Especificación de Requerimientos de Software

para

Aplicación web para la comparación de rutas metabólicas

Versión 1.0 aprobada

Preparado por Anthony Leandro, Bryan Vargas, Daniel Delgado

Tecnológico de Costa Rica

10/03/2019

Índice

Introducción	2
Propósito	2
Convenciones de documentos	2
Público previsto y sugerencias de lectura	3
Alcance del proyecto	3
Referencias	4
Descripción general	4
Perspectiva del producto	4
Características del producto	5
Clases de uso y características	5
Ambiente de operación	5
Restricciones de diseño e implementación	5
Documentación de usuario	6
Suposiciones y dependencias	6
Características del sistema	6
Gestión de archivos y grafos	6
Ejecución de algoritmos de comparación de rutas metabólicas	7
Visualización en pantalla y reportes	8
Requerimientos de la interfaz externa	9
Interfaces de usuario	9
Interfaces de Hardware	15
Interfaces de Software	15
Interfaces de comunicaciones	15
Otros requerimientos no funcionales	15
Requerimientos de desempeño	15
Requerimientos de seguridad	15
Requerimientos de seguridad	15
Atributos de calidad de software	16
Otros requerimientos	16
Apendice A: Glosario	16
Apendice B: Modelo de datos	17
Apendice C: Lista de problemas	34
Anexos	35

Revisiones

Nombre	Fecha	Razón para cambios	Versión

1.1. Introducción

Esta sección proporciona una descripción del alcance y una descripción general de todo lo que se incluye en este documento SRS. También, se describe el propósito de este documento y se proporciona una lista de abreviaturas y definiciones.

1.2. Propósito

El propósito de este documento es proporcionar una descripción detallada de los requisitos del proyecto llamado "Aplicación Web para la Comparación de Rutas Metabólicas". Se definirá el objetivo y se describirán los pasos para el desarrollo del software. Del mismo modo se explicarán las limitaciones del sistema y la interfaz de usuario. El fin principal del presente documento es ser propuesto a un cliente para su aprobación y para ser tomado como referencia en el desarrollo de la primera versión del sistema.

1.3. Convenciones de documentos

Término	Definición
Usuario	Alguien que interactúa con la aplicación web
Administrador	Administrador del sistema, quien cuenta con permisos específicos para el manejo y control del sistema
Investigador	Alguien que se encuentra trabajando en algún trabajo científico o investigativo

Aplicación web	Programa de software el cual puede ser accedido mediante Internet		
Open source	Código de software que se encontrará disponible para cualquier persona		
Stakeholder	Cualquier persona que interactúa con el sistema y no es un desarrollador		

1.4. Público previsto y sugerencias de lectura

Este proyecto es desarrollado a nivel institucional para ser utilizado por investigadores (graduados o estudiantes) pertenecientes al sector público nacional, sin embargo no se limitará solamente a este tipo de profesionales ya que será posible acceder al sitio desde cualquier lugar del planeta. El presente trabajo será de utilidad para aquellas personas que se encuentren trabajando en investigaciones relacionadas a redes y rutas metabólicas, entre los que se pueden mencionar a los profesionales del área de biología, química, biotecnología, entre otros.

1.5. Alcance del proyecto

El software de Comparación de Rutas Metabólicas será una aplicación desarrollada completamente en web, la cual ayudará a investigadores en los cálculos de necesarios para sus trabajos. La aplicación deberá ser gratis, código open source y deberá poder ser accedida sin importar la ubicación geográfica del usuario.

Los investigadores podrán cargar sus propios archivos KGML provenientes de bases de datos científicas, esta información podrá ser utilizada por cualquier otro usuario en otro momento. Será responsabilidad de los administradores del sitio mantener la base de datos limpia de archivos indeseados.

Cada usuario tendrá la posibilidad de ejecutar cualquiera de las tres versiones de algoritmos de comparación que se implementarán; de igual manera se encontrará disponible la opción de cambiar los nombres de cada metabolito a la descripción común o a los códigos utilizados en la base de datos Kegg. Una función importante será la definición y edición de grafos manualmente y/o reordenamiento en las relaciones entre cada nodo.

Para el correcto funcionamiento de la aplicación será necesario contar con una conexión estable a Internet, ya que el sistema se encontrará alojado en servidores web. Toda la información del sistema es mantenida en una base de datos. La aplicación también cuenta con la opción de descargar reportes de los resultados o visualizarlos en pantalla.

1.6. Referencias

- [1] IEEE Software Engineering Standards Committee, "IEEE Std 830-1998, IEEE Recommended Practice for Software Requirements Specifications", October 20, 1998.
- [2] E. Arias-Mendez and F. Torres-Rojas, "Alternative low cost algorithms for metabolic pathway comparison," 2017 International Conference and Workshop on Bioinspired Intelligence (IWOBI), Funchal, 2017, pp. 1-9.
- [3] E. Arias-Mendez, A. Montero-Marin, D. Chaves-Chaves and F. J. Torres-Rojas, "Simple Graph Comparison Inspired on Metabolic Pathway Correlation," 2018 IEEE International Work Conference on Bioinspired Intelligence (IWOBI), San Carlos, 2018, pp. 1-8.

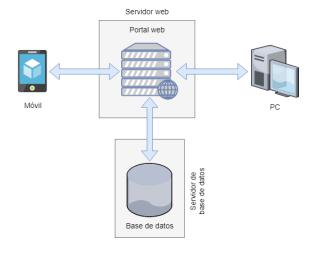
2. Descripción general

Esta sección dará una visión general de todo el sistema. El sistema se explicará para mostrar e introducir la funcionalidad básica del mismo. También describe qué tipo de stakeholders utilizarán el sistema y qué funcionalidad está disponible para cada uno. Finalmente, se presentarán las restricciones y suposiciones para el sistema.

2.1. Perspectiva del producto

El producto consistirá de una aplicación web, alojada en servidores conectados permanentemente a Internet y a una base de datos que será utilizada para almacenar los usuario y los archivos cargados por estos mismos.

Podrá accederse desde un dispositivo móvil, computadora de escritorio o laptop sin la necesidad de descargar ningún tipo de programa, lo anterior permitirá a los usuarios interactuar con la aplicación web fácilmente.



Debido a que el sistema necesita información para una correcta ejecución, es necesario contar con un lugar para almacenar datos, para esto será utilizada una base de datos. El portal web se comunicará con la base de datos cuando se solicite almacenar o leer datos. Toda la comunicación será a través de Internet.

2.2. Características del producto

Con la aplicación web, los usuarios podrán realizar la comparación de redes y rutas metabólicas. Los resultados de los algoritmos se basarán en los archivos seleccionados o cargados en el momento de ejecución. Habrán tres diferentes tipos de algoritmos, cada uno con al menos dos modos distintos.

El resultado de los cálculos podrán ser visualizados en pantalla mediante la interfaz gráfica o, si el usuario así lo desea, será posible descargar un archivo que le permitirá observar y tomar decisiones con base en los resultados.

Desde la aplicación web será posible acceder a todas las funcionalidades del producto que un investigador necesitará; la administración de la base de datos se realizará mediante una conexión directa empleando queries o mediante la aplicación manualmente.

2.3. Clases de uso y características

Habrán dos tipos de usuarios que utilizarán la aplicación: usuarios de dispositivos móviles, usuarios de computadoras personales (PCs) y administradores del sistema. Los usuarios contarán con distintos privilegios que les permitirán acceder a las funciones que cada uno necesita.

Los usuarios de dispositivos móviles y de PCs accederán al sitio con la posibilidad de navegar la interfaz gráfica y seleccionar la comparación que cada uno desee, cada usuario tendrá a su disposición múltiples algoritmos de los cuales escoger para la ejecución.

Los administradores del sistema podrán acceder directamente a la información almacenada en la base de datos mediante la aplicación o a través de queries; cada administrador podrá modificar documentos y usuarios. Cada administrador se encargará de que la información de los usuarios y datos almacenados no son una amenaza para el sistema o es incorrecta.

2.4. Ambiente de operación

El software, en condiciones de operación normal, se encontrará alojado en servidores con el sistema operativo Linux Server 16.04.1 LTS. La base de datos será no relacional y de rápido acceso, pues se encontrará en el mismo *clúster* del servidor.

2.5. Restricciones de diseño e implementación

La aplicación web será afectada por la disponibilidad del servidor donde se encontrará alojada, ya que el tiempo de ejecución del servidor será compartido con múltiples otras tareas que son importantes para la institución.

La conexión a Internet también será una restricción para la aplicación. Dado que la aplicación obtiene información de la base de datos a través de Internet, es crucial que exista una conexión estable para el correcto funcionamiento de la aplicación.

El portal web estarán limitados por la capacidad de la base de datos. Ya que la base de datos se comparte con otras aplicaciones del mismo servidor y puede ser forzada a poner en cola las solicitudes entrantes y por lo tanto aumentar el tiempo que lleva recuperar los datos y realizar los cálculos de comparación.

2.6. Documentación de usuario

La aplicación web contará con una sección de ayuda, la cual podrá ser accedida desde la misma plataforma para dudas rápidas y solución de errores sencillos.

Se entregará un manual digital y físico al cliente, el cual servirá como guía para los usuarios que cuenten con una menor experiencia técnica, para una correcta ejecución de la aplicación y reducir la cantidad de errores encontrados.

2.7. Suposiciones y dependencias

Una suposición sobre el producto es que siempre será utilizado a través de un explorador web con una versión no mayor a un 365 días desde la última actualización. Si el dispositivo no cuenta con una versión lo suficientemente reciente puede que la aplicación sea inestable o no pueda ser ejecutada del todo.

Una dependencia son los servidores donde se encontrará alojada la aplicación web, estos serán administrados por la institución, por lo que las decisiones que los encargados tomen podrán afectar el funcionamiento del sistema.

3. Características del sistema

3.1. Gestión de archivos y grafos

3.1.1. Descripción y prioridad

El sitio utiliza rutas metabólicas y las compara, dichas rutas son representadas por medio de estructuras de grafo que son generadas a partir de un archivo o por el usuario; de igual forma se desea que estas estructuras sean persistentes en el sistema y así se le ahorraría al usuario la tarea de volver a cargar o generar tales grafos cada vez que quiera utilizarlos. Esta característica

es de alta prioridad dado que los grafos son fundamentales para el uso de la herramienta y sin ellos no habría una estructura que represente rutas metabólicas para su comparación.

3.1.2. Secuencia de respuestas

- 3.1.2.1. El usuario oprime el botón de cargar un archivo
- 3.1.2.2. El archivo se carga y se extrae la ruta metabólica representada dentro del mismo
- 3.1.2.3. El usuario oprime el botón de crear grafo
- 3.1.2.4. El usuario oprime la opción de editar las relaciones de un grafo
- 3.1.2.5. El usuario guarda el grafo creado en la base de datos
- 3.1.2.6. El usuario administrador ingresa a la sección de administración de archivos KGML y oprime alguna de las opciones: agregar, editar, eliminar

3.1.3. Casos de uso

- 3.1.3.1. CU1 Cargar archivo y extraer rutas metabólicas
- 3.1.3.2. CU2 Almacenar rutas metabólicas en base de datos local
- 3.1.3.3. CU9 Definir grafos manualmente
- 3.1.3.4. CU11 Editar el orden en las relaciones de un grafo
- 3.1.3.5. CU12 Cargar grafos creados manualmente en la base de datos
- 3.1.3.6. CU15 Mantenimiento de archivos KGML

3.2. Ejecución de algoritmos de comparación de rutas metabólicas

3.2.1. Descripción y prioridad

La manera en que se pueden comparar dos rutas metabólicas en el sitio consiste en algoritmos descritos por los artículos *Alternative low cost algorithms for metabolic pathway comparison* y *Simple graph comparison inspired on metabolic pathways correlation*. Estos algoritmos son necesarios pero no se espera su elaboración por parte del equipo de desarrollo sino su inserción en el sitio para que el usuario pueda elegir cómo comparar las rutas metabólicas seleccionadas, por lo tanto, esta característica es de alta prioridad.

3.2.2. Secuencia de respuestas

3.2.2.1. El usuario ingresa los valores para la comparación del alineamiento o bien, utiliza la matriz de valores de sustitución y define los parámetros respectivos

- 3.2.2.2. El usuario selecciona uno de los algoritmos originales y oprime el botón de procesar las rutas metabólicas para su comparación
- 3.2.2.3. El usuario selecciona una de las versiones extendidas del algoritmo *2D to 1D graph transformation,* ingresa los parámetros correspondientes y oprime el botón de procesar las rutas metabólicas para su comparación
- 3.2.2.4. El usuario selecciona la versión del algoritmo *2D to 1D graph transformation* utilizando pesos en el grafo y oprime el botón de procesar las rutas metabólicas para su comparación
- 3.2.2.5. El usuario define o selecciona un grafo de la base de datos y aplica alguno de los algoritmos disponibles en el sistema

3.2.3. Casos de uso

- 3.2.3.1. CU3 Parametrizar valores para la comparación del alineamiento
- 3.2.3.2. CU4 Ejecutar algoritmos originales para comparación
- 3.2.3.3. CU5 Ejecutar versión extendida de algoritmos de comparación
- 3.2.3.4. CU6 Ejecutar la versión original del algoritmo 2D to 1D graph transformation con pesos en el grafo
- 3.2.3.5. CU10 Aplicar algoritmos existentes a grafos definidos manualmente

3.3. Visualización en pantalla y reportes

3.3.1. Descripción y prioridad

Para que los usuarios puedan ver las estructuras que representan las rutas metabólicas, se desea la implementación de gráficos que muestren el estado actual de los grafos; además, la representación de los datos resultantes luego de la ejecución de un algoritmo de comparación y que el usuario pueda relacionar códigos con nombres conocidos dentro de las rutas metabólicas. Es una característica muy deseable pero no fundamental, por lo que tiene una prioridad media.

3.3.2. Secuencia de respuestas

3.3.2.1. El usuario selecciona la opción de mostrar códigos de metabolitos o selecciona la opción de mostrar nombres de uso común en el grafo mostrado

- 3.3.2.2. El sistema procesa las rutas metabólicas con el algoritmo seleccionado y muestra en pantalla los resultados obtenidos sobre la comparación de estas rutas
- 3.3.2.3. El usuario oprime el botón de generar reporte luego de que un algoritmo se haya ejecutado
- 3.3.2.4. El sistema muestra visualmente un grafo luego de haber extraído la información de la ruta metabólica seleccionada
- 3.3.2.5. El usuario administrador ingresa a la sección de administración de diccionario de metabolitos y oprime alguna de las opciones: incluir, editar, eliminar

3.3.3. Casos de uso

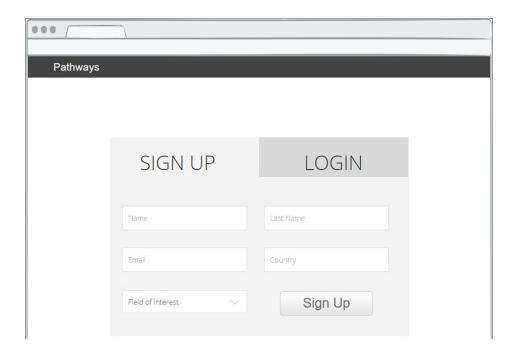
- 3.3.3.1. CU7 Traducir códigos de metabolitos a nombres
- 3.3.3.2. CU8 Tabular los resultados de los algoritmos en pantalla
- 3.3.3. CU13 Generar reporte en archivo
- 3.3.3.4. CU14 Visualizar el grafo generado luego del proceso de extracción
- 3.3.3.5. CU16 Mantenimiento de diccionario de metabolitos

4. Requerimientos de la interfaz externa

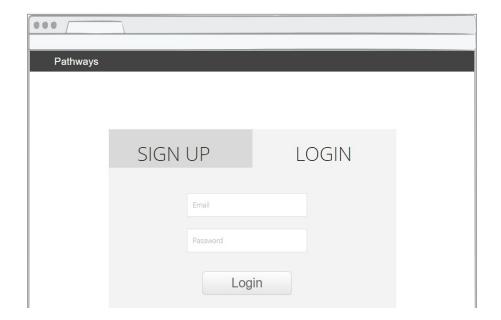
4.1.Interfaces de usuario

La primer pantalla es la permite al usuario iniciar sesión o registrarse. También es la permite al administrador iniciar sesión.

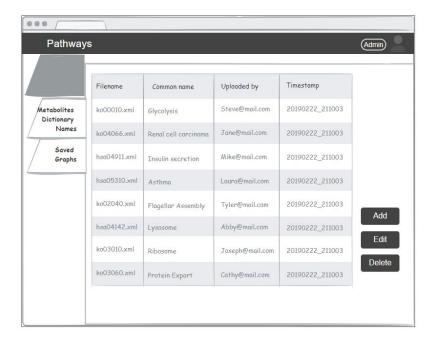
En caso de registro se solicita el nombre, apellidos, correo, ciudad, y el interés de usar la aplicación web.



Si desea iniciar sesion solo debe ingresar correo y contraseña.



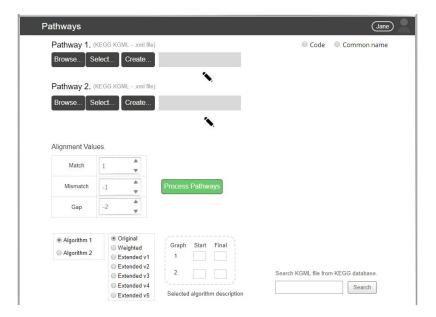
La ventana de administrador permite a este gestionar los archivos existentes en la plataforma, en ella puede saber quien ha subido archivos (CU3: Almacenamiento de rutas metabólicas en base de datos local), que se pueden utilizar posteriormente en una búsqueda rápida para no tener que subirlos de nuevo.



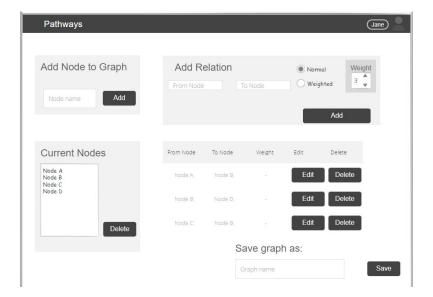
La ventana del usuario le permite trabajar con los grafos y los algoritmos a utilizar en estos.

En esta ventana puede, escoger los dos grafos, asignar valores y escoger el algoritmo a utilizar.

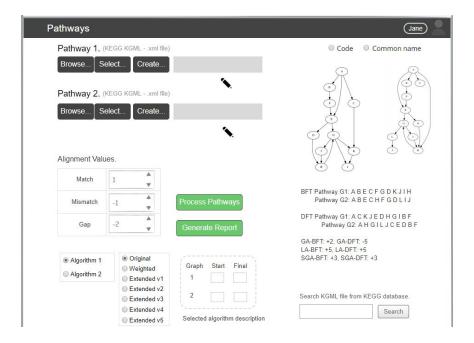
También desde esta pantalla redirecciona a la ventana que nos permite editar o crear un grafo, correr el algoritmo con los dos grafos y crear el pdf con los resultados.



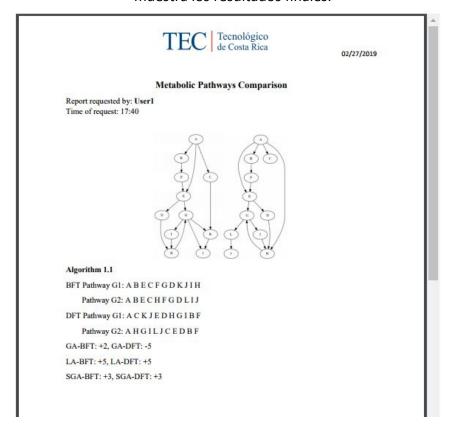
Esta es la ventana que permite al usuario crear un grafo desde cero y también editar uno cargado por él mismo.

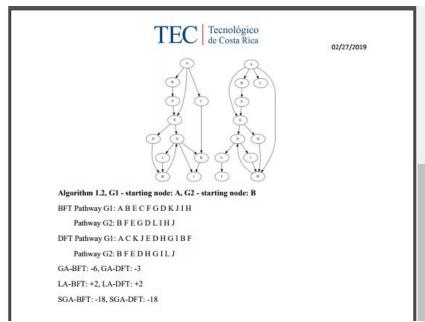


En esta ventana se muestra los resultados luego de realizar el proceso de comparación. El usuario tiene la posibilidad de ver el código o el nombre de cada nodo del grafo.



Lo siguiente es como se muestra el reporte en el pdf si el usuario desea crearlo. Es este se muestra los resultados finales.





4.2.Interfaces de Hardware

Esta aplicación web se podrá utilizar desde cualquier dispositivo que tenga conexión a internet, por lo tanto se podrá utilizar desde dispositivos con android y IOS por ejemplo hasta cualquier computadora con cualquier sistema operativo, no hay restricciones más que la conexión a internet.

4.3.Interfaces de Software

Se podrá acceder desde cualquier navegador web en cualquier dispositivo ya sea móvil o computadora mientras que se tenga conexión a internet.

4.4.Interfaces de comunicaciones

La aplicación se mantiene en constante comunicación con la base de datos donde se almacena la información de los algoritmos a utilizar en la comparación de las rutas metabólicas además de que es donde se guarda la información de los usuario y permite la validación de credenciales de estos.

5. Otros requerimientos no funcionales

5.1.Requerimientos de desempeño

El tiempo de respuesta de esta aplicación depende en gran parte de la conexión a internet que posea el dispositivo, esto para que se realice la comunicación entre la aplicación y la base de datos para solicitar los algoritmos deseados. Se espera que la aplicación brinde una respuesta en un tiempo no mayor a 10 segundos en condiciones donde la conexión a internet es buena.

5.2. Requerimientos de seguridad

Podría pasar que por culpa de la conexión a internet la aplicación y las respuestas de esta se vuelvan más lentas. También la aplicación está hecha para que si el usuario ingresa datos erróneos sean detectados de inmediato e informados al usuario para que los corrija. Es importante informar que las cuentas de usuario están protegidas para que no puedan ser obtenidas por terceros.

5.3. Requerimientos de seguridad

Cada usuario tendrá su propia cuenta donde puede mantener las pruebas realizadas. Esta cuenta brinda a la aplicación una manera de saber quien esta usando la aplicación y desde

donde la está utilizando. Por lo tanto esta cuenta contará con una contraseña para que sea de uso personal.

5.4. Atributos de calidad de software

Esta aplicación podrá ser accedida por cualquier usuario con un dispositivo con conexión a internet, esto es lo único que necesita ya que la aplicación web es gratuita y solo requiere registrarse en ella. La exactitud de los resultados será precisa siempre y cuando el usuario ingrese datos correctos para comparar.

6. Otros requerimientos

Para la creación del prototipo de la aplicación web se utilizó JustinMind.

Se necesitará acceder a Kegg para obtener archivos KGML que tienen rutas metabólicas.

Se usará NodeJS para el servidor, ExpressJS para la presentación/formato de los datos, AngularJS como Front End y MongoDB para el almacenamiento interno de los datos del proyecto.

Se utilizará git como herramienta de control de versiones.

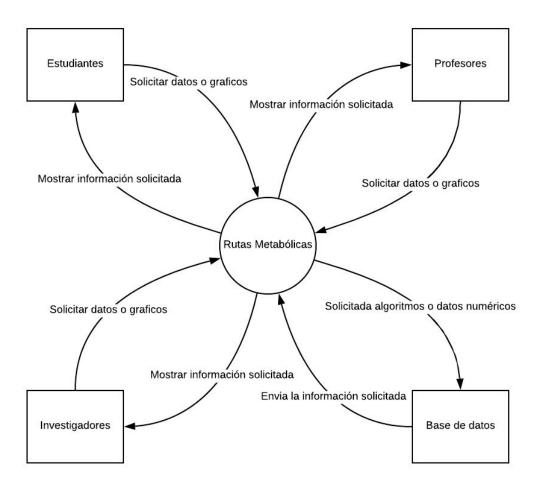
Apendice A: Glosario

- KGML (KEGG Markup Language): Formato de intercambio de datos de mapas de rutas
- JustinMind: Es una herramienta de creación de prototipos de aplicaciones web y móviles.
- NodeJS: Es un entorno en tiempo de ejecución multiplataforma, de código abierto, para la capa del servidor basado en el lenguaje de programación ECMAScript
- ExpressJS: Es un marco de aplicación web para Node.j el cual está diseñado para construir aplicaciones web y APIs.
- AngularJS: Es un framework que se utiliza para crear y mantener aplicaciones web de una sola página.
- MongoDB: Es un sistema de base de datos NoSQL, que almacena los datos en estructuras o "documentos", los cuales están definidos con la notación JSON.
- Git: Es un software de control de versiones.

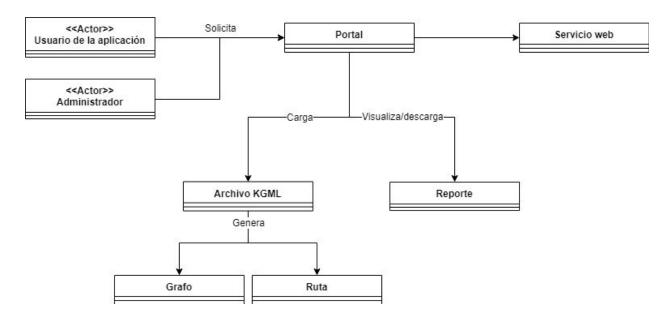
Apendice B: Modelo de datos

B.1 - Contexto del sistema

B.1.1 - Diagrama de contexto



B.1.2 - Modelo dominio del sistema



B.1.3 - Descripción modelo dominio (Para cada concepto indicar intención y extensión)

Usuario de la aplicación

Intención: un usuario de la aplicación representa la abstracción de un investigador independiente o de una determinada institución.

Extensión: todos los usuarios que vayan a utilizar la aplicación web para sus investigaciones.

Administrador

Intención: un administrador representa la abstracción de un trabajador de la institución, el cual se va a hacer cargo del mantenimiento del sistema.

Extensión: todos los trabajadores que se les encargue la tarea de velar por el correcto funcionamiento del sistema.

Portal

Intención: el portal representa el medio de interacción entre los usuarios del sistema y la aplicación web.

Extensión: todos los usuarios del sistema deberán acceder a través del portal para poder utilizar el sistema.

Servicio web

Intención: un servicio web representa el sitio donde se encontrará el alojamiento y procesamiento del sistema.

Extensión: un solo servicio web para todo el sistema.

Archivo KGML

Intención: un archivo KGML representa un grafo o ruta metabólica descargada de una base de datos como KEGG, por ejemplo.

Extensión: todos los archivos que contendrán datos de rutas metabólicas y se almacenarán en la base de datos.

Reporte

Intención: un reporte representa un archivo PDF con los resultados de la ejecución de algún algoritmo ejecutado por el usuario.

Extensión: reportes visualizados en pantalla y descargados por el usuario.

Ruta

Intención: una ruta representa la estructura de datos con la cual se visualizará en pantalla y en los reportes la ruta cargada del archivo KGML.

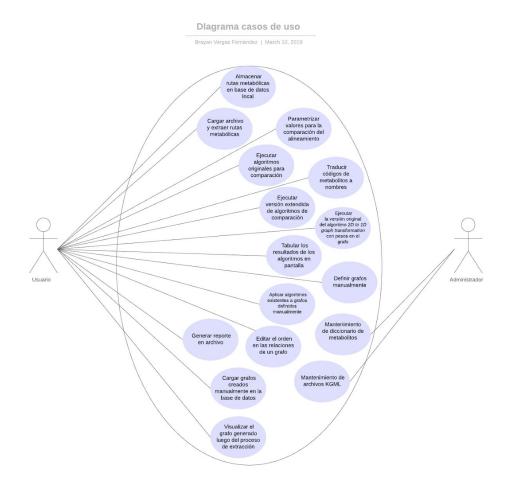
Extensión: todos los grafos utilizados por el sistema para la ejecución.

Grafo

Intención: un grafo representa la estructura de datos con la cual se visualizará en pantalla y en los reportes el grafo cargado de la ruta.

Extensión: todos los grafos utilizados por el sistema para la ejecución.

B.1.4 - Diagrama de casos de uso



B.2 - Descripción detallada de cada caso de uso

B.2.1 - Caso de uso 1:

ID y nombre	CU1 - Cargar archivo y extraer rutas metabólicas		
Creado por	Anthony Leandro Fecha de creación 04/03/2019		
Actor principal	El usuario		
Descripción	Se carga un archivo de tipo KGML proveniente de la base de datos pública Kegg y se extrae su información para generar una estructura de grafo que representa rutas metabólicas		
Desencadenador	Cargar un archivo correctamente con el formato de los archivos de Kegg que representan rutas metabólicas		
Precondiciones	El usuario debe estar registrado y realizó su respectiva autenticación en el sitio		

Postcondiciones	Se muestra gráficamente el grafo generado para que el usuario pueda visualizarlo	
Flujo normal	 El usuario selecciona la opción de cargar un archivo externo del sitio Selecciona un archivo de tipo KGML y lo carga El sistema procesa el contenido del archivo y genera un grafo que representa tal información 	
Flujo alternativo	 El usuario no selecciona la opción de cargar archivo El usuario selecciona la opción de cancelar y no carga ningún archivo externo 	
Excepciones	 El archivo no es de tipo KGML La información contenida dentro del archivo no se puede representar por medio de un grafo conexo 	
Prioridad	Alta	
Suposiciones	Los archivos de Kegg mantienen la misma estructura y serán procesados por igual	

B.2.2 - Caso de uso 2:

ID y nombre	CU2 - Almacenar rutas metabólicas en base de datos local		
Creado por	Anthony Leandro	Fecha de creación	04/03/2019
Actor principal	El usuario		
Descripción	El usuario puede almacenar en la base de datos local del sitio los archivos que cargue		
Desencadenador	El usuario selecciona la opción de guardar el archivo cargado recientemente		
Precondiciones	El archivo debe haberse cargado correctamente antes de seleccionar la opción de guardar		
Postcondiciones	Se le muestra un mensaje al usuario de que el archivo ha sido almacenado con éxito		
Flujo normal	 El usuario selecciona la opción de guardar el archivo cargado recientemente y en uso por el sitio El sistema solicita el nombre del archivo al usuario 		

	3. El usuario indica el nombre del archivo y selecciona la opción de confirmar4. El archivo es almacenado en la base de datos del sitio	
Flujo alternativo	 El usuario no selecciona la opción de guardar el archivo cargado recientemente El usuario cancela el proceso de almacenamiento del archivo cuando el sitio le solicita el nombre del archivo por guardar 	
Excepciones	 Al archivo por guardar se le asigna un nombre que contiene caracteres inválidos 	
Prioridad	Media	
Suposiciones	El archivo es perfectamente almacenable en una base de datos	

B.2.3 - Caso de uso 3:

ID y nombre	CU3 - Parametrizar valores para la comparación del alineamiento			
Creado por	Anthony Leandro	Fecha de creación	04/03/2019	
Actor principal	El usuario			
Descripción		El usuario selecciona los valores que determinan un resultado en la ejecución de los algoritmos de comparación		
Desencadenador	El usuario selecciona correctamente dos estructuras de grafo ya sea desde un archivo externo, interno o un grafo guardado anteriormente			
Precondiciones	Debe haber seleccionado dos rutas metabólicas por ser comparadas			
Postcondiciones				
Flujo normal	1. El usuario selecciona los valores de los parámetros: match (igual), mismatch (diferente), y gap (vacío); por defecto estos valores son 1, -1 y -2 respectivamente o por medio de una matriz de valores de sustitución que contiene todos los metabolitos que constituyen ambas rutas metabólicas			
Flujo alternativo	1. El usuario mantiene los valores por defecto			
Excepciones	 El usuario ingresa valores inválidos o fuera del rango del tipo de dato utilizado para albergar tales valores 			
Prioridad	Alta			

Suposiciones	No hay
•	

B.2.4 - Caso de uso 4:

ID y nombre	CU4 - Ejecutar algoritmos originales para comparación		
Creado por	Anthony Leandro	Fecha de creación	05/03/2019
Actor principal	El usuario		
Descripción	El usuario puede elegir comparar las rutas metabólicas seleccionadas por medio de los algoritmos de comparación descritos en el artículo Alternative low cost algorithms for metabolic pathways comparison		
Desencadenador	El usuario indica que desea hacer la comparación de rutas metabólicas con alguno de estos algoritmos		
Precondiciones	Debe tener seleccionado dos rutas metabólicas para su comparación		
Postcondiciones	Generar un resultado en pantalla		
Flujo normal	 El usuario indica alguno de los dos algoritmos: a. Transformation of 2D graph to a 1D or linear structure for later alignment and evaluation b. Differentiation by pairs El usuario selecciona la opción de procesar los datos 		
Flujo alternativo	 El usuario selecciona otro algoritmo de comparación (versiones extendidas o tomando en cuenta grafos con pesos) 		
Excepciones	1. Los parámetros de comparación son inválidos		
Prioridad	Alta		
Suposiciones	Los grafos generados mediante archivos KGML pueden ser procesados por estos algoritmos		

B.2.5 - Caso de uso 5:

ID y nombre	CU5 - Ejecutar versión extendida de algoritmos de comparación		
Creado por	Anthony Leandro Fecha de creación 05/03/2019		
Actor principal	El usuario		

Descripción	El usuario puede elegir comparar las rutas metabólicas seleccionadas por medio de las versiones extendidas algoritmo de comparación <i>2D to 1D graph transformation</i> , propuestas en el artículo "Simple Graph Comparison Inspired on Metabolic Pathway Correlation"		
Desencadenador	El usuario indica que desea hacer la comparación de rutas metabólicas con alguno de estos algoritmos		
Precondiciones	Debe tener seleccionado dos rutas metabólicas para su comparación		
Postcondiciones	Generar un resultado en pantalla		
Flujo normal	 El usuario indica alguno de las cinco algoritmos de la versión extendida, estos trabajan de la misma manera pero se debe especificar los nodos iniciales y finales dependiendo del mismo por medio de los siguientes parámetros: Empezando de cualquier nodo y terminando en cualquier nodo Empezando en un nodo dado y terminando en cualquier nodo Empezando en un nodo dado y terminando en un nodo dado Empezando en un nodo dado y terminando en un nodo dado Empezando de cualquier nodo y terminando en un nodo dado Empezando de cualquier nodo y terminando en un nodo dado El usuario selecciona la opción de procesar los datos 		
Flujo alternativo	 El usuario selecciona otro algoritmo de comparación (versiones originales o tomando en cuenta grafos con pesos) 		
Excepciones	1. Los parámetros de comparación son inválidos		
Prioridad	Alta		
Suposiciones	Los algoritmos funcionan perfectamente con los parámetros especificados aquí		

B.2.6 - Caso de uso 6:

	CU6 - Ejecutar la versión original del algoritmo 2D to 1D graph transformation con pesos en el grafo		
Creado por	Anthony Leandro	Fecha de creación	08/03/2019

Actor principal	El usuario	
Descripción	El usuario puede elegir comparar las rutas metabólicas seleccionadas por medio de la versión del algoritmo 2D to 1D graph transformation utilizando un grafo con pesos	
Desencadenador	El usuario indica que desea hacer la comparación de rutas metabólicas con esta versión del algoritmo	
Precondiciones	Debe tener seleccionado dos rutas metabólicas para su comparación, y estas rutas deben ser representadas por medio de grafos con pesos	
Postcondiciones	Generar un resultado en pantalla	
Flujo normal	 El usuario indica que utilizará el algoritmo la versión del algoritmo 2D to 1D graph transformation utilizando pesos El usuario selecciona la opción de procesar los datos 	
Flujo alternativo	 El usuario selecciona otro algoritmo de comparación (versiones extendidas u originales) 	
Excepciones	1. Los parámetros de comparación son inválidos	
Prioridad	Alta	
Suposiciones	El grafo por utilizar puede ser procesado por este algoritmo, y cuenta con pesos en las aristas de las relaciones	

B.2.7 - Caso de uso 7:

ID y nombre	CU7 - Traducir códigos de metabolitos a nombres		
Creado por	Anthony Leandro	Fecha de creación	05/03/2019
Actor principal	El usuario		
Descripción	El usuario puede ver los códigos de metabolitos como nombres de uso común		
Desencadenador	El usuario presiona la opción en la visualización de los grafos para observarlos con nombres de uso común o como códigos		
Precondiciones	El usuario debe tener al menos un grafo mostrado en pantalla		
Postcondiciones	La opción de ver los grafos como códigos de metabolitos debe estar desactivada		

Flujo normal	 El usuario selecciona la opción para visualizar los metabolitos en un grafo mostrado en pantalla como nombres de uso común en caso de estar mostrados como código o viceversa El grafo mostrado en pantalla se vuelve a mostrar pero mostrando lo que el usuario desea (nombres de uso común o códigos) 		
Flujo alternativo	 El metabolito en código no tiene un nombre común asociado en la base de datos El grafo se vuelve a mostrar pero mostrando códigos en aquellos metabolitos que no pudieron ser traducidos debido a la falta de información en la base de datos 		
Excepciones	No hay		
Prioridad	Baja		
Suposiciones	El sistema se alimentará de información sobre los nombres de uso común de metabolitos por medio de un usuario administrador		

B.2.8 - Caso de uso 8:

ID y nombre	CU8 - Tabular los resultados de los algoritmos en pantalla		
Creado por	Anthony Leandro Fecha de creación 05/03/2019		
Actor principal	El usuario		
Descripción	El usuario observa los resultados de la comparación de rutas metabólicas		
Desencadenador	El usuario ejecutó un algoritmo de comparación de rutas metabólicas		
Precondiciones	 El algoritmo utilizado se ejecutó correctamente Los valores de los parámetros de comparación fueron válidos 		
Postcondiciones	 El sistema es capaz de ejecutar de nuevo el algoritmo seleccionado, o bien, otro algoritmo, además de poder elegir nuevos parámetros o rutas metabólicas 		
Flujo normal	 El usuario ejecuta un algoritmo de comparación de rutas metabólicas El algoritmo termina de ejecutarse y muestra los resultados en pantalla 		

Flujo alternativo	No hay
Excepciones	 El algoritmo no pudo ejecutarse correctamente y no muestra los resultados en pantalla
Prioridad	Alta
Suposiciones	Los algoritmos proveen esta información

B.2.9 - Caso de uso 9:

ID y nombre	CU9 - Definir grafos manualmente			
Creado por	Anthony Leandro	Fecha de creación	05/03/2019	
Actor principal	El usuario			
Descripción		El usuario puede elegir crear un grafo manualmente en vez de generarlo mediante la carga de un archivo externo		
Desencadenador	El usuario oprime un botór	El usuario oprime un botón para definir un grafo manualmente		
Precondiciones	El usuario esté registrado en la plataforma			
Postcondiciones	El usuario es notificado de que el grafo ha sido creado exitosamente			
Flujo normal	 El usuario selecciona la opción de crear un grafo desde cero El sistema muestra una ventana en donde el usuario puede definir los nodos del grafo, sus relaciones y si es un grafo con pesos o no, si es con pesos entonces puede definir manualmente cuáles son estos pesos en las relaciones El usuario selecciona la opción de listo cuando desea dejar de editar el grafo construido 			
Flujo alternativo	1. El usuario cancela la	1. El usuario cancela la creación de un grafo		
Excepciones	1. El usuario define un grafo no conexo			
Prioridad	Media			
Suposiciones	El usuario conoce las restri esta sistema	cciones en la creaciór	ı de un grafo para uso de	

B.2.10 - Caso de uso 10:

ID y nombre	CU10 - Aplicar algoritmos existentes a grafos definidos manualmente			
Creado por	Anthony Leandro	Fecha de creación	06/03/2019	
Actor principal	El usuario			
Descripción	El usuario puede aplicar l que define manualmente	El usuario puede aplicar los algoritmos existentes en el sitio a los grafos que define manualmente		
Desencadenador	El usuario indica que desea hacer la comparación de rutas metabólicas con alguno de estos algoritmos			
Precondiciones	Debe tener seleccionado dos rutas metabólicas para su comparación y al menos una de estas debe ser representada mediante un grafo definido por el usuario			
Postcondiciones	Generar un resultado en pantalla			
Flujo normal	 El usuario indica uno de los algoritmos disponibles en la plataforma: con pesos, sin pesos, originales, o extendidos El usuario selecciona la opción de procesar los datos 			
Flujo alternativo	 El usuario sustituye el grafo definido manualmente por un archivo externo al sitio o interno del sitio 			
Excepciones	1. Los parámetros de comparación son inválidos			
Prioridad	Alta			
Suposiciones	El usuario seleccionó dos rutas metabólicas correctamente para su comparación bajo las condiciones propuestas			

B.2.11 - Caso de uso 11:

ID y nombre	CU11 - Editar el orden en las relaciones de un grafo			
Creado por	Anthony Leandro Fecha de creación 06/03/2019			
Actor principal	El usuario			
Descripción	El usuario puede cambiar libremente las relaciones que poseen los nodos en un grafo o bien, definir nuevas relaciones			
Desencadenador	El usuario oprime el botón de edición de grafo en la ventana principal junto a la ruta metabólica respectiva			

Precondiciones	El usuario debe haber cargado una ruta metabólica		
Postcondiciones	El grafo debe mostrarse de manera visual bajo los nuevos cambios propuestos por el usuario		
Flujo normal	 El usuario oprime la opcion de edicion de grafo junto a la ruta metabólica que desea editar El usuario cambia las relaciones del grafo como desee, y los pesos que este tuviera en caso de necesitarlo; asimismo puede definir nuevas relaciones 		
Flujo alternativo	 El usuario cancela la edición de las relaciones del grafo y lo deja tal y como estaba antes de querer editarlo 		
Excepciones	 El usuario edita las relaciones del grafo de tal manera que en el mismo quedan nodos sin conectar, situación que no es permitida 		
Prioridad	Media		
Suposiciones	El grafo podrá ser procesado por un algoritmo luego de su correcta edición		

B.2.12 - Caso de uso 12:

ID y nombre	CU12 - Cargar grafos creados manualmente en la base de datos			
Creado por	Anthony Leandro Fecha de creación 06/03/2019			
Actor principal	El usuario			
Descripción	El usuario puede almacenar los grafos que define manualmente en la base de datos del sitio			
Desencadenador	El usuario selecciona el botón de guardar el grafo definido manualmente			
Precondiciones	El usuario debe haber definido un nuevo grafo conexo			
Postcondiciones	El usuario es notificado de que el grafo fue guardado exitosamente			
Flujo normal	 El usuario define el grafo conexo El usuario oprime la opción de guardar el grafo El sistema solicita el nombre con el que se guardará el grafo El usuario le asigna un nombre y presiona la opción de guardar 			
Flujo alternativo	 El usuario no oprime la opción de guardar el grafo y continúa usando el mismo sin ser almacenado por el sitio 			

Excepciones	 El usuario introduce caracteres inválidos en el nombre del grafo por almacenar 	
Prioridad	Media	
Suposiciones	El grafo definido por el usuario es capaz de ser almacenado en la base de datos del sitio	

B.2.13 - Caso de uso 13:

ID y nombre	CU13 - Generar reporte en archivo			
Creado por	Anthony Leandro	Fecha de creación	06/03/2019	
Actor principal	El usuario	El usuario		
Descripción	El usuario puede obtener un reporte de la ejecución de un algoritmo de comparación de rutas metabólicas			
Desencadenador	El usuario oprime el botór	n de generar reporte		
Precondiciones	Un algoritmo de comparación de rutas metabólicas debe haberse ejecutado correctamente			
Postcondiciones	El reporte debe mostrarse en una nueva ventana el usuario lo podrá ver y descargar			
Flujo normal	 El usuario oprime la opción de generar reporte El sistema muestra el reporte en una nueva ventana 			
Flujo alternativo	 El usuario no toma en cuenta la opción de generar reporte y omite la acción 			
Excepciones	No hay			
Prioridad	Alta			
Suposiciones	El usuario desea obtener exactamente la misma información mostrada por los resultados de los algoritmos en el reporte			

B.2.14 - Caso de uso 14:

ID y nombre	CU14 - Visualizar el grafo generado luego del proceso de extracción	

Creado por	Anthony Leandro Fe	echa de creación	06/03/2019
Actor principal	El usuario		
Descripción	El usuario puede visualizar en pantalla un grafo construido a partir de una ruta metabólica seleccionada ya sea por un archivo externo, interno o por un grafo guardado anteriormente		
Desencadenador	El usuario selecciona una ruta	a metabólica	
Precondiciones	La ruta metabólica seleccionada representa un grafo conexo		
Postcondiciones	No hay		
Flujo normal	 El usuario selecciona una ruta metabólica El sistema extrae la información del grafo que genera el mismo El sistema produce una representación gráfica en pantalla 		
Flujo alternativo	 El usuario no quiere opción de no visualiza 		
Excepciones	 El grafo no es inconsistencia de los o 		ráficamente debido a
Prioridad	Alta		
Suposiciones	El proceso de extracción se completa exitosamente y produce un grafo representable en pantalla		

B.2.15 - Caso de uso 15:

ID y nombre	CU15 - Mantenimiento de archivos KGML		
Creado por	Anthony Leandro	Fecha de creación	06/03/2019
Actor principal	El administrador		
Descripción	El administrador puede incluir archivos por su cuenta de tipo KGML, visualizar, editar y eliminarlos también		
Desencadenador	El usuario navega hasta la sección de administración de archivos KGML		
Precondiciones	El usuario administrador debe haber iniciado sesión		
Postcondiciones	No hay		

Flujo normal	 El usuario administrador ingresa a la sección de administración de archivos de tipo KGML El usuario selecciona entre las opciones: Agregar, Editar, Eliminar archivo de tipo KGML Si selecciona la opción de agregar:
Flujo alternativo	 El usuario administrador no ingresa a la sección de administración de archivos de tipo KGML El usuario administrador selecciona las opciones de agregar, editar o eliminar pero cancela la acción antes de completarlas
Excepciones	 El usuario administrador sube archivos ajenos al tipo de archivos KGML de la base de datos pública de Kegg
Prioridad	Media
Suposiciones	El usuario administrador reconoce y trabaja con archivos de tipo KGML

B.2.16 - Caso de uso 16:

ID y nombre	CU16 - Mantenimiento de diccionario de metabolitos		
Creado por	Anthony Leandro	Fecha de creación	06/03/2019
Actor principal	El administrador		
Descripción	El administrador puede visualizar, editar, incluir y eliminar entradas en el diccionario de metabolitos		

Desencadenador	El usuario ingresa a la opción de administración de diccionario de metabolitos	
Precondiciones	El usuario administrador debe haber iniciado sesión	
Postcondiciones	No hay	
Flujo normal	 El usuario administrador ingresa a la sección de administración de diccionario de metabolitos El usuario selecciona entre las opciones: incluir, editar, eliminar entrada en el diccionario Si selecciona la opción de incluir:	
Flujo alternativo	 El usuario administrador no ingresa a la sección de administración de diccionario de metabolitos El usuario administrador selecciona las opciones de incluir, editar o eliminar pero cancela la acción antes de completarlas 	
Excepciones	 El usuario incluye caracteres inválidos dentro del texto de las entradas del diccionario 	
Prioridad	Alta	
Suposiciones	El usuario administrador reconoce y trabaja con entradas que permite traducir un metabolito de su representación de codigo a nombre común	

Apendice C: Lista de problemas

- La búsqueda de grafos y rutas metabólicas no ha sido definida como un caso de uso, es probable que quedará fuera del scope del proyecto. Se pretende utilizar algoritmos de comparación de texto para retornar los resultados con porcentajes de diferencia y mostrar al usuario los archivos más apropiados para la búsqueda realizada.
- Aún no se ha diseñado la estructura de la base de datos que almacenará la información del sistema; tampoco ha sido definido si será una base de datos relacional o no relacional, sin embargo la inclinación actual es hacia MongoDB.
- Es necesario consultar a la Escuela de Computación los pasos necesarios para el alojamiento del software en sus servidores, debe pedirse la información al encargado correspondiente.
- Se está analizando realizar mejoras a la interfaz de usuario presentada en el prototipo, para así mejorar y facilitar la interacción entre los usuarios y el sistema.

Anexos

1- PLANTILLA PATRÓN REQS DATOS (Withall)

Template(s)

Summary	Definition
Store «Data description» «Storage form» for «Duration»	«Data description» shall be stored «Manner of storage» for «Retention duration» from «Duration start trigger». [When data is eligible for removal, «Action at deadline».]
«Storage form» for «Duracion»	«Storage purpose».

⇒Open table as spreadsheet

Example(s)

Summary	Definition
Store orders	Customer orders shall be retained online for 90 days from the date the order was shipped.
for 90 days online	Orders shall not be visible to customers after this date, but they may continue to be stored online. The purpose of this is so the details of an order are easily available in the event of a problem with delivery.
Store transactions for 12 months	All transactions shall be retained for at least 12 months.

2- PLANTILLA PARA DESCRIPCIÓN CU (Formato Wiegers)

ID and Name:	UC-4 Request a Chemical		
Created By:	Lori Date Created: 8/22/13		
Primary Actor:	Requester Secondary Actors: Buyer, Chemical Stockroom, Training Database		
Description:	The Requester specifies the desired chemical to request by entering its name or chemical ID number or by importing its structure from a chemical drawing tool. The system either offers the Requester a container of the chemical from the chemical stockroom or lets the Requester order one from a vendor.		
Trigger:	Requester indicates that he wants to request a chemical.		
Preconditions:	PRE-1. User's identity has been authenticated. PRE-2. User is authorized to request chemicals. PRE-3. Chemical inventory database is online.		
Postconditions:	POST-1. Request is stored in the CTS. POST-2. Request was sent to the Chemical Stockroom or to a Buyer.		
Normal Flow:	 4.0 Request a Chemical from the Chemical Stockroom 1. Requester specifies the desired chemical. 2. System lists containers of the desired chemical that are in the chemical stockroom, if any. 3. System gives Requester the option to View Container History for any container. 4. Requester selects a specific container or asks to place a vendor order (see 4.1). 5. Requester enters other information to complete the request. 6. System stores the request and notifies the Chemical Stockroom. 		
Alternative Flows:	 4.1 Request a Chemical from a Vendor Requester searches vendor catalogs for the chemical (see 4.1.E1). System displays a list of vendors for the chemical with available container sizes, grades, and prices. Requester selects a vendor, container size, grade, and number of containers. Requester enters other information to complete the request. System stores the request and notifies the Buyer. 		
Exceptions:	4.1.E1 Chemical Is Not Commercially Available 1. System displays message: No vendors for that chemical. 2. System asks Requester if he wants to request another chemical (3a) or to exit (4a). 3a. Requester asks to request another chemical. 3b. System starts normal flow over. 4a. Requester asks to exit. 4b. System terminates use case.		
Priority:	High		
Frequency of Use:	Approximately 5 times per week by each chemist, 200 times per week by chemical stockroom staff		
Business Rules:	BR-28, BR-31		
Other Information:	The system must be able to import a chemical structure in the standard encoded form from any of the supported chemical drawing packages.		
Assumptions:	Imported chemical structures are assumed to be valid.		

FIGURE 8-3 Partial specification of the Chemical Tracking System's "Request a Chemical" use case.