



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

Índice de figuras

1.	Estructura de la cafeína	2
2.	Estructura del metano	3
3.	Dos formas de representar el butano	3
4.	Fases de la metodología SCRUM [1]	7

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.

Con el paso de los años, esta capacidad de automatización va en aumento pudiéndose aplicar en situaciones anteriormente impensables. Los numerosos avances en hardware y la aplicación de arquitecturas GPU en el campo del Aprendizaje Automático, y concretamente del Deep Learning, han permitido crear modelos mucho más avanzados capaces de interiorizar datos más complejos.

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.

Motivación del proyecto

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 [2].

“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”.

Desde la Universidad de Granada, mi tutora Rocío trabaja en este ámbito. Colabora con químicos de la Universidad de Negev y es consciente de los problemas que tienen para manejar la gran cantidad de datos que aparecen en publicaciones científicas. Un tipo de datos muy valioso son las imágenes, pero clasificarlas no es trivial: pueden ser sobre cualquier temática, algunas pueden referirse a esquemas explicando cómo funciona un modelo, otras pueden contener resultados de algún experimento, pueden ser representaciones de compuestos químicos, etc. Clasificarlas manualmente por un operario no es una opción viable.

Es por ello que en este Trabajo de Fin de Grado vamos a crear una utilidad que permita clasificar imágenes. En concreto, aquellas que son representaciones de moléculas organometálicas, del resto.

Aunque hay diferentes opiniones sobre el alcance de las cheminformatics, 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.

Compuestos orgánicos y su representación

Un compuesto orgánico es un compuesto químico que contiene átomos de carbono, formando enlaces carbono-carbono y carbono-hidrógeno [6]. En este TFG, vamos a trabajar concretamente con la clasificación de compuestos organometálicos, donde los átomos de carbono forman enlaces covalentes con átomos metálicos [7].

En las publicaciones de química encontramos numerosas representaciones gráficas de estos compuestos, lo que se conocen como fórmulas estructurales. Éstas muestran la disposición en el espacio de los átomos que forman el compuesto. Un ejemplo es la siguiente figura:

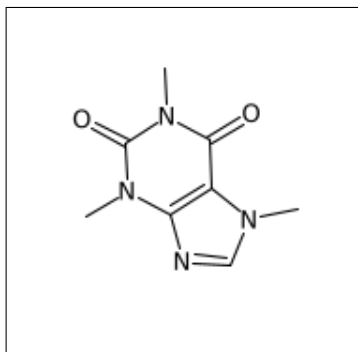


Figura 1: Estructura de la cafeína

En ellas pueden aparecer multitud de elementos, apareciendo siempre:

- **Átomos:** Se sitúan en los extremos de los enlaces. Representados con letras que indican el elemento químico del que se trata, tal y como aparece en la tabla periódica.
- **Enlaces:** Unen dos átomos entre sí.

En algunas ocasiones, sobre los átomos pueden mostrarse cargas positivas o negativas representando iones. Aparte, puede mostrarse lo que se conoce como información estereoquímica, que indica la disposición de los átomos en el espacio. Ésta es importante ya que afecta a las propiedades y reactividad de las moléculas [8, 5].

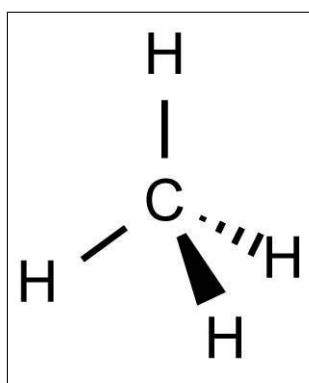


Figura 2: Estructura del metano

- Las líneas sólidas representan enlaces en el plano.
- Las discontinuas representan enlaces que están más alejados.
- Aquellas con forma de cuña indican que uno de los átomos se encuentra más cerca del espectador.

Además, un mismo compuesto se puede representar de distintas formas:

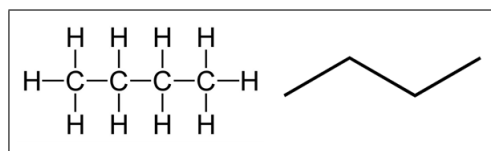


Figura 3: Dos formas de representar el butano

A la izquierda se detalla la definición de todos los átomos, en cambio a la derecha encontramos lo que se conoce como fórmula de esqueleto, donde

se omiten los átomos de carbono e hidrógeno. Se sabe que hay un átomo de carbono en los vértices que quedan libres en la intersección de dos enlaces o en las terminaciones donde no aparece ningún otro elemento. Se supone a la vez que cada átomo de carbono tiene cuatro enlaces, por tanto el número de enlaces que faltan por indicar explícitamente se corresponden con enlaces a moléculas de hidrógeno [9, 5].

Planificación del proyecto

En los primeros años del desarrollo de software, este se creaba sin seguir ningún enfoque formal. Muchos de los proyectos que se iniciaban terminaban fracasando por los retrasos en la entrega, el mal funcionamiento del producto o por no cumplir los requisitos del cliente. Además, la complejidad requerida en el software iba aumentando con el tiempo.

Por ello, era necesario crear un marco que permitiera metodizar el desarrollo. Es así como surge la Ingeniería del Software, que acompaña al software durante todo su ciclo vital.

En nuestro proyecto vamos a aplicar este enfoque a la hora de desarrollar el producto, y en este apartado vamos a describir información general sobre su gestión, la metodología de desarrollo a seguir y otra información relativa a costes, riesgos y otros factores que influyen sobre el proyecto para asegurarnos de que se consiguen los objetivos en el tiempo previsto, detectando posibles amenazas y problemas a tiempo.

Gestión del proyecto

Metodología de desarrollo

Las metodologías se pueden clasificar en dos grandes bloques [4], tradicionales y ágiles. Las tradicionales son las que primero surgieron, se caracterizan por definir rígidamente los requisitos al inicio del proyecto. En ellas, se aplica una serie de etapas de forma lineal, y una vez alcanzada una de ellas no se puede volver atrás. Por todo esto no se adaptan bien a los cambios.

En general, los proyectos de software tienden a ser cada vez más complejos. Las metodologías ágiles surgieron con el objetivo de hacer los proyectos de desarrollo más dinámicos, de forma que se adaptaran mejor al entorno y a los cambios. Se basan en una metodología incremental, donde se van construyendo prototipos del producto poco a poco, añadiendo funcionalidades hasta obtener la aplicación final. Los equipos se reúnen cada poco tiempo

para intercambiar ideas y repartir las tareas a realizar.

A la hora de elegir la metodología que vamos a usar, debemos tener en cuenta los siguientes factores relativos a la naturaleza del proyecto:

- 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 y tipo 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 [3], creemos que una buena candidata es SCRUM [1]. Es posiblemente una de las más utilizadas en la actualidad, y los proyectos que la aplican cuentan con las siguientes características:

- **Entregable flexible:** Su contenido viene dado por lo que demanda el entorno.
- **Calendario flexible:** El entregable puede ser requerido antes o después de lo previsto.
- **Equipos pequeños:** Los equipos están formados por pocas personas, de forma que la comunicación y sincronización entre sus miembros es alta.
- **Revisiones frecuentes:** El progreso del equipo se evalúa de forma periódica y frecuentemente, de forma que se ponen en común las dificultades encontradas y se intentan resolver con la ayuda de todos los miembros.
- **Colaboración:** La colaboración entre todos los miembros del equipo es muy alta, así como entre el equipo y entidades externas como el cliente.

Cuando se trabaja con esta metodología, en cada equipo existe un miembro conocido como SCRUM manager. Es el encargado de guiar al equipo en

el desarrollo y en la aplicación de la metodología. En SCRUM el equipo es muy importante y todos sus miembros participan con su opinión. Esta metodología consta de las siguientes fases:

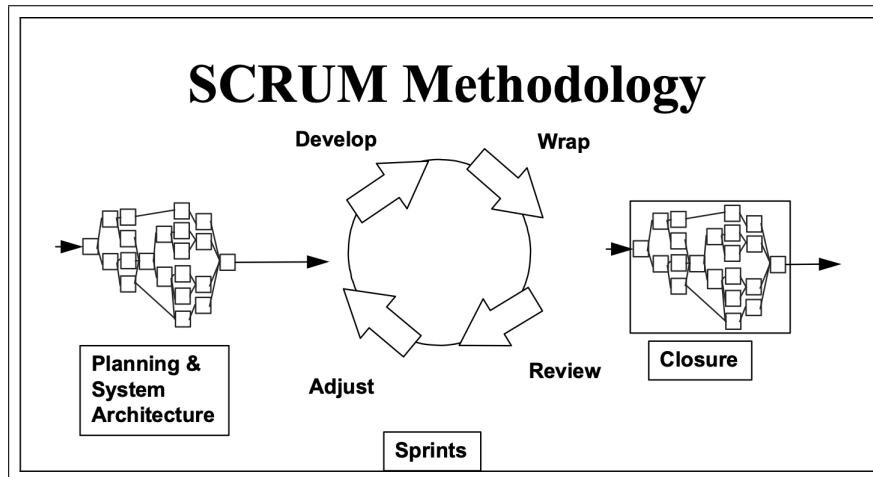


Figura 4: Fases de la metodología SCRUM [1]

■ **Pregame:**

- *Planificación:* En esta fase se crea la lista de tareas a realizar (backlog list), se fija la fecha de entrega del producto y su funcionalidad, se forma el equipo (o equipos) de trabajo, se valoran los riesgos que puedan surgir, los costes y finalmente se revisa todo y se aprueba el proyecto.
- *Arquitectura/Diseño de alto nivel:* Se revisan los elementos en el backlog, se realizan cambios si es necesario para poder implementarlos, se perfila la arquitectura del sistema teniendo en cuenta estos cambios y una reunión es organizada para revisar el diseño, donde cada equipo presenta una propuesta para implementar cada backlog.

■ **Game:** Corresponde con el conocido Sprint de la metodología SCRUM. Es la parte iterativa de la metodología, que se ejecuta varias veces hasta conseguir el producto final y está formada por las siguientes subtarefas:

- *Desarrollo:* Lo primero que se realiza es definir los cambios que hay que realizar en los backlogs para poder implementarlos. Se dividen las tareas presentes en el backlog en paquetes, y se completan estos paquetes diseñando, desarrollando, implementando, testeando y documentando los cambios.

- *Envoltura*: Se cierran los paquetes, creando una ejecutable que incorpora los cambios y se explica como cumplen lo especificado en los backlogs.
 - *Revisión*: Todos los equipos se reúnen para presentar el trabajo. El desarrollo obtenido se evalúa y se añaden nuevas tareas que puedan surgir al backlog. Se evalúa el riesgo y se realizan propuestas en base a este.
 - *Ajuste*: Se consolida la información recibida durante la revisión.
- **Postgame:**
- *Cierre*: Cuando el gestor del proyecto considera que el producto está terminado y cumple con los requisitos solicitados por el cliente se entra en esta fase, donde se prepara el producto para su despliegue. Integración, generación de la documentación, testeo y marketing son algunas de las actividades que se realizan en este paso.

Estas características que hemos mencionado son las especificadas en la definición original de SCRUM. Aún así, en la práctica cada proyecto las adapta a sus necesidades. En general, los sprints suelen tener una duración de 2 o 3 semanas. En nuestro caso tendrán 1 o 2 semanas de duración.

Bibliografía

- [1] Ken Schwaber. “Scrum development process”. *Business object design and implementation*. Springer, 1997, págs. 117-134.
- [2] Thomas Engel. “Basic Overview of Chemoinformatics”. *Journal of Chemical Information and Modeling* 46.6 (2006). PMID: 17125169, págs. 2267-2277. DOI: 10 . 1021 / ci600234z. eprint: <https://doi.org/10.1021/ci600234z>. URL: <https://doi.org/10.1021/ci600234z>.
- [3] Mihai Liviu Despa. “Comparative study on software development methodologies”. *Database Systems Journal* 5.3 (2014), págs. 37-56.

Otras fuentes

- [4] Santander Universidades. *Metodologías de desarrollo de software: ¿qué son?* URL: <https://www.becas-santander.com/es/blog/metodologias-desarrollo-software.html> (visitado 04-03-2022).
- [5] Aditya Virani y col. *Structural Representations of Organic Compounds*. URL: <https://brilliant.org/wiki/structural-representations-of-organic-compounds/> (visitado 21-04-2022).
- [6] Wikipedia. *Compuesto orgánico*. URL: https://es.wikipedia.org/wiki/Compuesto_org%C3%A1nico (visitado 21-04-2022).
- [7] Wikipedia. *Compuesto organometálico*. URL: https://es.wikipedia.org/wiki/Compuesto_organomet%C3%A1lico (visitado 21-04-2022).
- [8] Wikipedia. *Estereoquímica*. URL: <https://es.wikipedia.org/wiki/Estereoqu%C3%ADmica> (visitado 21-04-2022).
- [9] Wikipedia. *Fórmula estructural*. URL: https://es.wikipedia.org/wiki/F%C3%B3rmula_estructural (visitado 21-04-2022).