

# ETIS TFC – GRAFICOS POR COMPUTADOR

**TITULO**

**DISEÑO DE UNA HERRAMIENTA PARA LA VISUALIZACION DE MOLECULAS**

## MEMORIA

**MATEO SORROCHE MONTELLANO**

## INDICE

### ESPECIFICACIÓN

#### FUENTES DE INFORMACIÓN

- Entrevistas y encuestas
- Documentación
- Usuarios y afines
- Sistemas similares

#### REQUISITOS

- Descripción general del proyecto
- Glosario de términos
- Objetivos del usuario
- Clasificación de usuarios

#### REQUISITOS FUNCIONALES

- Carga y generación del modelo de molécula
- Navegación sobre el modelo de molécula
- Selección y calculo de resultados
- Rotación y grabación de la secuencia
- Ayuda aplicación
- Salida de la aplicación

#### REQUISITOS NO FUNCIONALES

- Interficie
- Comportamiento
- Estilo
- Facilidad de uso

#### REQUISITOS DE PRODUCCIÓN

- Rendimiento
- Precisión
- Disponibilidad
- Volumen de Información
- Entorno físico y tecnológico
- Numero de usuarios
- Distribución del software
- Consumibles
- Impacto

#### REQUISITOS DE FORMACIÓN

- Seguridad
- Mantenimiento
- Política
- Legalidad
- Reutilización

**REQUISITOS DE PRUEBAS**

- Necesidades y medios
- Herramientas
- Entorno hardware / software
- Relaciones lógicas y físicas con otros sistemas
- Procedimientos de emergencia
- Procedimientos de recuperación de datos

**CONTEXTO DE LA APLICACIÓN**

- Modelo del dominio
- Modelo del negocio

**GUIONES**

- Guiones del usuario

**IDENTIFICACIÓN DE LOS ACTORES**

- Actor: Usuario
- Actor: Sistema (entorno informático)

**IDENTIFICACIÓN DE LOS CASOS DE USO****IDENTIFICACIÓN DE LAS RELACIONES ENTRE CASOS DE USO**

- Relación caso de uso: Carga y generación del modelo de molécula
- Relación caso de uso: Navegación sobre el modelo de molécula
- Relación caso de uso: Selección y calculo de resultados
- Relación caso de uso: Rotación y grabación de la secuencia
- Relación caso de uso: Ayuda aplicación
- Relación caso de uso: Salida de la aplicación

**DOCUMENTACIÓN DE LOS CASOS DE USO**

- Caso de uso: Carga y generación del modelo de molécula
- Caso de uso: Navegación sobre el modelo de molécula
- Caso de uso: Selección y calculo de resultados
- Caso de uso: Rotación y grabación de la secuencia
- Caso de uso: Ayuda aplicación
- Caso de uso: Salida de la aplicación

**ANALISIS****REVISION DE LOS CASOS DE USO****PAQUETES DE ANALISIS Y SERVICIO****IDENTIFICACIÓN DE LAS CLASES DE ENTIDAD**

- Caso de uso: Carga y generación del modelo de molécula
- Caso de uso: Navegación sobre el modelo de molécula
- Caso de uso: Selección y calculo de resultados
- Caso de uso: Rotación y grabación de la secuencia
- Caso de uso: Ayuda aplicación
- Caso de uso: Salida de la aplicación

**ESPECIFICACIÓN DE LOS ATRIBUTOS DE LAS CLASES DE ENTIDAD**

- Clase ATOMO
- Clase ENLACE
- Clase MOLECULA
- Clase ELEMENTO

**RELACIONES**

- Herencia
- Asociaciones
- Agregaciones

**DISEÑO DE LA INTERFICIE DE USUARIO****VALORACION ECONOMICA****ANEXO I.1 - DESCRIPCION DEL TFC****ANEXO I.2 – DOCUMENTACIÓN: ENLACES Y REFERENCIAS****ANEXO I.3 – PROGRAMAS: ENLACES Y REFERENCIAS****DOCUMENTO 1 – PLAN DE TRABAJO****DOCUMENTO 2 – MANUAL DE INSTALACION****DOCUMENTO 3 – MANUAL DE USUARIO****DOCUMENTO 4 – MANUAL DE AYUDA RAPIDA**

## ESPECIFICACION

### FUENTES DE INFORMACION

En el proceso de obtención de información de los requisitos que ha de cumplir la aplicación se ha recorrido entre otras, a las siguientes fuentes de información:

- **Entrevistas y encuestas**

No se han realizado entrevistas ni encuestas directas a los futuros usuarios de esta aplicación, exceptuando la reunión mantenida con el consultor de la asignatura los días del encuentro presencial.

En dicha reunión se valoro algunos aspectos destacados de la aplicación, como el hecho de que su utilidad seria apreciada por una parte de la comunidad científica universitaria (lo que de alguna manera nos centra la tipología del usuario final, con formación científico-técnica).

Otros de los aspectos que se comentaron es que debería realizarse en entorno Linux o Windows, en JAVA y OPENGL, y por supuesto con una interficie grafica de usuario.

En esta primera reunión se despejaron muchas de las incógnitas con que se presentaba el proyecto, formatos de entrega, planificación, objetivos y áreas de interés que sirvieron como base para la realización del primer documento del proyecto, denominado Plan de Trabajo ( Documento 1).

- **Documentación**

Se ha utilizado como punto de partida numerosa documentación proveniente de diversas fuentes.

Como documento inicial y principal de trabajo se ha utilizado el enunciado de descripción del TFC “Diseny d’una eina per a la visualització de molècules” proporcionado por los consultores de TFC de la UOC, reproducido en el Anexo I.1 de este documento.

En dicho documento se establece la descripción del trabajo y sus objetivos, así como los conocimientos necesarios y requerimientos de hardware y software necesarios para llevarlo a termino.

Otros documentos utilizados para una primera aproximación, fueron facilitados por el consultor de la asignatura, descripción de algunas moléculas y algunas tablas de representación de elementos con símbolos y radios.

Toda esta documentación ha servido como punto de partida para iniciar una investigación y búsqueda sobre formatos de representación molecular, centrándonos en especial sobre el formato Xmol XYZ formato de archivo de modelo cartesiano molecular.

La búsqueda de la documentación se ha realizado y obtenido básicamente en su totalidad en Internet, a través de la WWW y usando el buscador de referencia [www.google.es](http://www.google.es)

En el Anexo I.2 se recogen algunas de las direcciones de Internet y documentos encontrados que has servido como base para la elaboración de este documento, así como una breve referencia de su contenido.

- **Usuarios y afines**

Hasta el momento no se han realizado reuniones ni obtenido información de las personas del entorno, que sin ser usuarios directos finales de la aplicación si estén familiarizados con las misma y puedan aportar una visión libre de prejuicios y deformaciones profesionales a las que se ven sometidas los usuarios directamente implicados.

Dentro de este mismo grupo se incluirán también el desarrollador de la aplicación, los integrantes del equipo de pruebas y aquellos usuarios finales que así manifiesten interés.

- **Sistemas similares**

Se ha realizado una búsqueda sistemas similares que hay en el mercado o se publicitan en Internet, referenciando algunos de ellos.

La mayoría de los sistemas encontrados han sido desarrollados o pertenecen a la comunidad científica, en el ámbito universitario.

Se encuentran versiones de estos programas para casi todas las plataformas (Windows, X-Windows, Mac, Linux, etc), aunque la mayoría de los mas prestigiosos fueron inicialmente desarrollados para plataformas Unix en sus orígenes.

Las aplicaciones de fuerte carácter comercial (que todas no obstante tienen programas de evaluación o freeware) hacen gala de un gran componente gráfico, con un avanzado interface hombre-maquina donde sumerge al usuario en un completo sistema de navegación en 3D. El nivel de información y datos presentados es configurable en todo momento y el usuario solo recibe la información que requiere.

Las capacidades de todos esos programas van muchísimo mas allá de las pretensiones de este proyecto, no obstante son una clara referencia de hacia donde se han de dirigir los esfuerzos en el desarrollo de la aplicación.

En el Anexo I.3 se recogen enlaces a algunos de los programas referenciados.

## REQUISITOS

- **Descripción general del proyecto**

En este apartado se describen las funcionalidades que se requieren para el diseño, desarrollo y construcción de una nueva aplicación que permita la visualización e inspección de moléculas, de gran utilidad en áreas como la química, farmacia, docencia, etc.

La herramienta proyectada admitirá definiciones de moléculas a través de un fichero de entrada (una variación simplificada del formato Xmol XYZ), construirá el modelo de la misma y permitirá la navegación alrededor de ella, así como la selección e identificación de sus elementos y el calculo de distancias y ángulos de torsión entre los mismos.

La utilidad permitirá la definición de un eje sobre el cual generar una rotación del modelo y grabar una secuencia de salida en un formato a definir (posiblemente BMP)

- **Glosario de términos**

Termino	Descripción
Administrador	Usuario
Autocentrado molécula	Característica de central la molécula en el eje de coordenadas
Barra de Menú	Barra en la parte superior de la ventana de aplicación con las opciones mas usuales disponibles en la aplicación
Cilindro	Elemento que representa a un enlace entre átomos

Doble selecció	Proceso para indicar dos elementos del mismo tipo en el modelo sobre los cuales se proporcionara informaci3n (átomos o enlaces)
Eje Rotaci3n	Eje alrededor del cual rotamos la molécula
Esfera	Elemento que representa a un átomo
Herramienta	Aplicaci3n, programa, utilidad
Modelo	Estructura de datos para la representaci3n de una realidad
Molécula	Estructura compuesta por átomos y enlaces entre ellos
Monopuesto	La aplicaci3n se ejecuta independientemente en una única estaci3n de trabajo
Monousuario	La aplicaci3n solo permite el trabajo de un único usuario simultáneamente.
Panel de Informaci3n General	Panel donde se reúne la informaci3n de la molécula, la de los átomos o enlaces seleccionados y la del sistema de reproducci3n y grabaci3n de rotaciones.
Panel de navegaci3n	Panel donde se desarrolla el proceso de navegaci3n alrededor de la molécula.
Radio covalente	Radio empleado para el establecimiento de enlaces entre átomos
Radio de Van Der Walls	Radio empleado para la representaci3n de los átomos
Rejilla	Entramado de líneas contenidas en un plano, ortogonales y equidistantes entre si que reverencian dicho plano como origen.
Selecció	Proceso para indicar un elemento en el modelo sobre el cual se proporcionara informaci3n (átomo o enlace)
Usuario	Operador de la aplicaci3n.
Usuario final	Usuario
Vector de rotaci3n	Coordenadas X, Y, Z del vector sobre el cual rotara la molecula.
Xmol XYZ	Formato estándar de representaci3n de moléculas.

- **Objetivos del usuario**

El usuario desea con esta herramienta la exploraci3n, estudio y análisis de moléculas.

A través de las funcionalidades aportadas por la aplicaci3n, navegara en un entorno 3D alrededor de la molécula, apreciara su estructura, aprenderá a identificar sus átomos y enlaces, calcular distancias y ángulos entre sus elementos, comparar entre distintas moléculas propiedades geométricas, etc.

Opcionalmente podrá visualizar la rotaci3n de la molécula sobre un eje arbitrario y grabar la secuencia en un formato de imagen estándar (BMP).



- **Clasificación de usuarios**

Solo se contempla un tipo de clasificación de usuario o usuario final y nos referimos a el con la denominación genérica de “usuario”.

Efectivamente, no se contempla en la aplicación la realización de tareas o procedimientos que requieran una especialización determinada, ni un nivel de acceso con privilegios diferenciados.

El usuario tendrá control y acceso completo a todas las funcionalidades de la aplicación, así como a su configuración y estado.

## REQUISITOS FUNCIONALES

- **Carga y generación del modelo de molécula**

Una vez iniciada la aplicación y como paso previo a cualquier otra acción o función, se deberá cargar en el sistema los datos de una molécula desde un fichero de entrada y generar un modelo de la misma. Para hacerlo, el usuario deberá seleccionar desde un panel nodal de selección de ficheros (que implementa las características de navegación por directorios), un fichero de descripción de la molécula. El formato de dicho fichero corresponde con una variación simplificada del formato de archivo del modelo cartesiano molecular Xmol XYZ, y típicamente posee la extensión XYZ en el tipo de archivo.

Una vez cargado el fichero en el sistema, este determinara la validez del mismo, comprobando la coherencia de su estructura interna ya que el formato Xmol no incorpora mecanismos de auto validación.

La comprobación se realiza en los puntos:

- verificación de que el numero de átomos de la molécula definidos en la cabecera sea un entero positivo.
- verificación de que el numero de átomos presentes en la molécula correspondan con el definido en la cabecera.

Todas las entradas del fichero que no se ajusten al formato serán descartadas.

Las entradas que describan átomos que no estén definidos en la base de datos interna le serán asignados el elemento Nul.

En caso de discrepancias entre el numero de átomos definidos en la cabecera y el numero real presente en el archivo, este ultimo tendrá prioridad si es menor.

En caso que no supere la validación, el sistema presentara un mensaje de notificación e invitara a realizar una nueva selección.

En el caso de que se decline la realización de una nueva selección se abandonara la aplicación y se retornara al SO.

Una vez superada la validación de un fichero de datos, el sistema creara una estructura de datos para el modelo de representación molecular. Dicho modelo consiste básicamente en asignar una esfera a los átomos y un cilindro a los enlaces. Las esferas son representadas con el color que tradicionalmente se le asigna a los átomos de los elementos, y en la posición definida en el fichero de entrada. El radio de las esferas corresponde con el radio de Van Der Walls del átomo representado.

Los enlaces solo se manifiestan si la distancia entre los átomos es menor que la suma de los radios covalentes de los átomos implicados (aunque afectada por un factor).

Una vez generado el modelo de la molécula, este es representado en 3D en el panel principal de la aplicación, finalizando así el proceso de carga y generación del modelo de molécula. El sistema queda estable a la espera de una nueva actuación por parte del usuario, que podrá, en cualquier momento a partir de ahora realizar una nueva selección y carga de un nuevo fichero de datos, entre otras funciones.

- **Navegación sobre el modelo de molécula**

Se podrá navegar sobre el modelo. Para hacerlo (una vez cargado un modelo de molécula) bastara pulsar sobre el panel con el ratón y arrastrar este sobre la superficie del mismo. La aplicación traducirá el movimiento resultante de esta acción y realizara las rotaciones correspondientes sobre la molécula:

- Si se arrastra en sentido horizontal, se rota el modelo respecto al eje Y.
- Si se arrastra en sentido vertical se modifica la elevación del plano XZ

A través de la pulsación de dos teclas o dos botones, la aplicación realiza un aumento o disminución de la escala de representación de la molécula (a través de acercar o alejar la vista de representación).

- **Selección y calculo de resultados**

Se podrá seleccionar elementos del modelo y obtener información de los mismos. Para hacerlo (una vez cargado un modelo de molécula) se situara con el ratón sobre el elemento (átomo o enlace) del modelo y se presionara el botón derecho. Una vez establecida la selección (que asignaremos a SELECCIÓN 1), la aplicación presentara la información que lo identifica (numero, tipo, posicion, etc o si se trata de un enlace y entre que átomos se establece). Cada nueva selección deshabilita la anterior y muestra la información de la nueva selección.

Es posible realizar una doble selección sobre el mismo tipo de elemento (que asignaremos a SELECCIÓN 2). Para ello después de realizar la primera, se realiza una nueva selección sobre un nuevo elemento del mismo tipo presionando simultáneamente la tecla de control al boton derecho del raton. El sistema presentara de esta doble selección datos adicionales tales como la distancia entre los elementos (si se trata de la selección de dos átomos) o el ángulo que forman entre ellos (si se trata de dos enlaces).

Una nueva doble selección deshabilitara el ultimo elemento seleccionado, substituyéndolo por el nuevo.

- **Rotación y grabación de la secuencia**

Es posible realizar la rotación del modelo sobre un eje arbitrario. Para ello (una vez cargado un modelo de molécula) el usuario deberá definir un eje de rotación mediante la introducción de un vector y un punto en coordenadas cartesianas. Una vez definido el eje es posible iniciar una rotación de la molécula sobre el mismo. La secuencia de la rotación podrá grabarse en un formato estándar previa definición del nombre de fichero de salida.

- **Ayuda aplicación**

En cualquier momento durante la ejecución de la aplicación (fuera de los paneles nodales) es posible la solicitud de Ayuda Aplicación, accediendo a la opción de Ayuda Aplicación situada en la Barra de Menús.

- **Salida de la aplicació**

En cualquier momento durante la ejecución de la aplicación (fuera de los paneles nodales) es posible el abandono de la misma presionando el icono de cerrar aplicación situado en la esquina superior derecha del panel principal. Este acto, previa confirmación para evitar falsas salidas, provoca la salida ordenada de la aplicación, cerrando todos los ficheros en uso, liberando los recursos utilizados y devolviendo el control al SO.

## REQUISITOS NO FUNCIONALES

- **Interficie**

La interficie grafica de usuario será clara, intuitiva, rápida y fácil de usar. Además, ofrecerá al usuario en todo momento un sistema de ayuda que le resuelva las dudas que se le puedan plantear durante el funcionamiento de la misma, además de información complementaria.

La interficie también habrá de notificar cuando sea necesario al usuario, mediante un grafico o texto animado, el estado de una operación en curso que requiera un largo tiempo de procesamiento.

- **Comportamiento**

La aplicación tendrá que mostrar un comportamiento estable, de forma que si existen problemas durante la ejecución se informara adecuadamente al usuario, si es pertinente.

Los mensajes de error proporcionaran toda la información necesaria para que el usuario pueda redirigirlos al autor de la aplicación y proceder a su resolución.

- **Estilo**

La parte visual de la aplicación no ha de cumplir con ningún libro de estilos específico, aunque tendrá el estilo de las aplicaciones java para entornos Windows.

En cualquier caso, predominara un sentimiento de discreción estética, en cuanto a la decoración, uso de colores y tipografía empleada.

- **Facilidad de uso**

La aplicación tendrá que cumplir con los requisitos estándar de intuitividad y facilidad de uso de las aplicaciones Windows, así como de los aspectos ergonómicos establecidos en las interfaces hombre – maquina.

## **REQUISITOS DE PRODUCCIÓN**

La aplicación no tendrá una localización predeterminada. Podrá estar localizada en un servidor central o en cualquier estación de trabajo, ya que se ejecuta y se desarrolla de forma local y autónoma.

Se ha de prever que la aplicación, instalada en diversas estaciones de trabajo puedan acceder simultáneamente a un mismo fichero de definición de moléculas (por ejemplo en un repositorio de datos en un servidor central).

Efectivamente, puede plantearse el caso de que en varias estaciones de trabajo se acceda al mismo fichero de definición de moléculas en el caso de que coincidan dos o mas usuarios intentando analizar la misma molécula y cuyo fichero de definición se encuentre en un servidor central.

Como el acceso al fichero de definición de moléculas siempre se realiza en modo de lectura, no es de prever que este punto, aunque tenido en cuenta, ocasiona problemas.

- **Rendimiento**

La aplicación tendrá que procesar las acciones del usuario y proporcionarle los datos requeridos en el mínimo tiempo posible, y según el nivel de prioridad que le asigne el SO en función de la carga del mismo. Bajo ningún concepto la aplicación modificara o intentara modificar su nivel de prioridad o privilegio a fin de conseguir mas recurso en contra del resto de aplicaciones con las que compita.

- **Precisión**

Los datos proporcionados por la aplicación tendrán que ser actuales (tiempo real), o en su defecto finales si la acción no los permite. En ningún caso presentara datos intermedios en los finales de los procesos.

En cada caso se proporcionarán datos con la precisión adecuada o la mayor posible, ajustándose a su relevancia. Internamente la aplicación trabajará siempre con la mayor precisión posible.

- **Disponibilidad**

Aunque no se establecen requerimientos de alta disponibilidad para la aplicación, tendrá la robustez e integridad necesaria para poder garantizar la ejecución de la misma en periodos prolongados de tiempo, incluso varios días (por ejemplo, grabaciones de rotaciones de moléculas de grandes dimensiones y que consuman gran cantidad de recursos y tiempo de cálculo en estaciones de baja potencia).

- **Volumen de Información**

Debido a que la aplicación no existe actualmente no se puede hacer una estimación válida sobre los volúmenes de información que se manejarán y hacer una previsión al respecto. Por ello, se tendrá que diseñar la aplicación de manera que un gran volumen de datos no signifique una pérdida de estabilidad ni de rendimiento en la misma, aunque por las características gráficas de la misma está fuertemente interrelacionado.

Efectivamente, es presumible que el aumento del número de átomos a representar de una molécula (aumento de la carga de cómputo y gráfica) afecte el rendimiento global de la aplicación, por lo que se han de tratar de minimizar sus efectos.

En cuanto al volumen de información que la aplicación puede generar, no se dispone hasta el momento de datos que permitan una estimación válida. El volumen de información a grabar dependerá del formato final de salida empleado, del tiempo de grabación y de la resolución con que finalmente se decida efectuarla.

En condiciones normales de trabajo sin redimensionamiento de la ventana gráfica se estima un tamaño de 568Kbytes por imagen de secuencia grabada. Por defecto se realiza una grabación cada 10 grados de rotación (36 grabaciones por ciclo de 360°) lo que determina un volumen medio de 20 Mb (19.96 Mb) por secuencia grabada en formato BMP.

- **Entorno físico y tecnológico**

No se ha definido ni es relevante el entorno físico y tecnológico. La aplicación no presenta condicionantes en este aspecto que obliguen a realizar una previsión y localización en este sentido.

- **Numero de usuarios**

La aplicación se diseñara para ser monopuesto y monousuario, por lo que no habrá usuarios ni accesos concurrentes a la misma.

No se prevén distintos modos de acceso para los usuarios, ni niveles de ejecución diferenciados.

- **Distribución del software**

No se han previsto hasta el momento canales de distribución del software, formas de comercialización, ni el formato de presentación del mismo.

No se ha previsto hasta el momento el procedimiento de instalación automatizado del mismo, que posiblemente se realizara con algún programa de instalación automatizada estándar en entornos Windows.

En el Manual de Instalación (Documento 2) se describen tanto la instalación de programas necesarios, librerías graficas, etc. en función de la estructura de directorios creadas.

- **Consumibles**

No se prevé el uso de ningún tipo de consumibles, salvo posiblemente el de unidades CD, DVD o DAT para el almacenamiento de los ficheros de grabación de las rotaciones de moléculas, o como copias de respaldo o de seguridad de la aplicación.

- **Impacto**

Debido a que la aplicación no substituye ninguna aplicación existente, no se ha de contemplar un impacto sobre ninguna otra existente, excepto en el momento de la implantación de la aplicación en el entorno de producción, que bajo ningún motivo tendrá que afectar al trabajo de ninguna otra aplicación existente.

La instalación y puesta en servicio de esta nueva aplicación ha de ser totalmente transparente y no afectar a ninguna otra.

## REQUISITOS DE FORMACION

Los usuarios tendrán un perfil único de formación.

Se asumirá que los usuarios tienen la formación necesaria para el uso de aplicaciones Windows y que conocen las características del entorno donde se ejecutara la aplicación, ya sea como estación de trabajo o en entorno de intranet.

Se asumirá también que los usuarios tienen la formación técnica necesaria para entender la utilidad de la aplicación y de los términos y conceptos en ella empleados.

La formación que se proporcionara como Manual de Usuario (Documento 3) y como Manual de Ayuda Rapida (Documento 4) en la aplicación (on-line) se referirá únicamente a las funcionalidades de la aplicación y el manejo de la misma.

- **Seguridad**

No hay previstos mecanismos de seguridad en el acceso a la aplicación, salvo los que proporcionen el SO en el acceso a los usuarios y su identificación.

Se entiende que una vez instalada la aplicación por un usuario (en los que se requiere privilegios de administración) es suficiente para a partir de este punto permitir el acceso a la misma y a voluntad por ese mismo usuario.

- **Mantenimiento**

Una vez finalizada la etapa de implantación de la última versión estable, y después de recoger y recuperar las incidencias del proceso, no se prevé inicialmente un mantenimiento evolutivo de la aplicación, quedando "así tal cual".

- **Política**

No hay previstos ni aplicados requerimientos políticos en la aplicación.

- **Legalidad**

Se cumplirán en todo momento la LOPD y todas aquellas otras leyes que sean aplicables.



- **Reutilización**

Toda construcción se realizara en base a componentes reutilizables, ya sea aplicando componentes existentes o diseñándolos de nuevo, siempre que sea posible.

## **REQUISITOS DE PRUEBAS**

No hay requisitos específicos fuera de lo habitual en los puestos de trabajo estándar.

- **Necesidades y medios**

Se requerirán puestos de trabajo con la instalación estándar del SO Windows ( W2000 o XP) y configuración estándar (incluyendo navegador).

Además requerirán la instalación de JAVA2 j2dsk1.3.1, Java JRE 1.3.1\_01 y las librerías de java GL4Java 2.8.2

Para generar archivos AVI a partir de una secuencia de ficheros BMP usamos la aplicación externa Slide Show Movie Maker Versión 3.7, de Joem Thiemann, programa gratuito de generación de archivos AVI. (<http://www.joem-thiemann.de>)

Los usuarios escogidos para realizar pruebas no requerirán ser dados de alta en ningún entorno y las pruebas se realizaran de forma local en sus equipos.

- **Herramientas**

No se requiere ninguna herramienta especifica adicional para la realización de pruebas salvo las proporcionadas por el propio SO (editor de texto ASCII o reproductor multimedia).

- **Entorno hardware / software**

El entorno hardware / software será el estándar para las aplicaciones Windows actuales.

- **Relaciones lógicas y físicas con otros sistemas**

No se han previsto relaciones lógicas ni físicas con otros sistemas ni son aplicables a este proyecto.

- **Procedimientos de emergencia**

No se han previstos procedimientos de emergencia.

La aplicación no consume ni proporciona ningún tipo de datos que requiera de una planificación de emergencia.

- **Procedimientos de recuperación de datos**

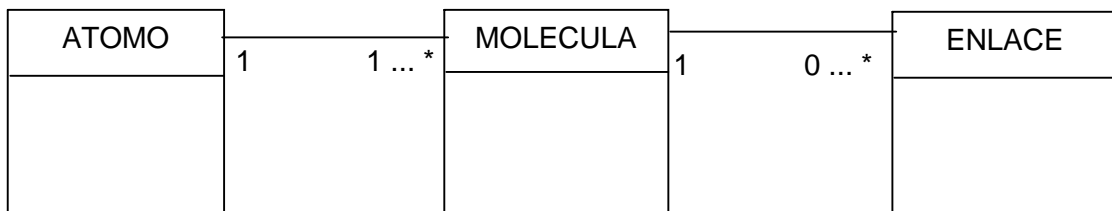
No se ha previsto ningún procedimiento de recuperación de datos específico fuera de los que pueda proporcionar el SO.

## CONTEXTO DE LA APLICACION

Hay dos maneras de describir el contexto de una aplicación: a través del modelo de dominio (manera simplificada) o a través del modelo de negocio (manera más detallada)

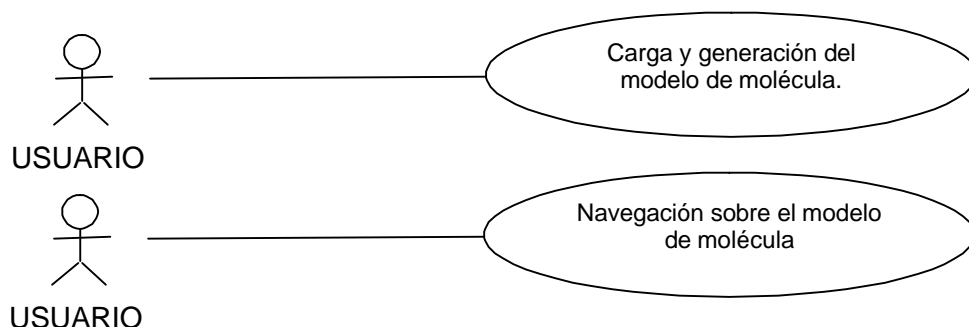
- **Modelo del dominio**

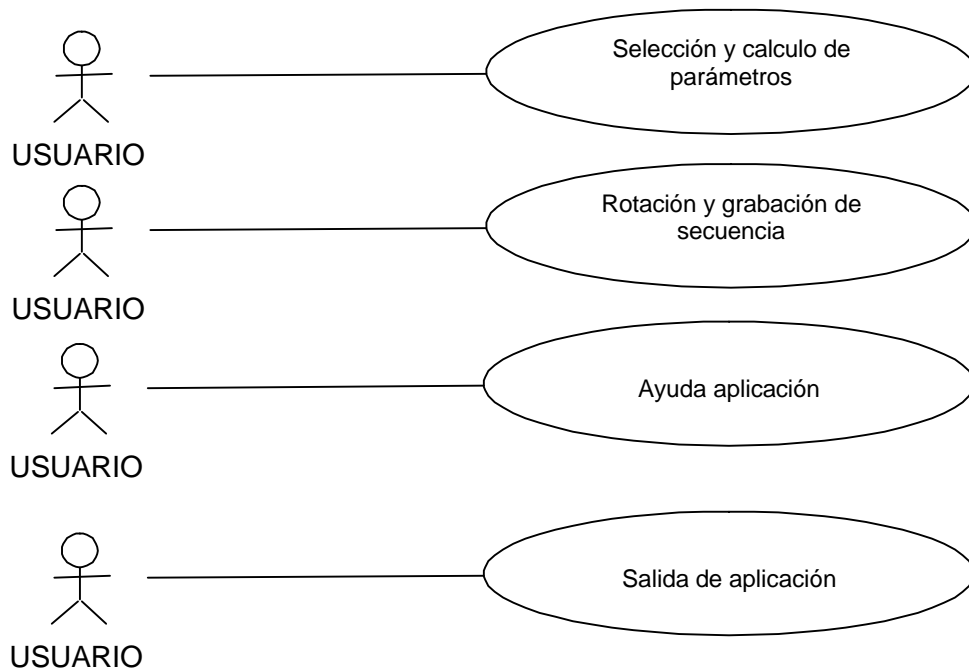
En el modelo de dominio recogemos los tipos de objetos o clases más importantes:



- **Modelo del negocio**

En el modelo de negocio describimos a grandes rasgos los procesos y entidades principales del entorno de la aplicación





## GUIONES

Tanto en la introducción realizada en el ANEXO I.1 - Descripción del TFC, en el Documento 1 - PLAN DE TRABAJO, así como a lo largo de este documento, se han avanzado y hecho referencias a los distintos guiones o escenarios de la aplicación. Así, se advierte de un escenario llamado carga y generación del modelo de molécula, navegación sobre el modelo y de otros.

En este apartado y a continuación volvemos a relatar los distintos guiones que ha servido como base para la extracción de los requisitos funcionales y de los casos de uso, a partir de la interpretación de los mismos.

- **Guiones del usuario**

Una vez iniciada la aplicación presentara un interfaz grafico de usuario en forma de panel donde solicitara la entrada o selección de un fichero en formato Xmol XYZ valido, a través de un panel nodal de selección de ficheros que implemente las características de navegación por directorios. Durante este proceso, el resto de las funciones de la aplicación estarán deshabilitadas, ya que requieren de los datos contenidos en un fichero XYZ valido para poder desarrollarse.

Una vez seleccionado y validado el fichero de entrada, se representa gráficamente la estructura de átomos descrita en el fichero, quedando la aplicación en espera de las ordenes del usuario.

El usuario podrá en este punto navegar rotando la molécula en todas sus direcciones , situando el puntero del ratón en el panel, presionando el botón izquierdo y moviéndolo en la dirección del eje en que se desee rotar. El sistema traducirá el movimiento detectado por la rotación que le sea adecuada.

En cualquier momento, el usuario podrá seleccionar cualquiera de sus elementos (átomos o enlaces) procediendo a su identificación y presentación de sus datos característicos, seleccionándolo con el puntero del ratón y el botón derecho del mismo.

Se podrá realizar una doble selección dos átomos simultáneamente, si tras seleccionar el primero se repite la operación con un segundo y se presiona la tecla de control durante la selección. El sistema presentara entre los datos la distancia entre ellos y si comparten o no un enlace.

En el caso de que se seleccionaran dos enlaces simultáneamente (con un procedimiento análogo al anterior), se presentara entre los datos el ángulo que forman entre ellos.

La aplicación proporciona un mecanismo con el cual es posible la definición de un eje sobre el que rotara la molécula. Dicho mecanismo es la introducción las coordenadas X, Y, X de un vector de rotación y las coordenadas X, Y, Z de un punto de origen o aplicación de dicho vector.

Una vez establecido dicho vector la aplicación habilitara la posibilidad de efectuar rotaciones de la molécula respecto al nuevo eje.

El usuario tendrá también la posibilidad de generar y grabar en disco una secuencia de imagenes del movimiento de rotación de la molécula, en un formato BitMap (BMP).

En cualquier momento el usuario podrá seleccionar un nuevo archivo de entrada, y tras confirmar su elección, se reiniciaría la aplicación con los nuevos datos.

Finalmente el usuario también podrá en cualquier momento abandonar la aplicación previa confirmación para evitar salidas accidentales.

## IDENTIFICACIÓN DE LOS ACTORES

Dada la simplicidad de la aplicación, en la que la intervención del usuario esta muy limitada en sus funciones y papeles, es útil realizar la clasificación de los actores: Usuario y Sistema.

No se identifican relaciones de especialización entre los actores.

- **Actor: Usuario**

Es el colectivo de personas que interactúan directamente con el sistema y hacen servir las funciones de usuario.

- **Actor: Sistema (entorno informático)**

Es un concepto que agrupa todo lo que hace referencia a la interficie no humana de la aplicación.

## IDENTIFICACIÓN DE LOS CASOS DE USO

La identificación de los casos de uso recogen todos los requisitos funcionales, por lo que nos referimos a la sección REQUISITOS FUNCIONALES para mas detalles.

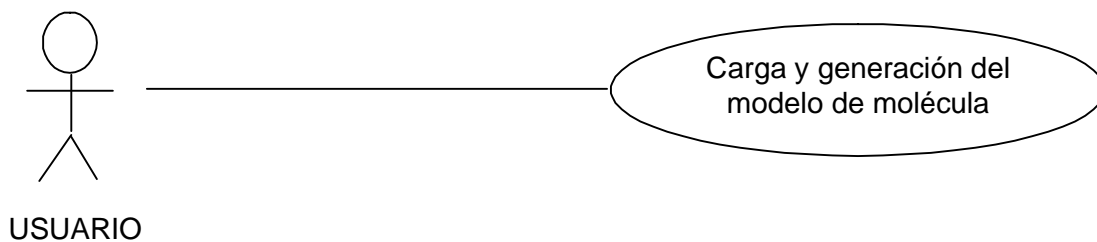
No obstante, los enumeramos a continuación de forma sucinta:

- Carga y generación del modelo de molécula
- Navegación sobre el modelo de molécula
- Selección y calculo de resultados
- Rotación y grabación de la secuencia
- Ayuda aplicación
- Salida de la aplicación

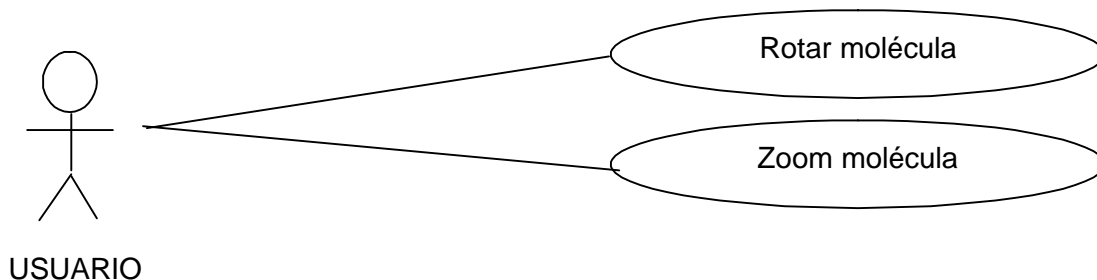
## IDENTIFICACIÓN DE LAS RELACIONES ENTRE CASOS DE USO

A continuación presentamos para cada caso de uso las relaciones de extensión, inclusión y generalización identificadas.

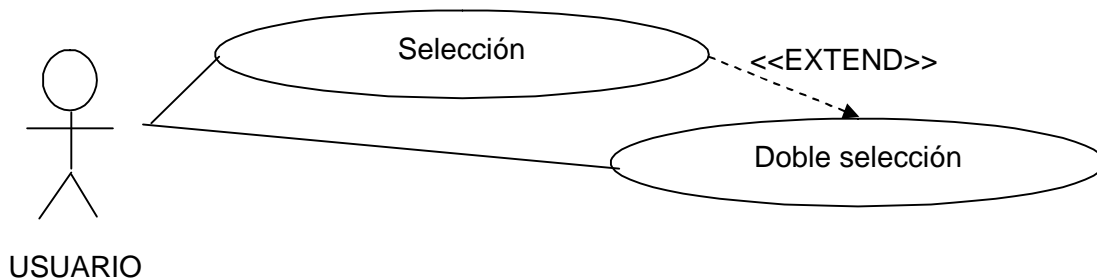
- **Relación caso de uso: Carga y generación del modelo de molécula**



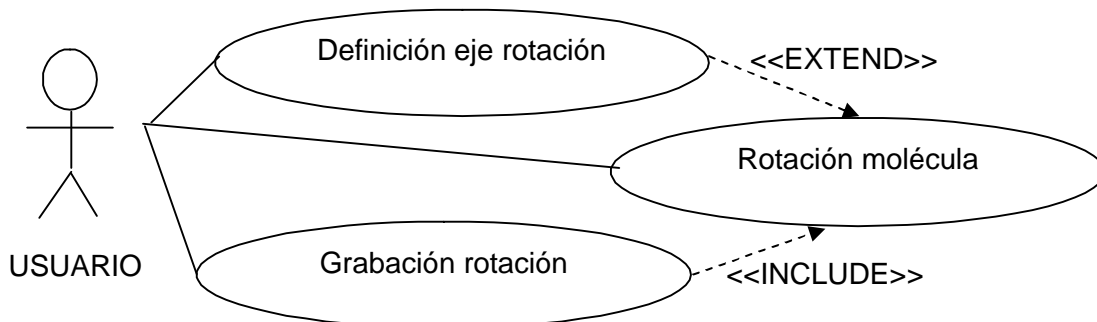
- **Relación caso de uso: Navegación sobre el modelo de molécula**



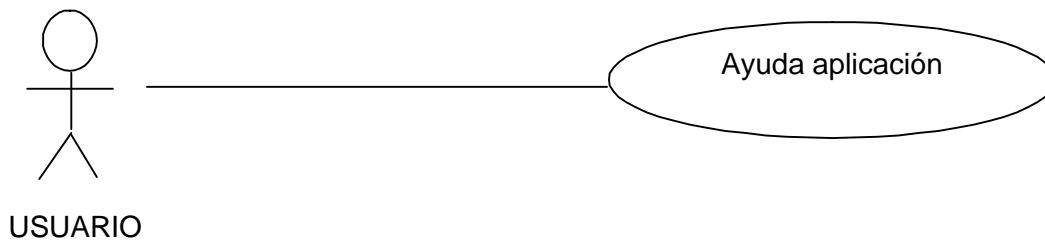
- **Relación caso de uso: Selección y calculo de resultados**



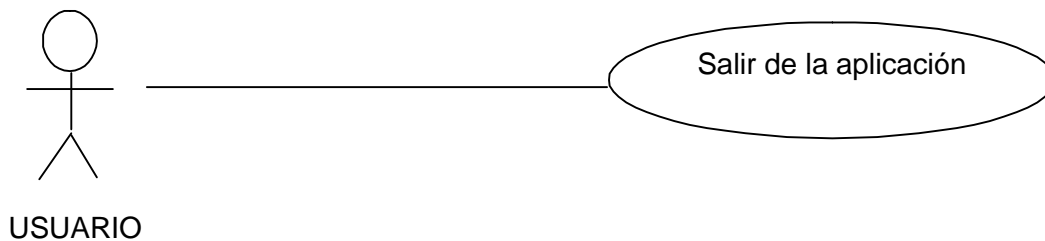
- **Relación caso de uso: Rotación y grabación de la secuencia**



- **Relación caso de uso: Ayuda aplicación**



- **Relación caso de uso: Salida de la aplicación**



## DOCUMENTACIÓN DE LOS CASOS DE USO

- **Caso de uso: Carga y generación del modelo de molécula**

### Descripción:

Este caso de uso encapsula la funcionalidad encargada de la carga de un fichero con formato valido y la generación del modelo de molécula. Puede realizarse en cualquier momento desde el menú de la aplicación y obligatoriamente como paso previo al inicio de la misma.

### Pre-condiciones:

No se requieren.

### Post-condiciones:

El sistema permanece en estado estable representando en 3D un modelo valido de molécula cargado. En caso de error el sistema proporciona un mensaje de advertencia y retorna al estado inicial previo.

### Flujo de eventos:

#### Flujo principal – Carga y generación del modelo de molécula:

1.- El usuario selecciona en el panel modal de selección de ficheros (con capacidad de navegación por directorios) que el sistema le proporciona, el fichero con la descripción de la molécula.

2.- El sistema verifica la validez del fichero de entrada y en caso de que no sea valido ofrece al usuario un mensaje de advertencia.

El usuario puede:

a- Seleccionar un nuevo fichero. El sistema vuelve a verificarlo.

b- Abandonar la aplicación. La aplicación termina retornando al SO.

3.- El sistema genera, a partir de un fichero valido de entrada, el modelo de representación 3D de la molécula , lo visualiza y permanece a la espera

**Flujo alternativo:**

No hay flujo alternativo.

**Comentarios:**

Este caso de uso es previo a cualquier otro, ya que las funcionalidades descritas en los otros se basan en los datos cargados y calculados de este primero.

En cualquier momento después, el usuario puede realizar la carga de un nuevo modelo de molécula.

- **Caso de uso: Navegación sobre el modelo de molécula**

**Descripción:**

Este caso de uso encapsula la funcionalidad encargada de la navegación alrededor del modelo 3D de la molécula.

**Pre-condiciones:**

Es necesario un modelo valido de molécula cargado y generado en el sistema.

**Post-condiciones:**

El sistema ha generado la rotación o el zoom sobre el modelo de la molécula, visualizándolas y permanece a la espera de nuevas acciones.

**Flujo de eventos:**

**Flujo principal – Rotación del modelo de molécula:**

1.- El usuario pulsa sobre el panel de visualización con el ratón y desplaza este sobre la superficie del mismo.



2.- El sistema traduce el movimiento resultante de la acción y realiza las rotaciones correspondientes sobre el modelo de la molécula, las visualiza y permanece a la espera.

**Flujo alternativo – Zoom del modelo de molécula:**

1- El usuario presiona la tecla y/o botón de acercar o alejar.

2- El sistema aumenta o disminuye la escala de representación de la molécula, las visualiza y permanece a la espera

**Comentarios:**

Posiblemente el zoom sobre el modelo de molécula se realizara finalmente únicamente con las pulsaciones de dos teclas.

- **Caso de uso: Selección y calculo de resultados**

**Descripción:**

Este caso de uso encapsula la funcionalidad encargada de la selección de elementos del modelo (átomos y enlaces) y de obtener y calcular información de los mismos

**Pre-condiciones:**

Es necesario un modelo valido de molécula cargado y generado en el sistema.

Para realizar una doble selección de un elemento es obligatorio haber realizado y tener activa la selección de otro elemento del mismo tipo.

**Post-condiciones:**

El sistema calcula y presenta los datos solicitados cuando se completa el proceso de selección y permanece a la espera de nuevas acciones.

En caso de error se presenta un mensaje indicativo del mismo y el sistema permanece a la espera de nuevas acciones.

**Flujo de eventos:**

**Flujo principal – Selección de un elemento:**

1.- El usuario situá el puntero del ratón sobre un elemento (átomo o enlace) y pulsa el botón derecho del ratón.

2.- El sistema promueve el elemento marcado al estado de selección. Si existía algún otro elemento en estado de selección o doble selección previamente, pasa al estado normal y presenta toda la información relacionada con el nuevo elemento seleccionado.

La información que el sistema presenta varia si se trata de un átomo o un enlace.

Si es un átomo el sistema presenta información de:

- a- posición en fichero de entrada
- b- tipo de átomo, elemento químico
- c- coordenadas de posición

Si es un enlace el sistema presenta información de:

- a- posición de los átomos que lo forman en el fichero de entrada
- b- tipos de átomos que lo forman, elementos químicos
- c- coordenadas de posición de ambos átomos
- d- distancia entre ellos (longitud del enlace)

El sistema actualiza y presenta la información, permaneciendo a la espera.

#### **Flujo alternativo – Doble selección de un elemento:**

1.- El usuario después de realizar la selección de un elemento situá el puntero del ratón sobre un nuevo elemento (átomo o enlace) del mismo tipo que el anterior y pulsa simultáneamente la tecla de control y el botón derecho del ratón.

2- El sistema promueve el elemento marcado al estado de doble selección. Si existía algún otro elemento en estado de doble selección previamente, pasa al estado normal y presenta toda la información relacionada con este nuevo elemento seleccionado y de la doble selección.

La información que el sistema presenta varia si se trata de una doble selección de átomos o enlaces.

Si son átomos el sistema presenta información para cada uno de ellos:

- a- posición en el fichero de entrada
- b- tipos de átomos, elementos químicos
- c- coordenadas de posición
- d- distancia entre ambos átomos
- e- Si comparten o no algún enlace y que enlace.

Si son enlaces el sistema presenta información para cada uno de ellos:

- a- posición de los átomos que lo forman en el fichero de entrada
- b- tipos de átomos que lo forman, elementos químicos
- c- coordenadas de posición de ambos átomos

d- distancia entre ellos (longitud del enlace)

e- Angulo que forman entre si ambos enlaces

El sistema actualiza y presenta la información, permaneciendo a la espera.

#### **Comentarios:**

Sea cual sea el elementos o elementos que se encuentren en estado de selección o doble selección, al realizar una nueva selección todos, excepto el recién seleccionado, vuelven a su estado normal.

Actualmente no es posible realizar la doble selección de dos elementos de diferente tipo. El sistema ignora la orden cuando se trata de este supuesto.

- **Caso de uso: Rotación y grabación de la secuencia**

#### **Descripción:**

Este caso de uso encapsula la funcionalidad encargada de la rotación del modelo sobre un eje arbitrario y opcionalmente a grabación de la secuencia de rotación en un formato de video estándar.

#### **Pre-condiciones:**

Es necesario un modelo valido de molécula cargado y generado en el sistema.

Para realizar una rotación es indispensable definir previamente el eje de rotación de la molécula.

Para realizar la grabación de la secuencia de rotación es necesario previamente definir el eje de rotación y el nombre del fichero de salida de la secuencia a grabar.

#### **Post-condiciones:**

Se ha definido el eje de rotación de la molécula, se realiza la rotación de la molécula y se realiza la grabación de las secuencias de rotación frame a frame, en función del flujo de eventos seguido.

En caso de error en cualquier flujo se muestra un mensaje identificativo del mismo.

El sistema permanece estable a la espera de nuevas acciones.

#### **Flujo de eventos:**

##### **Flujo principal – Definición del eje de rotación de la molécula:**

1.- El usuario selecciona la opción de definición del eje de rotación de la molécula.

- 2.- El sistema presenta un panel nodal donde el usuario deberá entrar las coordenadas de dos puntos en el espacio que definan un vector de rotación y su punto de aplicación.
- 3.- El usuario introduce dos series de tres valores reales que identifican a un vector y su origen.
- 4.- El eje de rotación queda establecido. El sistema presenta esta información en el panel y queda a la espera.

**Flujo alternativo – Rotación de la molécula:**

- 1.- El usuario selecciona la opción de inicio de secuencia de rotación de la molécula.
- 2.- El sistema calcula y realiza la rotación de la molécula respecto a dicho eje de 10 en 10 grados (este valor podría ser ajustable por el usuario en próximas revisiones). A cada cambio de posición el sistema actualiza el valor de ángulo rotado como información en el panel principal. Una vez completada la rotación sobre el eje, el sistema queda a la espera.
- 3.- Si el usuario presiona el control de Paro, entramos en Pausa, el sistema detiene la rotación.
- 4.- Si el usuario presiona el control de reproducción en estado de pausa, el sistema realiza la rotación desde el punto en que se detuvo un paso.
- 5.- Si el usuario presiona el control Pausa, el sistema entra en Paro. Pulsando los controles de Inicio y Final accedemos a la posición de inicio o final.

**Flujo alternativo – Grabación de la secuencia de rotación de la molécula:**

- 1.- El usuario selecciona la opción de grabación de la secuencia de rotación de la molécula.
- 2.- El usuario selecciona un directorio y fichero donde se grabara la secuencia de rotación.
- 3.- Si esta habilitada la opción, el sistema sincroniza el inicio de grabación con el inicio de reproducción. En caso contrario inicia la grabación.
- 4.- El sistema auto inicia un proceso de rotación de la molécula. A cada ángulo de rotación realizado graba la imagen de la pantalla como un frame de la secuencia de video (en formato BMP). Una vez finalizada la secuencia de rotación vuelve a quedar a la espera.

**Comentarios:**

El proceso de grabación de la secuencia de rotación se realiza imagen a imagen, grabando cada cuadro correspondiente a cada rotación como un archivo de tipo BitMap (BMP). Hacemos uso de una aplicación externa para reunir todos estos frames y confeccionar un archivo AVI.

- **Caso de uso: Ayuda aplicación**

**Descripción:**

Este caso de uso encapsula la funcionalidad encargada de presentar una ventana con la ayuda en línea solicitada.

**Pre-condiciones:**

No se requieren, exceptuando no encontrarse dentro de un panel nodal.

**Post-condiciones:**

El sistema presenta una ventana no modal con el Manual de Ayuda Rápida de la aplicación..

**Flujo de eventos:**

**Flujo principal – Ayuda aplicación:**

- 1.- El usuario pulsa sobre la opción Ayuda Aplicación en el menú Ayuda de la Barra de Menús.
- 2.- El sistema inicia el procedimiento creación y presentación de una ventana no modal que contiene la ayuda solicitada (Manual de Ayuda Rápida de la Aplicación).

**Flujo alternativo:**

No hay flujo alternativo.

**Comentarios:**

Puede realizarse en cualquier momento (fuera de paneles modales) ya que su uso es transparente a la aplicación.

- **Caso de uso: Salida de la aplicación**

**Descripción:**

Este caso de uso encapsula la funcionalidad encargada de liberar todos los recursos utilizados y salir ordenadamente de la aplicación al SO

**Pre-condiciones:**

No se requieren, exceptuando no encontrarse dentro de un panel nodal.

**Post-condiciones:**

El sistema ha abandonado la aplicación quedando bajo el SO.

**Flujo de eventos:****Flujo principal – Salida de la aplicación:**

- 1.- El usuario pulsa sobre el botón de cerrar en la parte superior derecha del panel principal.
- 2.- El sistema inicia el procedimiento de liberación de los recursos utilizados, cierra ficheros y sale ordenadamente al SO.

**Flujo alternativo:**

No hay flujo alternativo.

**Comentarios:**

Puede realizarse en cualquier momento (fuera de paneles nodales) ya que no hay datos que produzca la aplicación que requieran ser salvados de forma previa a la salida de la aplicación o que no se puedan volver a reproducir fácilmente.

## **ANALISIS**

### **REVISION DE LOS CASOS DE USO**

Los casos de uso presentados son muy simples y no se ha aportado en este tiempo nueva información o cambiado los planteamientos de tal manera que una revisión en los casos de usos aporte modificaciones a los mismo.

### **PAQUETES DE ANALISIS Y DE SERVICIO**

En este caso, dada la simplicidad de la aplicación, solo consideramos un único paquete de análisis y de servicio.

### **IDENTIFICACIÓN DE LAS CLASES DE ENTIDAD**

Identificamos las clases de entidad a partir de los casos de uso. Para cada caso de uso indicamos las clases que encontramos:

- **Caso de uso: Carga y generación del modelo de molécula**

Clase: Molécula

- **Caso de uso: Navegación sobre el modelo de molécula**

Clase: Molécula

- **Caso de uso: Selección y calculo de resultados**

Clase: Molécula, Átomo, Enlace

- **Caso de uso: Rotación y grabación de la secuencia**

Clase: Molécula

- **Caso de uso: Ayuda aplicación**

Clase: Molécula, Atomo, Enlace

- **Caso de uso: Salida de la aplicación**

Clase: Molécula

## ESPECIFICACIÓN DE LOS ATRIBUTOS DE LAS CLASES DE ENTIDAD

- **Clase ATOMO**

Indice( integer )

Elemento( elemento)

CoordX( double )

CoordY( double )

CoordZ( double )

Carga( double )

VectorX( double )

VectorY( double )

VectorZ( double )

- **Clase ENLACE**

Índice( integer)

Atomo1( atomo )

Atomo2( atomo )

Distancia( double )

RotYAtom( double )

RotXAtom( double )

Color( double )

- **Clase MOLECULA**

Nombre( String )

NumAtomo( integer )

NumEnlace( integer )

Atomo( array of atomo )

Enlace( array of enlace )

Elemento( array of integer )

FactEnl( double )

DimMaxX( double )

DimMinX( double )

DimIncX( double )

DimCenX( double )

DimMaxY( double )

DimMinY( double )

DimIncY( double )

DimCenY( double )

DimMaxZ( double )

DimMinZ( double )

DimIncZ( double )

DimCenZ( double )



- **Clase ELEMENTO**

Índice (integer )

Simbolo( string )

Nombre ( string )

Rcoval( double )

RvdWalls( double )

Color( double )

## RELACIONES

- **Herencia**

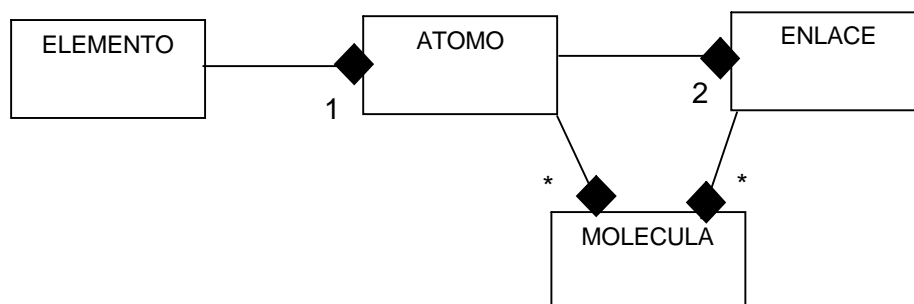
Hasta el momento no se han identificado relaciones de herencia.

- **Asociaciones**

Hasta el momento no se han identificado relaciones de asociación.

- **Agregaciones**

Se han identificado las siguientes relaciones de agregación:

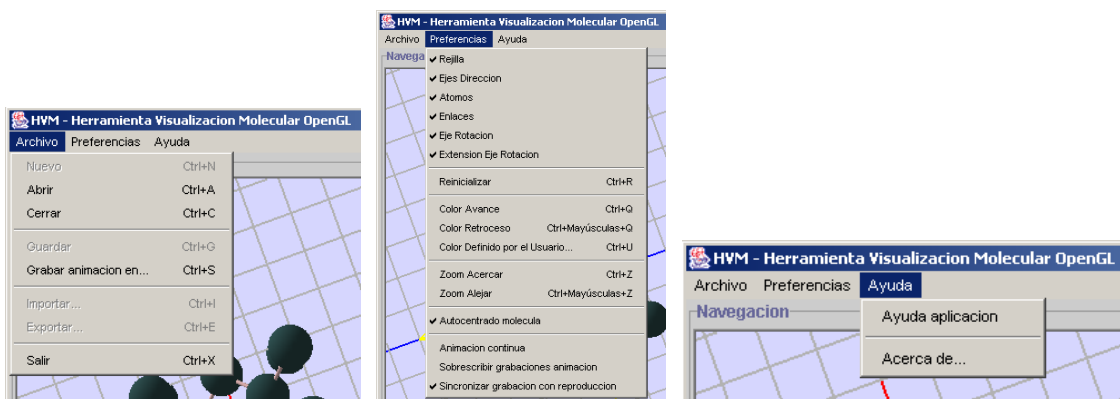


## DISEÑO DE LA INTERFICIE DE USUARIO

La interficie se comprende tres dispositivos fuertemente relacionados:

- **Barra de Menús.**

Gestión de modelos en el sistema, preferencias de visualización y operación, y asistencia en línea.



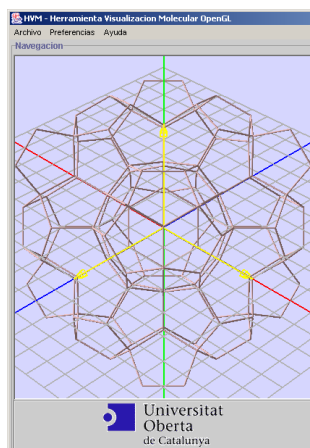
**Menú Archivo:** Permite abrir un nuevo fichero de modelo molécula, cerrar el actual, definir ruta y nombre de archivos de grabación animación y salir de la aplicación.

**Menú Preferencias:** Permite habilitar o deshabilitar todos los elementos de visualización (ejes, átomos, enlaces, etc.), reiniciarlos, gestión de color, zoom imagen, autocentrado modelo, control sobre reproducción y grabación secuencia.

**Menú Ayuda:** Permite obtener ayuda sobre todas las funciones y opciones de la aplicación y créditos de autor.

- **Panel Navegación.**

Navegación e inspección de moléculas en tiempo real en entorno 3D y selección de átomos y enlaces



Permite la navegación alrededor de la molécula.

Permite la visualización o no de ejes de dirección, rejilla, átomos, enlaces y eje de rotación, así como la gestión del color de fondo de representación.

Permite acercar o alejar la vista (zoom).

Permite reinicializar a las condiciones iniciales.

Permite selección o de dos elementos, átomos o enlaces e identificarlos con otro color.

Presenta créditos de autor pulsando icono UOC.

- **Panel Información General.**

Información de la molécula, selección y resultados, control de reproducción y grabación de secuencias.



**Zona Información:** Proporciona información sobre ruta y nombre archivo molécula, comentario obtenido de su estructura, descripción con número de átomos, enlaces e histograma de los elementos en función de su frecuencia de aparición.

**Zona Selección:** Proporciona información sobre los elementos seleccionados: átomos o enlaces (número, tipo elemento y posición, o número, tipo enlace e información de los átomos que lo componen).

Seleccionando dos átomos calcula la distancia que los separa y si comparten o no un enlace.

Seleccionando dos enlaces calcula el ángulo de torsión entre ambos.

**Zona Reproducción y Grabación:** Permite la definición de un eje de rotación (vector y punto de aplicación) a través de sus coordenadas.

Permite la definición de ruta y nombre base de archivo donde grabar las secuencias de rotación.

Muestra información de estado en la línea de avisos.

Controles de inicio, final, reproducción paso a paso, ciclo, ciclo continuo, avance, retroceso, paro y pausa.

Control de grabación secuencia, fotograma a fotograma, secuencia continua, sincronización de grabación con reproducción y control de sobre escritura de archivos existentes.

## VALORACION ECONOMICA

- **Hardware de base:**

Hardware punto de trabajo UOC estándar.

No se requiere inversión en hardware de base.

- **Software de base:**

Software punto de trabajo UOC estándar.

Java JDK 1.3.1\_01 o superior (en CD de IG 1).

Java JRE 1.3.1\_01 o superior (en CD de IG 1)

OpenGL GL4JAVA 2.8.2.0 (en CD de IG 1).

Slide Show Movie Maker Versión 3.7, de Joem Thiemann, programa gratuito

Entorno desarrollo Eclipse gratuito.

No se requiere inversión den software de base.

- **Software de aplicación:**

En la realización de este trabajo se han invertido aproximadamente 250 horas con la siguiente distribución de tareas:

10% en tareas de Análisis ( 25 horas )

15% en tareas de Diseño ( 40 horas )

60% en tareas de Implementación ( 145 horas)

15% en tareas de Documentación ( 40 horas )

En ámbitos docentes un precio hora común es de 9 €

El coste estimado del desarrollo de la aplicación es de 2.250 €

## ANEXO I.1 – DESCRIPCION DEL TFC

### **Títol**

Disseny d'una eina per a la visualització de molècules.

### **Descripció del treball**

La visualització de molècules es una tasca molt important en moltes àrees com la química, la farmàcia, etc.

Les molècules estan composades d'àtoms i lligams. En el format de visualització *ball-and-stick* els àtoms es representen com a esferes i els lligams com a cilindres.

Aquest tfc consisteix en construir una eina que permet visualitzar molècules en aquest format de visualització. L'eina haurà de permetre navegar al voltant de la molècula i utilitzar tècniques de selecció que permetin identificar àtoms, calcular distàncies i angles de torsió. A més, s'haurà de poder definir un eix i sobre ell generar una rotació i gravar-la en una pel·lícula (en el format que sigui més senzill).

### **Objectius del treball**

L'objectiu final és una aplicació que permeti inspeccionar molècules. Per a assolir-lo, caldrà estudiar sobre els següents termes:

- Format de fitxer d'entrada (molt senzill, les posicions dels àtoms).
- Format de sortida de la pel·lícula.
- Tècniques d'interacció i usabilitat.

### **Coneixements previs necessaris per a realitzar el treball:**

Obligatòriament haver cursat Informàtica Gràfica I. És recomanable també haver cursat Interacció Humana amb els Ordinadors.

Es requereixen coneixements d'orientació a objectes.

### **Requeriments hardware:**

Punt de treball estàndard de la UOC.

**Requeriments Software:**

Sistema operatiu Linux/Windows

Els de l'assignatura d'Informàtica Gràfica I:

- Java (JDK)
- OpenGL
- Alguna eina per la creació d'interfícies d'usuari

**Lectures recomanades:**

- Angel E., "Interactive Computer Graphics: A top-down approach with OpenGL" Addison-Wesley, 1996.

## ANEXO I.2 – DOCUMENTACIÓN: ENLACES Y REFERENCIAS

**Nota:** Algunos de los enlaces presentan ocasionalmente problemas de conexión.

[http://www.csc.fi/gopenmol/developers/xmol\\_format.phtml](http://www.csc.fi/gopenmol/developers/xmol_format.phtml)

Descripción del formato XYZ

<http://hackberry.chem.trinity.edu/IJC/Text/xmolxyz.html>

Descripción del formato XYZ

<http://sun.uni-regensburg.de/xmol-1.3.1/html/xyz.5.html>

Documentación del formato XYZ (pagina de manual)

<http://www.ahpcc.unm.edu/~chem/xmol/xmol.html>

Documentación xmol y formato XYZ

<http://www.ugr.es/~gebqmed/esrasmol27.html>

Documentación Rasmol.

<http://www.structuresearch.com:8080/catalog/marvin/doc/xyz-doc.html>

Descripción del formato XYZ como formato de exportación

<http://www.lrz->

[muenchen.de/services/software/chemie/unichem\\_doku/5500/5500\\_247.html](http://www.lrz-muenchen.de/services/software/chemie/unichem_doku/5500/5500_247.html)

Descripción del formato XYZ como formato de exportación

[http://194.94.42.12/licensed\\_materials/00897/papers/0001002/column02.htm](http://194.94.42.12/licensed_materials/00897/papers/0001002/column02.htm)

Documento de comunicación de imágenes químicas en Internet

## ANEXO I.3 – PROGRAMAS: ENLACES Y REFERENCIAS

**Nota:** Algunos de los enlaces presentan ocasionalmente problemas de conexión.

### IMÁGENES EN 2 DIMENSIONES

ChemWindows 3.1, ChemIntosh 3.4, ChemWeb.

<http://www.softshell.com/>

Internet Chemistry Viewer

<http://www.synopsys.co.uk/>

ChemDraw

<http://www.camsci.com/>

ISIS/Draw

<http://www.mdli.com/products/framework/isis/>

## IMAGENES EN 3 DIMENSIONES

RasMol

<http://klaatu.oit.umass.edu/microbio/rasmol/>

KineMage

<http://www.prosci.uci.edu/kinemages/kinpage.html>

WPDB - The Protein Data Bank Through Microsoft Windows

<http://www.sdsc.edu/pb/wpdb/wpdb.htm>

SWISS-PDB Viewer

<http://www.expasy.org/>

VDM Visual Molecular Dynamics

<http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>

SHAPE, FLEX, PDBTool, XTALVIEW

<http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>

Xmol

<http://www.msc.edu/msc/docs/xmol/XMol.html>

Axiom Discovery Molecule Viewer

<http://www.axiomdiscovery.com/>

Software diverso



<http://cmm.cit.nih.gov/>

<http://cmm.cit.nih.gov/software.html>

## PLUG-INS

Virtual Reality

<http://ws05.pc.chemie.th-darmstadt.de/vrml/>

Java

<http://java.sun.com/applets/index.html>

Chime

<http://www.mdli.com/products/framework/chemscape/>

## ANIMACIONES

Concatenated XYZ Files, Chime

<http://www.softshell.com/>

Re View

[http://http1.brunel.ac.uk:8080/depts/chem/ch241s/re\\_view/re\\_view.htm](http://http1.brunel.ac.uk:8080/depts/chem/ch241s/re_view/re_view.htm)

MovieMol

<http://chem-www.mps.ohio-state.edu/~lars/moviemol.html>

# **DOCUMENTO 1**

## **PLAN DE TRABAJO**

# ETIS TFC – GRAFICOS POR COMPUTADOR

**TITULO**

**DISEÑO DE UNA HERRAMIENTA PARA LA VISUALIZACION DE MOLECULAS**

## PLAN DE TRABAJO

**MATEO SORROCHE MONTELLANO**

## INTRODUCCION

El objetivo de este Trabajo Final de Carrera – Gráficos por Ordenador: “Diseño de una herramienta para la visualización de moléculas”, trata del diseño y desarrollo de una herramienta que permita la visualización e inspección de moléculas, de gran utilidad en áreas como la química, farmacia, etc.

La herramienta admitirá definiciones de moléculas a través de un fichero de entrada (una variación simplificada del formato Xmol XYZ), construirá el modelo de la misma y permitirá la navegación alrededor de ella, así como la selección e identificación de sus elementos y el calculo de distancias y ángulos de torsión entre los mismos.

La utilidad permitirá la definición de un eje sobre el cual generar una rotación del modelo y grabar una secuencia de salida en un formato a definir (posiblemente BMP)

### Interfaz grafico de usuario

Una vez iniciada la aplicación presentara un interfaz grafico de usuario en forma de panel donde solicitara la entrada o selección de un fichero en formato Xmol XYZ valido, a través de un panel nodal de selección de ficheros que implemente las características de navegación por directorios. Durante este proceso, el resto de las funciones de la aplicación estarán deshabilitadas, ya que requieren de los datos contenidos en un fichero XYZ valido para poder desarrollarse.

Una vez seleccionado y validado el fichero de entrada, se representa gráficamente la estructura de átomos descrita en el fichero, quedando la aplicación en espera de las ordenes del usuario.

El usuario podrá en este punto navegar alrededor de la molécula en todas sus direcciones a través de sencillas acciones con el cursor del ratón sobre la superficie de representación, y/o presionando algunas teclas.

En cualquier momento, el usuario podrá seleccionar cualquiera de sus elementos (átomos o enlaces) procediendo a su identificación y presentación de sus datos característicos.

Se podrá seleccionar dos átomos simultáneamente, tras lo cual se presentara entre los datos la distancia entre ellos.

En el caso de que se seleccionaran dos enlaces simultáneamente, se presentara entre los datos el ángulo que forman entre ellos.

La aplicació proporcionara un mecanisme con el qual sea posible la definició de un eje sobre el que rotara la molécula. Dicho mecanismo será la introducción de las coordenadas x, y, z de un vector de rotación y las coordenadas x, y, z de un punto de aplicación u origen de dicho vector.

Una vez establecido dicho vector la aplicació habilitara la posibilidad de efectuar rotaciones de la molécula respecto al nuevo eje.

El usuario tendrá también la posibilidad de generar y grabar en disco una secuencia del movimiento de rotación de la molécula, en un formato todavía por definir (posiblemente BMP).

En cualquier momento el usuario podrá seleccionar un nuevo archivo de entrada, y tras confirmar su elección, se reiniciaría la aplicació con los nuevos datos.

Finalmente el usuario también podrá en cualquier momento abandonar la aplicació previa confirmació para evitar salidas accidentales.

### **Formato del fichero de entrada**

El fichero de entrada corresponde a una variación simplificada del formato de archivo del modelo cartesiano molecular, **Xmol XYZ**, desarrollado por Research Equipement Inc dba Minnesota Supercomputer Center en 1991.

Se trata pues de un fichero en formato ASCII en el que se describe de forma muy sencilla la molécula que representa, a través de dos líneas de cabecera y una por cada átomo presente en la misma.

La estructura de este fichero es la siguiente:

- La primera línea de cabecera corresponde con el numero de átomos presentes en la molécula. Es un numero entero que puede ser precedido por espacios y cualquier cosa añadida detrás del mismo es ignorada.
- La segunda línea de cabecera esta reservada para añadir comentarios y/o descripciones sobre la molécula. Puede estar vacía o con espacios en blanco, pero en cualquier caso debe existir. Los comentarios no pueden exceder esta línea de longitud.
- Cada una de las siguientes líneas de texto describen a un único átomo que necesitan contener como mínimo 4 campos de información, separados por espacios en blanco:
  - **Tipo de átomo**, representado por un string de caracteres alfanuméricos

- **Coordenada X**, coordenada X de la posició del àtom
- **Coordenada Y**, coordenada Y de la posició del àtom
- **Coordenada Z**, coordenada Z de la posició del àtom

Opcionalment se poden utilitzar camps extras per especificar la càrrega del àtom y/o un vector associat al mateix.

Si la línia d'entrada conté 5 o 8 camps, el cinquè camp serà interpretat com la càrrega del àtom, en un altre cas, la càrrega es assumeix com zero.

Si la línia d'entrada conté 7 o 8 camps, els tres últims són interpretats com els components X, Y, Z d'un vector, i el seu valor està especificat en àngstroms.

Nuestra aplicació no tindrà en compte la possibilitat d'incorporar diferents frames en la estructura d'un únic arxiu (per generar animacions, vibracions, oscil·lacions, etc.) del format original, repintant les capçaleres i línies de definició d'àtoms les vegades necessàries per aconseguir l'efecte. En altres paraules, nuestra aplicació només tindrà en compte en la definició de la molècula del primer frame trobat, donant llavors el fitxer per processat.

### **Modelo de representación molecular**

El model de representació usat és bàsicament el de assignar una esfera als àtoms i un cilindre als enllaços.

Com pot comprovar-se, en la descripció de les molècules en el fitxer d'entrada no s'especifica informació sobre els enllaços entre els àtoms. Efectivament, els enllaços en aquest supòsit es calculen en funció de la distància entre els àtoms i es verifica que dos àtoms comparteixen un enllaç quan la distància entre ells és menor que la suma dels radis covalents dels àtoms implicats.

Así doncs, una vegada processat el fitxer d'entrada es calcula per a cada àtom la distància respecte a tots els altres i es comprova la suma del seu radi covalent amb el radi covalent de l'altre àtom implicat. Si la distància és menor, es crea i registra un enllaç entre ells, representat per un cilindre que uneix ambdós àtoms.

La representació de l'àtom es realitza mitjançant una esfera el seu radi correspon al radi de Van Der Waals de l'element, centrada en la posició definida en l'arxiu d'entrada i amb el color corresponent a l'element químic de l'àtom en qüestió.

Existe establecida una asignación de colores en la definición de estos átomos que corresponde a motivos históricos.

### **Formato del fichero de salida**

El formato de salida del fichero de salida será el que corresponda con el formato BitMap (BMP).

## **PLAN DE TRABAJO**

Se ha subdividido el proyecto en 4 etapas:

### **Etapas 1. PAC1 - Plan de trabajo**

**Intervalo 18/09/2004 –27/09/2004**

En esta etapa se realiza el análisis y la planificación del trabajo a realizar en el desarrollo del TFC.

También se realiza la valoración de las distintas alternativas en la obtención e instalación del software de base necesario para la realización del mismo (sistema operativo, versión de Java, de GL4java -OpenGL-, de navegador, de entorno IDE, etc.), así como la búsqueda de toda la documentación que sea necesaria para su correcta instalación y administración.

Se confeccionará un documento:

- **Plan de Trabajo**

En este documento se incluirá la planificación de todas las tareas a realizar en el desarrollo del TFC, descritas en los apartados anteriores y siguientes.

Una vez confeccionado el documento será entregado en la fecha prevista como PAC1.

### **Etapas 2. PAC 2 – Especificación y Análisis**

**Intervalo 25/09/2004 – 02/11/2004**

En esta etapa se realizara principalmente la especificación y el análisis de la aplicación.

También se iniciara la implementación del entorno grafico de la misma, y se desarrollaran los procedimientos de entrada y salida de datos.

Se confeccionaran dos documentos:

- **Especificación**

En este documento se incluirán todas las especificaciones de la aplicación, descripción del comportamiento, propiedades y restricciones que se ha de desarrollar.

Para ello se identificarán las posibles fuentes de información que se emplearan para recoger información de los requisitos a cumplir.

Se establecerá el contexto de la aplicación, los guiones, se identificarán los actores, los casos de uso y las relaciones entre ellos, documentándolas.

Incluirá también la recogida y documentación de los requisitos de la interficie de usuario, teniéndose en cuenta aspecto como la comodidad y productividad del usuario, la imagen de la aplicación, las restricciones técnicas, los distintos perfiles de usuario si los hubiere, documentación de las tareas y comparación con los casos de uso, y usabilidad general.

- **Análisis**

En este documento se realizara una revisión de las clases de uso del documento anterior que nos servirá de punto de partida.

Se consideraran los tres tipos de clases (frontera, entidades y control), identificando las de entidad y especificando sus atributos, así como la relación entre las clases.

También se analizara la interficie de usuario.

Una vez confeccionados ambos documentos, serán entregados en la fecha prevista como PAC2



### **Etapa 3. PAC 3 – Desarrollo y Manual de Uso**

**Intervalo 03/11/2004 – 12/12/2004**

En esta etapa se desarrolla e implementa la aplicación y se confecciona el manual de uso de la misma.

Se confeccionara únicamente un documento:

- **Manual de Uso**

En este documento se describe con detalle todas las operaciones que pueden realizarse con la herramienta, así como el orden si este se requiere, en el uso de comandos y la interacciones que puedan ocasionarse entre ellos.

También se describen otros aspectos en cuanto a la filosofía de la aplicación, que limitaciones tiene, que ampliaciones son posibles de realizar en un futuro, que archivos de entrada y formato son necesarios, archivos de salida y formatos que genera y posibles archivo de configuración que son necesarios.

Este Manual de Uso corresponderá con la versión beta de la aplicación (pre-entrega) y será actualizado en la entrega final.

Una vez confeccionado el documento será entregado en la fecha prevista como PAC3.

### **Etapa 4. Entrega – Memoria TFC, Presentación y Resultados**

**Intervalo 13/12/2004 – 10/01/2005**

En esta etapa se concluye el desarrollo de la herramienta y se confecciona la memoria de TFC con las notas y documentos realizados durante las etapas anteriores actualizados con las posibles variaciones que se hayan llevado a cabo. Se prepara también la presentación de la aplicación y los resultados de salida obtenidos.

Se confecciona un archivo que incluye la estructura de directorios de:

- **HVM:** Programas fuentes de la aplicación (java) y compilados (class)
- **doc:** Documentación generada por javadoc
- **images:** Recursos gráficos del programa
- **models:** Archivos con datos de entrada
- **anim:** Archivos con los datos de salida

Se confecciona un documento:

- **Memoria TFC**

En este documento se expone con detalle todos los procesos realizados en el diseño e implementación de la aplicación, en base a las notas y los documentos realizados durante las etapas anteriores, actualizándolos con las últimas incorporaciones producidas. Incluye también todo el código fuente de la aplicación, detalles de instalación y compilación del código, relación de librerías empleadas, etc., si como toda la documentación generada por la utilidad javadoc sobre los ficheros fuentes de la aplicación.

Una vez confeccionado el documento y los archivos fuentes y binarios, serán entregados en la fecha prevista como ENTREGA del TFC.

MATEO SORROCHE MONTELLANO

# **DOCUMENTO 2**

# **MANUAL DE INSTALACION**

## INSTALACION DEL PROGRAMA

El programa usa la siguiente estructura de directorios:

### **.HVM\**

Directorio raiz

### **.HVM\HVM\**

Directorio que contiene los programa java y las clases.

### **.HVM\anim\**

Directorio que contiene las secuencias de animaciones

### **.HVM\docs\**

Directorio que contiene la estructura de ficheros de documentación javadoc

### **.HVM\images**

Directorio que contiene los recursos gráficos usados por la aplicación

### **.HVM\models**

Directorio que contiene los modelos de molécula empleados

## EJECUTAR EL PROGRAMA

Para ejecutar el programa, desde el directorio raiz **.HVM\** se usa la siguiente instrucción.

```
C:\jdk1.3.1_01\bin\java -cp .;HVM HVM/HVM
```

o

```
java -cp .;HVM HVM/HVM
```

**IMPORTANTE, DESDE EL DIRECTORIO RAIZ .HVM\**

# **DOCUMENTO 3**

## **MANUAL AYUDA RAPIDA**

HVM - Herramienta Visualizacion Molecular OpenGL

Universitat Oberta de Catalunya

Enginyeria Tecnica en Informatica de Sistemes

TFC - Informatica Grafica 2004-2005

Director del TFC: Dr. Pere Pau Vazquez Alcocer (pvazqueza@uoc.edu)

Autor del TFC: Mateo Sorroche Montellano (msorroche@uoc.edu)

Version 1.0 (10/01/2005)

Manual de Ayuda Rapida:

1.- Descripcion de las opciones del menu

\*\*\*\*\*

1.1- Menu Archivo

-----

-- Nuevo Ctrl+N:

Esta opcion nos permitiria reinicializar la estructura base de modelo de molecula y editar los distintos elementos que la componen (atomos, enlaces, etc) asi como sus propiedades. En esta version esta opcion no esta implementada.

-- Abrir Ctrl+A:

Esta opción nos despliega un cuadro de dialogo de archivos a partir del cual seleccionar un nuevo modelo de molecula en formato XYZ que sera cargado por la aplicacion

-- Cerrar Ctrl+C:

Esta opción cierra el modelo de molecula actual y libera los recursos reservados por el mismo. La aplicacion queda a la espera de la carga de un nuevo modelo de molecula.

-- Guardar Ctrl+G:

Esta opción nos permite guardar el modelo de molecula actual en cualquier dispositivo de almacenamiento reconocido por el sistema. Esta opción no esta implementada en la version actual.

-- Grabar animacion en... Ctrl+S:

Esta opción nos permite establecer el directorio y nombre y nombre raiz de los archivos donde se grabaran los diferentes fotogramas que componen la animacion. El nombre raiz no debe contener extension, ya que la proporcionara la aplicacion en el momento de la grabacion.

-- Importar Ctrl+I:

Esta opción nos permite importar modelos de moleculas desde diferentes formatos. En la actualidad la aplicacion solo soporta el formato XMOL XYZ por lo que esta opción no esta habilitada.

-- Exportar Ctrl+E:

Esta opción nos permite exportar modelos de molecular a diferentes formatos. En la actualidad la aplicacion solo soporta el formato XMOL XYZ de forma nativa, por lo que esta opción no esta habilitada.

-- Salir Ctrl+X:

Esta opción nos permite abandonar la aplicación y salir al sistema operativo de forma ordenada. Para evitar la salida accidental, la aplicación presenta un cuadro de diálogo modal en el que se nos solicita la confirmación de la intención de abandonar la aplicación antes de proceder.

## 1.2- Menu Preferencias

-----

### -- Rejilla (on/off):

Esta opción permite la habilitación o deshabilitación (ON/OFF) de la representación de la rejilla de orientación del panel de navegación. La rejilla de orientación es una malla de 20 x 20 de color gris, que nos permite emplazar y orientar gráficamente la molécula en el espacio tridimensional. Por defecto esta opción está habilitada.

### -- Ejes dirección (on/off):

Esta opción permite la habilitación o deshabilitación (ON/OFF) de la representación de los ejes de coordenadas X, Y, Z. Los ejes de coordenadas X, Y, Z son tres segmentos de color amarillo ortogonales entre sí, dos de los cuales están situados en el mismo plano que la rejilla y paralelos a sus líneas. Al igual que la rejilla, nos permite la orientación gráfica de la molécula en el espacio tridimensional. Por defecto esta opción está habilitada.

### -- Átomos (on/off):

Esta opción permite la habilitación o deshabilitación (ON/OFF) de la representación de los átomos que componen la molécula. Los átomos de la molécula son esferas del color y tamaño asignado al elemento que representan en una posición concreta en el espacio. En determinadas circunstancias puede ser deseable la ocultación de dichos átomos a fin de apreciar con mayor claridad la estructura de los enlaces, por ejemplo. Por defecto esta opción está habilitada.

### -- Enlaces (on/off):



Esta opción permite la habilitación o deshabilitación (ON/OFF) de la representación de los enlaces entre átomos que componen la molécula. Los enlaces entre átomos están representados por cilindros, que parten de un átomo a su enlazado, con color y tamaño asignado arbitrariamente. En determinadas circunstancias puede ser deseable la ocultación de dichos enlaces a fin de apreciar con mayor claridad la estructura de los átomos. Por defecto esta opción está habilitada.

-- Eje Rotación (on/off):

Esta opción permite la habilitación o deshabilitación (ON/OFF) de la representación del eje de rotación. El eje de rotación es el eje definido en la parte inferior del panel de Información General a través de un vector de rotación y un punto de origen o aplicación del mismo. El vector de rotación y la posición de origen se definen a través de sus coordenadas X, Y y Z. En determinadas circunstancias puede ser deseable la ocultación de dicho eje a fin de apreciar otros aspectos de la molécula. Por defecto esta opción está habilitada.

-- Extensión Eje Rotación (on/off):

Esta opción permite la habilitación o deshabilitación (ON/OFF) de la representación de la extensión del eje de rotación. La extensión del eje de rotación es la prolongación del mismo, desde el punto de aplicación hasta el punto de situación contraria al definido por el vector de rotación. Por ejemplo, para el vector de rotación (1.0, 1.0, 1.0) y el punto de origen (0.0, 0.0, 0.0) representaríamos el vector que va desde (0.0, 0.0, 0.0) hasta (1.0, 1.0, 1.0) como eje de rotación y el vector que va desde (0.0, 0.0, 0.0) hasta (-1.0, -1.0, -1.0) como extensión del eje de rotación. En determinadas circunstancias puede resultar más clarificador la representación extendida del eje de rotación para apreciar mejor la rotación de la molécula sobre el mismo. Por defecto esta opción está habilitada.

-- Reiniciar Ctrl+R:

Esta opción permite devolver al sistema a sus condiciones de partida en la visualización de la molécula, esto es: posición, tamaño, color y representación de los elementos que la componen. Después de un periodo de navegación sobre la molécula puede ser deseable volver a sus condiciones de partida para probar otras rutas. No

reinicializa el vector de rotacion, ni el angulo de giro aplicado a la molecula sobre el mismo.

-- Color Avance Ctrl+Q:

Esta opción nos permite seleccionar un color de fondo de una lista reducida para el panel de navegación sobre el cual se representara la escena de la molécula. Debido a los diversos colores que pueden adoptar los átomos en función del elemento al que representan, algunas combinaciones de colores no obtienen el suficiente contraste con la molécula que permita una cómoda exploración de la misma. Actualmente hay disponibles 7 colores predefinidos mas uno definido por el usuario.

-- Color Retroceso Ctrl+May+Q:

Esta opción, de forma análoga al caso anterior, nos permite la substitución de color de fondo actual por el color anterior de la lista.

-- Color Definido por el Usuario Ctrl+U:

Esta opcion permite la definicion de un color arbitrario de fondo para el panel de visualizacion por parte del usuario. Para ello se despliega un dialogo de seleccion de color donde el usuario podra escoger, dentro de la gama soportada po el sistema, el color que mejor se ajuste a sus necesidades. Dependiendo de los colores asignados a atomos y enlaces puede ser conveniente la posibilidad de definir un nuevo color de fondo que mejore el contraste entre los elementos y facilite su analisis. En caso de cancelar o no validar la seleccion el sistema mantiene el ultimo color definido.

-- Zoom Acercar Ctrl+Z:

Esta opcion permite disminuir la distancia del observador en una unidad y por tanto acercar la escena al mismo consiguiendo un efecto de aumento de zoom sobre ella. Inicialmente la distancia del observador a la escena es de 50 unidades.

-- Zoom Alejar Ctrl+May+Z:

Esta opcion permite aumentar la distancia del observador en una unidad y por tanto alejar la escena al mismo consiguiendo un efecto de disminucion de zoom sobre ella. Inicialmente la distancia del observador a la escena es de 50 unidades.

-- Autocentrado Molecula (on/off):

Esta opción permite la habilitación o deshabilitación (ON/OFF) de la situación del origen de coordenadas en el centro geométrico de la molécula. En determinadas circunstancias puede ser interesante la representación de la molécula centrada en el origen de coordenadas en vez de representada en su posición original, sobre todo para apreciar simetrías y producir movimientos o rotaciones respecto a determinados ejes. Por defecto esta opción está deshabilitada.

-- Animación Continua (on/off):

Esta opción permite la habilitación o deshabilitación (ON/OFF) de la característica de animación continua en el proceso de reproducción. En determinadas circunstancias puede ser deseable la reproducción continua de la rotación programada, esto es, no detenerla al cumplir un ciclo de rotación sino que se realicen indefinidamente a fin de poder apreciar determinados detalles de la misma. Por defecto esta opción está deshabilitada.

-- Sobrescribir grabaciones anteriores (on/off):

Esta opción permite la habilitación o deshabilitación (ON/OFF) de la característica de sobrescribir grabaciones anteriores sin diálogo de confirmación. Durante el proceso de grabación se suelen realizar numerosos ajustes sobre la molécula (cambio de color, tamaño, representación de ejes, etc) que originan numerosas secuencias de grabación no definitivas. Cuando la aplicación detecta la existencia de un fichero (el primero de la secuencia) presenta un diálogo advirtiendo de la posibilidad de sobrescribir un fichero válido y pidiendo confirmación para hacerlo. Esto, que en principio es una ventaja puesto que elimina la posibilidad de sobrescribir accidentalmente un fichero de imagen válido, puede ser un proceso tedioso en esta etapa de ajuste. Esta opción permite obviar el proceso de confirmación y proceder a la sobreescritura directamente, a riesgo del usuario. Esta opción por defecto está deshabilitada.

-- Sincronizar grabación con reproducción (on/off):

Esta opción permite la habilitación o deshabilitación (ON/OFF) de la característica de sincronizar el inicio de la secuencia de grabación con el inicio de reproducción de la

animacion. Cuando esta opcion esta deshabilitada, el inicio de la secuencia de grabacion se realiza en el momento de la pulsacion del correspondiente control. Si el sistema esta parado o en pausa se realiza una unica grabacion. Si el sistema esta en reproduccion realiza las grabaciones correspondientes hasta que finaliza un ciclo. Con esta caracteristica habilitada, se tranfiere el control del inicio de la secuencia de grabacion al inicio de reproduccion, permitiendo de esta forma grabaciones de secuencias enteras de rotaciones, sin perder ninguna funcionalidad. Esta opcion por defecto esta habilitada.

### 1.3- Menu Ayuda

-----

#### -- Ayuda Aplicacion:

Esta opcion abre una ventana grafica no modal y dependiente de la aplicacion principal, que muestra este manual de ayuda rapida. En este manual se describen las distintas opciones de menu, asi como los distintos componentes y funcionalidades de los paneles que constituyen esta aplicacion.

ATENCION - Este manual puede ser seleccionado en todo o parte y copiado en el portapapeles, y desde alli transferirlo a una aplicacion de edicion de texto u notas desde donde puede ser almacenado o imprimido libremente para facilitar futuras referencias al mismo.

#### -- Acerca De ...:

Esta opcion presenta un panel de dialogo modal con informacion de la aplicacion. Esta informacion es relativa a nombre de la aplicacion, Univesidad donde se ha desarrollado, proyecto y año, director del TFC y autor del mismo. Para continuar con la aplicacion es necesario cerrar este panel.

### 2.- Descripcion de los paneles

\*\*\*\*\*

## 2.1- Panel de Navegacion

-----

El panel de Navegacion esta situado en el lateral izquierdo del panel principal de la aplicacion y ocupa entre un 50 a un 70% de la superficie del mismo. En este panel es donde se realizara la representacion grafica de las moleculas asi como la de sus tranformaciones. Este panel acepta eventos a traves de los dispositivos de entrada raton y teclado cuando posee el foco de trabajo, procesandolos y realizando las transformaciones que se le indican. Estas características, alguna de las cuales tambien estan presentes en la barra de menu de la aplicacion son las siguientes:

Tecla 'a' o 'A':

Activa o desactiva la representacion de los atomos de la molecula.

Tecla 'c':

Establece como color de fondo el siguiente de los preprogramados.

Tecla 'C':

Establece como color de fondo el anterior de los preprogramados.

Tecla 'd' o 'D':

Activa o desactiva la representacion de los ejes de direccion.

Tecla 'e' o 'E':

Activa o desactiva la representacion de los enlaces de la molecula.

Tecla 'g' o 'G':

Activa o desactiva la representacion de la rejilla de orientacion.

Tecla 'j' o 'J':

Activa o desactiva la representacion del eje de rotacion.

Tecla 'k' o 'K':

Activa o desactiva la representacion de la extension del eje de rotacion.

Tecla 'q' o 'Q':

Procede a la salida de la aplicacion previa confirmacion de un cuadro de dialogo modal.

Tecla 'r' o 'R':

Reinicializa la representacion de la molecula con los parametros por defecto.

Tecla 'u' o 'U':

Establece como color de fondo el color definido por el usuario.

Tecla 'z':

Aumenta la distancia de representacion de la molecula al usuario. Zoom -.

Tecla 'Z':

Disminuye la distancia de representacion de la molecula al usuario. Zoom +.

Navegacion sobre la molecula:

Seleccionando con el boton izquierdo del raton y arrastrando la seleccion nos permite la navegacion alrededor de la molecula. Arastrando horizontalmente (eje X) rotamos la molecula de 0 a 360 GRADOS de forma continua sobre el eje Y. Arrastrando verticalmente (eje Y) elevamos o descendemos el plano XZ respecto al punto de origen O de -90 a 90 grados. La combinacion de los dos movimientos nos permite la exploracion total de la molecula desde cualquier direccion.

Seleccion 1 de un elemento:

Seleccionando (un click) con el boton derecho del raton sobre cualquier elemento (atomo o enlace) se procede a su primera seleccion. El sistema representa a dicho elemento con un color rojo y proporciona algunos de sus datos caracteristicos en el panel de informacion. Una seleccion sobre un elemento inexistente deshabilita la existente.

Selección 2 de un elemento:

Seleccionando (un click) con el boton derecho del raton sobre cualquier elemento (atomo o enlace) mientras se mantiene presionada la tecla de control se procede a su segunda seleccion. El sistema representa a dicho elemento con un color rojo magenta y proporciona algunos de sus datos caracteristicos en el panel de informacion. Una seleccion sobre un elemento inexistente deshabilita la existente.

Icono UOC:

Presionando sobre el icono de la UOC (parte inferior del panel de navegacion) presenta el panel 'Acerca De...' del menu de ayuda de la barra de menus.

## 2.2- Panel de Informacion General

-----

El panel de Informacion General esta situado en el lateral derecho del panel principal de la aplicacion, y junto con el panel de Navegacion lo ocupan por entero. En el panel de Informacion General encontramos informacion sobre la molecula, informacion sobre las selecciones sobre sus elementos e informacion y controles sobre el procedimiento de rotacion. Toda esta informacion la encontramos dentro de este panel en tres zona claramente diferenciadas:

Zona de Informacion:

Situada en la parte superior del panel de Informacion General, contiene informacion relativa a la molecula y se diferencia de las otras zonas a traves del color azul de fondo de sus elementos. Entre la informacion que presenta se encuentra el nombre y ruta del archivo que contiene la informacion de la molecula, la linea de comentario de

la estructura de datos de dicho archivo, el numero de atomos y enlaces que la componen y un pequeño histograma de sus elementos, donde para cada uno de ellos se muestra numerica y graficamente su frecuencia de aparicion dentro de la molecula. La representacion grafica se realiza de forma proporcional y relativa a la frecuencia de aparicion de dicho elemento dentro de la composicion de la molecula.

#### Zona de Seleccion:

Situada en la parte central del panel de Informacion General, contiene informacion relativa a los elementos seleccionados y los calculos que entre ellos realiza, y se diferencia de las otras zonas a traves del color rojo de fondo de sus elementos. Entre la informacion que presenta se encuentra: en los controles de seleccion 1 y 2, la informacion relativa al elemento seleccionado, que varia entre si se trata de un atomo (posicion, elemento y situacion) o un enlace (posicion, elemento y situacion de los dos atomos que lo definen). En el control de resultados presenta informacion solo en el caso de seleccionar dos enlaces (angulo que forman entre ellos) o dos atomos (distancia entre ellos y si definen un enlace).

#### Zona de Control reproduccion rotacion:

Situada en la parte inferior del panel de Informacion General, contiene informacion relativa al vector de rotacion y el punto de aplicacion del mismo, asi como la ruta y el nombre de archivo base para la secuencia de grabacion en la reproduccion de la rotacion, y se diferencia de las otras zonas a traves del color verde de fondo de sus elementos. Entre la informacion que presenta se encuentra: coordenadas X, Y, Z del vector de rotacion sobre el cual rotara la molecula, coordenadas X, Y, Z del punto de aplicacion u origen del anterior vector, ruta completa y nombre base de los archivos que se grabaran en el proceso de grabacion de la secuencia de reproduccion de la rotacion de la molecula, ademas de una zona libre destinada a los distintos mensajes de aviso o informacion que proporciona de los distintos procesos que realiza la aplicacion y finalmente una barra de controles que nos permitiran realizar todos los anteriores procesos.

Los controles son los siguiente (de izquierda a derecha):

[ |< ] Posicion inicial:



Establece la posición de la molécula en la posición inicial (corresponde con 0 grados de rotación)

[ < ] Reproducción CW:

Inicia la reproducción en sentido retroceso (sentido agujas de reloj). Si el sistema se encuentra en paro o reproducción la reproducción se realiza hasta la posición inicial o indefinidamente si el sistema se encuentra en animación continua. Si el sistema se encuentra en pausa, la reproducción solo se realiza en un paso (reproducción paso a paso).

[ || ] Paro o [ || ] Pausa:

Si el sistema se encuentra en reproducción o en paro, lo establece en pausa. En pausa la reproducción en cualquier sentido se realiza paso a paso y deteniéndose. Si el sistema se encuentra en pausa lo establece en paro deteniendo todas las actividades.

[ > ] Reproducción CCW:

Inicia la reproducción en sentido avance (sentido contrario agujas de reloj). Si el sistema se encuentra en paro o reproducción la reproducción se realiza hasta la posición final o indefinidamente si el sistema se encuentra en animación continua. Si el sistema se encuentra en pausa, la reproducción solo se realiza en un paso (reproducción paso a paso).

[ >| ] Posición final:

Establece la posición de la molécula en la posición final (corresponde con 360 grados de rotación)

[ O ] Grabación:

Inicia el proceso de grabación de la imagen del panel de navegación con la ruta y nombre definido en el indicador de 'Grabar Animación en...'. Si la característica de 'Sincronizar grabación con reproducción' está habilitada, el sistema sincroniza el inicio del proceso de grabación con el inicio de reproducción de forma que puede grabar una secuencia completa de rotación. Si el sistema ya se encontraba en ese momento en

reproduccion, comienza inmediatamente al grabar hasta el final de la secuencia, pero no la grabara entera, pues logicamente la secuencia estaba ya iniciada cuando se habilito esta opcion. En caso contrario, es decir, la característica de 'Sincronizar grabacion con reproduccion' este deshabilitada, el comportamiento variara en funcion de si el sistema se encuentra en reproduccion o en paro o pausa. En el primer caso, realizara grabaciones hasta la finalizacion de la secuencia de rotacion. En el segundo (paro o pausa) realizara la grabacion de un unico fotograma.

Cuando el sistema esta en proceso de grabacion, el control cambia a color rojo. Una segunda pulsacion en ese estado finaliza el proceso de grabacion y retorna a su estado normal.

El formato de los archivos grabados es de bitmap o bmp, y el nombre esta formado por el nombre programado añadiendole el sufijo XXXXX.bmp, donde XXXXX corresponde con la posicion de rotacion, en centesimas de grado, en que se encuentra la molecula en ese momento. Todas las secuencias de grabacion y el nombre de los archivos grabados son mostrados en la zona de avisos sobre esta barra de controles.

Para mas informacion dirigirse a la memoria del TFC.

UOC-ETIS-TFC-IG-MSM-050110

# **DOCUMENTO 4**

# **MANUAL DE USUARIO**

# ETIS TFC – GRAFICOS POR COMPUTADOR

**TITULO**

**DISEÑO DE UNA HERRAMIENTA PARA LA VISUALIZACION DE MOLECULAS**

## MANUAL DE USUARIO

**MATEO SORROCHE MONTELLANO**

**INDICE****INTRODUCCION****DESCRIPCION DEL ENTORNO****BARRA DE MENUS****Menú Archivo**

- Nuevo
- Abrir
- Cerrar
- Guardar
- Guardar como
- Importar
- Exportar
- Salir

**Menú Preferencias**

- Rejilla
- Ejes Dirección
- Átomos
- Enlaces
- Ejes Rotación
- Extensión Eje Rotación
- Reinicializar
- Color siguiente
- Color anterior
- Color Definido por el Usuario
- Zoom Acercar
- Zoom Alejar
- Autocentrado Molécula
- Animación continua
- Sobrescribir grabaciones animación
- Sincronizar grabación con reproducción

**Menú Ayuda**

- Ayuda aplicación
- Acerca De...

**PANEL NAVEGACION****PANEL INFORMACION GENERAL**

**ZONA DE INFORMACION  
ZONA DE SELECCIÓN  
ZONA DE REPRODUCCION Y GRABACION**

**DESCRIPCION DE LAS OPERACIONES  
CARGA DE MODELO DE MOLECULA  
NAVEGACION SOBRE EL MODELO  
CARACTERISTICAS NAVEGACION  
SELECCIÓN ELEMENTOS  
REPRODUCCION ROTACIONES  
GRABACION SECUENCIAS ROTACION  
GENERACION FILS DE LA SECUENCIA  
AYUDA APLICACION**

## INTRODUCCION

El presente documento corresponde con el manual de usuario de la versión 1.0 de la aplicación “HVM HERRAMIENTA VISUALIZACION MOLECULAR OPENGL”, (en lo sucesivo HVM).

La aplicación HVM permite la visualización e inspección de moléculas, de gran utilidad en áreas como la química, farmacia, docencia, etc, admitiendo definiciones de moléculas a través de un fichero de entrada (una variación simplificada del formato Xmol XYZ), construyendo el modelo de la misma y permitiendo la navegación alrededor de ella, así como la selección e identificación de sus elementos y el calculo de distancias y ángulos de torsión entre los mismos.

Permite también la definición de un eje sobre el cual generar una rotación del modelo y grabar una secuencia de salida.

## DESCRIPCION DEL ENTORNO

Una vez iniciada la aplicación aparece en la pantalla del monitor la ventana principal de la misma, y de forma inmediata un dialogo de archivos donde se nos invita a seleccionar un fichero de modelo de moléculas con la extensión XYZ. (Figura 1)

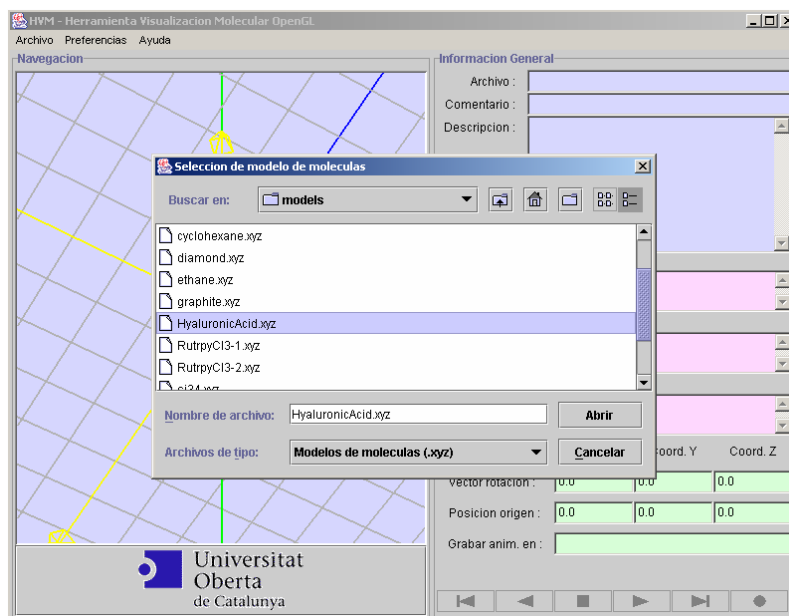


Figura 1

El dialogo nos permite navegar entre los directorios y ficheros al alcance de nuestro equipo, ya sea discos locales o unidades de red. Una vez seleccionado, al abrirlo este

se cargara en el sistema y nos ofrecerá una representación grafica del mismo, en formato 3D con la que podremos interactuar. (Figura 2)

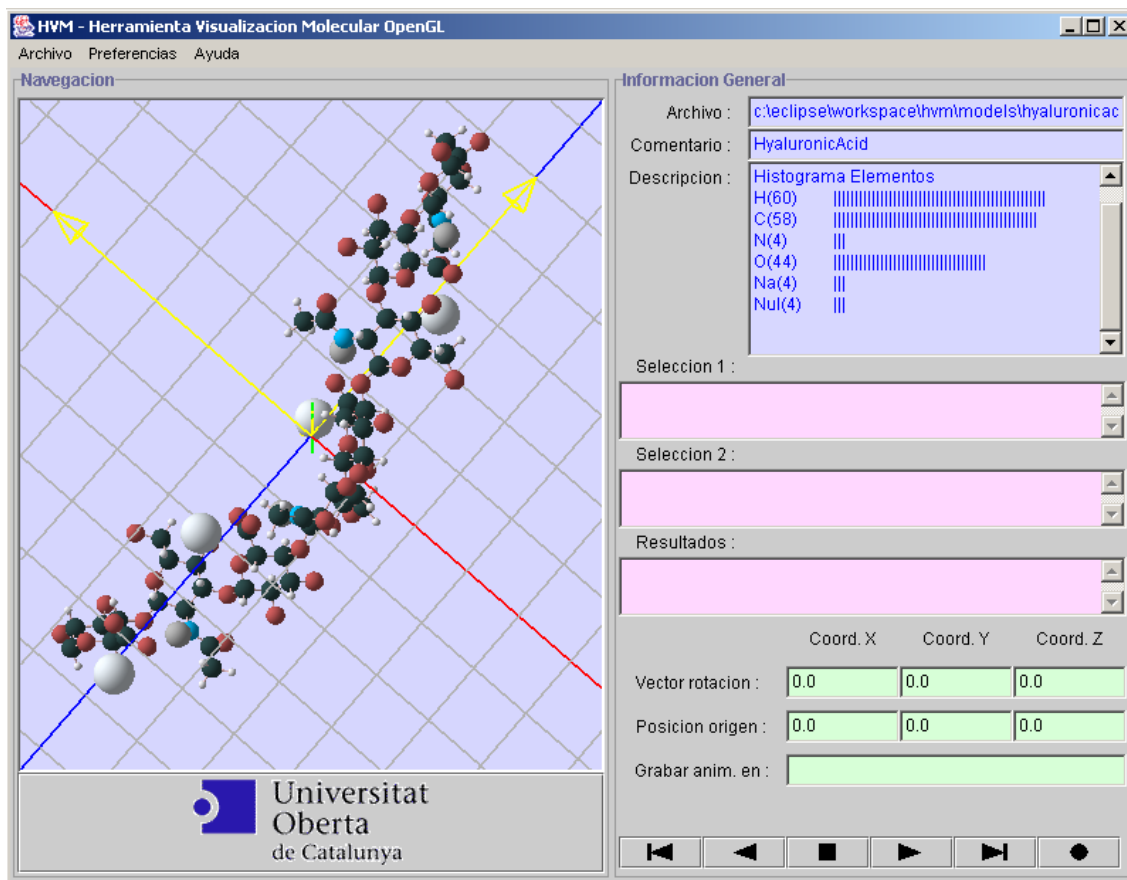


Figura 2

Dentro de la ventana principal de la aplicación podremos diferenciar tres zonas que cubren aspectos bien diferenciados: el área de la barra de menús, el panel de navegación y el panel de información general, sobre las cuales se amplia en los siguientes apartados.

## BARRA DE MENUS

En la parte superior de la pantalla, bajo la barra de título se encuentra la barra de menús de la aplicación.

De apariencia y funcionamiento estándar en las aplicaciones Windows, contiene los siguientes menús, a los cuales se pueden acceder en cualquier momento.

En algunos casos (sobre todo en las opciones de preferencias), es posible acceder a la funcionalidad descrita en el submenú presionando una combinación de una o varias



teclas. En dicho supuesto, en la explicación de la opción en concreto se indicara que combinación de tecla o teclas lo permite.

### Menú Archivo

Este menú contiene los submenús relacionados con la gestión de archivos y salida al sistema operativo (Figura 3):

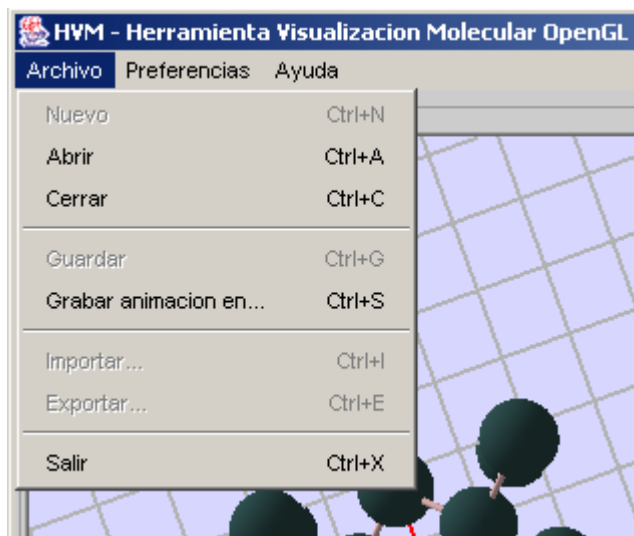


Figura 3

- **Nuevo:** Esta opción permite la creación de un nuevo archivo de modelo de moléculas. Esta opción no está totalmente implementada y está deshabilitada. En una posterior fase de este proyecto se planteaba la creación de un editor gráfico de moléculas en la cual esta opción creaba la estructura inicial a partir de la cual construir la molécula.
- **Abrir:** Esta opción permite la navegación por un sistema de directorios, ya sea de forma local o en unidades de red, para la selección de un fichero en formato XYZ con la definición de la molécula. Una vez seleccionado el sistema realiza una serie de comprobaciones destinadas a verificar la integridad de los datos, y si son correctas genera una estructura de datos correspondiente a la molécula. Dentro de los datos comprobados se encuentra la validez del archivo y la coherencia entre los números de átomos descritos y los átomos que realmente contiene el fichero.
- **Cerrar:** Cierra el modelo de molécula actual, libera recursos y reinicializa el sistema, dejándolo en condiciones de seleccionar un nuevo modelo.

- **Guardar:** Guarda la molécula en disco, manteniendo el nombre y ubicación actual. Esta opción no está totalmente implementada y está deshabilitada. Permitiría guardar las modificaciones realizadas con el editor de moléculas,
- **Grabar animación en...:** Esta opción nos permite establecer el directorio y nombre y nombre raíz de los archivos donde se grabarán los diferentes fotogramas que componen la animación. El nombre raíz no debe contener extensión, ya que la proporcionará la aplicación en el momento de la grabación.
- **Importar:** Esta opción permite la adquisición de disco y la generación de modelos de moléculas usando como base otros formatos de modelos de moléculas diferentes. Esta opción no está totalmente implementada y se encuentra deshabilitada.
- **Exportar:** Esta opción permite la exportación de la estructura de datos de la molécula actual a otro formato diferente y grabarla en disco. Se usa para el intercambio de modelos de moléculas entre sistemas con distintos formatos. Esta opción no está totalmente implementada y se encuentra deshabilitada.
- **Salir:** Esta opción nos permite cerrar el modelo de molécula actual, liberar recursos y abandonar la aplicación retornando el control al sistema operativo.

### Menú Preferencias

Este menú contiene los submenús de preferencias, a través de los cuales puede modificarse el aspecto y comportamiento de la aplicación (Figura 4):

- **Rejilla:** Esta opción permite la habilitación o deshabilitación (ON/OFF) de la representación de la rejilla de orientación del panel de navegación. La rejilla de orientación es una malla de 20 x 20 de color gris, que nos permite emplazar y orientar gráficamente la molécula en el espacio tridimensional. Presionando la tecla 'G' (o 'g') (con el foco de la aplicación en el panel de navegación) habilitaremos o deshabilitaremos la representación de la rejilla a cada pulsación.

- Ejes Direccion:** Esta opción permite la habilitación o deshabilitación (ON/OFF) de la representación de los ejes de coordenadas X, Y, Z. Los ejes de coordenadas X, Y, Z son tres segmentos de color amarillo ortogonales entre si, dos de los cuales están situados en el mismo plano que la rejilla y paralelos a sus líneas. Al igual que la rejilla, nos permite la orientación grafica de la molécula en el espacio tridimensional. Presionando la tecla 'D' o 'd' con el foco de la aplicación en el panel de navegación, habilitaremos o deshabilitaremos la representación de los ejes a cada pulsación.

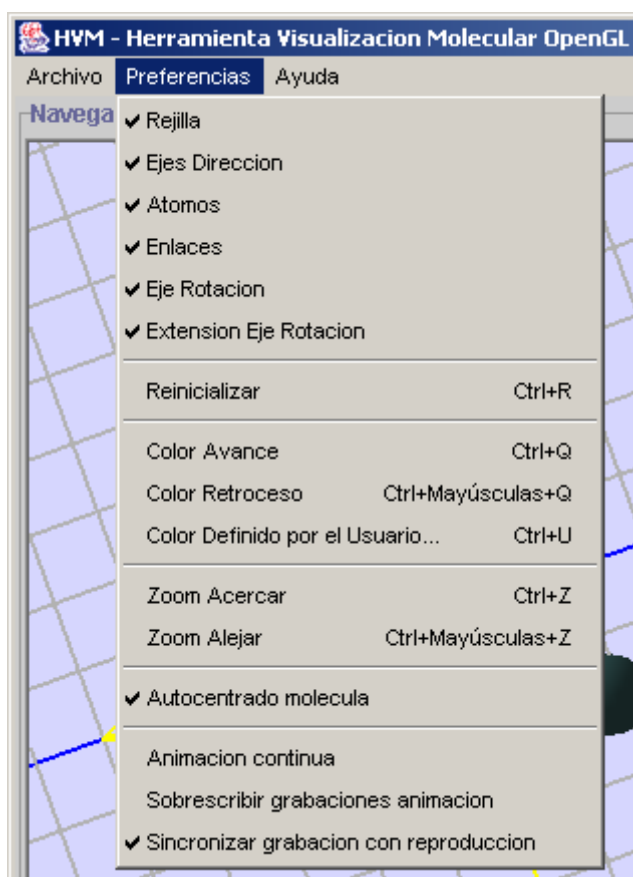


Figura 4.

- Átomos:** Esta opción permite la habilitación o deshabilitación (ON/OFF) de la representación de los átomos que componen la molécula. Los átomos de la molécula son esferas del color y tamaño asignado al elemento que representan en una posición concreta en el espacio. En determinadas circunstancias puede ser deseable la ocultación de dichos átomos a fin de apreciar con mayor claridad la estructura de los enlaces, por ejemplo. Presionando la tecla 'A' o 'a' con el foco de

la aplicaci3n en el panel de navegaci3n, habilitaremos o deshabilitaremos la representaci3n de los 3tomos a cada pulsaci3n.

- **Enlaces:** Esta opci3n permite la habilitaci3n o deshabilitaci3n (ON/OFF) de la representaci3n de los enlaces entre 3tomos que componen la mol3cula. Los enlaces entre 3tomos est3n representados por cilindros, que parten de un 3tomo a su enlazado, con color y tama1o asignado arbitrariamente. En determinadas circunstancias puede ser deseable la ocultaci3n de dichos enlaces a fin de apreciar con mayor claridad la estructura de los 3tomos. Presionando la tecla 'E' o 'e' con el foco de la aplicaci3n en el panel de navegaci3n, habilitaremos o deshabilitaremos la representaci3n de los enlaces a cada pulsaci3n.
- **Eje Rotaci3n:** Esta opci3n permite la habilitaci3n o deshabilitaci3n (ON/OFF) de la representaci3n del eje de rotaci3n. El eje de rotaci3n es el eje definido en la parte inferior del panel de Informaci3n General a trav3s de un vector de rotaci3n y un punto de origen o aplicaci3n del mismo. El vector de rotaci3n y la posici3n de origen se definen a trav3s de sus coordenadas X, Y y Z. En determinadas circunstancias puede ser deseable la ocultaci3n de dicho eje a fin de apreciar otros aspectos de la mol3cula. Por defecto esta opci3n est3 habilitada. Presionando la tecla 'J' o 'j' con el foco de la aplicaci3n en el panel de navegaci3n, habilitaremos o deshabilitaremos la representaci3n del eje de rotaci3n a cada pulsaci3n.
- **Extensi3n Eje Rotaci3n:** Esta opci3n permite la habilitaci3n o deshabilitaci3n (ON/OFF) de la representaci3n de la extensi3n del eje de rotaci3n. La extensi3n del eje de rotaci3n es la prolongaci3n del mismo, desde el punto de aplicaci3n hasta el punto de situaci3n contraria al definido por el vector de rotaci3n. Por ejemplo, para el vector de rotaci3n (1.0, 1.0, 1.0) y el punto de origen (0.0, 0.0, 0.0) representar3amos el vector que va desde (0.0, 0.0, 0.0) hasta (1.0, 1.0, 1.0) como eje de rotaci3n y el vector que va desde (0.0, 0.0, 0.0) hasta (-1.0, -1.0, -1.0) como extensi3n del eje de rotaci3n. En determinadas circunstancias puede resultar m3s clarificador la representaci3n extendida del eje de rotaci3n para apreciar mejor la rotaci3n de la mol3cula sobre el mismo. Por defecto esta opci3n est3 habilitada.

- **Reinicializar:** Esta opción permite devolver al sistema a sus condiciones de partida en la visualización de la molécula, esto es: posición, tamaño, color y representación de los elementos que la componen. Después de un periodo de navegación sobre la molécula puede ser deseable volver a sus condiciones de partida para probar otras rutas. Presionando la tecla 'R' o 'r' estableceremos el sistema a sus condiciones iniciales de representación.
- **Color siguiente:** Esta opción nos permite seleccionar un color de fondo de una lista reducida para el panel de navegación sobre el cual se representara la escena de la molécula. Debido a los diversos colores que pueden adoptar los átomos en función del elemento al que representan, algunas combinaciones de colores no obtienen el suficiente contraste con la molécula que permita una cómoda exploración de la misma, Presionando la tecla 'C' sustituiremos el color de fondo actual por el próximo de la lista. Actualmente hay disponibles 7 de ellos.
- **Color anterior:** Esta opción, de forma análoga al caso anterior, nos permite la sustitución de color de fondo actual por el color anterior de la lista. Presionando la tecla 'c' sustituiremos el color de fondo actual por el anterior de la lista,
- **Color Definido por el Usuario:** Esta opción permite la definición de un color arbitrario de fondo para el panel de visualización por parte del usuario. Para ello se despliega un dialogo de selección de color donde el usuario podrá escoger, dentro de la gama soportada por el sistema, el color que mejor se ajuste a sus necesidades. Dependiendo de los colores asignados a átomos y enlaces puede ser conveniente la posibilidad de definir un nuevo color de fondo que mejore el contraste entre los elementos y facilite su análisis. En caso de cancelar o no validar la selección el sistema mantiene el ultimo color definido.
- **Acercar:** Esta opción nos permite acercar el sistema a la posición del observador, y así poder apreciar con mayor detalle las características del mismo. Presionando la tecla 'Z' acercaremos a cada pulsación un poco mas el sistema al observador.

- **Alejar:** Esta opción nos permite alejar el sistema de la posición del observador, y así poder apreciar en conjunto las características del mismo. Presionando la tecla 'z' alejaremos a cada pulsación un poco mas el sistema del observador.
- **Autocentrado Molécula:** Esta opción permite la habilitación o deshabilitación (ON/OFF) de la situación del origen de coordenadas en el centro geométrico de la molécula. En determinadas circunstancias puede ser interesante la representación de la molécula centrada en el origen de coordenadas en vez de representada en su posición original, sobre todo para apreciar simetrías y producir movimientos o rotaciones respecto a determinados ejes. Por defecto esta opción esta deshabilitada.
- **Animación Continua:** Esta opción permite la habilitación o deshabilitación (ON/OFF) de la característica de animación continua en el proceso de reproducción. En determinadas circunstancias puede ser deseable la reproducción continua de la rotación programada, esto es, no detenerla la cumplir un ciclo de rotación sino que se realicen indefinidamente a fin de poder apreciar determinados detalles de la misma. Por defecto esta opción esta deshabilitada.
- **Sobrescribir grabaciones anteriores:** Esta opción permite la habilitación o deshabilitación (ON/OFF) de la característica de sobrescribir grabaciones anteriores sin dialogo de confirmación. Durante el proceso de grabación se suelen realizar numerosos ajustes sobre la molécula (cambio de color, tamaño, representación de ejes, etc) que originan numerosas secuencias de grabación no definitivas. Cuando la aplicación detecta la existencia de un fichero (el primero de la secuencia) presenta un dialogo advirtiendole de la posibilidad de sobrescribir un fichero valido y pidiendo confirmación para hacerlo. Esto, que en principio es una ventaja puesto que elimina la posibilidad de sobrescribir accidentalmente un fichero de imagen valido, puede ser un proceso tedioso en esta etapa de ajuste. Esta opción permite obviar el proceso de confirmación y procede a la sobre escritura directamente, a riesgo del usuario. Esta opción por defecto esta deshabilitada.

- Sincronizar grabación con reproducción:** Esta opción permite la habilitación o deshabilitación (ON/OFF) de la característica de sincronizar el inicio de la secuencia de grabación con el inicio de reproducción de la animación. Cuando esta opción está deshabilitada, el inicio de la secuencia de grabación se realiza en el momento de la pulsación del correspondiente control. Si el sistema está parado o en pausa se realiza una única grabación. Si el sistema está en reproducción realiza las grabaciones correspondientes hasta que finaliza un ciclo. Con esta característica habilitada, se transfiere el control del inicio de la secuencia de grabación al inicio de reproducción, permitiendo de esta forma grabaciones de secuencias enteras de rotaciones, sin perder ninguna funcionalidad. Esta opción por defecto está habilitada.

### Menú Ayuda

Este menú da acceso a un panel de ayuda al usuario, en el que aparece de forma sucinta algunas de las explicaciones proporcionadas en este manual, en especial a cada una de las opciones que contiene la barra de menús y sus teclas de acceso rápido. Contiene también información del autor de proyecto (Figura 5).

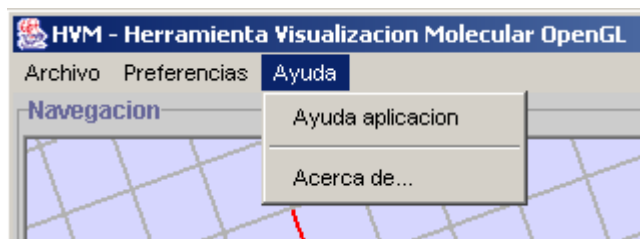


Figura 5.

- Ayuda Aplicación:** Esta opción abre una ventana gráfica no modal y dependiente de la aplicación principal, que muestra este manual de ayuda rápida. En este manual se describen las distintas opciones de menú, así como los distintos componentes y funcionalidades de los paneles que constituyen esta aplicación.

ATENCIÓN - Este manual puede ser seleccionado en todo o parte y copiado en el portapapeles, y desde allí transferirlo a una aplicación de edición de texto u notas desde donde puede ser almacenado o impreso libremente para facilitar futuras referencias al mismo.

- **Acerca De ...:** Esta opción presenta un panel de dialogo modal con información de la aplicación. Esta información es relativa a nombre de la aplicación, Universidad donde se ha desarrollado, proyecto y año, director del TFC y autor del mismo. Para continuar con la aplicación es necesario cerrar este panel.

## PANEL DE NAVEGACION

El panel de navegación es el panel mas espectacular de la aplicación. Situado en el lateral izquierdo de la ventana de la aplicación, ocupa el 70% de la misma. Sobre su superficie se representa la molécula y su entorno (Figura 6).

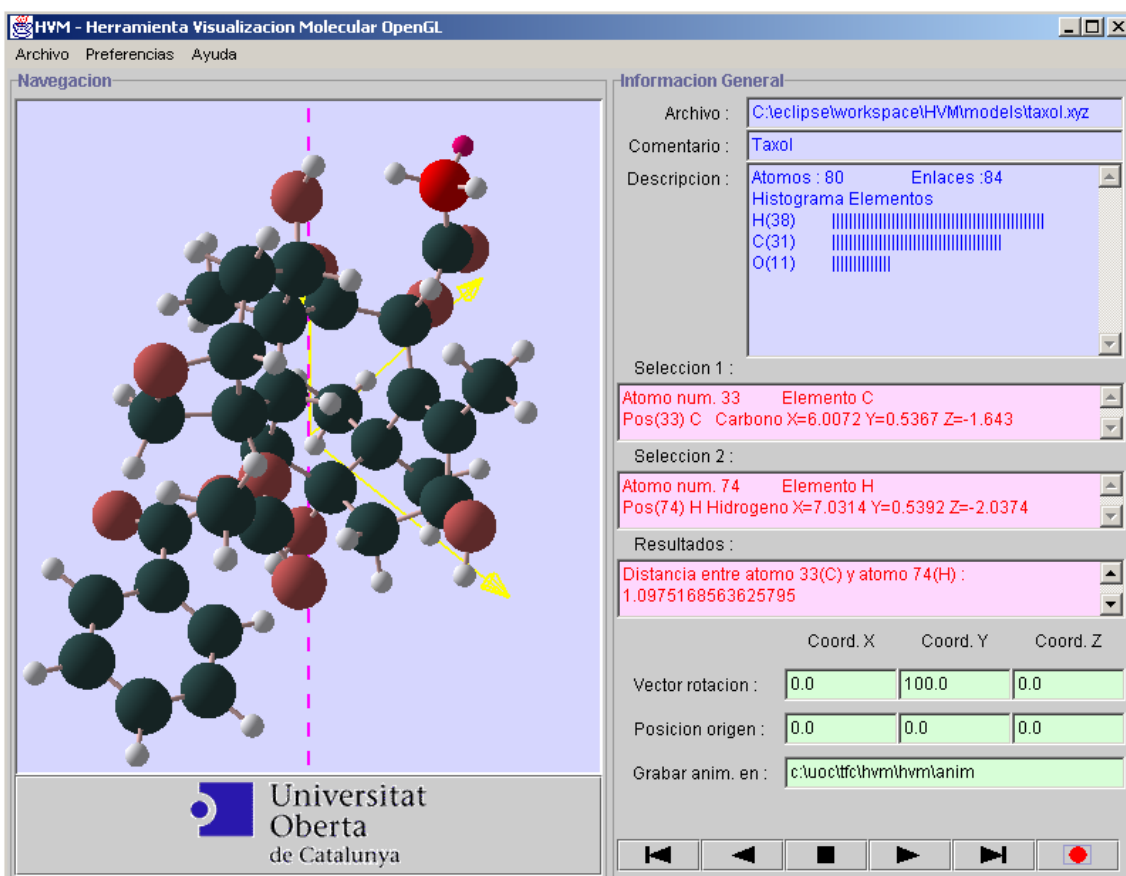


Figura 6

Podemos interactuar en tiempo real con el panel de navegación (las prestaciones de este tiempo real dependerán de las prestaciones del equipo donde se desarrolle y del tamaño de la molécula a representar) a través de actuaciones con el ratón y de las opciones de menú descritas anteriormente.



Arrastrando con el botón izquierdo de ratón sobre la superficie del panel de navegación en sentido vertical modificaremos la elevación del plano XZ ofreciendo nuevas perspectivas sobre la misma.

De forma análoga, arrastrando con el botón izquierdo del ratón sobre la superficie del panel de navegación en sentido horizontal rotaremos el modelo respecto al eje Y ofreciendo nuevas perspectivas sobre la misma.

Podemos realizar una selección 1 de un elemento de la molécula (átomo o enlace) haciendo un click con el botón derecho del ratón sobre el elemento en cuestión (átomo o enlace). Una nueva selección sobre otro elemento, desactiva la anterior y activa la nueva. Una selección sobre una zona del panel donde no se encuentre ningún tipo de elemento, desactiva las selecciones curso (tanto 1 como 2). El elemento seleccionado se representa en color rojo, a diferencia de los que no lo están que se representan en su color asignado.

Como veremos en el apartado siguiente, la información relativa a un átomo o enlace seleccionado es mostrada en un área de texto correspondiente a su selección (1) dentro del panel de información general.

También podemos realizar una selección 2 de un elemento de la molécula (átomo o enlace) haciendo un click con el botón derecho del ratón sobre el elemento en cuestión (átomo o enlace) mientras se mantiene presionada simultáneamente la tecla de control 'CTRL'. Una nueva selección sobre otro elemento se activa la anterior y activa la nueva. Una selección sobre una zona del panel donde no se encuentre ningún tipo de elemento, desactiva las selecciones en curso (tanto 1 como 2). El elemento seleccionado se representa en un color magenta, similar al rojo anterior pero con la suficiente diferencia como para percibir cual de los dos se trata, e identificar correctamente el tipo de selección que es ( 1 o 2 ).

Como en el caso anterior, la información relativa a un átomo o enlace seleccionado es mostrada en un área de texto correspondiente a su selección (2) dentro del panel de información general.

## **PANEL INFORMACION GENERAL**

El panel de información general muestra toda la información asociada a la molécula. Esta situado en el lateral derecho de la ventana de la aplicación y cubre aproximadamente un 30% de la misma.

Sobre la misma, podemos apreciar tres zonas diferenciadas tanto por su temática como por los colores de fondo utilizados en su diseño.

## ZONA DE INFORMACION

La primera de esta zonas esta dedicada a la información general de la molécula propiamente dicha, Ocupa el tercio superior del panel de información y se diferencia por el color azulado del fondo de sus componentes (Figura 7).

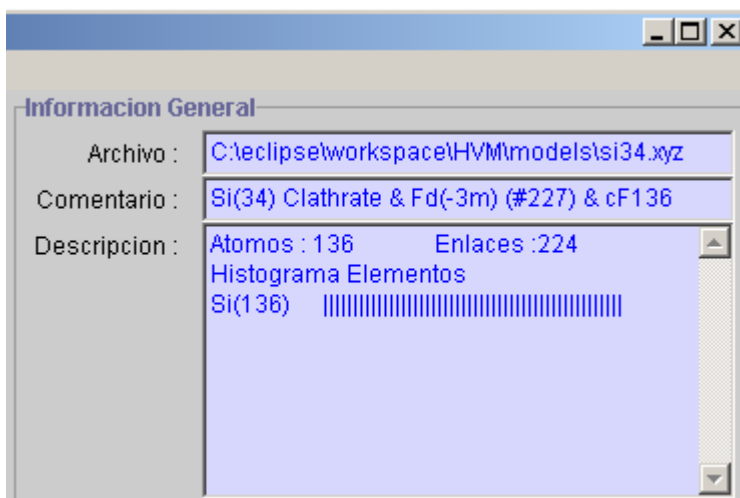


Figura 7

En esta zona se encuentran las áreas de texto de información de:

- **Archivo:** Muestra el nombre y ruta completa del archivo de molécula que se representa. Puede corresponder con una dirección local o de una unidad de red. El archivo ha de tener la extensión XYZ, que hasta el momento es el único formato que reconoce la aplicación. La longitud de la ruta completa del archivo puede exceder la capacidad del control en cuanto a su visualización, o por redimensionamiento de ventana, pero situándose sobre el control y con la teclas de cursor es posible mostrar las partes ocultas.
- **Comentario:** Muestra el comentario completo obtenido de la segunda línea del archivo de molécula. El formato de los ficheros XYZ prevé que la segunda línea del fichero contenga un campo comentario donde se definirá el nombre de la moléculas y/o algunas de sus características. En este campo pues se transcribe el contenido integro, sin aplicar ningún tipo de filtro o comprobación.
- **Descripción:** Muestra alguna información relevante, obtenida del análisis de los datos que definen la molécula, por ejemplo: Numero de átomos de la molécula,, numero de enlaces que se establecen entre esos átomo, histograma de los

elemento que intervienen en la molécula, mostrando de forma numérica y grafica el valor y la proporción de los mismos. Para cada elemento que intervienen en la molécula mostramos su símbolo químico, el numero de átomos que intervienen y la proporción de los mismos respecto al resto de átomos.

## ZONA DE SELECCION

La segunda de dichas zonas muestra información de las selecciones realizadas y de los resultados obtenidos. Ocupa el tercio medio del panel de información general y se diferencia por el color rojizo de fondo de sus componentes (Figura 8).

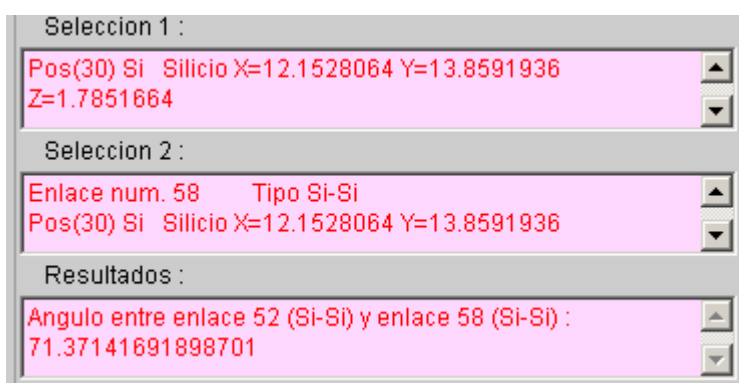


Figura 8

En esta zona se encuentran las áreas de texto de información de:

- **Selección 1:** En esta área de texto se muestra información relativa al elemento seleccionado 1. Esta información varia de si se trata de un átomo o un enlace. Para un átomo, mostramos el numero de átomo, el símbolo del elemento al cual pertenece, la posición de átomo (que coincide con su numero), el elemento al cual pertenece y las posiciones X,Y,Z que ocupa en el espacio. Para un enlace, mostramos en numero de enlace, el tipo de enlace que es (símbolo elemento – símbolo elemento) y para cada uno de los dos enlaces
- **Selección 2:** En esta área de texto se muestra información relativa al elemento seleccionado 2, de forma análoga a la del apartado anterior, al cual me remito para su lectura.
- **Resultados:** En esta área de texto se muestra información relativa a los resultados obtenidos, que varían en función de los elementos seleccionados. Si los elementos seleccionados pertenecen a tipos distintos (átomo y enlace o viceversa), no se presenta ningún tipo de datos, ya que en principio quedaban fuera este tipo de selecciones. Si las selecciones son dos átomos, el sistema presenta la distancia

entre ambos, identificándolos claramente en el panel. Si las selecciones son dos enlaces, el sistema presenta el ángulo que forman entre ellos, identificando cada uno de los enlaces.

## ZONA DE REPRODUCCION Y GRABACION

La tercera de dichas zonas ocupa el tercio inferior del panel de información general y corresponde a la zona del control de la rotación de la imagen (Figura 9).



Figura 9

En esta zona encontramos los siguientes controles:

- **Coord. X:** Coordenada X del vector de rotación y posición origen, Es un valor de tipo doble que es introducido por el usuario como paso previo a la realización del proceso de rotación.
- **Coord Y:** Coordenada Y del vector de rotación y posición origen, Es un valor del tipo doble que es introducido por el usuario como paso previo a la realización del proceso de rotación.
- **Coord Z:** Coordenada Z del vector de rotación y posición origen, Es un valor del tipo doble que es introducido por el usuario como paso previo a la realización del predecesor de rotación.
- **Guardar como:** Campo de texto que muestra el nombre y ruta completa del archivo secuencias que se va a grabar. Puede corresponder con una dirección local o de una unidad de red. La longitud de la ruta completa del archivo puede exceder la capacidad del control en cuanto a su visualización, o por redimensionamiento de ventana, pero situándose sobre el control y con la teclas de cursor es posible mostrar las partes ocultas.
- **Avisos:** Es un campo de texto sobre el cual se mostraran los distintos mensajes y advertencias que proporcionen el sistema durante la ejecución del mismo.

- **Pulsadores de control:** En la parte inferior de esta zona se encuentra la zona de pulsadores. Estos pulsadores nos permiten a través de los comandos que representan un control mas exhaustivo sobre el proceso de rotación de la molécula sobre un eje arbitrario, y su posterior grabación. Entre esto pulsadores se encuentran el de paro, retroceso, avance, retroceso rápido, avance rápido, grabar, etc.

Los controles son los siguiente (de izquierda a derecha):

 Posición inicial:


Establece la posición de la molécula en la posición inicial (corresponde con 0 grados de rotación)

 Reproducción CW:

Inicia la reproducción en sentido retroceso (sentido agujas de reloj). Si el sistema se encuentra en paro o reproducción la reproducción se realiza hasta la posición inicial o indefinidamente si el sistema se encuentra en animación continua. Si el sistema se encuentra en pausa, la reproducción solo se realiza en un paso (reproducción paso a paso).

 Paro o  Pausa:

Si el sistema se encuentra en reproducción o en paro, lo establece en pausa. En pausa la reproducción en cualquier sentido se realiza paso a paso y deteniéndose. Si el sistema se encuentra en pausa lo establece en paro deteniendo todas las actividades.

 Reproducción CCW:

Inicia la reproducción en sentido avance (sentido contrario agujas de reloj). Si el sistema se encuentra en paro o reproducción la reproducción se realiza hasta la posición final o indefinidamente si el sistema se encuentra en animación continua. Si el sistema se encuentra en pausa, la reproducción solo se realiza en un paso (reproducción paso a paso).

 Posición final:

Establece la posición de la molécula en la posición final (corresponde con 360 grados de rotación)

#### ● Grabación:

Inicia el proceso de grabación de la imagen del panel de navegación con la ruta y nombre definido en el indicador de 'Grabar Animación en...'. Si la característica de 'Sincronizar grabación con reproducción' esta habilitada, el sistema sincroniza el inicio del proceso de grabación con el inicio de reproducción de forma que puede grabar una secuencia completa de rotación. Si el sistema ya se encontraba en ese momento en reproducción, comienza inmediatamente al grabar hasta el final de la secuencia, pero no la grabara entera, pues lógicamente la secuencia estaba ya iniciada cuando se habilito esta opción. En caso contrario, es decir, la característica de 'Sincronizar grabación con reproducción' este deshabilitada, el comportamiento variara en función de si el sistema se encuentra en reproducción o en paro o pausa. En el primer caso, realizara grabaciones hasta la finalización de la secuencia de rotación. En el segundo (paro o pausa) realizara la grabación de un único fotograma.

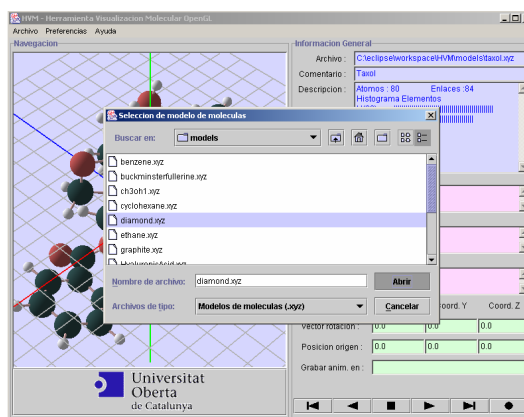
Cuando el sistema esta en proceso de grabación, el control cambia a color rojo. Una segunda pulsación en ese estado finaliza el proceso de grabación y retorna a su estado normal.

El formato de los archivos grabados es de bitmap o bmp, y el nombre esta formado por el nombre programado añadiéndole el sufijo XXXXX.bmp, donde XXXXX corresponde con la posición de rotación, en centésimas de grado, en que se encuentra la molécula en ese momento. Todas las secuencias de grabación y el nombre de los archivos grabados son mostrados en la zona de avisos sobre esta barra de controles.

## DESCRIPCION DE LAS OPERACIONES

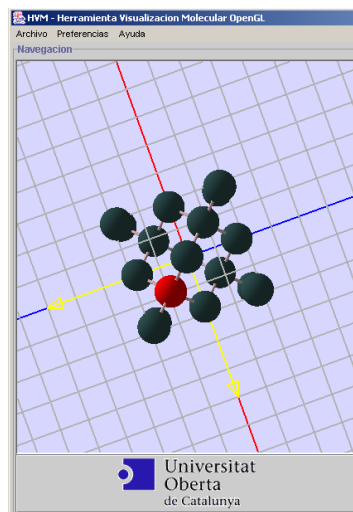
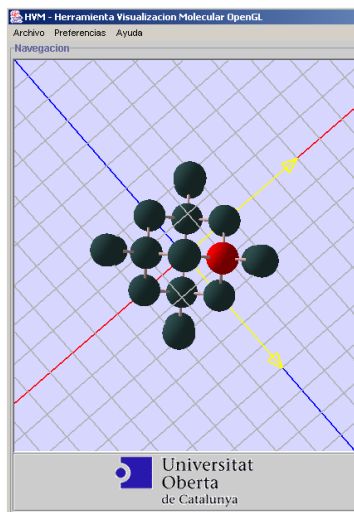
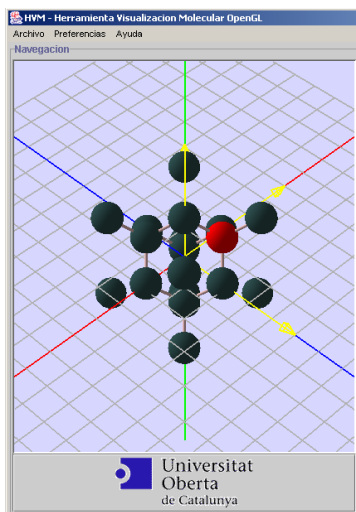
En este apartado describimos las operaciones mas importantes de la aplicación.

### CARGA DE MODELO DE MOLECULA



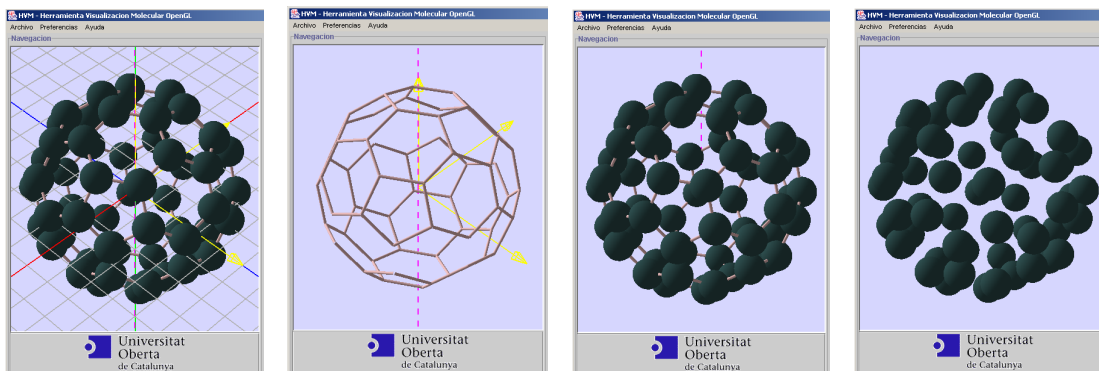
- Desde la barra de menú, seleccionar Archivo, Abrir.
- Aparecerá un dialogo de archivos desde donde se selecciona el directorio y archivo en formato Xmol (extensión XYZ) y presionar 'Abrir'.
- La aplicación carga la estructura, genera el modelo de molécula en el sistema y lo representa.

### NAVEGACION SOBRE EL MODELO

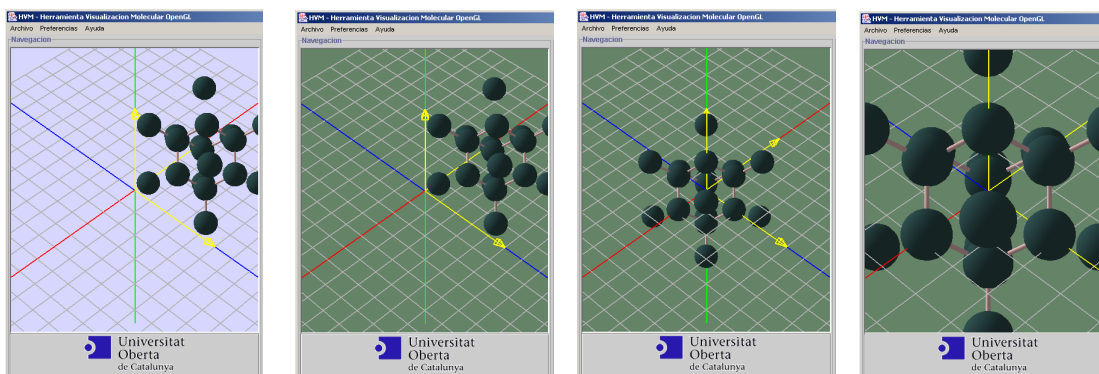


- Pulsar con el botón izquierdo del ratón sobre el panel de navegación.
- Arrastrar en sentido horizontal para rotar el modelo respecto al eje Y.
- Arrastrar en sentido vertical para modificar la elevación del plano XZ
- Desde la barra de menú, seleccionar Preferencias, Reinicializar para reinicializar.

## CARACTERÍSTICAS NAVEGACION



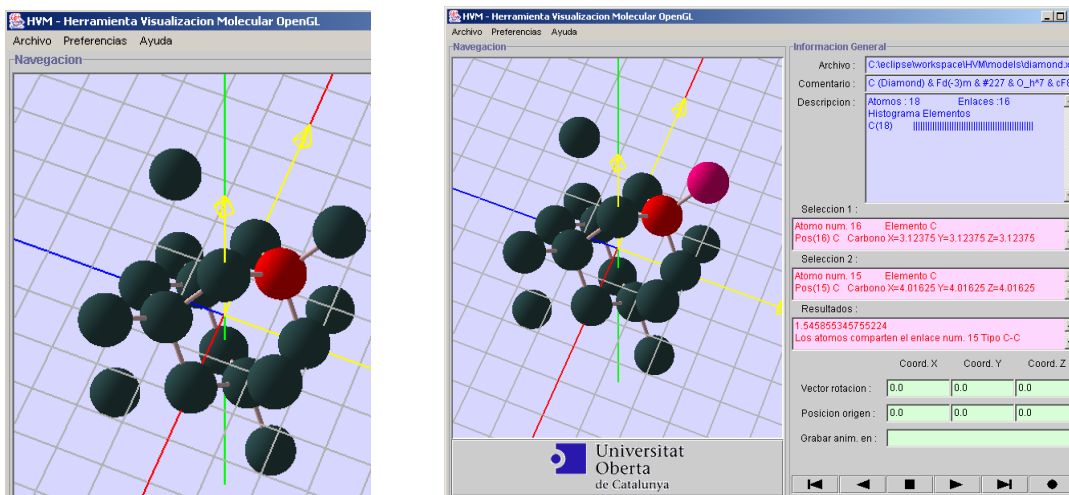
- Barra de menú, Preferencias, habilitar/deshabilitar Rejilla.
- Barra de menú, Preferencias, habilitar/deshabilitar Ejes Dirección.
- Barra de menú, Preferencias, habilitar/deshabilitar Átomos.
- Barra de menú, Preferencias, habilitar/deshabilitar Enlaces.
- Barra de menú, Preferencias, habilitar/deshabilitar Eje Rotación
- Barra de menú, Preferencias, habilitar/deshabilitar Extensión Eje Rotación.



- Barra de menú, Preferencias, Reinicializar.
- Barra de menú, Preferencias, Color Avance o Retroceso.
- Barra de menú, Preferencias, Color definido por el Usuario.
- Barra de menú, Preferencias, Zoom Acercar o Alejar.
- Barra de menú, Preferencias, Autocentrado molécula.

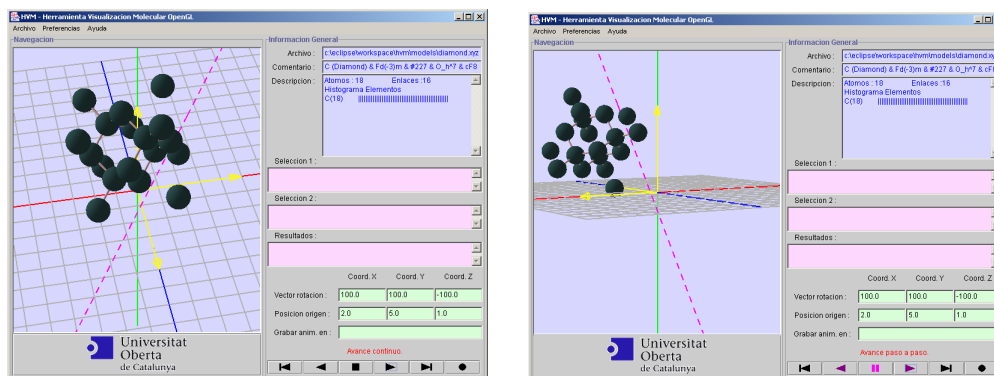


## SELECCIÓN ELEMENTOS



- Presionar con el botón derecho del ratón sobre el elemento a selección 1 (átomo o enlace).
- El elemento selección 1 cambiara a color rojo.
- Presionar el botón derecho del ratón simultáneamente a la tecla de control sobre el elemento a selección 2 (átomo o enlace).
- El elemento selección 2 cambiara a color rojo-magenta.
- Una selección 1 o 2 nula deshabilita una selección previa.

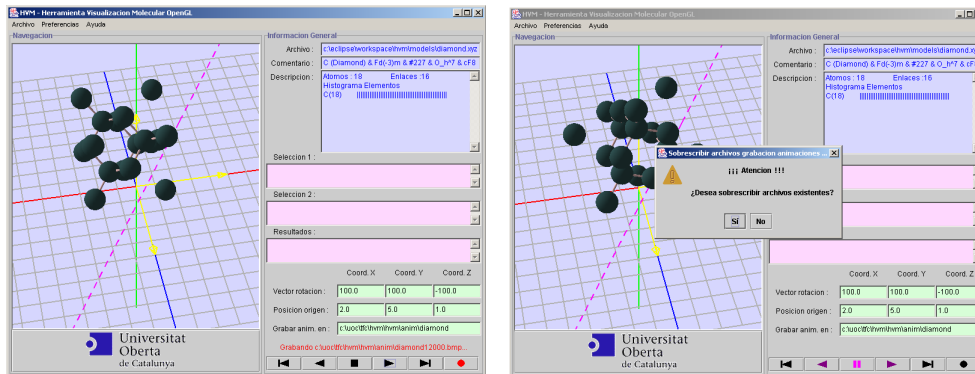
## REPRODUCCION ROTACIONES



- Introducir coordenadas X, Y, Z del Vector rotación.  
 Introducir coordenadas X, Y, Z de la Posición origen.  
 Presionar para ir a inicio.  
 Presionar para ir a final.  
 Presionar para retroceso.  
 Presionar para avance.  
 Presionar para hacer pausa.

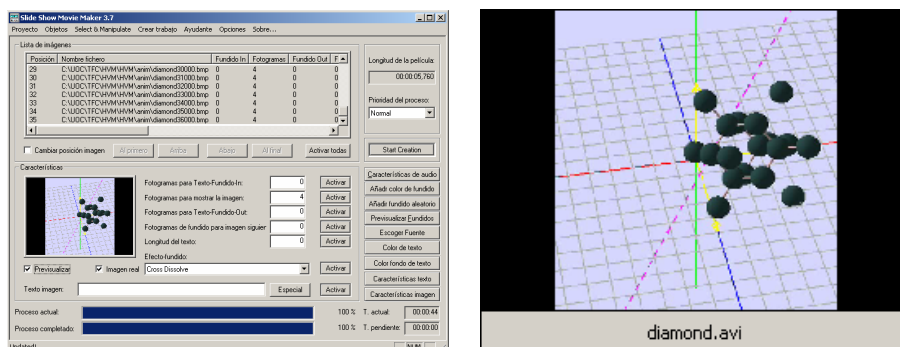
- Presionar para detener.
- Presionar retroceso paso a paso
- Presionar avance paso a paso

## GRABACION SECUENCIAS ROTACION



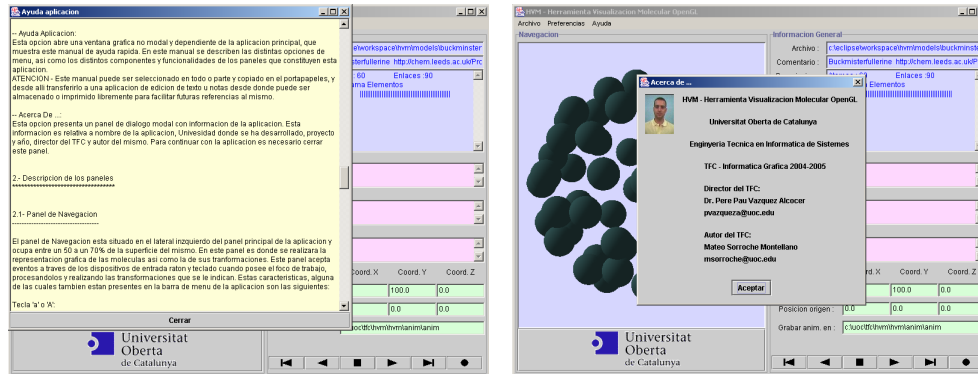
- Introducir ruta y nombre base en Grabar animación en...
- Activar Barra de menú, Preferencias, Grabación sincronizada con reproducción.
- Presionar para grabación.
- Presionar o para inicio de reproducción.
- Para grabar un único cuadro, desactivar Grabación sincronizada con reproducción, entrar en pausa, avanzar o retroceder hasta posición deseada y presionar

## GENERACION FILMS DE LA SECUENCIA



- Usamos la aplicación externa Slide Show Movie Maker Versión 3.7, de Joem Thiemann, programa gratuito de generación de archivos AVI. (<http://www.joem-thiemann.de>)
- Ajustar según necesidades. La aplicación permite numerosos ajustes y opciones. Proporcionar como ruta y ficheros de imágenes los programados en 'Grabar animación en...'
- Proceder a la creación del fichero AVI y reproducir con un reproductor de medios.

## AYUDA APLICACIÓN



- Barra de menú, Ayuda, Ayuda aplicación.
- La aplicación presenta una ventana de Ayuda aplicación con el Manual de ayuda rápida, donde están contempladas todas las opciones y funciones soportadas por la aplicación.
- Barra de menú, Ayuda, Acerca de...
- La aplicación presenta un dialogo modal con los créditos de autor. Pueden dirigirse al autor del trabajo para consultas sobre la aplicación.

## MATEO SORROCHE MONTELLANO