchem"     |                 |
| SÍNTOMA/ENFERMEDAD | "Síntoma/enfermedad obtenido del vademécum de medicamentos"  | Último registro |
| TIPO               | "Tipo de medicamento obtenido del vademécum de medicamentos" | Primer registro |

Una vez añadido el fármaco, se presiona el botón de agregar en la parte superior derecha, y automáticamente se agregará a la base de datos, para observar que estos datos han sido agregados correctamente, se recomienda actualizar el apartado de la base de datos.

Continuando con las funciones del programa, tenemos la función principal y el propósito por el cual se decidió realizar el proyecto. Existe un apartado llamado "Formulario de consulta" en el cual al ser abierto, se mostrará una interfaz en la cual pide como datos el síntoma o la enfermedad deseada a buscar, y el tipo de medicamento que se desea consultar. En caso de no conocer el tipo de medicamento, no es necesario rellenar el campo, simplemente bastaría con colocar un asterisco (\*) en el apartado de "Tipo medicamento".



Otro aspecto a mencionar es que los síntomas que se pueden ingresar, son los que se muestran en el desplegable de síntomas, si en caso no encuentra el síntoma o enfermedad deseada, es sugerido agregar un fármaco correspondiente a aquel síntoma.

Una vez ingresado o no los datos deseados a buscar, en la parte inferior se observan dos botones, el primero de ellos genera una consulta en la misma base de datos, es decir que al presionar este botón nos llevará a la propia base de datos la cual nos mostrará aquellos fármacos que coinciden con las especificaciones ingresadas. Esta sería la vista proporcionada al momento de presionar el



botón de consulta.

|   | NOMBRE       | PUBCHEM ID | FÓRMULA MOLECULAR | PESO MOLECU  | SÍNTOMA/ENFERMEDAD | TIPO                   |
|---|--------------|------------|-------------------|--------------|--------------------|------------------------|
|   | Ampicilina   | 6249       | C16H19N3O4S       | 349.4 g/mol  | Infecciones        | Antibiótico            |
|   | Amoxicilina  | 33613      | C16H19N3O5S       | 365.4 g/mol  | Infecciones        | Antibiótico            |
|   | Azitromicina | 447043     | C38H72N2O12       | 749 g/mol    | Infecciones        | Antibiótico            |
|   | Cefaclor     | 51039      | C15H14ClN3O4S     | 367.8g/mol   | Infecciones        | Antibiótico            |
|   | Eritromicina | 12560      | C37H67NO13        | 733.9 g/mol  | Infecciones        | Antibiótico            |
|   | Cefalexina   | 27447      | 16H17N3O4S        | 347.4 g/mol  | Infecciones        | Antibiótico            |
|   | Dapsona      | 2955       | C12H12N2O2S       | 248.30 g/mol | Infecciones        | Antibiótico de sulfona |
| * |              |            |                   |              |                    |                        |
|   |              |            |                   |              |                    |                        |
|   |              |            |                   |              |                    |                        |
|   |              |            |                   |              |                    |                        |
|   |              |            |                   |              |                    |                        |

Por otro lado, el segundo botón, se encarga de generar un informe de aquellos fármacos que coincidan con las especificaciones ingresadas. Este informe nos muestra una vista mucho más formal de lo que son los datos consultados. Si es deseado, este informe se puede descargar, imprimir, importar a Microsoft excel, etc.

Reporte de medicamentos sugeridos

| NOMBRE       | PUBCHEM ID | FÓRMULA MOLECULAR | PESO MOLECULAR | SÍNTOMA/ENFERMEDAD | TIPO                   |
|--------------|------------|-------------------|----------------|--------------------|------------------------|
| Amoxicilina  | 33613      | C16H19N3O5S       | 365.4 g/mol    | Infecciones        | Antibiótico            |
| Ampicilina   | 6249       | C16H19N3O4S       | 349.4 g/mol    | Infecciones        | Antibiótico            |
| Azitromicina | 447043     | C38H72N2O12       | 749 g/mol      | Infecciones        | Antibiótico            |
| Cefaclor     | 51039      | C15H14ClN3O4S     | 367.8g/mol     | Infecciones        | Antibiótico            |
| Cefalexina   | 27447      | 16H17N3O4S        | 347.4 g/mol    | Infecciones        | Antibiótico            |
| Dapsona      | 2955       | C12H12N2O2S       | 248.30 g/mol   | Infecciones        | Antibiótico de sulfona |
| Eritromicina | 12560      | C37H67NO13        | 733.9 g/mol    | Infecciones        | Antibiótico            |

Como resultado final se proporcionará el archivo en Windows Access que permite realizar todas estas funciones para que el lector pueda así probar por cuenta propia la funcionalidad del programa.

## 5. Discusiones

En los resultados se ha visto proyectado la funcionalidad del programa elaborado, proporcionando los datos propuestos y permitiendo ingresar datos adicionales, el concepto de realizar una base de datos en Windows Access fue inspirado de la tesis de León Jiménez, V. el cual

también realizó una base de datos en Windows Access, con ingreso y consulta de datos de plantas medicinales, la diferencia a destacar es que aquella tesis fue elaborada alrededor de 2005, donde aún existían algunas limitaciones en lo que respecta a base de datos.

Esta base de datos puede ser de gran utilidad para algún estudiante o incluso profesional del área de medicina, química o sistemas. Algunas limitaciones presentadas durante la elaboración de la base de datos fue obtener datos que sean de carácter confiable, debido a esto se tuvieron que hacer una comparativa con los primeros fármacos ingresados para corroborar que la información proporcionada en la base de datos sea la correcta y pueda ser utilizada como un recurso educativo.

## 6. Conclusiones

En conclusión, el programa realizado abarca lo que es el área de la química farmacéutica junto con el desarrollo de la base de datos, utilizando como ítem a los fármacos más usados o fármacos más relevantes para tratar algunos síntomas o enfermedades que pueden presentar las personas.

## 7. Referencias bibliográficas

- León Jiménez, V. (2005). Elaboración de una base de datos de plantas utilizadas en la medicina tradicional de México.
- Vivar, D.(2002). *Consumo y valor farmacoterapéutico de los 100 medicamentos más vendidos sin receta médica en farmacias y boticas del Perú, registrados en el IMS 1997-1998*. [Tesis de maestría, Universidad Nacional Mayor de San Marcos].  
<https://hdl.handle.net/20.500.12672/2946>
- Guerrero, A. M. ENFERMEDADES MÁS COMUNES.
- Font, E. (2003). *Fármacos para el tratamiento de la tos*. Offarm, 22(11), 70-78.
- Triviño, D. (2002). *Antigripales. Adiós malestar*. Farmacia profesional, 16(1), 40-46.

## 8. Comentarios finales (4 puntos)

### 8.1 ¿Qué perfil profesional tienen los autores del artículo de referencia? ¿Cuál es la diferencia en la productividad científica y profesional entre el primer autor y el último autor?

Para la elaboración de este proyecto se utilizaron diversas referencias, pero entre las que más destacaron, León Jimenez, V. se desempeña en el área de farmacia, o bajo el perfil profesional de farmacología y otro autor en el cual se inspiró para el desarrollo de este proyecto, Vivar, D. se desempeña bajo el perfil profesional de Química farmacéutica. En su mayoría las referencias utilizadas tienen como autores a profesionales en el área de la química. La diferencia en sus productividades científicas el primero de ellos, se encarga principalmente del diseño, la síntesis y el desarrollo de moléculas biológicamente activas y fármacos con fines terapéuticos y el segundo también con un perfil parecido, está más enfocado en la funcionalidad que tienen los fármacos en un área más aplicada a la medicina.

### 8.2 ¿Qué habilidades blandas, nuevos skills, etc. consideras que aprendiste en el curso? (linkedin)

Este curso realmente ha servido de ayuda, debido al desempeño activo del profesor al hacer posible el desarrollo de las continuas prácticas del curso con el lenguaje de programación de Python, esto mejorando mi interés por la programación y descubriendo una mayor vocación en este aspecto, además de tener un mayor interés en el área de la química observando la gran utilidad y aplicación de el desarrollo de aplicaciones en ese ámbito. Como habilidades blandas he notado una mejora en lo que es la escucha activa, debido a la gran cantidad de información proporcionada tanto como por parte del maestro, como por parte de mis compañeros de curso.

### 8.3 ¿Cómo te visualizas en 5 años?

En 5 años tengo una visión positiva sobre mi desempeño, buscando oportunidades laborales o culminando mis estudios de manera exitosa, ambas alternativas habiendo aprendido del proceso, incluso buscando más vocaciones que complementen a mi área de estudio, como pueden ser campos aplicables entre otros.