



INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL

ESCUELA SUPERIOR DE CÓMPUTO



“Software de evaluación de datos de espectrometría infrarroja”

TRABAJO TERMINAL 2016-B015

Resumen – Este trabajo tiene la finalidad de crear un software que proporcione información de un mineral que se quiera analizar, mediante el análisis de la señal emitida por un instrumento de espectrometría infrarroja que será representada en una gráfica de intensidad contra longitud de onda, en la cual se da énfasis a su grado de concentración, así como los grupos funcionales en los que se clasifica.

Palabras clave – Análisis de señales, espectrometría infrarroja, interpretación de datos

Presentan:

Díaz Delgado Daniel Elihu

Mata Ramírez Verónica

Directores:

Dr. Tonáhtiu Arturo Ramírez Romero

Ing. Miguel Hesiquio Garduño

e-mail: exprogramacion@gmail.com

Índice general

Índice general	1
Introducción.....	3
1. Antecedentes	3
2. Problemática	4
3. Objetivo	4
4.1. Objetivo general	4
4.2. . Objetivos específicos.....	4
4. Propuesta	5
5. Justificación.....	5
6. Metodología.....	6
7. Estado del arte	7
Marco teórico	15
5.1. Mineral	15
6.1. Espectroscopía.....	15
7.1. Espectroscopía infrarroja.....	16
8.1. Espectrómetro.....	17
9.1. Espectrómetro infrarrojo	17
Análisis.....	19
8. Análisis de riesgos.....	19
9. Requerimientos del sistema	19
9.1. Requisitos funcionales.....	19
9.2 Requisitos no funcionales	22
10. Reglas del negocio	23
11. Diagramas de Casos de uso	24
12. Modelo de Comportamiento:	27
13. Requerimientos de hardware y software	28
14. Tecnologías utilizadas.....	28
15. Personas y roles del proyecto.....	31

16. Artefactos	32
Desarrollo.....	33
17. Sprint 0 - Organización de desarrollo.....	33
Historias de usuario	33
10.1. Organización de los Sprints.....	34
11.1. Scrum meeting	34
18. Sprint 1 - Parámetros obtenidos	35
12.1. Incidencia 1 Identificación de datos.....	35
13.1. Incidencia 2 - Algoritmo para separar los metadatos y coordenadas	35
14.1. Incidencia 3 Cargar el archivo	36
15.1. Incidencia 4 Visualizar los datos.....	36
19. Sprint 2 - Relacionar los datos obtenidos con el espectro	37
16.1. Incidencia 1 Seleccionar archivos del ordenador	37
17.1. Incidencia 2 Validación de carga de archivos	38
18.1. Incidencia 3 Colocar valores de la gráfica en el cuadrante positivo	38
19.1. Incidencia 4 - Delimitar los ejes de la gráfica e identificar las magnitudes de absorbancia y longitud de onda en los mismos	39
20. Sprint 3 - Reconocimiento de picos y valles en el espectro.....	40
20.1. Incidencia 1 Plotly.....	40
21.1. Incidencia 2 Identificación de picos y valles	40
Actividades para Trabajo Terminal II	41
Referencias.....	41

Introducción

1. Antecedentes

Se tiene el antecedente de que México ha sido dotado por la naturaleza de enormes recursos naturales tanto metálicos como no metálicos. Lo anterior es prueba contundente del inmenso campo de estudio que la mineralogía tiene en el país. A pesar de ello y de manera paradójica, el territorio mexicano no ha sido debidamente explorado desde el punto de vista mineralógico. [1]

Las técnicas disponibles para el estudio de los minerales han aumentado considerablemente en las últimas décadas. [2] Se ha pasado del empleo de las técnicas tradicionales a técnicas instrumentales en las que se han incorporado fuentes de excitación y sistemas de detección desarrolladas hace pocos años en la ciencia moderna, principalmente en la física y química contemporánea. La utilización de las computadoras para el control de los instrumentos y realizar complejas operaciones matemáticas, unido a una mejor organización de los laboratorios ha permitido una mayor eficacia en la caracterización de los minerales.

Existen métodos que permiten determinar y caracterizar cuantitativamente las particularidades cristaloquímicas y las propiedades de los minerales, por ejemplo, los instrumentos modernos de la microsonda electrónica, fluorescencia de rayos X, Espectrometría, etc., estos presentan actualmente mejores posibilidades en comparación con los métodos químicos tradicionales (gravimetría, volumetría y calorimetría) para la determinación de la composición elemental de las sustancias minerales. [3]

Actualmente las industrias que trabajan con minerales y que tienen mayor aporte económico en México son, por ejemplo: Minería del carbón mineral, fabricación de coque, Minería metálica, industria del acero, industria del cobre, Minería no metálica. [4]

Sin duda, estas industrias llevan a cabo la caracterización de minerales con alguna técnica como las que antes se mencionaron y si estas técnicas son modernas, los instrumentos de los que se apoyan para aplicarlas tales como espectrómetros o difractómetros utilizan algún software desarrollado por el mismo fabricante del instrumento donde muestran al usuario una representación gráfica del mineral estudiado. Cabe mencionar que los fabricantes de dichos instrumentos no son mexicanos y por lo tanto el software de visualización tampoco lo es.

En este trabajo terminal se dará una propuesta para el desarrollo de un sistema que permita dar una interpretación del mineral después de haber obtenido sus características principales

2. Problemática

Lo que se identificó es que, en los diferentes tipos de espectrometría, donde existe poco desarrollo en cuanto a software, es la espectrometría infrarroja ya que los programas computacionales comerciales para el análisis del espectro que lanza un espectrógrafo infrarrojo, presentan algunas características básicas de la sustancia analizada, sin embargo, dichos programas permiten un análisis cualitativo y no uno cuantitativo.

Además, solamente son desarrollados por el mismo fabricante y no son muy amigables con el usuario es decir no le muestra opciones para poder manipularlo, todo es decidido por el software y los resultados que arrojan al analizar el espectro no dan una interpretación final de la sustancia con esos datos, estos se enfocan únicamente en encontrar ciertos máximos de manera automática sin que el usuario pueda modificar dicha búsqueda provocando que el usuario recurra a libros y artículos para poder identificar claramente las características de la sustancia en cuestión.

3. Objetivo

4.1. Objetivo general

Crear un software eficiente que permita hacer los respectivos cálculos para la determinación de las características cualitativas y cuantitativas de un mineral a partir de la interpretación de los resultados obtenidos de un espectrómetro infrarrojo, analizando un área general y específica, además de dar una interpretación a estos.

4.2 . Objetivos específicos

- 1.-Optimizar los procesos de análisis de la información obtenida por el espectrómetro infrarrojo en la distinción los materiales que componen la sustancia analizada.
- 2.-Lograr que el usuario tenga oportunidad de elegir entre analizar un área específica o general del espectro según convenga es decir que además del área que el software de por default, esta se pueda cambiar si así se requiere.
- 3.-Lograr tener ventajas sobre el software comercial y visualizar estas con evaluación comparativa

4. Propuesta

Desarrollar un sistema que sea capaz de dar las características cuantitativas y cualitativas de un mineral encontrando primero los datos necesarios (área bajo la curva, grupos funcionales, concentración, etc. *) para poder realizar un árbol de decisión, donde se tomen en comparación los datos obtenidos y los que estarán en una base de datos cuya información estará respaldada por libros y artículos que dan resultados del análisis a mano, realizados por especialistas en caracterización de los materiales que están comprobados y validados.

Dando así al usuario dos opciones: la primera que el software dé como resultado del análisis del espectro, la interpretación de este y dejando ver de una manera sencilla, sin tener que hacer un análisis más después del software, información que le sea útil para la toma de decisión sobre el mineral en cuestión y la segunda que el usuario manipule el software con la finalidad de obtener sólo la información que él desea, por ejemplo, saber únicamente el grado de concentración del mineral.

5. Justificación

Actualmente existen varias técnicas de espectrometría, no obstante, se eligió la técnica de espectrometría infrarroja porque las aplicaciones en el mercado no son elaboradas en México, es decir, aún no se cuenta con un amplio desarrollo en la obtención de resultados útiles para alguna experimentación con los minerales. Es por lo anterior que se pretende que esta técnica tenga la tecnología necesaria en software para manipular los datos, de tal manera que el tratado de la sustancia, utilizando dicho método, tenga resultados de impacto en la eficiencia de los procesos y pueda ser de mayor interés y beneficio para los usuarios, así como también sería un aporte tecnológico en nuestro país.

Debido a que los tipos de software dedicados a la interpretación de datos de la espectrometría infrarroja actuales, no dejan al usuario tener una mayor interacción con los resultados más que el de opciones limitadas al criterio de las aplicaciones y que estas sólo arrojan resultados cualitativos, como solución se propone el desarrollo de un sistema que le dé oportunidad al operador de intervenir en la interpretación de los resultados.

Si bien es cierto que el análisis de un espectro de infrarrojo no es nuevo, y existen sistemas para este fin, los resultados que muestran no son suficientes para determinar la concentración que tiene cierta sustancia este es una de las ventajas que se tendrán en el sistema propuesto.

La novedad del software que se propone es que podrá además de lo que ya hacen los sistemas existentes, cubrir estas deficiencias que se han identificado, dándole a la espectrometría infrarroja una mayor oportunidad de ser utilizada para sacar un análisis cuantitativo a un menor costo.

El sector al que está dirigido este sistema es la Ingeniería Química, será útil en aquellos lugares donde se necesite hacer un análisis profundo de sustancias o materiales desde un laboratorio en una escuela donde se requiera estudiar una muestra, hasta la industria alimenticia, del carbón, petroquímica, del alcohol por mencionar algunas, cuya funcionalidad sería comparar los resultados de dos o más muestras para determinar cuál es el que más conviene emplear en la creación de algún producto.

6. Metodología

Para elegir la metodología se exploraron diferentes modelos de desarrollo por ejemplo la modelo cascada, espiral, iterativa e incremental y después las metodologías clásicas que se basan en estos desarrollos tal como

Los rasgos más importantes acerca de estas metodologías que se checaron son mencionados a continuación:

La metodología de cascada se basa en el modelo de desarrollo en cascada indica que cuando el trabajo desde la comunicación hasta el despliegue fluye en forma razonablemente lineal.

La metodología espiral que se basa en el modelo de desarrollo en espiral indica que es un generador de proceso impulsado por el riesgo, que se usa para guiar la ingeniería concurrente con participantes múltiples de sistemas intensivos en software. [5]

Las metodologías Scrum y Programación Extrema que tienen como base el modelo iterativo o incremental proponen que se utilice cuando tal vez haya una necesidad imperiosa de dar rápidamente cierta funcionalidad limitada de software a los usuarios y aumentarla en las entregas posteriores de software.

Cuando se hizo el análisis de cómo nuestro software evolucionaría contemplamos que el sistema requiere de evaluaciones cada cierto tiempo para que cumpla con los requerimientos, comparaciones con resultados ya conocidos para calibrarse, y debe adaptarse fácilmente a cualquier cambio o mejora, es decir debemos desarrollar una parte, probarla, hacer correcciones si las hay y proceder con el siguiente incremento.

Por los puntos mencionados y comparando estos con los rasgos de las metodologías que identificamos anteriormente se decide que la mejor opción para el desarrollo del sistema es una metodología que cuente con un modelo de desarrollo iterativo o incremental por lo tanto se eligió la metodología de Scrum debido a que nos permite principalmente hacer retroalimentación y mejoras, por lo que se va actualizando el software progresivamente, además de que gracias a los Sprints se permite planificar todas las tareas que se deben realizar para conseguir un ritmo de trabajo sostenible.

Una vez que se eligió Scrum se procedió a utilizar la plataforma Jira en el primer mes y MeisterTask para el resto del desarrollo con el propósito de seguir la metodología ya que estas plataformas nos permitieron controlar las incidencias en cada Sprint propuesto.

7. Estado del arte

Software que están en el mercado y las investigaciones relacionadas que se han hecho.

Existen algunos sistemas computacionales en el mercado que desempeñan funciones en este ámbito, estos se han utilizado en investigaciones para realizar análisis entre otras funciones de cada software y requerimientos de investigación.

A continuación, se presentan algunos de estos sistemas.

Spectrum Software – Perkin Elmer

Este software se incluye con el instrumento (espectrómetro infrarrojo), nos permite obtener la muestra y hacer un pequeño análisis de ella, también es posible crear un fondo con el cual la muestra obtenida es mejorada, ya que se descarta cualquier otro factor externo como algún elemento en el aire.

Contiene herramientas avanzadas, las cuales no son muy intuitivas, además que no permiten una manipulación personalizada.

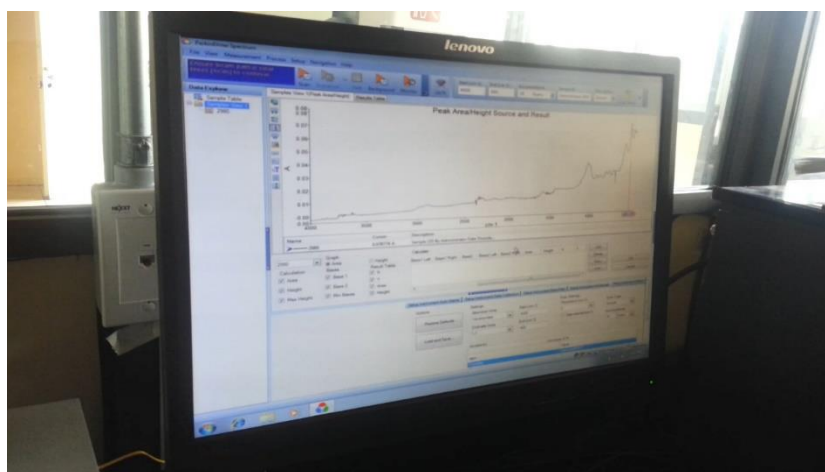


Ilustración 1 – Se observa la gráfica generada por Spectrum Software después de ser medida una sustancia a través del espectrómetro.

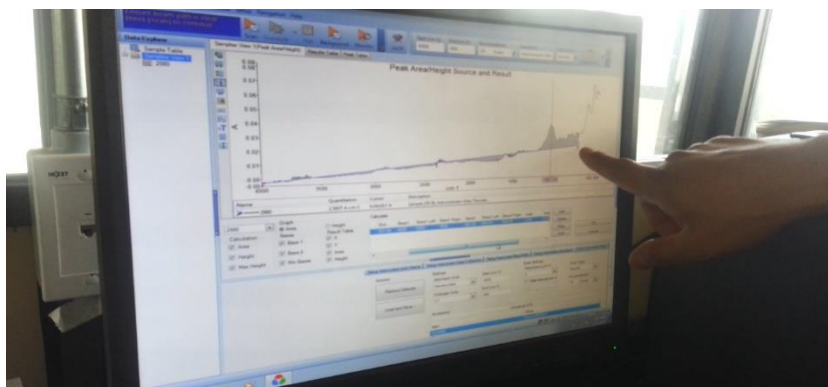


Ilustración 2 – Se muestra que se selecciona área bajo la curva y en otras partes de la gráfica se selecciona área sobre la curva

KnowItAll® ID Expert™

Para usar este software en especial, primero seleccionas la muestra y se carga, si es desconocida utiliza espectros de referencia y de consulta.

Antes de empezar, te pregunta si deseas aplicar algunas correcciones al espectro, esto con la intención de “acercar” el resultado más preciso.

Una vez que haga el análisis, se muestran los componentes con un porcentaje de coincidencia, se buscan múltiples coincidencias en orden.

También identifica los grupos funcionales del espectro, además permite usar una base de datos específica para identificar la muestra o crear una nueva base de datos bajo tu criterio.

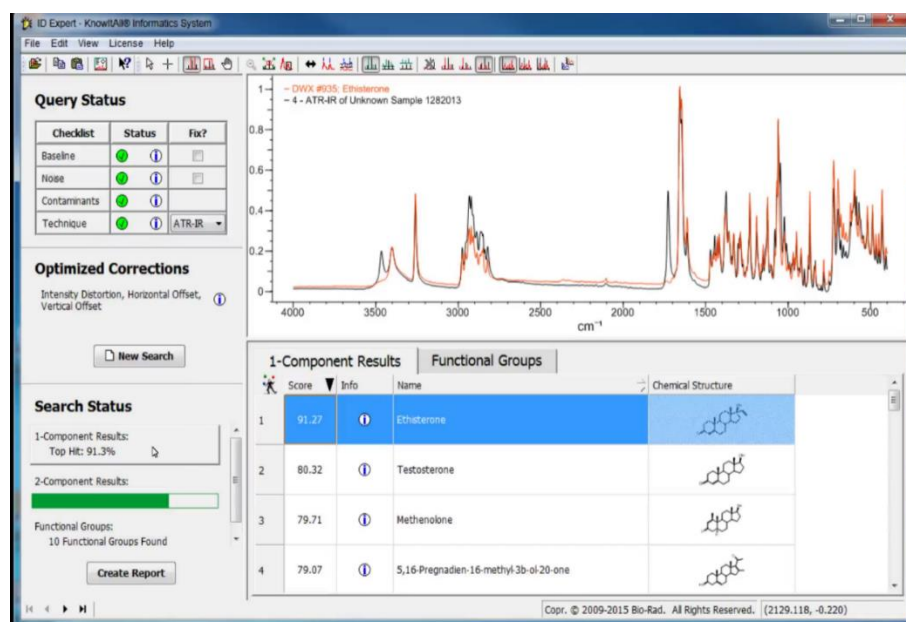


Ilustración 3 – Se observa como el software ID Expert va listando los componentes con su respectiva probabilidad

KnowItAll tiene una variedad de productos con propósitos específicos para el análisis, algunos son parecidos o realizan los mismos procesos.

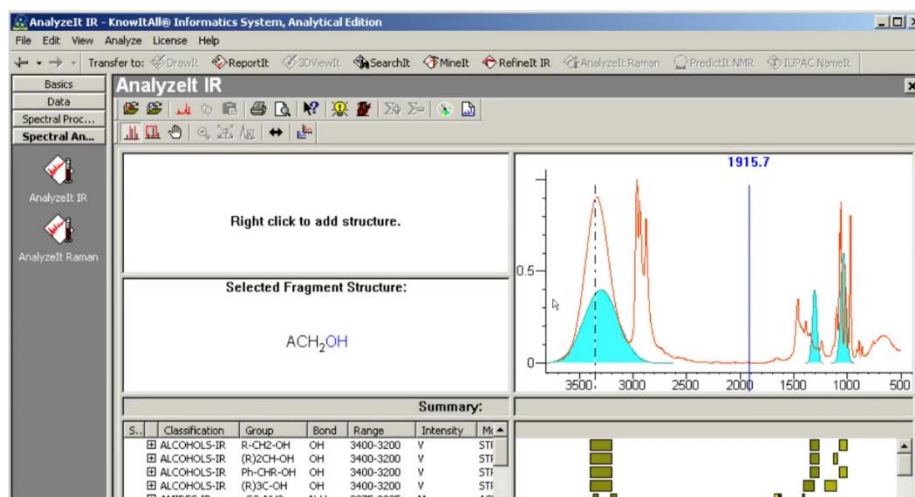


Ilustración 4 - Se observa que el software AnalyzeIt IR va listando los grupos funcionales a los que puede pertenecer

TOPAS - Academic

Es un potente software para el análisis de los datos de difracción de polvo, además permite:

- Analizar la longitud de onda constante y datos de rayos X de energía dispersiva
- Analizar la longitud de onda constante y el tiempo de los datos de vuelo de neutrones
- Realizar refinación Rietveld / Pawley / reflexión individual
- Datos de difracción de polvo
- Resolver las estructuras mediante recocido simulado
- Realizar refinamientos del modo distorsión *isodisplace

Para utilizar este software es necesario tener amplio conocimiento de las herramientas, ya que requiere de una serie de pasos para hacer los cálculos necesarios según sea el caso.

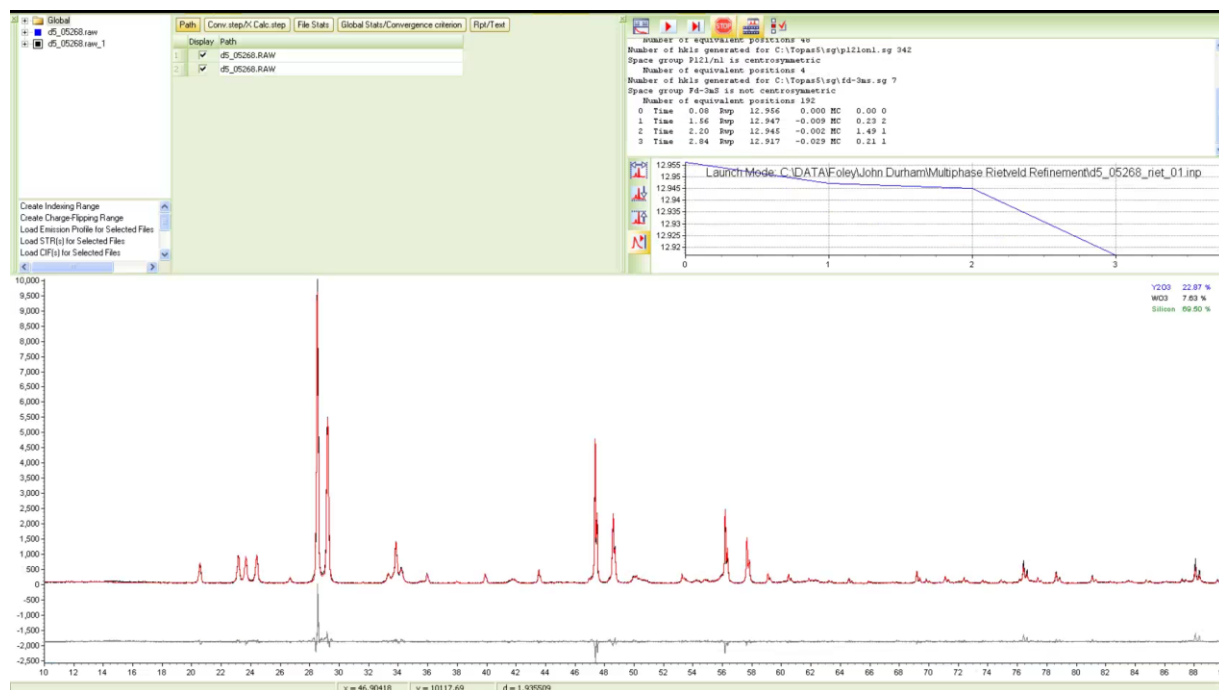


Ilustración 5 – Se muestra TOPAS Academic haciendo una refinación de Rietveld

Fityk

Originalmente, Fityk fue desarrollado para analizar de difracción en polvo de datos. También se utiliza en otros campos que requieren un análisis de pico y pico apropiado, como cromatografía o varias clases de espectroscopia .

Este software puede analizar diferentes tipos de datos experimentales que proporcionan la posibilidad de cuantificar parámetros seleccionados. Fityk se utiliza en cromatografía, fotoluminiscencia y espectroscopia fotoeléctrica, espectroscopia de infrarrojos y Raman, y en otras técnicas.

El uso de un programa más genérico proporciona una mayor flexibilidad. Aunque esto no es una ventaja en el análisis de rutina, la flexibilidad es importante cuando se desea modificar el procedimiento de refinamiento o introducir un esquema de análisis de datos personalizado.

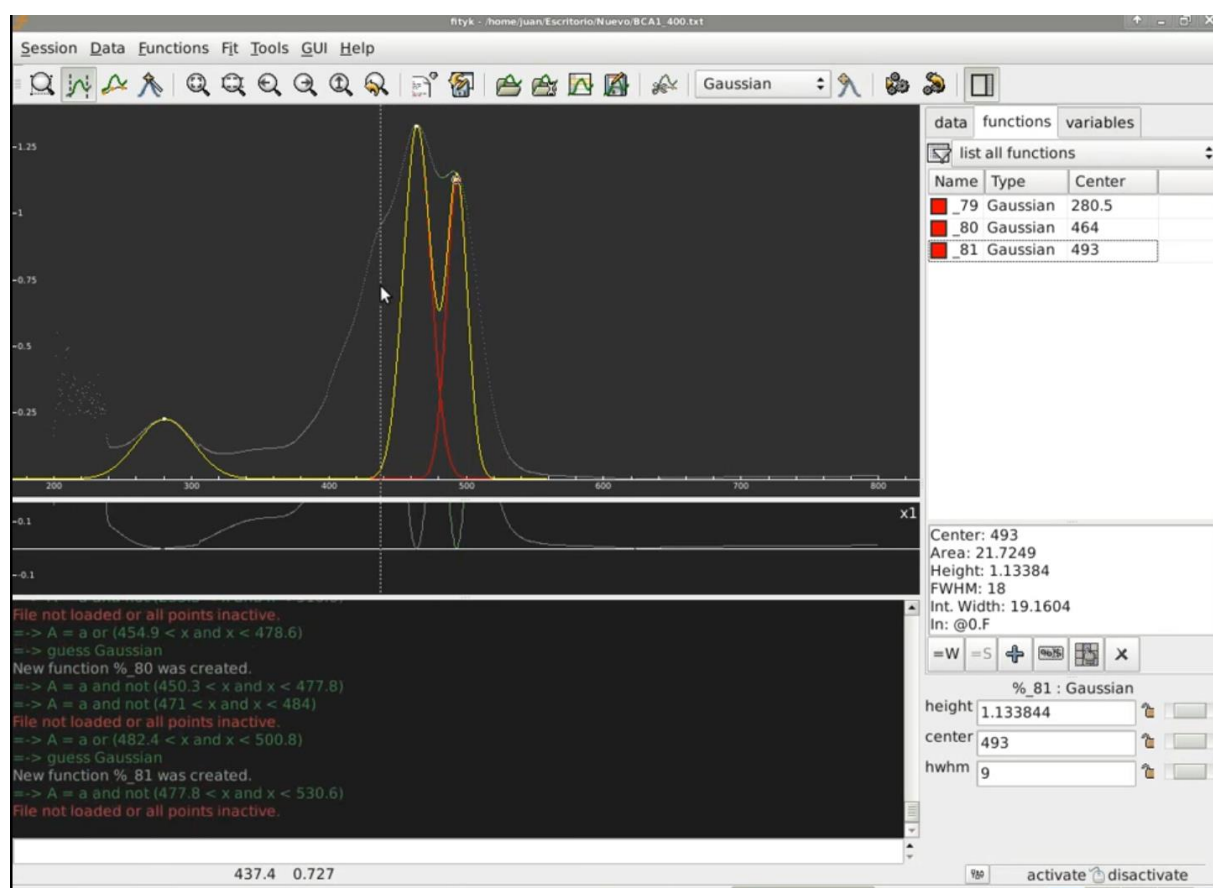


Ilustración 6 – Se observa Fityk realizando una marca Gaussiana

A continuación, se muestra en la tabla los precios de los sistemas antes mencionados.

Cabe mencionar que cada software tiene fines particulares pero que son muy utilizados en el ámbito de la espectroscopia infrarroja.

Programas	Descripción	Precio en el mercado
Spectrum Software Perkin-Elmer	Este paquete completo establece el estándar en el software FT-IR para la simplicidad y la eficiencia en la recopilación de datos, el procesamiento y la generación de resultados. La interfaz del software combina acceso de un solo clic a funciones comunes con poderosos datos y gestión de resultados	US \$ 978. 00
KnowItAll Vibrational Spectroscopy Edition	KnowItAll espectroscopía vibracional edición de Bio-Rad ofrece soluciones de software para la espectroscopía infrarroja, así como cerca de IR y Raman.	Licencia de suscripción
TOPAS-Academic	Su enfoque principal es en la cristalografía, química del estado sólido y optimización. Programa de Rietveld totalmente funcional para laboratorio de difracción de rayos x, sincrotrón, de cristal único y longitud de onda fija de neutrones y los datos de TOF.	1500 € para la primera licencia 500 € por cada licencia adicional
Fityk	Es un programa para el procesamiento de datos y no lineal de ajuste de curvas. Se utiliza principalmente por los científicos que analizan los datos de difracción de polvo, cromatografía, espectroscopia de fotoluminiscencia y de fotoelectrones, infrarrojos y espectroscopia Raman, y otras técnicas experimentales.	US \$ 115 suscripción mensual US \$ 199 suscripción anual US \$ 299 suscripción 2 años

Por otra parte, existen algunos artículos en los cuales aplican técnicas como la espectroscopia con fines muy específicos.

Rendimiento muscular isocinético y respuestas inmuno-endocrinas salivales en jugadores de balonmano por espectroscopía infrarroja con transformada de Fourier

Los parámetros isocinéticos evaluados fueron el torque máximo, el índice de fatiga y la razón de torque máximo isquiotibial/cuádriceps. Las muestras de saliva se recogieron antes y después de un partido de balonmano simulado y tras 2h de recuperación.

El análisis de la saliva por espectroscopia infrarroja con transformada de Fourier se basó en las regiones de infrarrojos de sustancias puras (cortisol, cortisol salival y la inmunoglobulina A humana).

No hubo diferencias significativas entre los miembros inferiores dominante y no dominante a 60 y 180°/s, en extensión y flexión para torque máximo e índice de fatiga. La razón isquiotibial/cuádriceps a 60°/s fue inferior que a 180°/s. Las principales bandas de absorción de cortisol se encuentran en la región (1180–955cm⁻¹) y cortisol salival e inmunoglobulina A en la región (1584–1489cm⁻¹). Las muestras de saliva recogidas antes y después del partido no muestran diferencias significativas. La variación de cortisol por la posición de juego se correlacionó positivamente con la tasa de esfuerzo percibido en la sesión.

Los jugadores de balonmano mostraron buen rendimiento muscular de los miembros inferiores en la evaluación isocinética. El análisis por espectroscopia infrarroja con transformada de Fourier identificó las principales bandas de cortisol y cortisol salival e inmunoglobulina A, así como las posiciones de juego que requieren mayores niveles de estrés, por medio de los cambios en las bandas relacionadas con el cortisol salival. [6]

Caracterización y análisis quimiométrico de fragmentos antiguos de macetas excavados en Arpakkam, Tamil Nadu, India

Se utilizaron técnicas espectroscópicas combinadas con herramientas quimiométricas FA y CA para caracterizar las cerámicas de arcilla seleccionadas. De acuerdo con las asignaciones vibratorias y la mineralogía realizada por FT-IR y XRD, se obtuvieron las técnicas de disparo de las reliquias durante la fabricación. Ambas técnicas estaban bien concurrentes entre sí. Además, el análisis de SEM se llevó a cabo para estimar el intervalo de temperaturas de cocción también está en buen acuerdo con los resultados de las técnicas anteriores. A partir de todos los resultados anteriores, se obtuvieron temperaturas de cocción bajas (800 ° C) en la atmósfera oxidante y reductora. Por lo tanto, los resultados del análisis de EDS indican que se investigaron algunos de los elementos mayores y menores tales como O, Na, Al, Si, Cl, K, Fe y Si, Al, Na. Los elementos Si, Al y Na eran de naturaleza no volátil y se usaron para el agrupamiento preliminar de artefactos. La herramienta quimiométrica, es decir, CA, mostró que hay dos grupos distintos en los artefactos seleccionados. Esto indica que las alfarerías están hechas de arcillas de diferente composición; Estos resultados están de acuerdo con los resultados del análisis factorial. [7]

Caracterización del polvo obtenido de los neumáticos desperdiciados reducidos por pirólisis y proceso de choque térmico

Se realizó la caracterización fisicoquímica de los residuos sólidos obtenidos mediante dos procesos de reducción, la pirólisis mediante cuatro temperaturas de combustión (450°C, 550°C, 650°C y 750°C) y el método de choque térmico para comparar la eficiencia y viabilidad de ambos procesos como opción para Control de neumáticos desperdiciados. Los resultados de los experimentos de difracción de rayos X llevados a cabo en todas las muestras revelaron que a pesar del proceso, los compuestos presentes en los residuos son productos que contienen principalmente Zn y átomos de carbono.

Este análisis mostró que la temperatura de pirólisis determina la composición del residuo final que contiene una mayor cantidad de material inorgánico cuando se utiliza 750°C. La presencia del elemento Zn en los gránulos también se confirmó a través de este ensayo. Al analizar las muestras utilizando FTIR, se encontró que por pirólisis, los compuestos orgánicos no están presentes en los residuos cuando se usa temperatura más alta;

Sin embargo, el proceso de choque térmico permite la reducción del neumático pero no elimina completamente el componente orgánico. Al realizar una extracción, se reveló la presencia de una película polimérica correspondiente al isopreno. El análisis térmico expuso el proceso de degradación por alta temperatura dando como resultado la identificación de tres zonas de descomposición para el neumático de goma en el que aproximadamente el 35% es el sólido permanece. Los estudios de morfología por SEM dieron información sobre la aparición de los gránulos del polvo después de ser pulverizados manualmente. La morfología de los gránulos no era completamente esférica sino de forma irregular, con diferentes tamaños. La diferencia en el aspecto del polvo observado en la pirólisis y el choque térmico se debe a la composición final de los gránulos después de cada proceso. La distribución de partículas fue similar en ambos procesos con ligeras diferencias en algunos puntos; Esto se debe, como se ha explicado anteriormente, al método de pulverización. En resumen, ambos procesos demostraron una excelente eficiencia en la reducción del neumático, y la caracterización reveló la similitud. Sin embargo, el ahorro energético favorece el proceso de choque térmico aunque los compuestos orgánicos permanezcan en el polvo. Como opción adicional, el residuo sólido puede utilizarse posteriormente como relleno en materiales compuestos [9] donde las propiedades mecánicas deben ser profundamente estudiadas ya que cada tipo de polvo se comportará de manera diferente en el material final debido a su composición final como se comentó antes. [8]

Predicción de minerales, composición de ácidos grasos y contenido de colesterol de quesos comerciales por espectroscopia de transmitancia de infrarrojo cercano (NIR)

Los resultados del presente estudio demostraron la viabilidad de la espectroscopia NIR para predecir los minerales y la composición de FA del queso. La enorme variabilidad de los datos iniciales en términos de tipo de queso, las especies que originaron la leche para la producción de queso y el tiempo de maduración ayudó a construir calibraciones robustas. Sin embargo, los modelos de predicción podrían fallar cuando se aplican a muestras de diferentes poblaciones. La validación cruzada y la validación externa realizaron de manera similar la confirmación del gran potencial de los modelos de predicción. Aunque los minerales son difíciles de predecir, se desarrollaron excelentes modelos de predicción para Ca, P, S, Mg y Zn.

Este trabajo también apoyó la afirmación de que se obtuvieron predicciones más precisas para las AF expresadas como contenido absoluto que relativo en el queso.

Se lograron predicciones satisfactorias para las AFS, seguidas por UFAs, MUFAs, PUFAs, FAs principales (mirístico, palmítico y oleico) y algunas AF menores, mientras que el contenido de colesterol no pudo predecirse con una precisión satisfactoria.

En general, estos hallazgos son un precursor de la implementación en línea de los modelos de predicción para los minerales y AFs de queso más abundantes que, por su velocidad, podrían ser un método apropiado para el control y optimización del proceso durante la producción de queso. Esto ayudaría a la industria lechera a incorporar esta información en la etiqueta de sus productos. [9]

Capacidad predictiva de la espectroscopia de infrarrojo medio para la composición mineral principal y los rasgos de coagulación de la leche bovina mediante el algoritmo de selección de variable no informativa

La espectroscopia de infrarrojo medio se ha utilizado para desarrollar modelos de calibración para minerales de leche y propiedades de coagulación. Los modelos explicaron variación moderada de los rasgos estudiados y por lo tanto no fueron lo suficientemente precisos como para ser propuesto con fines analíticos. Sin embargo, estos modelos podrían representar una herramienta válida para un cribado rápido y rentable o adquirir fenotipos a nivel poblacional (o ambos), y podrían ser aplicados para fines de investigación a datos espectrales. Por último, el uso del enfoque UVE-PLS ha sido validado para ser un enfoque interesante para mejorar la precisión de los modelos de predicción. Futuras investigaciones investigarán la factibilidad de usar predicciones del infrarrojo medio como rasgos indicadores para mejorar genéticamente los minerales de la leche y la MCP. [10]

Determinación directa verde de elementos minerales en alcachofas por espectroscopia infrarroja y fluorescencia de rayos X

Se evaluaron las técnicas de espectroscopia NIR y XRF para determinar el calcio, potasio, magnesio, hierro, manganeso y zinc en muestras de alcachofa. Los modelos PLS construidos a partir de espectros NIR y XRF permitieron la determinación de concentraciones minerales con muy buenos resultados de manera ecológica. Las muestras de alcachofa se pueden analizar sin ninguna preparación de muestras químicas, excepto la liofilización física. Las metodologías propuestas son más ecológicas que la metodología convencional ICP-OES a partir de los reactivos, el tiempo y el costo de análisis.

Por lo tanto, a partir de los resultados obtenidos, se puede observar que la espectroscopia NIR y las técnicas de fluorescencia de rayos X ofrecen alternativas rápidas y verdes para determinar calcio, potasio, magnesio, hierro, manganeso y zinc en alcachofas, siendo XRF la mejor opción en la parte principal de los casos. [11]

En el sistema que se va a desarrollar se utilizará espectrometría infrarroja para la caracterización de minerales por lo cual es pertinente definir primero que es un mineral, espectrometría con técnica de infrarrojo y los conceptos que están ligados, así como la manera en que esta técnica ayuda a hacer posible la interpretación de mineral.

5.1. Mineral

Un mineral es un compuesto o elemento de ocurrencia natural, normalmente sólido e inorgánico, con una composición química específica, que posee una estructura interna ordenada de átomos.[1]

Se sabe que es un mineral debido a que existen diferentes técnicas para identificarlos y se mencionan a continuación:

- Observación de propiedades físicas en muestras de mano.
- Microscopio Petrográfico.- Láminas delgadas vistas con luz transmitida y reflejada, se observan propiedades ópticas de los minerales características para su identificación (estas propiedades son consecuencia de su estructura interna): Reflexión y refracción, Dispersión, Birrefringencia, Isotropía y Anisotropía, Pleocroísmo.
- Mediante la difracción de Rayos X e Infrarrojo
- Microscopio electrónico y de barrido.- Se observa la forma y estructura de los minerales.

Y los métodos anteriores se llevan a cabo con elementos como:

- Espectrómetros
- Fluorescencia de rayos X

6.1. Espectroscopía

La espectroscopía es una técnica de análisis que se basa en la absorción de radiación por parte de las moléculas. Aunque existen muchos tipos de espectroscopía, las más utilizadas en química orgánica se agrupan en cuatro categorías: - espectroscopía de resonancia magnética nuclear (RMN) - espectroscopía de infrarrojo - espectroscopía de ultravioleta - espectrometría de masas. Las moléculas orgánicas absorben la radiación electromagnética en paquetes discretos de energía, o cuantos. La absorción se produce solamente cuando la radiación que incide sobre la sustancia proporciona el cuanto de energía adecuado.

La absorción de energía provoca algún tipo de “movimiento” electrónico o mecánico en la molécula, proceso que se denomina excitación. La energía radiante presenta características ondulatorias.

Las radiaciones aparentemente tan distintas tienen en común ser radiaciones electromagnéticas y son ondas que viajan a la velocidad de la luz y solamente difieren unas de otras en su frecuencia o longitud de onda.

Tipos de espectroscopía

Aunque existen muchos tipos de espectroscopía, las más utilizadas en química orgánica se agrupan en cuatro categorías:

- Espectroscopía de resonancia magnética nuclear (RMN)
- Espectroscopía de infrarrojo
- Espectroscopía de ultravioleta
- Espectrometría de masas.

Para la realización de este sistema se usa la espectroscopía infrarroja así que es importante mencionar y conocerla.

7.1. Espectroscopía infrarroja

[3]La espectroscopía infrarroja tiene casi 125 años de existencia. El primer espectro de vibraciones moleculares fue observado en 1881 por Abney y Festing [3.1], quienes prepararon emulsiones fotográficas sensibles al infrarrojo cercano y fotografiaron el espectro de absorción de 48 líquidos orgánicos. Encontraron bandas características en estos espectros, las cuales asociaron con la presencia de hidrógeno en las moléculas estudiadas. En 1892, Julius [3.1] obtuvo el espectro infrarrojo de 20 compuestos orgánicos, encontrando que todos los compuestos que contienen metilo (CH_3) exhiben una banda de absorción de $3.45 \mu\text{m}$ y llegó a la conclusión de que la absorción de ‘ondas caloríficas’ se debe a movimientos intramoleculares; en otras palabras, la estructura interna de la molécula determina el tipo de absorción. También encontró que el efecto no es ‘aditivo’; es decir, que no se puede predecir el espectro de absorción de un compuesto a partir del conocimiento de los espectros de los átomos constituyentes.

Los espectrómetros infrarrojos son una de las herramientas más importantes para observar espectros vibracionales. Las características más relevantes de esta espectroscopía son las siguientes:

1. Si dos moléculas están constituidas por átomos distintos, o tienen distinta distribución isotópica, o configuración, o se encuentran en ambientes distintos, los espectros infrarrojos serán distintos.
2. Una sustancia definida puede identificarse por su espectro infrarrojo. Estos espectros pueden ser considerados como las huellas digitales de dicha sustancia.

3. Los espectros muestran bandas que son típicas de grupos funcionales particulares y que tienen localizaciones e intensidades específicas dentro de los espectros infrarrojos
4. A partir de los espectros se pueden inferir las estructuras moleculares. Para ello se requiere un modelo en el cual basar los cálculos.
5. Las intensidades en las bandas del espectro de una mezcla, son generalmente proporcionales a las concentraciones de las componentes individuales. Por lo tanto, es posible determinar la concentración de una sustancia y realizar análisis de muestras con varias componentes.
6. Es posible, mediante el uso de dispositivos experimentales adecuados, obtener espectros infrarrojos sin alteración de la muestra, lo que constituye a esta espectroscopía como una herramienta de análisis no destructiva.
7. El tiempo necesario para obtener y almacenar un espectro infrarrojo es del orden de minutos.

8.1. Espectrómetro

El espectrómetro es un instrumento de medición que analiza el tipo de espectro que emite una fuente o que es absorbida por una sustancia que se encuentra en el camino de la luz que emite una fuente. Estos espectros de emisión o de absorción son como una huella digital de las sustancias que forman a nuestra naturaleza. [12]

9.1. Espectrómetro infrarrojo

El espectrofotómetro infrarrojo va equipado con una fuente de emisión de radiación infrarroja, que normalmente es una barra de un material cerámico.

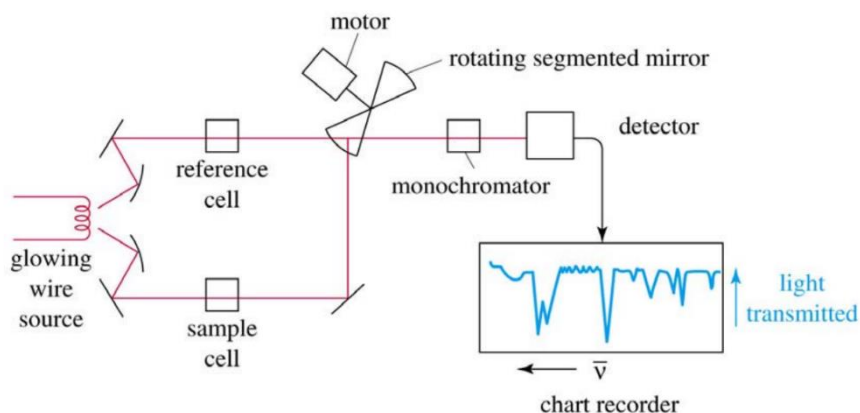


Ilustración 7 Diagrama de un espectrómetro infrarrojo, por fases.

La radiación emitida por esta fuente se divide en dos haces al atravesar una serie de espejos. De los dos haces uno de ellos pasa por una celda que contiene una disolución del compuesto orgánico (haz de la muestra) que se desea estudiar, mientras que el otro haz atraviesa una celda que sólo contiene el disolvente empleado (haz de referencia). Los dos haces se dirigen luego hacia un dispositivo que permite el pase alternativamente de un haz y luego del otro (interruptor rotatorio). El haz se dirige a la rejilla de difracción donde se separa en las longitudes de onda que lo componen (espectro de IR).

Estas radiaciones, separadas por su valor de longitud de onda, pasan a través de una ranura y llegan al detector. El detector es una bobina de alambre cuya resistencia aumenta debido al calentamiento que produce la radiación incidente. Así pues, la resistencia del detector depende de la intensidad de la radiación. La acción del interruptor rotatorio permite alternar la llegada al detector del haz de la muestra con la llegada del haz de referencia, pudiéndose comparar estas señales mediante una serie de circuitos eléctricos. Como la absorción por el disolvente es la misma en ambas celdas el efecto de éste se puede restar y el registrador recibe sólo las señales debidas a la absorción de la muestra. [13]

Análisis

8. Análisis de riesgos

Valores de impacto:

- 0
1. Catastrófico.
 2. Importante.
 3. Marginal.
 4. Despreciable.

Riesgo: 01	Probabilidad: 15%	Impacto: 2
Descripción	Negación de espectrómetro	
Contexto	El personal del laboratorio no permite el acceso y/o el uso del espectrómetro.	
Solución	Solicitar al encargado, el instrumento con anticipación	

Riesgo: 02	Probabilidad: 15%	Impacto: 2
Descripción	Indisponibilidad del director en ESIQIE	
Contexto	El director no puede asistir a una sesión en ESIQIE	
Solución	Reagendar otra sesión	

9. Requerimientos del sistema

9.1. Requisitos funcionales

El sistema:

Identificación del requerimiento	RF01
Nombre del requerimiento	Carga de archivos soportados
Características	El sistema recibe únicamente archivos con extensión .txt, .dat o .ASC
Descripción del requerimiento	El usuario selecciona su archivo con formato .txt, .dat o .ASC para subir al servidor
Prioridad	Alta

Identificación del requerimiento	RF02
Nombre del requerimiento	Grafica datos del archivo cargado
Características	El sistema grafica los datos del archivo que sea ha cargado
Descripción del requerimiento	El sistema valida que los datos del archivo cuenten con pares ordenados y graficarlo, cualquier otra información irrelevante sea ignorada.
Prioridad	Alta

Identificación del requerimiento	RF03
Nombre del requerimiento	Acercar o disminuir tamaño de la gráfica
Características	El sistema grafica permite acercar o alejar la gráfica
Descripción del requerimiento	El sistema cuenta con botones para realizar las funciones de acercar o alejar la gráfica.
Prioridad	Media

Identificación del requerimiento	RF04
Nombre del requerimiento	Identificar picos y valles
Características	El sistema identifica los picos y los valles
Descripción del requerimiento	El sistema cuenta con botones para identificar en la gráfica los picos y los valles
Prioridad	Media

Identificación del requerimiento	RF05
Nombre del requerimiento	Seleccionar área específica
Características	El sistema permite seleccionar un área específica dentro de la gráfica
Descripción del requerimiento	El usuario seleccionara a partir de una línea el área de su interés
Prioridad	Alta

Identificación del requerimiento	RF06
Nombre del requerimiento	Calcular área bajo la curva
Características	El sistema calcula el área bajo la curva del área seleccionada
Descripción del requerimiento	Después que el usuario seleccione el área de su interés, el sistema calcula el área bajo la curva de dicha área
Prioridad	Alta

Identificación del requerimiento	RF07
Nombre del requerimiento	Identificar grupos funcionales
Características	El sistema identifica los grupos funcionales
Descripción del requerimiento	El sistema identifica los grupos funcionales a los que pertenece cada pico de acuerdo a su ubicación en la gráfica
Prioridad	Alta

Identificación del requerimiento	RF08
Nombre del requerimiento	Determinar concentración de la sustancia
Características	El sistema determina la concentración de la sustancia
Descripción del requerimiento	El sistema identifica la concentración de la sustancia
Prioridad	Alta

Identificación del requerimiento	RF09
Nombre del requerimiento	Interpretar resultados
Características	El sistema interpreta los resultados obtenidos
Descripción del requerimiento	El sistema realiza una interpretación a partir de los resultados obtenidos y los despliega al usuario
Prioridad	Alta

9.2 Requisitos no funcionales

1.1. Identificación del requerimiento	RNF01
Nombre del requerimiento	Funcional
Descripción del requerimiento	Realiza las operaciones como deben
Prioridad	Alta

Identificación del requerimiento	RNF02
Nombre del requerimiento	Preciso
Descripción del requerimiento	Comparando con cálculos previos
Prioridad	Alta

Identificación del requerimiento	RNF03
Nombre del requerimiento	Compatible
Descripción del requerimiento	Compatible con cualquier sistema operativo
Prioridad	Alta

Identificación del requerimiento	RNF04
Nombre del requerimiento	Intuitivo
Descripción del requerimiento	Dar el sistema a por lo menos 20 usuarios y medir el tiempo de uso
Prioridad	Alta

10. Reglas del negocio

El usuario:

1. Puede cargar archivos en formato .dat o ASCII
2. Solamente se cargará archivos en los formatos mencionados siempre y cuando tengas metadatos y coordenadas.
3. Puede graficar el archivo cargado
4. Puede acercar o alejar la pantalla sobre la gráfica sin modificar el contenido
5. Puede elegir entre dibujar en el plano 3 figuras, el espectro, los picos y los valles.

El sistema:

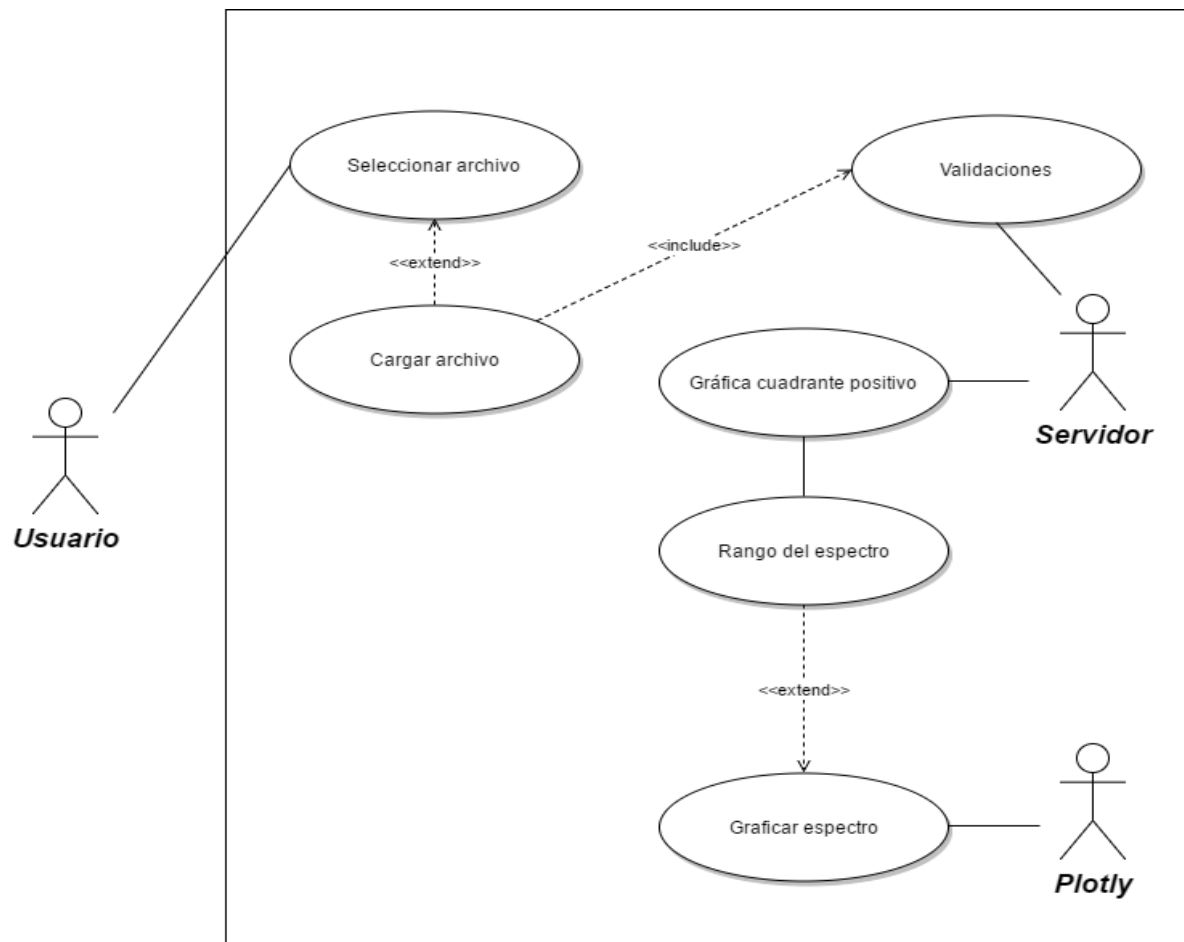
6. Provee una interfaz para la carga de archivos
7. Valida el formato y los datos del archivo
8. Hará positivos todos los valores del espectro
9. Establece los límites de los ejes
10. Tiene una opción para habilitar y deshabilitar los picos del espectro.
11. Tiene una opción para habilitar y deshabilitar los valles del espectro.

11. Diagramas de Casos de uso

CASO de USO 1:

El usuario selecciona un archivo de su equipo para poderlo cargar al servidor, una vez cargado, el servidor realiza las validaciones y coloca los datos del archivo en cuadrante positivo además que se encuentre en el rango del espectro.

Por último se envía la respuesta estructurada a la librería para graficar el espectro resultante.



CASO de USO 2:

El usuario hace click en el botón de “ubicar picos y valles” en el entorno gráfico, enviando la petición al servidor, éste ejecuta la función para obtener los picos y valles.

Por último, el servidor envía la respuesta con los datos ubicados para que la librería pueda graficar dichos puntos.

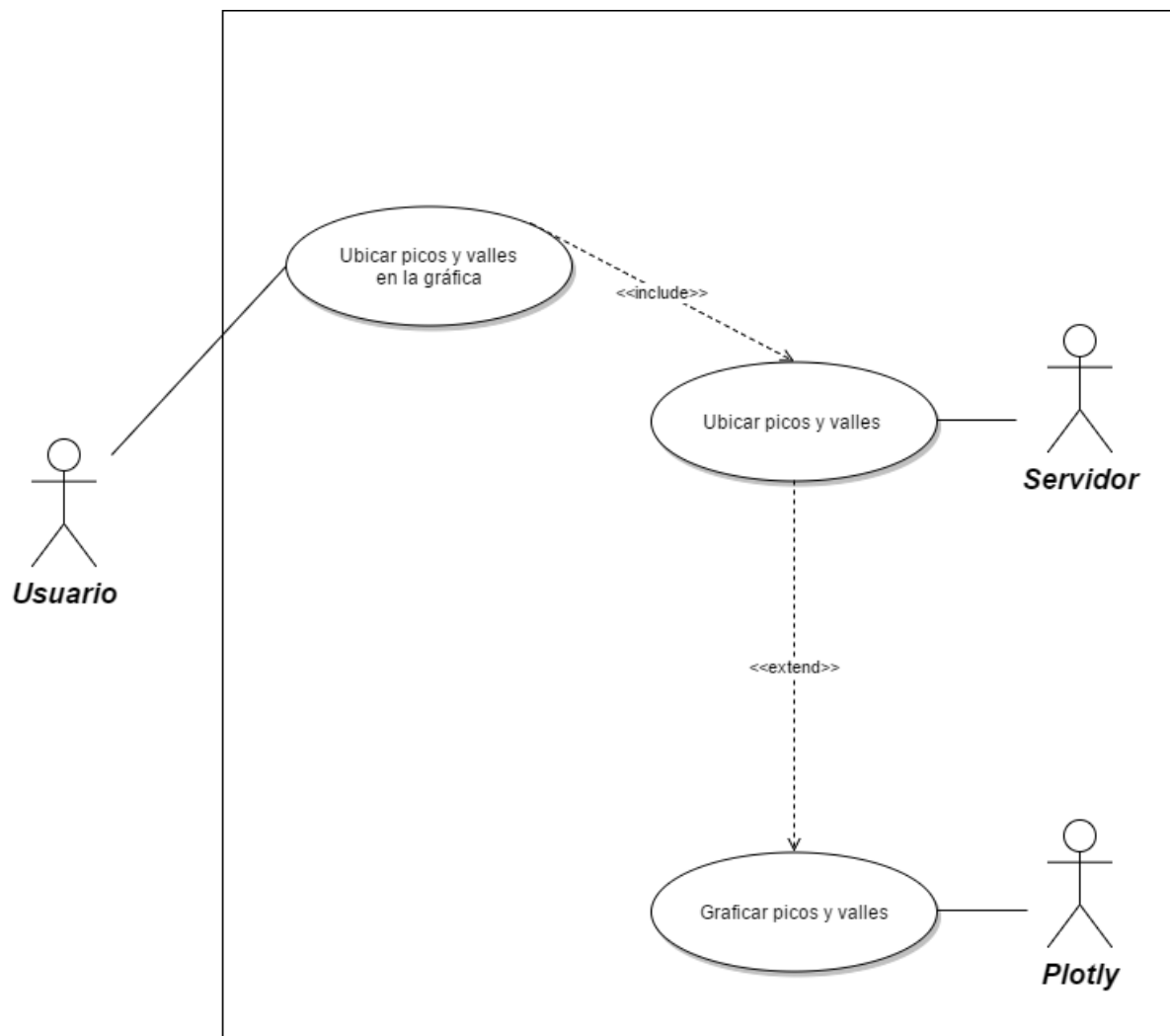


Diagrama de actividades 1:

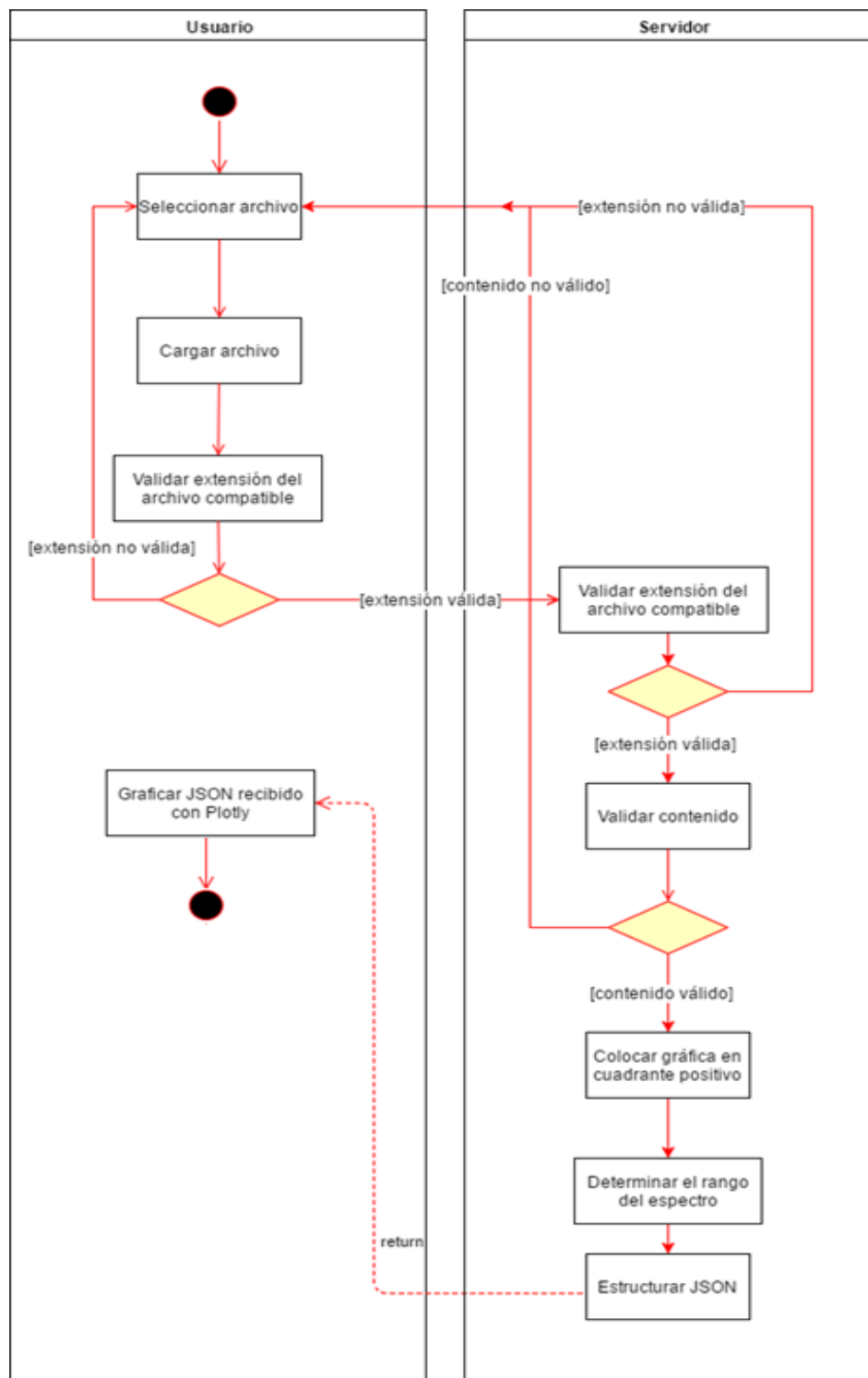
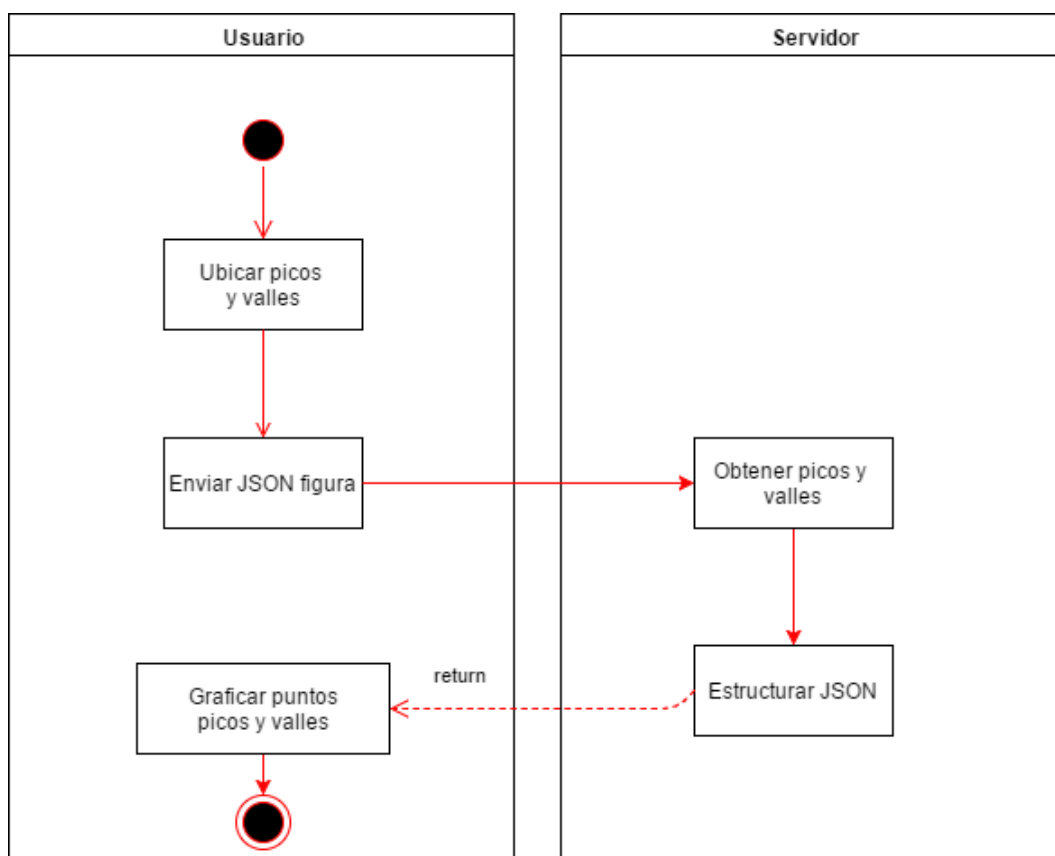


Diagrama de actividades 2:



12. Modelo de Comportamiento:

Este sistema se decidió hacer web debido a las tendencias y ventajas que se tienen con respecto a una aplicación de escritorio.

En primer lugar, tenemos que puede ser multiplataforma, y por tanto únicamente se requiere conexión a Internet y un navegador reciente (superior a las versiones indicadas en requerimientos).

Se requiere menos recursos del equipo, ya que las operaciones se realizan en el servidor, mostrando los resultados al cliente.

Un aspecto muy importante es que pueden realizarse actualizaciones y mejoras en cualquier instante sin que el cliente pueda tener problemas de hacer una instalación nuevamente.

La arquitectura que se usó en el Software es Modelo Vista Controlador debido a que con este se permite independizar la lógica y la parte visual del sistema usando para eso un controlador que administra los procesos sirviendo como puente entre estos.

A continuación se muestra un diagrama donde se puede observar el reparto de las carpetas del proyecto acuerdo a la arquitectura utilizada es decir Modelo,Vista y Controlador.

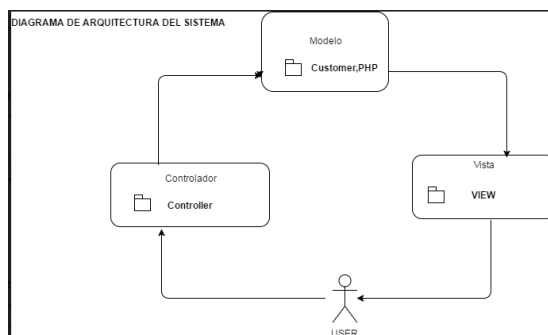


Ilustración 8 Diagrama que muestra las carpetas que corresponden a cada segmento del MVC

13. Requerimientos de hardware y software

- **Navegador de internet**



- **RAM**

1 GB

- **Procesador**

Intel Pentium M o superior

- **Sistema operativo**

Windows XP Service Pack 2 y versiones posteriores, Windows Vista, Windows 7, Windows 8, Windows 10

Mac OS X 10.6 y versiones posteriores

Ubuntu 12.04 y versiones posteriores, Debian 7 y versiones posteriores, OpenSuSE 12.2 y versiones posteriores, Fedora Linux 17

- **Acceso a internet**

2 MB Carga y Descarga

14. Tecnologías utilizadas

Plotly

Es una herramienta de análisis y visualización de datos, proporciona gráficos en línea, análisis y estadística, así como las bibliotecas de gráficos científicos.

Para el desarrollo de este trabajo se utilizó uno de los productos de Plotly, el cual es Plotly.js.

Plotly.js es una biblioteca de Javascript para la creación de gráficos de código abierto, utiliza el esquema JSON que intenta describir todos los aspectos físicos de cualquier gráfico científico. Con este enfoque, plotly.js toma la especificación JSON y produce una visualización interactiva.

Debido que plotly cuenta con bibliotecas de gráficos científicos, permite generar una representación gráfica del espectro con base en los datos obtenidos de la muestra, los cuales pueden ser fácilmente soportados gracias al esquema JSON.

Además, como es una biblioteca de Javascript, es posible utilizarla en el entorno web, ya que esta es la orientación de este proyecto.

De esta manera se puede dar una visualización de los datos usando una herramienta de carácter científico para asegurar la integridad de los datos de la muestra. [14]

jQuery

jQuery es una biblioteca gratuita de Javascript, cuyo objetivo principal es simplificar las tareas de creación de páginas web responsivas.

Otra de las grandes ventajas de jQuery es que se enfoca en simplificar los scripts y en acceder/modificar el contenido de una página web.

Para poder usar la herramienta Plotly, era necesario primero obtener los datos de una muestra, es por ello que jQuery facilitó el desarrollo para poder hacer algunas validaciones e interacciones importantes, además de complementar algunas funciones necesarias con las que Plotly no contaba.

AJAX

El término AJAX es un acrónimo de Asynchronous JavaScript + XML, que se puede traducir como "JavaScript asíncrono + XML".

Esto permite mejorar la interacción del usuario con la aplicación, permitiendo el intercambio de información con el servidor, de manera que se obtenga respuesta sin recargar la página.

Ya que los cálculos se realizan del lado del servidor con intención de hacer más ágil el software, fue necesario comunicar los datos de la muestra para que fuesen procesados, con el propósito de esperar una respuesta simplificada.

Bootstrap

Es un framework que permite crear interfaces web con CSS y Javascript cuya particularidad es la de adaptar la interfaz del sitio web al tamaño del dispositivo en que se visualice.

Se utilizó debido a la facilidad que tiene para crear interfaces de usuario sin recurrir a mucho código, además incluye adaptaciones y estándares que ahorran tiempo de desarrollo.

Javascript

Es un lenguaje de programación que se utiliza principalmente para crear páginas web dinámicas. Es un lenguaje interpretado, con dialecto ECMAScript, se utiliza del lado del cliente.

Se utilizó debido a que se requiere recolectar los datos y enviarlos al servidor en formato JSON entre algunos otros comportamientos básicos.

PHP

Es un lenguaje de código abierto muy popular especialmente adecuado para el desarrollo web y que puede ser incrustado en HTML.

El código es ejecutado en el servidor, generando HTML y enviándolo al cliente.

El cliente recibirá el resultado de ejecutar el script, aunque no se sabrá el código subyacente que era.

Se utilizó PHP debido a que es totalmente abierto, multiparadigma y es muy flexible, además se integra mucho mejor con javascript, esto permitió una comunicación más ágil.

A través de PHP se procesa la información, se realizan cálculos y se estructuran las respuestas para las correspondientes peticiones.

Apache

Es un servidor web, de código abierto, multiplataforma es utilizado principalmente, para realizar servicio a páginas web, ya sean estáticas o dinámicas, este estupendo servidor se integra a la perfección con otras aplicaciones, y da soporte a diferentes lenguajes, en caso de este proyecto se utilizó para dar soporte a PHP.

Gracias a este servidor se pudo dar soporte para hacer las pruebas debidas para ejecutar el código de PHP, realizar las peticiones y enviar las respuestas.

BitBucket

Es un servicio de alojamiento basado en web, para los proyectos que utilizan el sistema de control de revisiones Mercurial y Git. Bitbucket ofrece planes comerciales y gratuitos.

Se utilizó para poder trabajar colaborativamente, y en caso de alguna falla poder regresar a una versión anterior, además esta herramienta se adaptó a la metodología, haciendo incrementos de código y con cada incremento una breve descripción del mismo.

JIRA

Es una aplicación basada en web para el seguimiento de errores, de incidentes y para la gestión operativa de proyectos. Jira también se utiliza en áreas no técnicas para la administración de tareas.

En un principio se utilizó para poder planificar los sprints, tareas e incidencias que se tuvieron para comenzar el desarrollo, como indica la metodología.

De esta forma se llevaba un mejor control de las tareas de cada uno.

MeisterTask

Es una colaboración de mapas mentales de software que permite a sus usuarios visualizar sus pensamientos en la nube, también proporciona herramientas para facilitar en tiempo real la colaboración, gestión de tareas y la creación de presentaciones.

Debido que JIRA es de paga, se decidió usar esta herramienta, ya que es gratuita y funciona de una manera similar, permitiendo continuar con el trabajo como se veía desarrollando.

Mercurial

Es un sistema de control de versiones multiplataforma, para desarrolladores de software.

Se utilizó para actualizar los repositorios, y llevar el control de las versiones, con lo cual cada incremento era gestionado.

Draw.io

Es un software en línea gratuito para hacer diagramas de flujo, diagramas de procesos, organigramas, UML, ER y diagramas de red, entre otros.

Permitió crear los diversos diagramas, además contaba con la posibilidad de guardar los diagramas para posteriormente ir agregando más contenido y mejoras, todo esto de manera gratuita, simplemente con tener acceso a internet se pudo usar sin problemas.

15. Personas y roles del proyecto.

Persona	Contacto	Rol
Verónica	vero.mata.0819@gmail.com	Scrum Maneger (Coordinador)
Daniel	xcalibursilver@gmail.com	Product Owner (Gestor del producto)
Verónica y Daniel		Equipo técnico

16. Artefactos.

Documentos

- Product Backlog
- Sprint Backlog

Sprint

Incremento

Gráficas para registro y seguimiento del avance.

- Gráfica de producto o Burn Up
- Gráfica de avance o Burn Down.

Comunicación y reporting directo.

- Reunión de inicio de sprint
- Reunión técnica diaria
- Reunión de cierre de sprint y entrega del incremento

Desarrollo

17. Sprint 0 - Organización de desarrollo

Historias de usuario

Identificador	H01
Nombre historia	Graficar 400 a 4000
Descripción	Quiero que solamente se grafique de 400 a 4000
Resultado	Mostrar la gráfica únicamente en rango de 400 a 4000 (en número de onda)
Prioridad	Alta

Identificador	H02
Nombre historia	Subir valores
Descripción	Quiero subir la gráfica y eliminar los puntos negativos o solicitar un fondo indicando cuanto se quiere subir
Resultado	Colocar los valores de la gráfica en cuadrante positivo
Prioridad	Alta

Identificador	H03
Nombre historia	Ubicar picos
Descripción	Quiero ver en la gráfica los puntos que son picos
Resultado	Colocar puntos indicadores de picos y valles
Prioridad	Alta

Identificador	H04
Nombre historia	Trabajar un área particular
Descripción	Quiero que el software me permita manipular el área que yo quiera
Resultado	Permite seleccionar un área particular
Prioridad	Alta

10.1. Organización de los Sprints

Con la ayuda de la herramienta MeisterTask se va a registrar el backlog de cada sprint y habrá cuatro columnas en cada uno para identificar el progreso de las incidencias las cuales son: abrir, en progreso, listo, asesorías y entregables, además de incluir en cada incidencia una descripción de lo que se hizo.

En la siguiente imagen se muestra un ejemplo de la organización que se tiene en cada Sprint.

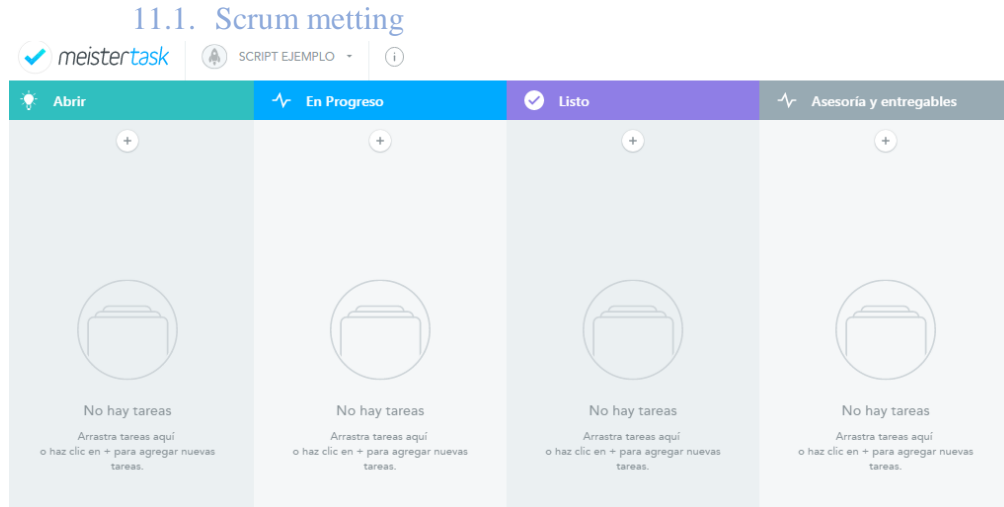


Ilustración 9 Ejemplo de organización en MeisterTask

Antes de comenzar con el desarrollo de cada incidencia se tendrá una reunión de aproximadamente 15 min para asegurar que se está entendiendo el objetivo de cada una de ellas, revisar el avance que se tiene, despejar dudas, si es que existen y el cumplimiento de los incrementos.

18. Sprint 1 - Parámetros obtenidos

12.1. Incidencia 1 Identificación de datos

El formato en el que el espectrómetro entrega la gráfica es en formato .dat , .sp y .ASCII, se identificó que lo contiene este archivo son los metadatos de la muestra (fecha,nombre,datos del equipo) y las coordenadas (x,y) de los puntos que conforman la gráfica.

```
PE IR      SUBTECH  SPECTRUM  ASCII    PEDS      4.00
-1
2910 Ceniza.ASC
13/06/19
14:25:01.00
13/06/19
14:25:01.00
Administrator
Sample 045 By Administrator Date Wednesday, June 19 2013
400.000000
#HDR
-1
-1
#GR
cm-1
A
1.0
0.0
6000.000000
-1.000000
5601
8
0.289008
-0.094812
#DATA
6000.000000 -0.080500
5999.000000 -0.080422
5998.000000 -0.080330
5997.000000 -0.080230
5996.000000 -0.080158
5995.000000 -0.080146
5994.000000 -0.080186
5993.000000 -0.080245
5992.000000 -0.080304
5991.000000 -0.080353
5990.000000 -0.080378
5989.000000 -0.080370
5988.000000 -0.080345
5987.000000 -0.080323
```

Ilustración 10 Datos de un archivo .dat

13.1. Incidencia 2 - Algoritmo para separar los metadatos y coordenadas

Después de identificar los datos de los archivos entregados por el espectrómetro se procedió a realizar un algoritmo con el cual se pudiese separar la cabecera donde se encuentran los metadatos y las coordenadas.

14.1. Incidencia 3 Cargar el archivo

Se creó el template para que el usuario pudiera cargar un sólo archivo desde la computadora.

Cargar JSON Plotear

Browse... No file selected.

Subir

15.1. Incidencia 4 Visualizar los datos

Con el uso de la librería de javascript, plotly, donde se cargaron las coordenadas obtenidas del archivo .dat ,se convirtieron estos datos en un objeto json ya que la librería requiere que los datos estén este formato para poder graficarlos.

En la siguiente imagen se observan los datos graficados con la librería.

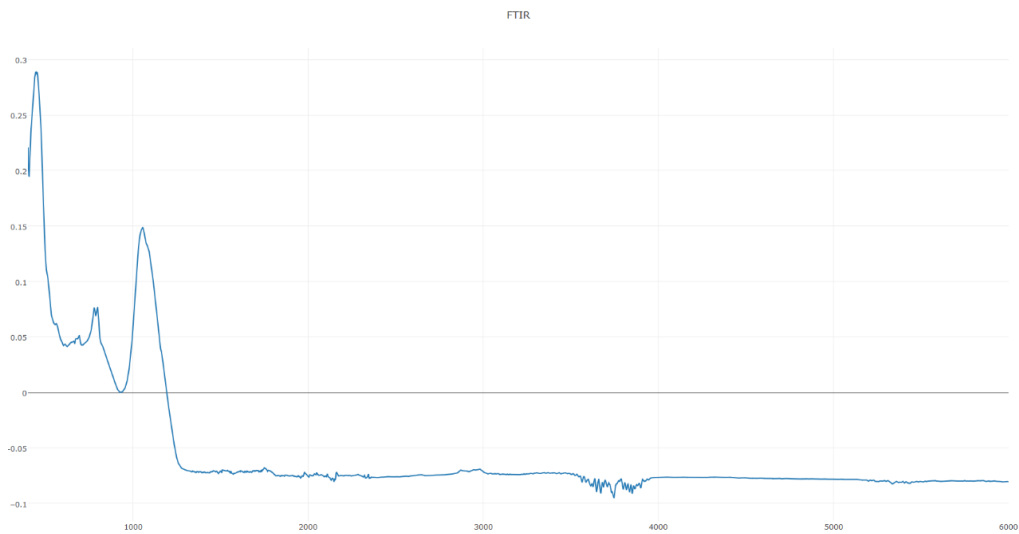


Ilustración 11 Datos graficados con la librería plotly

En la siguiente imagen se muestran las incidencias antes descritas así como los tiempos y las personas a quienes les fueron asignadas.

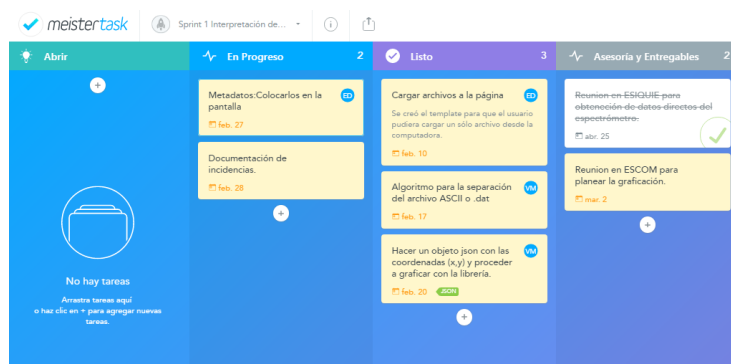


Ilustración 12 Incidencias del Sprint 1

19. Sprint 2 - Relacionar los datos obtenidos con el espectro

16.1. Incidencia 1 Seleccionar archivos del ordenador

El siguiente paso consistió en hacer posible la carga de cualquier archivo seleccionado desde el ordenador además de darle un diseño sencillo y funcional con ayuda de bootstrap.

Selecciona archivo .dat

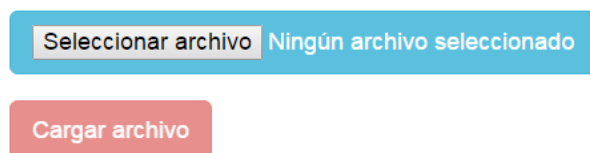


Ilustración 13 Carga de cualquier archivo desde el ordenador

17.1. Incidencia 2 Validación de carga de archivos

En el sistema una regla del negocio es que sólo se permitirá analizar los datos contenidos en un archivo con formato .dat o .ASCII , así que se hizo la validación desde Javascript y desde el servidor.

En caso de que cumpla con este formato también deberá cumplir con las características de que sea un archivo con los datos que se requieren para comenzar a analizar el espectro es decir las coordenadas y los metadatos.

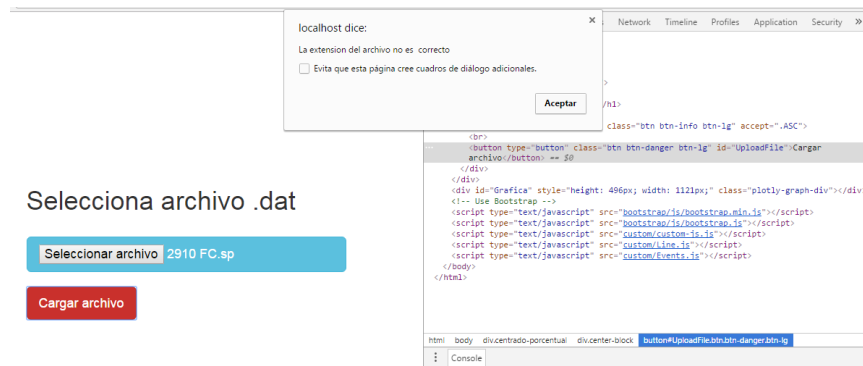


Ilustración 14 En esta imagen se observa cómo se deniega el acceso a un archivo debido a su extensión.

18.1. Incidencia 3 Colocar valores de la gráfica en el cuadrante positivo

Debido a que en la etapa de cálculos se trabajara con áreas es importante asegurar que no existan áreas negativas como muestra la ilustración 17, el primer paso fue identificar el punto más negativo y agregar el valor de la diferencia con respecto a 0.

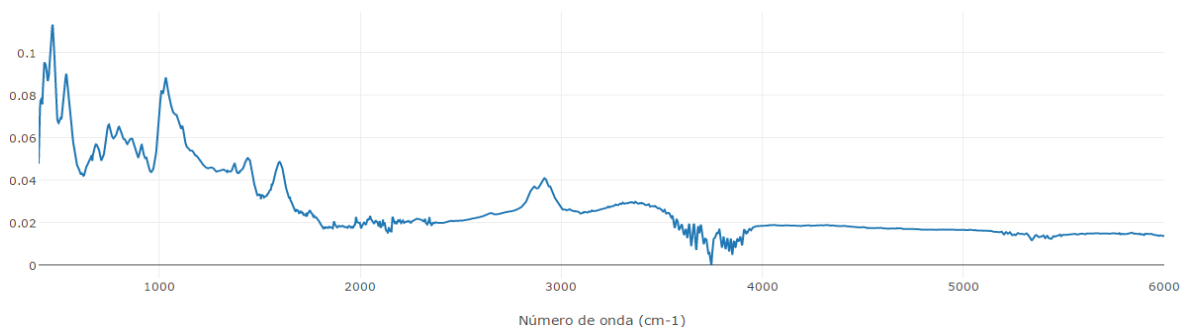


Ilustración 15 Valores del espectro ubicados en el cuadrante positivo

19.1. Incidencia 4 - Delimitar los ejes de la gráfica e identificar las magnitudes de absorbancia y longitud de onda en los mismos

En el espectro el eje de las abscisas representa el número de onda y el rango que debe tener de acuerdo a las historias de usuario es de 400 a 4000 cm^{-1} ; por otra parte, el eje de las ordenadas representa la absorbancia cuyo rango debe ir de 0 a 1. Para lograr la delimitación de rangos se realizó desde el servidor.

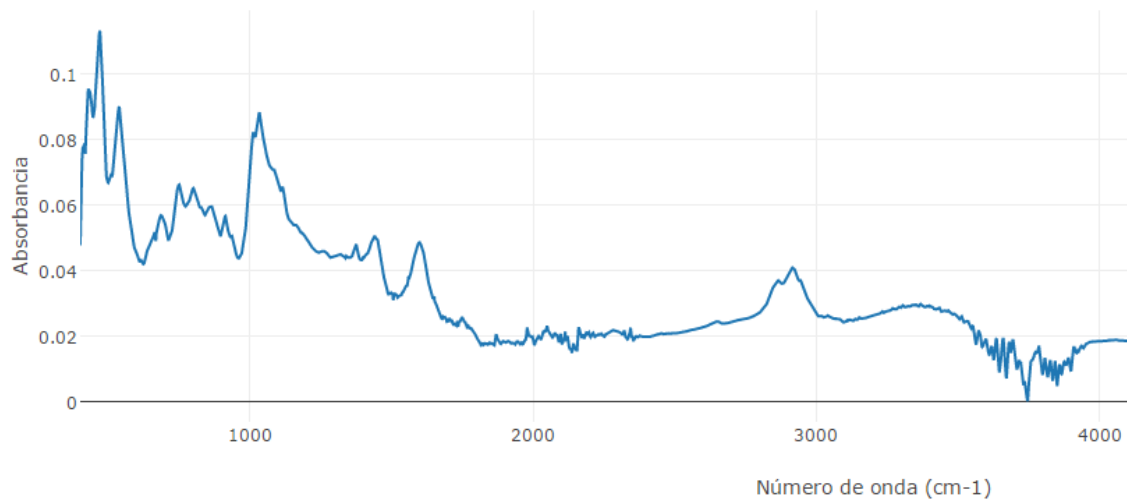


Ilustración 16 Se observan los límites, así como el nombre de las magnitudes en los ejes

Organización de incidencias, asignación de tiempo y de responsable.

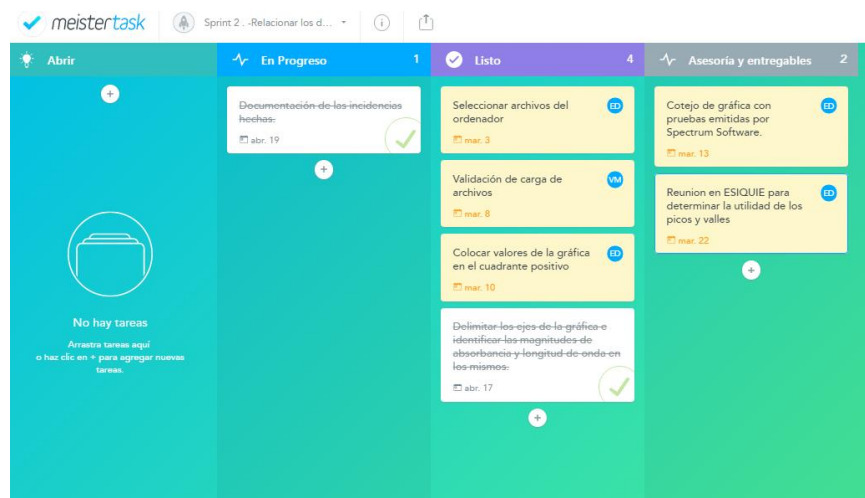


Ilustración 17 Incidencias del Sprint 2

20. Sprint 3 - Reconocimiento de picos y valles en el espectro

20.1. Incidencia 1 Plotly

Se hizo uso de la librería Plotly para crear dos figuras; una para valles y otra para picos; en adición a la del espectro. Estas figuras están deshabilitadas por defecto al graficar un nuevo espectro y se puede elegir pintar valles y/o picos sobre la gráfica dando clic al ícono que se encuentra en la parte superior derecha de la pantalla; y, de la misma forma, pueden deshabilitarse.

21.1. Incidencia 2 Identificación de picos y valles

El método creado para la identificación de picos consiste en recorrer el objeto JSON y ubicar aquellos puntos donde el valor de las ordenadas en la coordenada que los antecede y los prosigue son menores al valor de la ordenada que les pertenece es decir tratamos de encontrar un punto que su valor en (y) es superior al valor en (y) que tienen los puntos que están antes y después que él.

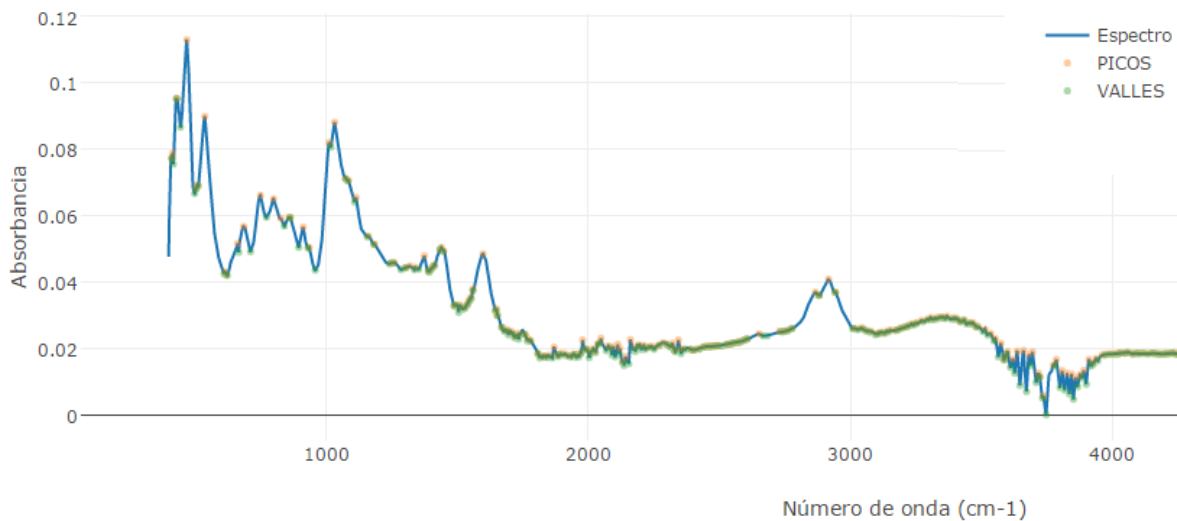


Ilustración 18 Identificación de picos y valles

Actividades para Trabajo Terminal II

Generar el árbol de decisión

Diseño de bases de datos patrón

Creación del sistema inteligente

Primeros reconocimientos de las características básicas de la sustancia

Añadir el reconocimiento al entorno gráfico

Referencias

- [1] Anthony, J., Bideaux R., Nichols M., *Handbook of Mineralogy*, Mineral Data Publishing, 1990-2003
- [2] Marfunin A.S., *Advanced Mineralogy: Method and instrumentation (Results and recent developments)*, Berlin-Heidelberg-New York:Spring-Verlag, 1994.
- [3] M. Ostrooumov, *Mineralogía Análítica Avanzada*, Morelia, Michoacan, México: Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, 2009, pp 275
- [4] *La industria minera ampliada. Censos Económicos 2014*, edición 2016. Aguascalientes: INEGI, 2014, pp. 29-75.
- [5] R. Pressman, *Ingeniería del software*, 7th ed. México: McGraw-Hill, 2010.
- [6] P. Caetano Júnior, J. Carvalho Aguiar, J. Ferreira-Strixino and L. José Raniero, "Isokinetic muscle performance and salivary immune-endocrine responses in handball players by Fourier transform infrared spectroscopy", *Revista Andaluza de Medicina del Deporte*, 2016.
- [7] D. Seetha, G. Velraj, " *Characterization and chemometric analysis of ancient pot shards trenched from Arpakkam, Tamil Nadu, India*", *Journal of Applied Research and Technology*, vol. 14, no. 5, pp. 345-353, 2016.
- [8] R. Mis-Fernandez, J.A. Azamar-Barrios, C.R. Rios-Soberanis, " *Characterization of the powder obtained from wasted tires reduced by pyrolysis and thermal shock process*", *Journal of Applied Research and Technology*, vol. 6, no. 2, pp. 95-105, 2008
- [9] C. L. Manuelian, S. Currò, M. Penasa, M. Cassandro and M. De Marchi, " *Prediction of minerals, fatty acid composition and cholesterol content of commercial cheeses by near infrared transmittance spectroscopy*", *International Dairy Journal*, vol. 71, pp. 107-113, 2017.

[10] G. Visentin, M. Penasa, P. Gottardo, M. Cassandro and M. De Marchi, "Predictive ability of mid-infrared spectroscopy for major mineral composition and coagulation traits of bovine milk by using the uninformative variable selection algorithm", *Journal of Dairy Science*, vol. 99, no. 10, pp. 8137-8145, 2016.

[11] A. Mir-Marqués, M. Martínez-García, S. Garrigues, M. Cervera and M. de la Guardia, "Green direct determination of mineral elements in artichokes by infrared spectroscopy and X-ray fluorescence", *Food Chemistry*, vol. 196, pp. 1023-1030, 2016.

[12] Montiel D., Ballinas M., Jiménez M., "Espectrómetro" Centro Univesitario México. Obtenido de <http://www.acmor.org.mx/cuam/2009/Fisico-Mate/101-CUM-%20Espectrometro.pdf>

[13] "Minerales: compuestos, elementos, átomos e isotopos", notas de curso, Ciencias de la Tierra, Facultad de Ciencias UNAM, 2011, Disponible en: <http://usuarios.geofisica.unam.mx/cecilia/cursos/31-MINERALES%20y.pdf>

[14] "Plotly.js Open-Source Announcement", *Plot.ly*, 2015. [Online]. Available: <https://plot.ly/javascript/open-source-announcement/>. [Accessed: 08- Jan- 2017].

Ilustración 3 - Bio-Rad's Spectroscopy Solutions, *Identify IR & Raman Spectra with Bio-Rad's KnowItAll® ID Expert™*. 2017.

Ilustración 4 - Bio-Rad's Spectroscopy Solutions, *IR & Raman Functional Group Analysis in Bio-Rad's KnowItAll® (AnalyzeIt™ IR/Raman)*. 2017.

Ilustración 5 - ScreenR, *Multiphase Rietveld Refinement - TOPAS Academic*. 2017.

Ilustración 6 - J. Manuel Caputo, *fityk Marcar Gaussiana 1*. 2017.

Ilustración 7 - *Infrared Spectroscopy*. 2017.