



ugr

Universidad
de Granada

TRABAJO FIN DE GRADO
INGENIERÍA EN ...

Titulo del Proyecto

Subtitulo del Proyecto

Autor

Nombre Apellido1 Apellido2 (alumno)

Directores

Nombre Apellido1 Apellido2 (tutor1)

Nombre Apellido1 Apellido2 (tutor2)



ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIERÍAS INFORMÁTICA Y DE
TELECOMUNICACIÓN

Granada, mes de 201



Título del proyecto

Subtítulo del proyecto.

Autor

Nombre Apellido1 Apellido2 (alumno)

Directores

Nombre Apellido1 Apellido2 (tutor1)

Nombre Apellido1 Apellido2 (tutor2)

Título del Proyecto: Subtítulo del proyecto

Nombre Apellido1 Apellido2 (alumno)

Palabras clave: palabra_clave1, palabra_clave2, palabra_clave3,

Resumen

Poner aquí el resumen.

Project Title: Project Subtitle

First name, Family name (student)

Keywords: Keyword1, Keyword2, Keyword3,

Abstract

Write here the abstract in English.

Yo, **Nombre Apellido1 Apellido2**, alumno de la titulación TITULACIÓN de la **Escuela Técnica Superior de Ingenierías Informática y de Telecomunicación de la Universidad de Granada**, con DNI XXXXXXXXXX, autorizo la ubicación de la siguiente copia de mi Trabajo Fin de Grado en la biblioteca del centro para que pueda ser consultada por las personas que lo deseen.

Fdo: Nombre Apellido1 Apellido2

Granada a X de mes de 201 .

D. **Nombre Apellido1 Apellido2 (tutor1)**, Profesor del Área de XXXX del Departamento YYYY de la Universidad de Granada.

D. **Nombre Apellido1 Apellido2 (tutor2)**, Profesor del Área de XXXX del Departamento YYYY de la Universidad de Granada.

Informan:

Que el presente trabajo, titulado ***Título del proyecto, Subtítulo del proyecto***, ha sido realizado bajo su supervisión por **Nombre Apellido1 Apellido2 (alumno)**, y autorizamos la defensa de dicho trabajo ante el tribunal que corresponda.

Y para que conste, expiden y firman el presente informe en Granada a X de mes de 201 .

Los directores:

Nombre Apellido1 Apellido2 (tutor1) **Nombre Apellido1 Apellido2 (tutor2)**

Agradecimientos

Poner aquí agradecimientos...

Índice general

Introducción	1
--------------	---

Índice de figuras

1.	Fórmula orgánica de la cafeína	2
----	--	---

Índice de cuadros

Introducción

Debido al desarrollo exponencial de la informática en el último siglo, todas las ramas del conocimiento se han visto afectadas. La informática está permitiendo la automatización de muchas tareas que anteriormente se realizaban de forma manual por un operario.

La química es una de las ciencias que se ha impregnado de este desarrollo tecnológico y de esta combinación ha surgido lo que se conoce como *cheminformatics* o *chemoinformatics*. En este capítulo definiremos esta rama científica y describiremos sus principales actuaciones. A continuación, explicaremos distintos conceptos y tecnologías existentes relacionados con el proyecto.

Cheminformatics o chemoinformatics

Desde hace décadas, en el mundo de la química ha estado presente la necesidad de almacenar, gestionar y procesar la gran cantidad de información que se genera. Con el tiempo se fueron desarrollando técnicas de tratamiento de ésta, pero no fue hasta hace algunos años cuando se acuñó el nombre de *cheminformatics* o *chemoinformatics*.

En la literatura existen diferentes definiciones para este término, discutidas en [1]. “Chem(o)informatics es un término genérico que engloba el diseño, creación, gestión, recuperación, análisis, diseminación, visualización y el uso de información química” es una de las definiciones recogidas. Otra más abierta es “La aplicación de métodos informáticos para resolver problemas de química”’.

Aunque hay diferentes opiniones en el alcance de este término, se puede considerar que este proyecto está dentro de sus fronteras, ya que vamos a crear una herramienta de clasificación de imágenes químicas, es decir, una herramienta que procesa y analiza este tipo de información.

Representación de fórmulas

En las publicaciones de química encontramos numerosas representaciones gráficas de fórmulas. Un ejemplo de esto es la siguiente figura:

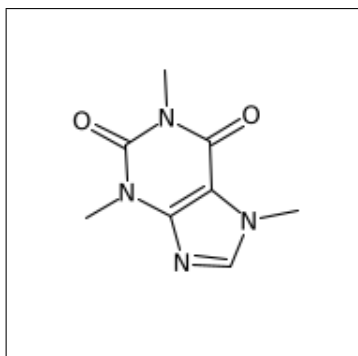


Figura 1: Fórmula orgánica de la cafeína

En ellas aparecen principalmente tres elementos:

- **Átomos:** Se sitúan en los extremos de los enlaces. Representados con letras que indican el elemento químico del que se trata. En caso de no existir letra, es porque estamos ante un átomo de carbono.
- **Enlaces:** Unen distintos átomos
- **Cargas:**

Planificación del proyecto

Gestión del proyecto

Metodología de desarrollo

A la hora de desarrollar el proyecto, debemos tener en cuenta los siguientes factores relativos a su naturaleza:

- Se trata de un proyecto de investigación, donde vamos a aplicar diferentes técnicas de Aprendizaje Automático a la resolución de un problema. Por tanto, a priori no se conoce la calidad de los resultados que se van a obtener y el número de experimentos que va a ser necesario realizar.
- La intervención del experto en química va a ser fundamental durante el desarrollo del proyecto. Aportará información y feedback esencial durante todas las fases.

Por estas razones, creemos que la metodología de desarrollo que mejor se adapta a nuestras necesidades es una metodología ágil, ya que nos provee de gran flexibilidad, permitiendo el desarrollo del proyecto de una forma incremental donde obtenemos feedback del cliente y del experto en cada iteración.

Revisando las distintas metodologías [2], creemos que dos buenas candidatas son SCRUM y Lean. SCRUM [3] es posiblemente una de las más utilizadas en la actualidad, y los proyectos que lo utilizan cuentan con las siguientes características:

- **Entregable flexible:** Su contenido viene dado por lo que demanda el entorno.
- **Calendario flexible:** Su contenido viene dado por lo que demanda el entorno.

Bibliografía

- [1] T. Engel, “Basic overview of chemoinformatics,” *Journal of Chemical Information and Modeling*, vol. 46, no. 6, pp. 2267–2277, 2006. PMID: 17125169.
- [2] M. L. Despa, “Comparative study on software development methodologies,”
- [3] K. Schwaber, “Scrum development process,” in *Business object design and implementation*, pp. 117–134, Springer, 1997.