



UNIVERSIDAD TÉCNICA ESTATAL DE QUEVEDO
FACULTAD DE CIENCIAS DE LA INGENIERÍA
CARRERA DE INGENIERÍA EN SISTEMAS

Proyecto de Investigación previo a la
obtención del título de Ingeniero en
Sistemas

Título del Proyecto de Investigación:

**“INTERFAZ WEB AL SOFTWARE DE ALINEAMIENTO MULTIPLE DE
SECUENCIAS CON METAHEURISTICA MULTIOBJETIVO (M2ALIGN)”**

Autor:

Jefferson Edilberto Soria Brito

Director de Proyecto de Investigación

Ing. Cristian Zambrano Vega, PhD.

Quevedo – Los Ríos – Ecuador

2017

DECLARACIÓN DE AUTORÍA Y CESIÓN DE DERECHOS

Yo, **Jefferson Edilberto Soria Brito**, declaro que el trabajo aquí descrito es de mi autoría; que no ha sido previamente presentado para ningún grado o calificación profesional; y, que he consultado las referencias bibliográficas que se incluyen en este documento.

La Universidad Técnica Estatal de Quevedo, puede hacer uso de los derechos correspondientes a este trabajo, según lo establecido por la Ley de Propiedad Intelectual, por su Reglamento y por la normatividad institucional vigente.

f. _____

Jefferson Edilberto Soria Brito

C. C. 0503715138

CERTIFICACIÓN DE CULMINACIÓN DEL PROYECTO DE INVESTIGACIÓN



El suscrito, Ing. Cristian Zambrano Vega, PhD., Docente de la Universidad Técnica Estatal de Quevedo, certifica que el estudiante Jefferson Edilberto Soria Brito, realizó el Proyecto de Investigación de grado titulado **“INTERFAZ WEB AL SOFTWARE DE ALINEAMIENTO MULTIPLE DE SECUENCIAS CON METAHEURISTICA MULTI OBJETIVO (M2ALIGN)”**, previo a la obtención del título de Ingeniero en sistemas, bajo mi dirección, habiendo cumplido con las disposiciones reglamentarias establecidas para el efecto.

Ing. Cristian Zambrano Vega, PhD.

DIRECTOR DE PROYECTO DE INVESTIGACIÓN

CERTIFICADO DEL REPORTE DE LA HERRAMIENTA DE PREVENCIÓN DE COINCIDENCIA Y/O PLAGIO ACADÉMICO



Ing. Gabriel Zambrano Vega, PhD en calidad de Director de Proyecto de Investigación titulado “**INTERFAZ WEB AL SOFTWARE DE ALINEAMIENTO MULTIPLE DE SECUENCIAS CON METAHEURISTICA MULTI OBJETIVO (M2ALIGN)**”, me permito manifestar a usted y por intermedio del Consejo Académico lo siguiente:

Que, el señor **JEFFERSON EDILBERTO SORIA BRITO**, egresado de la Facultad de Ciencias de la Ingeniería, carrera Ingeniería en Sistemas, ha cumplido con las correcciones pertinentes, e ingresado su Proyecto de Investigación al sistema URKUND, tengo bien certificar la siguiente información sobre el informe del sistema anti plagio con un porcentaje de 0%.

URKUND	
Documento	TESIS SORIA JEFFERSON.docx (D31080854)
Presentado	2017-10-06 08:23 (-05:00)
Presentado por	Cristian Gabriel Zambrano Vega (czambrano@uteq.edu.ec)
Recibido	cristianzambrano.uteq@analysis.arkund.com
Mensaje	Mostrar el mensaje completo
	0% de estas 32 páginas, se componen de texto presente en 0 fuentes.

Ing. Cristian Zambrano Vega, PhD.
DIRECTOR DE PROYECTO DE TITULACIÓN



UNIVERSIDAD TÉCNICA ESTATAL DE QUEVEDO
FACULTAD CIENCIAS DE LA INGENIERÍA
CARRERA DE INGENIERIA EN SISTEMAS
PROYECTO DE INVESTIGACION

Título:

“INTERFAZ WEB AL SOFTWARE DE ALINEAMIENTO MULTIPLE DE
SECUENCIAS CON METAHEURISTICA MULTIOBJETIVO (M2ALIGN)”

Presentado a la Comisión Académica como requisito previo a la obtención del título de
Ingeniero en Sistemas.

Aprobado por:

PRESIDENTE DEL TRIBUNAL

PhD. Byron Wladimir Oviedo Bayas

MIEMBRO DEL TRIBUNAL

PhD. Raúl Hernández Palacios

MIEMBRO DEL TRIBUNAL

Ing. Eduardo Samaniego Mena

QUEVEDO – LOS RIOS – ECUADOR

2017

AGRADECIMIENTO

Agradezco a los pilares fundamentales, esos que siempre quieren lo mejor para uno, mi familia.

A cada uno de los docentes que no solo impartieron sus conocimientos, sino que inculcaron en nosotros el aprecio a la carrera.

Jefferson Edilberto Soria Brito

DEDICATORIA

Dedico este trabajo a mi familia: Elsa Brito y Jimena Soria, sustento principal que me ha ayudado a seguir adelante en cada aspecto de mi vida. Siendo el motor de mis fuerzas, las mismas que he dedicado en el transcurso de la carrera.

A mis grandes amigos Martin Parrales, Carlos Hidalgo, Gabriela Angulo y mi enamorada Lucy Villarroel.

Al gestor de todos los hilos y procesos que suceden día a día, ese ente que puso a nuestro alcance todas las herramientas para que construyamos el mundo que soñamos.

Jefferson Edilberto Soria Brito

RESUMEN EJECUTIVO Y PALABRAS CLAVES

El objetivo principal del presente trabajo de investigación es brindar a la comunidad científica una interfaz web de fácil y rápido uso al software optimizador multiobjetivo M2Align para el Alineamiento Múltiple de Secuencias denominado W-M2Align.

Entre las principales funcionalidades de la plataforma web están los siguientes parámetros de entrada:

Archivo de secuencias: Conjunto de secuencias biológicas sin alinear en formato FASTA.

Numero de evaluaciones: El número máximo de evaluaciones del algoritmo.

Tamaño población: Tamaño de la población del algoritmo.

Email: Para recibir el vínculo con los resultados de la ejecución (Alineamiento múltiple de secuencias y una aproximación al Frente de Pareto).

Alineamientos pre-computarizados: MSA's realizadas por otras herramientas heurísticas para generar las soluciones iniciales del algoritmo.

Todos los cálculos se realizan en un servidor dedicado con más de 60 núcleos para procesamiento computacional y los usuarios reciben los resultados a través de URL o correo electrónico. Permite realizar un monitoreo de los procesos a través de sus estados (Ejecutándose, Finalizado o Error), así como la posibilidad de descargar los archivos productos de la ejecución.

W-M2Align está disponible en <http://bioinformatic.uteq.edu.ec/m2align/>. Es gratuito y abierto a todos los usuarios y no requiere de inicio de sesión.

Palabras clave: Interfaz Web, Alineamiento Múltiple de Secuencias. Optimización MultiObjetivo.

ABSTRACT AND KEYWORDS

The main objective of this research is provide the scientific community with a web interface for quick and easy use to the multi-objective optimizer software for the Multiple Sequence Alignment (M2Align) called W-M2Align.

Among the main functionalities of this web platform are the following input parameters:

Sequences File: Set of unaligned biological sequences in FASTA format.

Number of Evaluations: The maximum number of algorithm evaluations.

Population Size: Size of the population of the algorithm

Email: To receive the link with the execution results (Multiple Sequence Alignments and an approximation of the Pareto Front).

Pre-computed Alignments: MSA's performed by others heuristic tools to generate the initial solutions of the algorithm.

All calculations are performed by a dedicated web-server with more than 60 cores for computational processing and the users receive the results via URL or email. It allows to perform a monitoring of the processes through its states (Running, Finished or Error), as well as the possibility of downloading the files of the execution.

W-M2Align is available at <http://bioinformatic.uteq.edu.ec/m2align/>. It is free and open to all users and there is no login requirement.

Keywords: Web Interface, Multiple Sequence Alignment, MultiObjective Optimization.

ÍNDICE GENERAL

INTRODUCCIÓN	1
CAPÍTULO I	4
CONTEXTUALIZACIÓN DE LA INVESTIGACIÓN	4
1.1. Problema de investigación.	4
1.1.1. Planteamiento del problema.....	4
1.1.2. Formulación del problema.	4
1.1.3. Sistematización.	5
1.2. Objetivos.	5
1.2.1. Objetivo General.....	5
1.2.2. Objetivos Específicos.	5
1.3. Justificación.....	6
CAPÍTULO II.....	8
FUNDAMENTACIÓN TEÓRICA DE LA INVESTIGACIÓN.....	8
2.1. Marco Conceptual.	8
2.1.1. M2Align.....	8
2.1.2. MSA - Enfoque Multi-Objetivo.....	8
2.1.3. jMetalMSA.	9
2.1.4. STRIKE Contact Matrix Generator.	9
2.1.5. MSASViewer.	10
2.1.6. CentOS.....	11
2.1.7. SSMTP.....	11
2.1.8. PHP.	12
2.1.9. Bootstrap.....	12
2.1.10. Apache.	13
2.1.11. MySql.....	13
2.2. Marco referencial.	14

2.2.1. IQTREE Web Server.	14
2.2.2. PHYML Online.....	16
2.2.3. T-REX.....	16
CAPÍTULO III.....	19
MÉTODOLOGÍA DE LA INVESTIGACIÓN	19
3.1. Localización.	19
3.2. Tipo de investigación.	19
3.2.1. Investigación Aplicada Tecnológica.....	19
3.3. Métodos de investigación.....	20
3.3.1. Método Deductivo.	20
3.3.2. Método Analítico.	20
3.4. Fuentes de recopilación de información.	20
3.5. Recursos de Humanos y Materiales.	20
3.5.1. Equipo Humano.	20
3.5.2. Equipos y Materiales.	21
CAPÍTULO IV	25
METODOLOGÍA DE DESARROLLO	25
4.1. Desarrollo de Interfaz Web.	24
4.1.1. Metodología en cascada.....	24
4.1.2. Análisis de requerimientos.....	24
4.1.3. Diseño del sistema.	25
4.1.4. Implementación.	55
4.1.5. Pruebas.....	63
CAPITULO V.....	70
RESULTADOS	70
5.1. Interfaz web W-M2Align para la ejecución del software M2align.....	71
5.1.1. Tecnologías aplicadas en el desarrollo de la Interfaz Web.....	71

5.1.2.	Interfaz Principal.....	72
5.1.3.	Documentación.	73
5.1.4.	Interfaz W-M2Align (Servicio Web).....	75
5.1.5.	Interfaz de Administración de Procesos.	79
5.2.	Ejecución del Software M2Align con diferentes Instancia Balibase a través de la Interfaz Web.....	80
5.2.1.	Instancia del Balibase BB11001.	80
5.2.2.	Instancia del Balibase BB11002.	83
5.2.3.	Instancia del Balibase BB11003.	85
5.2.4.	Instancia del Balibase BB11004.	87
5.2.5.	Instancia del Balibase BB11005.	90
5.2.6.	Instancia del Balibase BB11006.	92
CAPITULO VI		104
CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES		104
5.1.	Conclusiones.	97
5.2.	Recomendaciones.....	98
CAPÍTULO VI		108
BIBLIOGRAFÍA		108
6.1.	Bibliografía	109
CAPITULO VII		111
ANEXOS		111

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1.-Hardware utilizado para el desarrollo de la investigación.	21
Tabla 2.- Software utilizado para el desarrollo de la investigación.	22
Tabla 3.- Caso de Uso Ejecutar Análisis.	28
Tabla 4.- Caso de Uso Revisar Resultado.....	32
Tabla 5.- Caso de Uso Consultar Resultado.	33
Tabla 6.- Caso de Uso Descargar Resultado.....	35
Tabla 7.- Caso de Uso Visualizar FUN	37
Tabla 8.- Caso de Uso Visualizar VAR.....	38
Tabla 9.- Caso de Uso Visualizar RunLog.	40
Tabla 10.- Caso de Uso Visualizar MSA.....	41
Tabla 11.- Caso de Uso Iniciar Sesión.....	42
Tabla 12.- Caso de Uso Administrar Procesos.	44
Tabla 13.- Caso de Uso Administrar Historial.	46
Tabla 14.- Caso de Uso Actualizar mis datos.	47
Tabla 15.- Recursos Servidor CentOS.....	56
Tabla 16.- Resultados de ejecución.	57
Tabla 17.- Cuadro comparativo de lenguajes de programacion web.....	71

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1.- Patrón MVC	25
Figura 2.- Casos de Uso (Cliente).....	26
Figura 3.- Casos de Uso (Administrador).....	27
Figura 4.- Diagrama de Clases.....	50
Figura 5.- Diagrama de secuencia Ejecutar Análisis. (Parte 1)	51
Figura 6.- Diagrama de secuencia Ejecutar Análisis. (Parte 2)	52
Figura 7.- Diagrama de secuencia Descargar Resultado.	53
Figura 8.- Diagrama de secuencia Visualizar(FUN-VAR-RunLog).	53
Figura 9.- Diagrama de secuencia Iniciar Sesión.	54
Figura 10.- Diagrama de secuencia Administrar Proceso.....	54
Figura 11.- Arquitectura de comunicación Interfaz Web	55
Figura 12.- Estructura directorio m2align.....	56
Figura 13.- Directorio Resultados.....	57
Figura 14.- Código MOSAStrERunner.java sin modificar.....	58
Figura 15.- Código MOSAStrERunner.java modificado.....	58
Figura 16.- Código para ejecutar en Foreground.	59
Figura 17.- Código para ejecutar en Background.	60
Figura 18.-Carga promedio del Servidor.	60
Figura 19.- Número de núcleos del Servidor.	60
Figura 20.- Sección Resultados de ejecución.	64
Figura 21.- Correo generado por la Interfaz Web.....	65
Figura 22.- Código GenerateStructuralInformation.java sin modificar.....	67
Figura 23.- Código GenerateStructuralInformation.java modificado.....	67
Figura 24.- Sección Descargar PDB.	69
Figura 25.- Documentación M2Align y W-M2Align.....	73
Figura 26.- Documentación parámetros de entrada W-M2Align.	73
Figura 27.- Documentación sección Resultados.....	74
Figura 28.- Documentación sección Descargar PDB	75
Figura 29.- Carga del Servidor.	75
Figura 30.- Sección Ejecutar Análisis.....	75
Figura 31.- Sección Resultados.	76
Figura 32.- Valores objetivo de las soluciones.	77

Figura 33.- Soluciones en formato Fasta.	77
Figura 34.- Registro de eventos y acciones.	78
Figura 35.- Soluciones representadas en componente MSAViewer.....	78
Figura 36.- Sección de Administración de Procesos.	79
Figura 37.- Listado de procesos ejecutados y finalizados.	80

ÍNDICE DE ILUSTRACIONES

Ilustración 1.- Arquitectura jMetalMSA.....	9
Ilustración 2.- A simplified view of the MSAViewer for the sequence alignment of protein VP24 within seven viruses of Filoviridae family.	10
Ilustración 3.- Archivos de salida W-IQTREE	15
Ilustración 4.- Configuración archivo /etc/ssmtp/ssmtp.conf.	62
Ilustración 5.- Función para detener un Proceso.....	63
Ilustración 6.- Función para continuar un Proceso.	63
Ilustración 7.- Función para terminar un Proceso.....	63
Ilustración 8.- Contenido del archivo FUN.tsv.....	65
Ilustración 9.- Contenido del archivo VAR.tsv.	65
Ilustración 10.- Contenido del archivo jMetal.log	66
Ilustración 11.- Contenido del archivo VAR.tsv presentado en el componente MSAViewer.....	66
Ilustración 12.- Página principal de la Interfaz Web.	72
Ilustración 13.- Correo enviado para revisión de resultados del problema Balibase BB11001.....	81
Ilustración 14.- Resultado de ejecución del problema Balibase BB11001.....	81
Ilustración 15.- Frente de Pareto resultado de la ejecución del problema Balibase BB11001.	81
Ilustración 16.- Soluciones FASTA resultado de la ejecución del problema Balibase BB11001.....	82
Ilustración 17.- Registro de eventos y acciones resultado de la ejecución del problema Balibase BB11001.	82
Ilustración 18.- Soluciones Fasta resultado de la ejecución del problema Balibase BB11001 representadas en componente MSAViewer.....	82
Ilustración 19.- Correo enviado para revisión de resultados del problema Balibase BB11002.....	83
Ilustración 20.- Resultado de ejecución del problema Balibase BB11002.....	83
Ilustración 21.- Frente de Pareto resultado de la ejecución del problema Balibase BB11002.	84
Ilustración 22.- Soluciones FASTA resultado de la ejecución del problema Balibase BB11002.....	84

Ilustración 23.- Registro de eventos y acciones resultado de la ejecución del problema Balibase BB11002.	84
Ilustración 24.- Soluciones Fasta resultado de la ejecución del problema Balibase BB11002 representadas en componente MSAViewer.....	85
Ilustración 25.- Correo enviado para revisión de resultados del problema Balibase BB11003.	85
Ilustración 26.- Resultado de ejecución del problema Balibase BB11003.....	86
Ilustración 27.- Frente de Pareto resultado de la ejecución del problema Balibase BB11003.	86
Ilustración 28.- Soluciones FASTA resultado de la ejecución del problema Balibase BB11003.....	86
Ilustración 29.- Registro de eventos y acciones resultado de la ejecución del problema Balibase BB11003.	87
Ilustración 30.- Soluciones Fasta resultado de la ejecución del problema Balibase BB11003 representadas en componente MSAViewer.....	87
Ilustración 31.- Correo enviado para revisión de resultados del problema Balibase BB11004.	88
Ilustración 32.- Resultado de ejecución del problema Balibase BB11004.....	88
Ilustración 33.- Frente de Pareto resultado de la ejecución del problema Balibase BB11004.	88
Ilustración 34.- Frente de Pareto resultado de la ejecución del problema Balibase BB11004.....	89
Ilustración 35.- Registro de eventos y acciones resultado de la ejecución del problema Balibase BB11004.	89
Ilustración 36.- Soluciones Fasta resultado de la ejecución del problema Balibase BB11004 representadas en componente MSAViewer.....	89
Ilustración 37.- Correo enviado para revisión de resultados del problema Balibase BB11005.	90
Ilustración 38.- Resultado de ejecución del problema Balibase BB11005.....	90
Ilustración 39.- Frente de Pareto resultado de la ejecución del problema Balibase BB11005.....	91
Ilustración 40.- Frente de Pareto resultado de la ejecución del problema Balibase BB11005.	91

Ilustración 41.- Registro de eventos y acciones resultado de la ejecución del problema Balibase BB11005.	91
Ilustración 42.- Soluciones Fasta resultado de la ejecución del problema Balibase BB11005 representadas en componente MSAViewer.....	92
Ilustración 43.- Correo enviado para revisión de resultados del problema Balibase BB11006.	92
Ilustración 44.- Resultado de ejecución del problema Balibase BB11006.....	93
Ilustración 45.- Frente de Pareto resultado de la ejecución del problema Balibase BB11006.	93
Ilustración 46.- Frente de Pareto resultado de la ejecución del problema Balibase BB11006.	93
Ilustración 47.- Registro de eventos y acciones resultado de la ejecución del problema Balibase BB11006.	94
Ilustración 48.- Soluciones Fasta resultado de la ejecución del problema Balibase BB11006 representadas en componente MSAViewer.....	94

CÓDIGO DUBLIN

Título	“Interfaz Web al software de Alineamiento Múltiple de Secuencias con metaheurística multiobjetivo (M2Align)”		
Autor	Jefferson Edilberto Soria Brito		
Palabras clave:	Interfaz Web	Multiple Alignment of Sequences	MultiObjective Optimization.
Fecha de publicación:			
Editorial	Quevedo: UTEQ, 2017		
Resumen	<p>Resumen. - El objetivo principal del presente trabajo de investigación es brindar a la comunidad científica una interfaz web de fácil y rápido uso al software optimizador multiobjetivo M2Align para el Alineamiento Múltiple de Secuencias biológicas denominado W-M2Align.</p> <p>Abstract. - The main objective of this research is provide the scientific community with a web interface for quick and easy use to the multi-objective optimizer software for the Multiple Sequence Alignment (M2Align) called W-M2Align.</p>		
Descripción	FORMATO: A4 29cm x 21cm		
URI	(En blanco hasta cuando se dispongan los repositorios)		

INTRODUCCIÓN

El alineamiento múltiple de secuencias (MSA), es uno de los principales tópicos de interés dentro del campo de la Bioinformática. Su objetivo principal es la encontrar un alineamiento óptimo para tres o más secuencias y resaltar la mayor cantidad de zonas conservadas y de similitud entre ellas. Para lograr esto se han empleado el uso de la optimización multiobjetivo que han demostrado en algunos campos tener beneficios importantes en comparación con los de enfoques mono-objetivo. [1]

Actualmente se han realizado estudios comparativos del uso de metaheurísticas multiobjetivo aplicadas al problema del Alineamiento Múltiple de Secuencia, el primero bajo un entorno bi-objetivo [2], y el segundo bajo un enfoque tri-objetivo [3], en el que se aplican las mismas métricas de evaluación de calidad de los resultados que emplea el algoritmo M2ALlign. En ambos trabajos se puede confirmar que el uso de la referencia NSGAI es la que mejor resultados brinda abordando el problema.

M2Align [4] es un software dirigido a resolver los problemas de alineación múltiples de secuencias (MSA) mediante el uso de metaheurísticas multiobjetivo, el cual cuenta con la implementación de una versión más eficiente y rápida del algoritmo MO-SAStrE que es un optimizador multi-objetivo para alineaciones de secuencia, que utiliza tres objetivos para evaluar la precisión de MSA: puntuación Strike, columnas totalmente conservadas (CT) y el porcentaje de no-vacíos.

Está basado en jMetalMSA [5] que es una extensión del Framework multiobjetivo jMetal de donde se toman gran parte de las clases esenciales y básicas, framework que se encuentra escrito en dos lenguajes de programación, Java y C++.

El software M2Align es un proyecto de código abierto que facilita a los usuarios interesados acceder desde el repositorio en GitHub¹ al código fuente del mismo, para descargarlo, compilarlo y ejecutarlo, siguiendo las instrucciones que se encuentran dadas en este repositorio.

Las herramientas de software de alineamiento múltiple de secuencias en gran parte se basan en líneas de comandos para ponerlos en funcionamiento incluyendo M2Align, este es un motivo que hace que la tarea de llevar a cabo la ejecución del software se convierta

¹ <https://github.com/KhaosResearch/M2Align>

una labor complicada para la comunidad científica (biólogos, biotecnólogos y afines) a la que está destinada, por motivo del poco conocimiento y destreza que pueda existir para ingresar mediante una terminal o consola los comandos necesarios para efectuar esta tarea con éxito.

Por esto el presente proyecto busca solucionar los inconvenientes que puedan existir al llevar acabo la puesta en marcha de esta herramienta por parte de la comunidad científica, desarrollando una Interfaz Web al software de Alineamiento Múltiple de Secuencias con metaheurística multiobjetivo “M2Align”, llamada W-M2Align, que permitirá el rápido y fácil uso del algoritmo MO-Sastre para la ejecución de alineamiento de un determinado conjunto de secuencias biológicas, reduciendo la ejecución a unos cuantos clics y contando con la opción de verificar el estado de la ejecución en el momento que el usuario disponga.

CAPÍTULO I
CONTEXTUALIZACIÓN DE LA INVESTIGACIÓN

1.1. Problema de investigación.

1.1.1. Planteamiento del problema.

La comunidad que trabaja con herramientas dedicadas a resolver problemas de alineamiento múltiple de secuencias (MSA), tiene la necesidad de ejecutar las mismas de forma rápida y fácil, pero al ser necesario que para su ejecución se deba tener conocimientos sobre comandos de consola y su correcta forma de ingresarlos hace que esta tarea no se lleve con éxito.

La ejecución de la herramienta de software M2Align se basa en líneas de comandos, esto hace laboriosa la tarea para los usuarios interesados el poner en funcionamiento el software, tornándola complicada y tediosa, debido a que no se cuenta con una interfaz web que interactúe con los usuarios de manera sencilla e intuitiva donde se tenga disponibles los mecanismos necesarios para la carga de datos y ajustes de parámetros.

1.1.1.1. Diagnóstico.

La implementación de una Interfaz Web para poner en funcionamiento el software M2Align evitará cometer errores en la carga de los parámetros de entradas, así como del ingreso de los comandos para poner en marcha el mismo, y que este lleve a cabo con éxito.

1.1.1.2. Pronóstico.

La ausencia de una Interfaz Web para automatizar el proceso de poner en funcionamiento el software de Alineamiento Múltiple de Secuencias con metaheurística multiobjetivo “M2Align” provocará que los usuarios interesados no puedan realizar sus ejecuciones y resolver sus problemas de alineación múltiples de secuencias (MSA) de manera fácil y rápida.

1.1.2. Formulación del problema.

¿Cómo lograr automatizar la ejecución del software de Alineamiento Múltiple de Secuencias con metaheurística multiobjetivo “M2Align” de manera eficiente?

1.1.3. Sistematización.

- ¿Cómo conseguir la ejecución del software M2Align mediante una interfaz web?
- ¿Cómo lograr la correcta ejecución del software M2Align?
- ¿Cómo mostrar el estado del progreso de ejecución del software M2Align?
- ¿De qué forma presentar los resultados producto de la salida del software M2Align desde la interfaz web?

1.2. Objetivos.

1.2.1. Objetivo General.

Desarrollar una Interfaz Web para el rápido uso y la fácil ejecución del software de alineamiento múltiple de secuencias con metaheurística multiobjetivo (M2Align).

1.2.2. Objetivos Específicos.

- Determinar las tecnologías para el desarrollo y enlace de la Interfaz Web con el software M2Align.
- Implementar mecanismos sencillos, adecuados para la carga de datos y ajustes de parámetros.
- Implantar método de visualización del estado del progreso de la ejecución del software M2Align.
- Establecer herramienta para la presentación numérica, textual y visual de los resultados del software M2Align.

1.3. Justificación.

W-M2Align la Interfaz Web al software de Alineamiento Múltiple de Secuencias con metaheurística multiobjetivo (M2Align) hará que la tarea de poner en funcionamiento el software sea una labor más fácil y rápida para los usuarios interesados, pues ya no deberán estar atados a conocer los comandos necesarios que se deben introducir mediante la consola para compilarlo o ejecutarlo.

Se contará con un mecanismo que brindará a los usuarios un método sencillo para la carga de datos y ajustes de parámetros mediante la Interfaz Web permitiendo mediante un clic poner en funcionamiento el software M2align, reduciendo el tiempo que el usuario emplearía si lo decide hacer mediante una consola o terminal ingresando los parámetros de forma manual.

Como el realizar ejecuciones del software no es algo que concluya de manera inmediata ya que el tiempo de ejecución puede variar debido a la cantidad de datos que se tenga que procesar, se proporcionará un medio para que el usuario pueda mantenerse informado sobre el estado del mismo, esto mediante el envío al email del usuario de un enlace que lo redireccionará a la página web de resultados, donde se visualizarán las ejecuciones realizadas y se estará reflejando el estado de la ejecución (Ejecutándose, Finalizado o Error).

Se brindará la visualización de una lista con cada una de las ejecuciones efectuadas al software M2Align con su correspondiente estado y fecha en la cual fue realizada por parte del usuario, esto en una sección de la Interfaz Web, en la cual se podrá visualizar los resultados o acceder a descargarlos en formato Zip.

Mediante una página web de administración se tendrá la posibilidad de observar un historial de las ejecuciones que ya finalizaron, así como de las que se están llevando a cabo, y contará con la oportunidad de decidir si se Detiene, Continúa o Finaliza la ejecución del software M2Align efectuada por algún usuario.

CAPÍTULO II
FUNDAMENTACIÓN TEÓRICA DE LA INVESTIGACIÓN

2.1. Marco Conceptual.

En el siguiente apartado se procede a mencionar los principales términos y conceptos; ésta información brinda los elementos para una comprensión adecuada de todos los temas que se ven involucrados en el presente proyecto de investigación.

2.1.1. M2Align.

M2Align es un software dirigido a resolver los problemas de alineación múltiples de secuencias (MSA) mediante el uso de metaheurísticas multiobjetivo, el cual cuenta con la implementación de una versión más eficiente y rápida del algoritmo MO-SAStrE que es un optimizador multi-objetivo para alineaciones de secuencia, que utiliza tres objetivos para evaluar la precisión de MSA: puntuación Strike, columnas totalmente conservadas (CT) y el porcentaje de no-vacíos. [2]

Es un proyecto basado en jMetalMSA [4] que es una extensión del Framework multiobjetivo jMetal de donde se toman gran parte de las clases básicas, es Open Source y se encuentra alojado en GitHub², en el sitio del proyecto se cuenta con información acerca de cómo descargar y compilar el software, facilitando su uso a todos los usuarios interesados en este tipo de herramientas. M2Align está escrito en Java (MO-SAStrE es implementado en Matlab), por lo que puede ejecutarse en cualquier ordenador que tenga instalado el JDK de Java.

2.1.2. MSA - Enfoque Multi-Objetivo.

EL alineamiento múltiple de secuencias biológicas, sea ADN, ARN o estructuras primarias proteicas (proteínas), es uno de los principales tópicos de interés dentro del campo de la Bioinformática. Su objetivo principal es la representar y comparar más de dos secuencias de aminoácidos o nucleótidos para resaltar la mayor cantidad de zonas de similitud entre ellas, las cuales podrían indicar relaciones funcionales o evolutivas entre los genes o proteínas consultadas. [1]

El alineamiento de un par de secuencias se puede realizar mediante el uso de técnicas de Programación Dinámica; sin embargo, estas estrategias no pueden ser aplicadas cuando

² <https://github.com/KhaosResearch/M2Align/>

se consideran más de dos secuencias en el proceso, debido a que el espacio de búsqueda crece de forma exponencial según el número y el tamaño de las secuencias consideradas. [1]

2.1.3. jMetalMSA.

JMetalMSA se basa en el marco de optimización multi-objetivo jMetal, de la cual toma la mayor parte de las clases básicas. La arquitectura orientada a objetos de JMetalMSA se muestra en la Ilustración 1, donde podemos observar que está compuesta de cuatro Clases principales (interfaces Java). Tres de ellos (MSAProblem, MSAAlgorithm, y MSASolution) hereda de sus contrapartes en jMetal (las relaciones de herencia se omiten en el diagrama), y la clase Score representar un MSA score. [5]

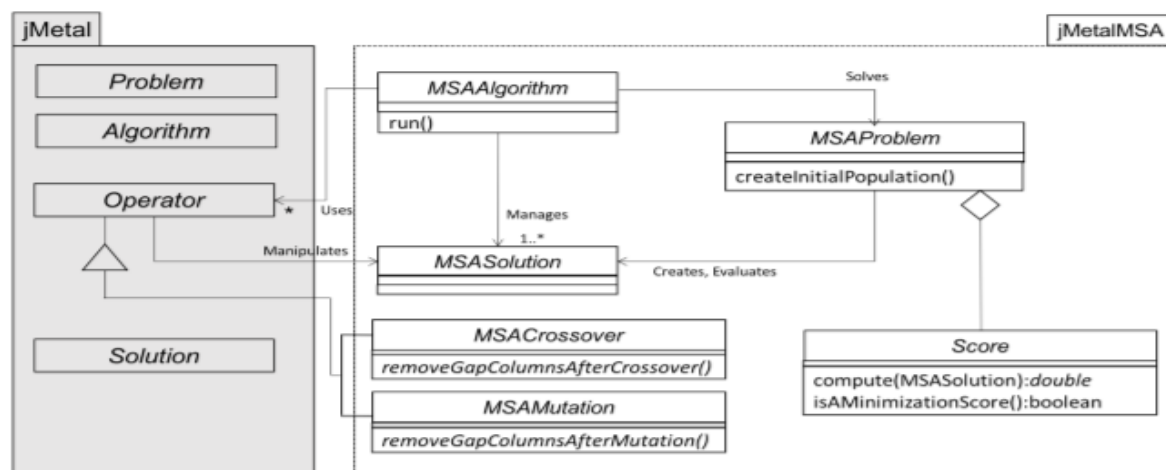


Ilustración 1.- Arquitectura jMetalMSA.

2.1.4. STRIKE Contact Matrix Generator.

Este utilitario es parte del programa STRIKE³ (Estructura única evaluación inducido) un programa para evaluar los alineamientos de secuencias de proteínas múltiples utilizando una única estructura de la proteína, y ha sido desarrollado para apoyar la funcionalidad de la jMetalMSA una herramienta de software paralelo para la alineación de secuencias múltiples con múltiples metaheurísticas objetivas. [7]

STRIKE Contacto Generador de Matrices permite el cálculo de la matriz de STRIKE contacto de una secuencia dada utilizando su información estructural PDB como fuente para las frecuencias de aminoácidos y contactos. Se crea un archivo de texto, llamado

³ <https://github.com/cristianzambrano/strikeContactGenerator>

como la secuencia con el prefijo (*.contacts). Este archivo de contacto se vuelve a consultar para calcular la puntuación de ejecución dado una alineación que incluye la secuencia. [7]

2.1.5. MSAViewer.

El MSAViewer es un componente JavaScript de visualización y análisis rápido y fácil para los datos de alineación de secuencias múltiples de cualquier tamaño. Las características principales incluyen la navegación interactiva a través de la alineación, la aplicación de esquemas de colores populares, clasificación, selección y filtrado. El MSAViewer está 'listo para la web': escrito completamente en JavaScript, compatible con navegadores web modernos y no requiere ningún software especializado. [8]

El MSAViewer carga datos de MSA en formatos FASTA (Pearson, 2000) o CLUSTAL (Larkin et al., 2007) desde la computadora local de un usuario o un servidor web. A continuación, dibuja dos paneles: el panel principal y el panel MSA de vista general, ver Ilustración 2. [8]

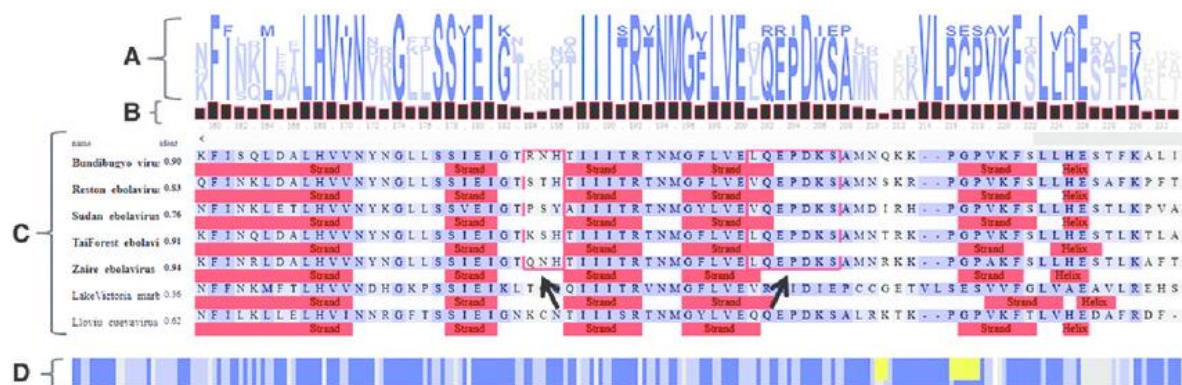


Ilustración 2.- A simplified view of the MSAViewer for the sequence alignment of protein VP24 within seven viruses of Filoviridae family.

La navegación a través de la alineación se activa a través de varios controles. En primer lugar, los usuarios pueden desplazarse o utilizar el elemento de menú "Saltar a una columna" para navegar hasta un cierto número de columna. En segundo lugar, los usuarios pueden desplazarse dentro del panel principal para desplazarse por la alineación; Esto ha demostrado ser una característica útil para grandes alineaciones. Finalmente, un segundo panel -el panel de vista general (dibujado debajo del panel principal) -proporciona una perspectiva de "vista de pájaro" sobre toda la alineación y también se puede usar para la navegación. [8]

2.1.6. CentOS.

CentOS es reconstruido a partir de otra plataforma Linux, Red Hat Enterprise Linux. RHEL la cual está basado completamente en software de fuente abierta. En otras palabras, cuando Red Hat proporciona el software para un suscriptor, también debe incluir el código fuente. El proyecto CentOS dedica considerable tiempo y esfuerzo eliminando todos los logotipos y marcas registradas de Red Hat. Una vez hecho esto, el software está remarcada como CentOS y compilado como tal. Cada versión CentOS es mantenida durante 10 años y está disponible gratuitamente y se puede descargar gratuitamente desde el sitio web de CentOS⁴. [6]

Las nuevas versiones de CentOS aproximadamente son liberadas cada 2 años y cada 6 meses cada versión es actualizada, para brindar el soporte a hardware nuevo. Esto se traduce en un entorno Linux seguro, de bajo mantenimiento, confiable, predecible y reproducibles. CentOS también cuenta con una fuerte comunidad mundial de más de 6 millones de sistemas instalados y muchos de los espejos utilizados por el proyecto CentOS son donados por terceras partes. [6]

2.1.7. SSMTP.

Ssmtp es un emulador sendmail para máquinas que normalmente recogen su correo desde un mailhub centralizado (a través de pop, imap, nfs montajes u otros medios). Proporciona la funcionalidad necesaria para los seres humanos y programas para enviar correo a través del estándar o agentes de usuario /usr/bin/mail. [9]

Acepta un flujo de correo en la entrada estándar con los destinatarios especificados en la línea de comandos y sincronizadamente envía el mensaje al agente de transferencia de correo de un mailhub para que el MTA mailhub procese. Los mensajes fallidos se colocan en dead.letter en el directorio personal del remitente. [9]

No intenta proporcionar toda la funcionalidad de sendmail: está pensado para su uso cuando otros programas son el principal medio de entrega del correo. Es útil con pop / imap, o para simular la opción de cola de correo compartido de Sun para máquinas que no son de Sun, para máquinas cuyos sendmails son demasiado difíciles (o varios) de

⁴ <https://www.centos.org>

configurar, para máquinas con disfunciones conocidas en sendmail o para aquellas donde Son " misteriosos problemas ". [9]

Archivos:

- /etc/ssmtp/ssmtp.conf - archivo de configuración. [9]
- / Etc / ssmtp / revalias - archivo de alias inversas. [9]
- / Etc / alias - archivo de alias. [9]

2.1.8. PHP.

PHP (acrónimo de "PHP: Hypertext Preprocessor") es un lenguaje "open source" interpretado de alto nivel embebido en páginas HTML y ejecutado en el servidor. [10]

Lo que distingue a PHP de la tecnología Javascript, la cual se ejecuta en la máquina cliente, es que el código PHP es ejecutado en el servidor. Si tuviésemos un script similar al de nuestro ejemplo en nuestro servidor, el cliente solamente recibiría el resultado de su ejecución en el servidor, sin ninguna posibilidad de determinar que código ha producido el resultado recibido. El servidor web puede ser incluso configurado para que procese todos los ficheros HTML con PHP [10]

PHP puede ser utilizado en cualquiera de los principales sistemas operativos del mercado, incluyendo Linux, muchas variantes Unix (incluido HP-UX, Solaris y OpenBSD), Microsoft Windows, Mac OS X, RISC OS y probablemente alguno más. PHP soporta la mayoría de servidores web de hoy en día, incluyendo Apache, Microsoft Internet Information Server, Personal Web Server, Netscape y iPlanet, Oreilly Website Pro server, Caudium, Xitami, OmniHTTPd y muchos otros. PHP tiene módulos disponibles para la mayoría de los servidores, para aquellos otros que soporten el estándar CGI, PHP puede usarse como procesador CGI. [10]

2.1.9. Bootstrap.

Bootstrap es un framework de front-end gratuito para un desarrollo web más rápido y fácil. Bootstrap incluye plantillas de diseño basadas en HTML y CSS para tipografías, formularios, botones, tablas, navegación, modales, carruseles de imágenes y muchos otros, así como complementos JavaScript opcionales. Bootstrap también le da la capacidad de crear fácilmente diseños de respuesta. [11]

Se basa en el diseño web responsivo que es la creación de sitios web que se ajustan automáticamente para verse bien en todos los dispositivos, desde teléfonos pequeños hasta grandes escritorios. [11]

Ventajas de Bootstrap:

- Fácil de usar: Cualquier persona con conocimientos básicos de HTML y CSS puede comenzar a usar Bootstrap. [11]
- Características responsivas: el CSS sensible a Bootstrap se ajusta a teléfonos, tablets y escritorios. [11]
- Enfoque móvil primero: En Bootstrap 3, los estilos móviles primero son parte del marco central. [11]
- Compatibilidad del navegador: Bootstrap es compatible con todos los navegadores modernos (Chrome, Firefox, Internet Explorer, Safari y Opera). [11]

2.1.10. Apache.

Un servidor Web es un servidor que es responsable de aceptar solicitudes HTTP de clientes web y de darles respuestas HTTP, generalmente en forma de páginas web que contienen contenido estático (texto, imágenes, etc.) y dinámico (scripts). El servidor web Apache ha sido el servidor Web más popular y ampliamente utilizado de la última década. Es utilizado por aproximadamente el 50% de todos los sitios web. Apache es multiplataforma, ligero, robusto, y se utiliza en pequeñas empresas, así como grandes corporaciones. Apache también es gratuito y de código abierto. [12]

El servidor web Apache tiene posibilidades casi infinitas, debido a su gran modularidad, lo que le permite ser integrado con numerosas otras aplicaciones. Uno de los paquetes más populares es la pila de aplicaciones del servidor Web LAMP, que incluye el servidor Web Apache junto con MySQL, PHP, Perl y Python. El Apache Web Server es desarrollado por Apache Software Foundation. [12]

2.1.11. MySql.

Una base de datos es una colección estructurada de datos. Puede ser cualquier cosa, desde una simple lista de compra a una galería de pintura o las más vastas cantidades de información en una red corporativa. Para añadir, acceder, y procesar los datos almacenados en una base de datos, necesita un sistema de gestión de base de datos como

MySQL Server. Al ser los computadores muy buenos en tratar grandes cantidades de datos, los sistemas de gestión de bases de datos juegan un papel central en computación, como aplicaciones autónomas o como parte de otras aplicaciones. [13]

MySQL software es Open Source significa que es posible para cualquiera usar y modificar el software. Cualquiera puede bajar el software MySQL desde internet y usarlo sin pagar nada. Si lo desea, puede estudiar el código fuente y cambiarlo para adaptarlo a sus necesidades. El software MySQL usa la licencia GPL (GNU General Public License), <http://www.fsf.org/licenses/>, para definir lo que puede y no puede hacer con el software en diferentes situaciones. Si no se encuentra cómodo con la GPL o necesita añadir código. [13]

2.2.Marco referencial.

2.2.1. IQTREE Web Server.

W-IQ-TREE fue diseñado para trabajar en todos los navegadores web. Proporciona una interfaz web para interactuar con los usuarios y enviar solicitudes de usuario al clúster de la computadora, donde el cálculo real se hace con la versión secuencial más reciente de IQ-TREE. A continuación, describimos elementos importantes de la interfaz web. [14]

2.2.1.1.Tree Inference.

Proporciona las características más utilizadas de IQ-TREE y permite a los usuarios realizar análisis filogenéticos en una alineación de secuencias múltiples (MSA). En el caso más básico, no se requiere más que un archivo MSA para enviar el trabajo. Sin más información, IQ-TREE se ejecutará con los parámetros por defecto y detectará automáticamente el tipo de secuencia, así como el modelo de sustitución mejor ajustado. Además, se llevará a cabo Ultrafast Bootstrap (Minh et al., 2013) y la prueba de rama SH-aLRT (Guindon et al., 2010). [15]

Puede probar el servidor web con un ejemplo de alineación marcando la casilla correspondiente o cargar su propio archivo de alineación. Al hacer clic en 'Examinar' se abrirá un cuadro de diálogo donde podrá seleccionar su MSA; Se soportan los formatos de archivo Phylip, Fasta, Nexus, Clustal y MSF. [15]

Después de que usted puede presentar el trabajo. Si proporciona una dirección de correo electrónico, se le enviará una notificación una vez finalizado el trabajo. En caso de que

no especifique una dirección de correo electrónico, recibirá un enlace en el siguiente paso; Puede marcar este enlace para obtener los resultados una vez finalizado el trabajo. [15]

2.2.1.2. Model Selection.

IQ-TREE soporta una amplia gama de modelos de sustitución de ADN, proteínas, codones, alineaciones binarias y morfológicas. En caso de que no sepa qué modelo es apropiado para sus datos, IQ-TREE puede determinar automáticamente el modelo más adecuado para su alineación. Utilice la pestaña Selección de modelo si sólo desea encontrar el modelo que mejor se ajuste sin realizar la reconstrucción del árbol. [15]

2.2.1.3. Analysis Results.

En la pestaña Resultados del análisis puede supervisar sus trabajos. Con nuestro archivo de ejemplo, una ejecución sólo tomará unos segundos, dependiendo de la carga del servidor. Para sus propias alineaciones el límite de tiempo de la CPU es 24 horas. Si proporcionó una dirección de correo electrónico al enviar el trabajo, recibirá un correo electrónico una vez que haya terminado. [15]

Una vez finalizado el trabajo, puede seleccionarlo marcando la casilla correspondiente y luego descargar los trabajos seleccionados como un archivo zip. Este archivo zip contendrá los resultados de su ejecución, incluyendo el registro de ejecución y el resultado completo que también son accesibles en el servidor web. [15]

Suffix	Explanation
<code>.iqtree</code>	Full result of the run, this is the main report file
<code>.log</code>	Run log
<code>.treefile</code>	Maximum likelihood tree in NEWICK format, can be visualized with treeviewer programs
<code>.svg</code>	Graphical tree representation in SVG format, done with ete view
<code>.pdf</code>	Graphical tree representation in PDF format, done with ete view
<code>.contree</code>	Consensus tree with assigned branch supports where branch lengths are optimized on the original alignment; printed if Ultrafast Bootstrap is selected
<code>.ckp.gz</code>	Checkpoint file; included if a job was stopped because of RAM/CPU limits

Ilustración 3.- Archivos de salida W-IQTREE

2.2.2. PHYML Online.

PHYML Online es una interfaz web para PHYML, un software que implementa una heurística rápida y precisa para estimar filogenias de máxima probabilidad de secuencias de ADN y proteínas. Esta herramienta proporciona al usuario una serie de opciones, por ejemplo, bootstrap no paramétrico y la estimación de varios parámetros evolutivos, con el fin de realizar amplios análisis filogenéticos en grandes conjuntos de datos en razonable tiempo de computación. [16]

PHYML Online es una interfaz web para el algoritmo PHYML. De forma predeterminada, los datos de entrada consisten en un único archivo de texto que contiene una o más alineaciones de secuencias de ADN o proteína en formato PHYLIP intercalado o secuencial. [16]

El servidor de PHYML Online se encuentra en el Laboratorio de Informática, de Robótica y Microelectrónica de Montpellier: <http://atgc.lirmm.fr/phyml>. [16]

PHYML también se puede descargar para la instalación local en <http://atgc.lirmm.fr/phyml/binaries.html>. El software PHYML se ha implementado en C ANSI y está disponible bajo licencia general GNU. Fuentes disponibles bajo petición. Los binarios, los conjuntos de datos de ejemplo, las fuentes y la documentación se distribuyen gratuitamente con fines académicos. [16]

2.2.2.1. Resultados.

PhyML produce de resultado los archivos:

- <sequence file name>_phyml_lk.txt : site likelihood value(s). [17]
- <sequence file name>_phyml_tree.txt : inferred tree(s). [17]
- <sequence file name>_phyml_stat.txt : detailed execution statistics. [17]
- <sequence file name>_phyml_boot_trees.txt : bootstrap trees (special case). [17]
- <sequence file name>_phyml_boot_stats.txt : bootstrap statistics (special case). [17]

2.2.3. T-REX.

T-REX (Reconstrucción de árboles y reticulogramas) es un servidor web dedicado a la reconstrucción de árboles filogenéticos, redes de reticulación y la inferencia de eventos

de transferencia horizontal de genes (HGT). T-REX incluye varias aplicaciones bioinformáticas populares tales como MUSCLE, MAFFT, Neighbour Joining, NINJA, BioNJ, PhyML, RAxML, generador aleatorio de árbol filogenético y algunos modelos de transformación de secuencia a distancia bien conocidos. [18]

También comprende métodos rápidos y efectivos para inferir árboles filogenéticos de matrices de distancia completas e incompletas, así como para reconstruir reticulogramas y redes de HGT, incluyendo la detección y validación de transferencias de genes completas y parciales, inferencia de escenarios HGT de consenso e identificación interactiva de HGT, desarrollada Por los autores. Los métodos incluidos permiten validar y visualizar árboles filogenéticos y redes que pueden construirse a partir de datos de distancia o secuencia. [18]

2.2.3.1. Resultados.

Los tres tipos principales de resultados proporcionados por el servidor web de T-REX son los siguientes:

- Un árbol filogenético de dibujo, las estadísticas de ajuste y árbol resultante codificado en el formato Newick. [18]
- Un dibujo de reticulograma y estadísticas de ajuste. [18]
- Una red de HGT en la que las transferencias de genes se indican mediante flechas discontinuas. [18]

Los datos de entrada de T-REX pueden estar en los tres formatos siguientes: Newick, PHYLIP y FASTA. Todos los resultados gráficos proporcionados por el servidor T-REX pueden guardarse en el formato SVG (Scalable Vector Graphics) y luego abrirse y modificarse (por ejemplo, preparado para una publicación o presentación) en el editor gráfico preferido del usuario. Todos los resultados numéricos se dan en el formato de texto. [18]

CAPÍTULO III
MÉTODOLOGÍA DE LA INVESTIGACIÓN

3.1. Localización.

La Universidad Técnica Estatal de Quevedo es el lugar en el que se desarrolló la presente investigación. Se encuentra ubicada en la Avenida Quito km. 1 1/2 vía a Santo Domingo de los Tsáchilas. En la calle Transversal Central entre la Avenida Carlos J. Arosemena y la calle Patria Nueva, junto a la Unidad Educativa Quevedo.

Se encuentra en la parroquia 24 de Mayo del Cantón Quevedo en la provincia de los Ríos en la República del Ecuador. Las coordenadas geográficas de su ubicación son -1° 0' 45" latitud y a -79° 28' 10" longitud.

3.2. Tipo de investigación.

La investigación propuesta es de naturaleza aplicada tecnológica, este tipo de investigaciones se basan fundamentalmente en hallazgos tecnológicos, y tiene como como objetivo enriquecer los bienes y servicios de la sociedad o el sector productivo mediante la implementación de un medio mucho más eficiente que enlace la teoría y el producto.

Por consiguiente, si se contrasta el propósito de esta investigación y la necesidad de desarrollar una Interfaz Web para la ejecución del software de alineamiento múltiple de secuencias con metaheurística multiobjetivo (M2Align), se evidencia de que se trata de investigaciones aplicada tecnológica.

3.2.1. Investigación Aplicada Tecnológica.

La investigación aplicada tecnológica tiene como como objetivo enriquecer los bienes y servicios, es decir darle un valor agregado mediante conocimientos o métodos que mejorarán y harán mucho más eficiente el uso de los mismos.

La presente investigación es de tipo aplicada tecnológica, atribuyendo esto por las siguientes razones que se enunciaran:

- La investigación se centra en el desarrollo de una Interfaz Web para la ejecución del software de alineamiento múltiple de secuencias con metaheurística multiobjetivo (M2Align).
- Facilita la interacción del software M2Align con el usuario, brindando los medios para para el ingreso de los parámetros de entrada que este necesita para su ejecución.

- Reduce el tiempo que conlleva efectuar la ejecución del software M2Align proporcionando más productividad.

3.3. Métodos de investigación.

3.3.1. Método Deductivo.

Método Deductivo, que permitirá analizar diferentes fuentes información que tengan similitud y en donde se encuentren estipuladas especificaciones que debe tener y que necesita una interfaz web destinada al MSA, contrastando y tomando como referencia para que sea de rápido y fácil uso para la comunidad a la cual está destinada.

3.3.2. Método Analítico.

Método Analítico, para conocer las herramientas y determinar que tecnología brindará más prestaciones y cuál de ellas se deben aplicar para que cada funcionalidad que se desarrolle y se implemente en la interfaz web brinde una experiencia satisfactoria a la comunidad a la cual está destinada.

3.4. Fuentes de recopilación de información.

La información necesaria para cumplir con el objetivo de la investigación, se obtuvo de fuentes tales como revistas científicas, documentos de sitios web, repositorios en los que se encuentran alojados las herramientas de software M2Align, jMetalMSA, STRIKE Contacts Generator con las debidas indicaciones de su forma de uso.

3.5. Recursos de Humanos y Materiales.

Los recursos necesarios para que el desarrollo de la investigación se lleve a cabo en cada una de sus fases fueron los siguientes:

3.5.1. Equipo Humano.

El presente proyecto de investigación ha sido desarrollado por el Sr. Jefferson Edilberto Soria Brito, con la ayuda, respaldo y dirección del Ing. Cristian Zambrano Vega, M. Sc. Los mencionados trabajaron en el análisis de los requerimientos, diseño, codificación, transición, implementación y la documentación.

3.5.2. Equipos y Materiales.

3.5.2.1. Hardware.

El hardware que se utilizó para el desarrollo y cumplimiento del presente proyecto fueron los siguientes:

Tabla 1.-Hardware utilizado para el desarrollo de la investigación.

Componente	Características técnicas
Servidor	HP ProLiant DL380 Gen9 E5-2650v3 2 Procesadores Intel Xeon E5-2650v3 10-Core (2.30GHz) /25MB L3 Cache. 32GB (2 x 16GB) DDR4 2133MHz RDIMM de Memoria RAM. 1Gb Ethernet 4-port 331i Adapter. FlexFabric 10Gb 2P 533FLR-T Adapter. Smart Array P440ar/2G Controller Module / (RAID /1/1+0/5/5+0/6/6+0)/ (8) SFF. SAS/SATA HDD bahias. Unidad de SATA DVD-RW/ 6 PCIe slots. 2 fuentes de 800W Flexible Slot Platinum Hot Plug Power Supply. 6 hot plug fans, redundant/ Rack (2U). Disco Duro HP 300GB 12G SAS 10K 2.5in SC ENT HDD
Laptop	DELL INSPIRON N4010 Procesador: Intel Core i3 Sistema operativo: Windows 10 Pro Memoria: 4 GB DDR3 1333Mhz Disco sólido: 480 GB

FUENTE: CONOCIMIENTO PROPIO.

ELABORADO POR: AUTOR.

3.6.2.2. Software.

El software que se utilizó para el desarrollo y cumplimiento del presente proyecto, se las menciona a continuación:

Tabla 2.- Software utilizado para el desarrollo de la investigación.

Componente	Función
NetBeans IDE 8.0.2	Entorno de desarrollo integrado para llevar el proceso de construcción del Servidor Web
S.O. CentOS 7.0	Servidor para alojamiento de la Interfaz y la ejecución del Software M2align.
Visual Paradigm for UML 10.0	Herramienta para la creación de los casos de usos, diagrama de secuencias, diagramas de clase.
Microsoft Office 2016	Desarrollo de documentos de entrega y documentación.
Microsoft Project	Desarrollo del plan calendario de proyecto.
Adobe Reader	Lectura de documentación en PDF.

FUENTE: CONOCIMIENTO PROPIO.

ELABORADO POR: AUTOR.

CAPÍTULO IV
METODOLOGÍA DE DESARROLLO

4.1. Desarrollo de Interfaz Web.

4.1.1. Metodología en cascada.

Se la conoce como metodología o modelo en cascada, porque está compuesta por unas fases que se deben seguir en orden secuencial, es decir que para iniciar una se debe haber concluido la fase anterior, las cuales son el análisis de requerimientos, el diseño, la implementación y las pruebas.

4.1.2. Análisis de requerimientos.

La Interfaz Web W-M2Align a desarrollar permitirá el uso del software M2Align, y tiene como requisito para ponerse en ejecución (funcionamiento) la entrada de 6 parámetros que el usuario debe proporcionar, los cuales son:

- Archivo con los alineamientos de secuencia en formato FASTA.
- Número de evaluaciones máximas del algoritmo.
- Tamaño de la población del algoritmo.
- Archivos PDB (Opciones: Generar automáticamente - Subir manualmente).
- Archivos con los Alineamientos Pre Computarizados.
- Email (Opcional para recuperar el resultado).

Si el usuario provee un email, se deberá enviar al buzón de correo del mismo un mensaje el cual contendrá el enlace para que pueda acceder a verificar el avance o resultado de la ejecución, así también a las ejecuciones que haya realizado anteriormente y ya se encuentren finalizadas. Todos los resultados (ejecuciones realizadas) producto de la ejecución serán listados con información correspondiente a su fecha y hora de ejecución, y su correspondiente estado (Ejecutándose, Finalizado, Error) y podrán ser descargados en un único archivo en formato Zip.

Los archivos generados por la ejecución del software podrán también ser visualizados en la sección de Resultados con la que contará la Interfaz Web, archivos tales como: FUN.tsv, VAR.tsv, RunLog.log, VARSolutions.

Se implementará "MSAViewer" un componente JavaScript de visualización y análisis rápido y fácil para los datos de alineación de secuencias múltiples de cualquier tamaño. Los archivos del directorio VARSolutions serán visualizadas en éste.

Con el fin de conocer la carga del servidor se mostrará una barra que refleje la carga media de trabajo del servidor de los últimos 15 minutos, información útil tanto para el usuario como para el administrador de la interfaz.

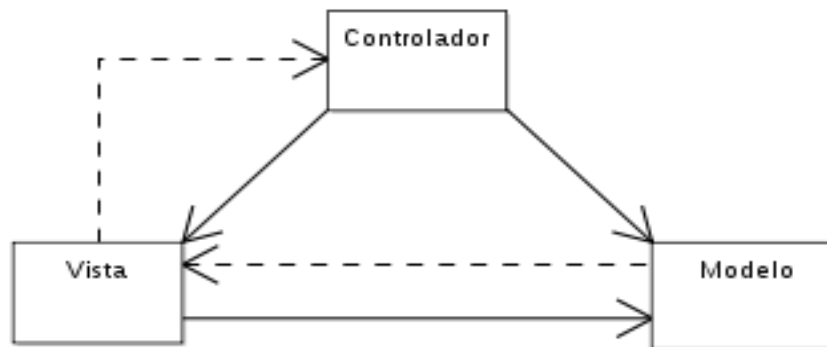
La interfaz web tendrá una parte administrativa en la cual se debe brindar la posibilidad de tener el control de los procesos que se han llevado a cabo debido a la ejecución del software M2Aling, permitiendo Detener, Continuar o Finalizar un proceso, según sea la necesidad.

4.1.3. Diseño del sistema.

4.1.3.1. Patrón de arquitectura de software.

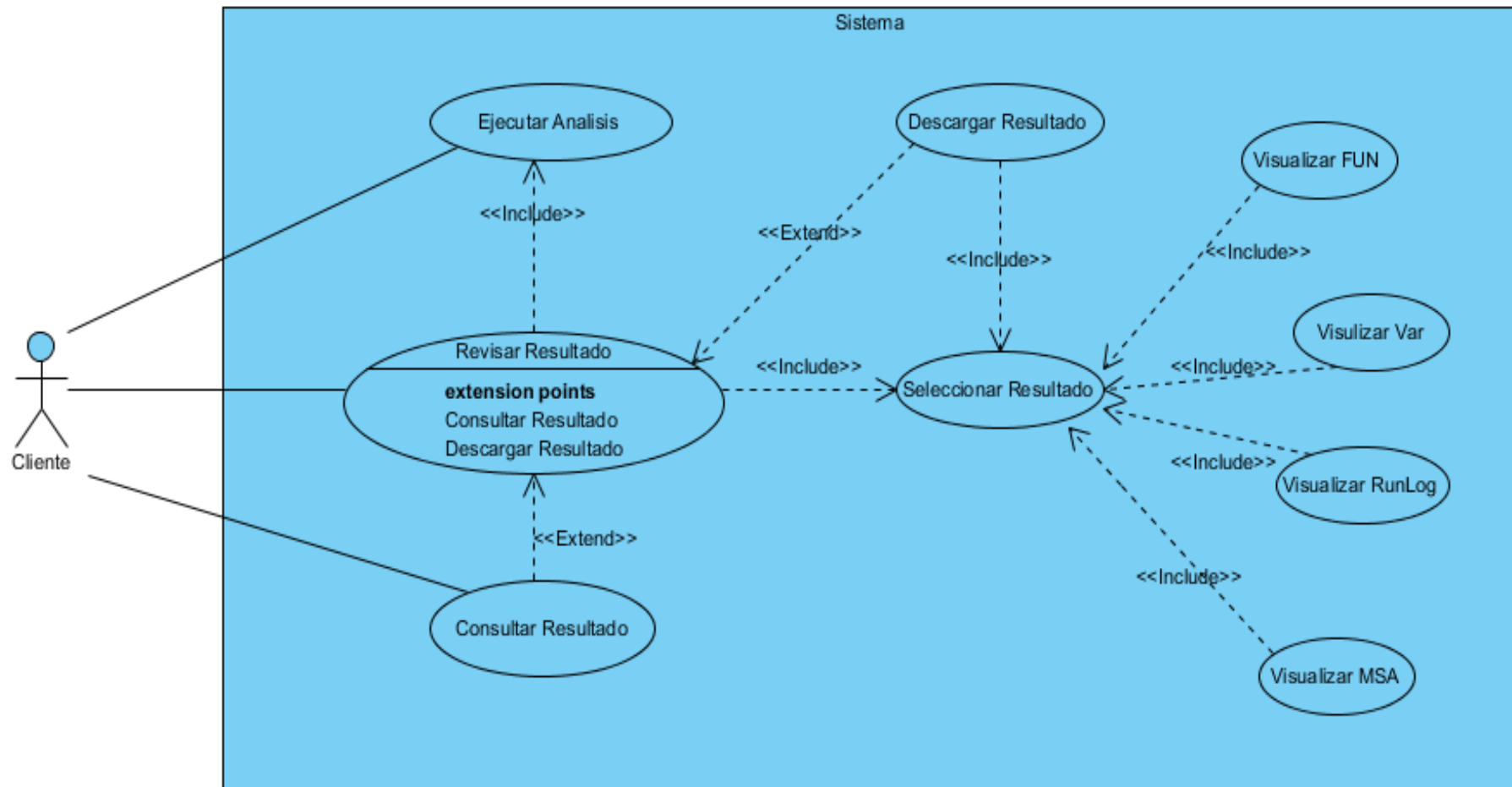
La arquitectura Modelo-Vista-Controlador, también conocida por sus iniciales (MVC) permite separar lo que es la lógica de negocios, los datos y la presentación, tomando como medio de comunicación entre el Modelo (encargado de gestionar los datos) y la Vista (tarea de presentar la salida final al usuario), el Controlador el cual gestiona y provee todo lo necesario para estas partes.

Figura 1.- Patrón MVC



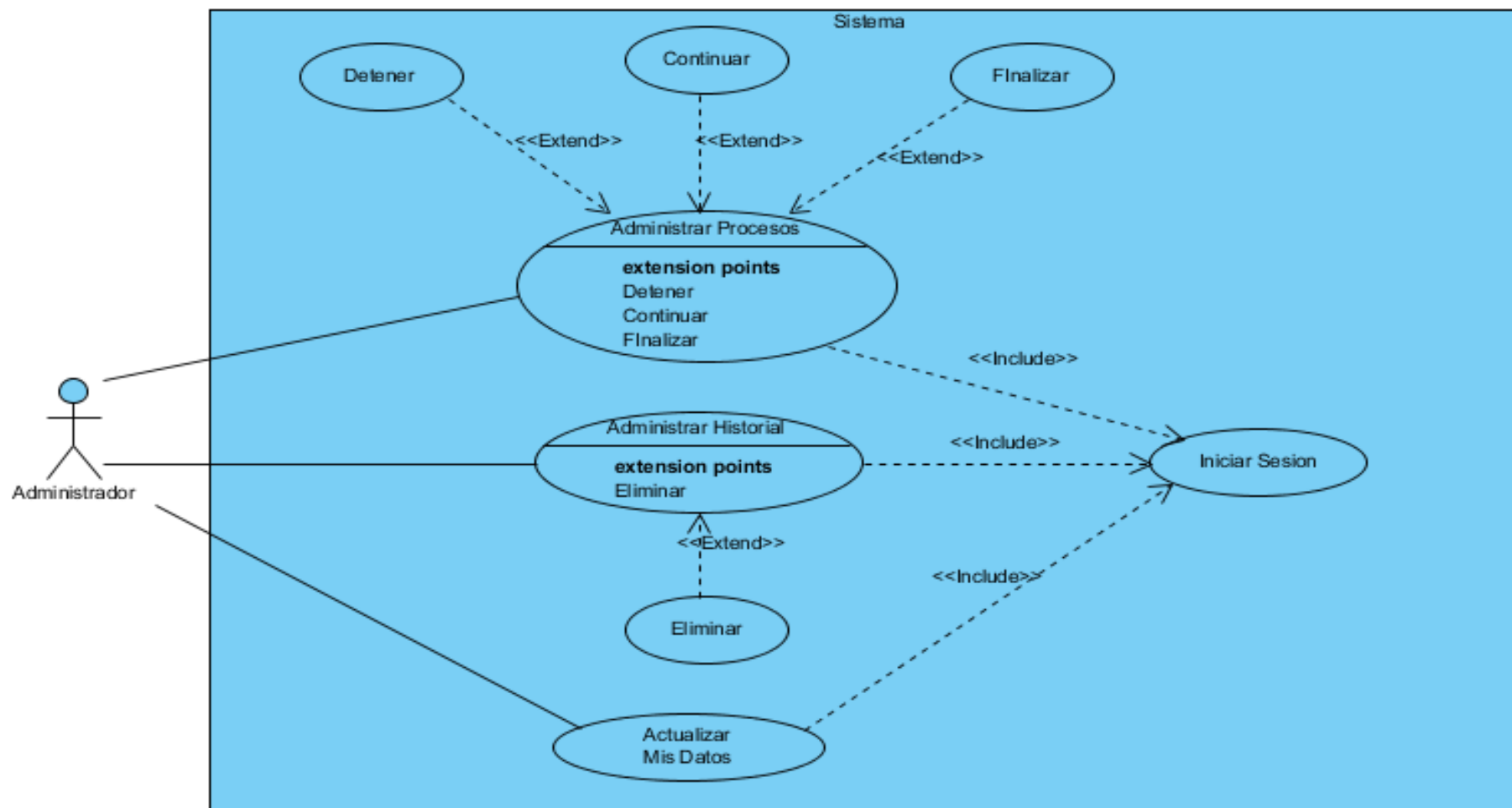
4.1.3.2. Casos de Uso (Cliente).

Figura 2.- Casos de Uso (Cliente).



4.1.3.3. Casos de Uso (Administrador).

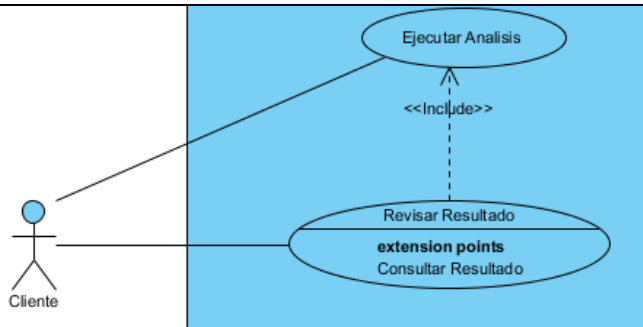
Figura 3.- Casos de Uso (Administrador).

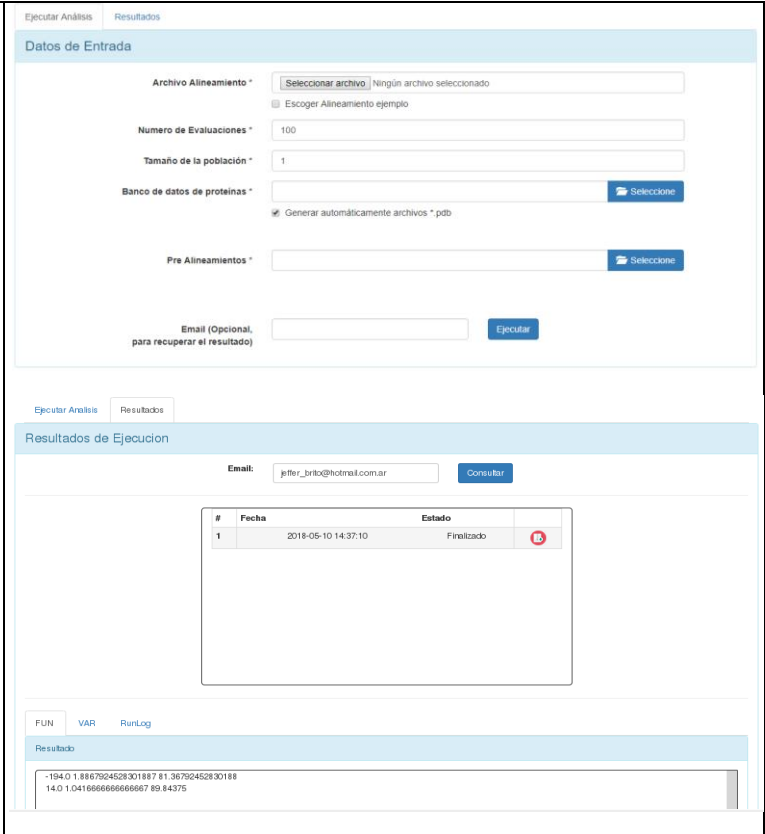
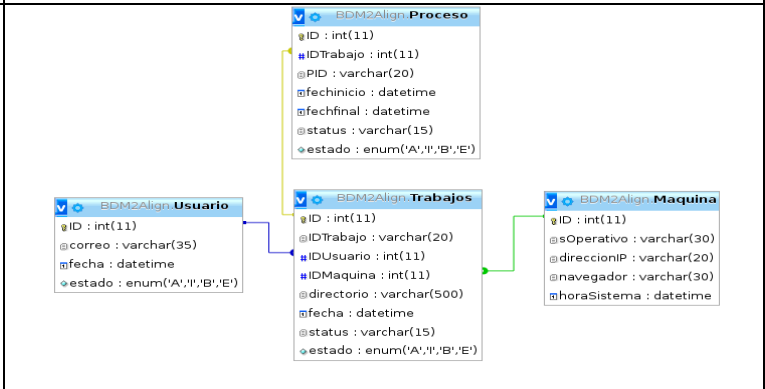


4.1.3.4. Caso de uso extendido (Cliente).

Tabla 3.- Caso de Uso Ejecutar Análisis.

Caso de Uso:		Ejecutar Análisis	
Tipo:	Real	Prioridad:	Alta
Actor:		Cliente	
Propósito:		Ejecutar el software M2Align mediante la interfaz web.	
Resumen:		El usuario puede cargar el archivo con el conjunto de datos de secuencias, los archivos de Información Estructural (*.pdb y *.contacts) de las secuencias para alinear y los alineamientos pre computarizados, el número de evaluaciones máximas y el tamaño de la población.	
Precondiciones:		1.- Usuario Ingresa a la página web inicial “W-M2Align”	
Flujo Normal:			
Actor		Sistema	
1.- Clic en el botón Iniciar Análisis.		2.- Envía a la página de Inicial de la Interfaz Web para la ejecución del software.	
3.-Ingresa el archivo con los alineamientos de secuencia.			
4.- Ingresa el número de evaluaciones.			
5.- Ingresa el Tamaño de la población.			
6.- Clic check “Generar automáticamente archivos *.pdb”			
7.-Ingresa los pre alineamientos.			
8.- Ingresa el email.			
9.-Da clic en Ejecutar.		10.- Valida los campos ingresados, según el tipo de dato que requiere el software M2Align para su ejecución.	
		11.- Crea la carpeta en la cual van hacer almacenados todos los resultados de la ejecución.	

	12.- Envía un enlace al email ingresado, para que el usuario revise el estado de la ejecución.
	13.- Ejecuta la descarga y cálculo de los *.pdb y *.contact de las secuencias dadas.
	14.- Ejecuta el Algoritmo M2Align en background con los datos cargados.
	15.- Se crea un archivo por cada solución del archivo VAR.tsv
	16.- Se posiciona el foco en la pestaña de Resultados
17.- Visualiza el estado de la ejecución realizada.	
Flujo Alternativo:	<p>F.A.3: Da clic en el check “Escoger Alineamiento ejemplo”, y salta al paso número 14.</p> <p>F.A.6: Si el “Generar automáticamente archivos *.pdb” no está chequeado, se deben Ingresar los Archivos PDB.</p> <p>F.A.10: Si existe algún error en los campos ingresados, se notifica dicho error y no se realiza la ejecución.</p> <p>F.A.12: Si no ingreso un email no se envía el enlace para que vea el estado de la ejecución.</p> <p>F.A.13: Si el check “Generar automáticamente archivos *.pdb” no está activo, se realiza el cálculo de los *.contact en base a los *.pdb proporcionados.</p>
Postcondiciones:	<p>Ejecutar el software M2Align con la información provista.</p> <p>Guardar los resultados en un directorio, listo para su descarga.</p> <p>Enviar un email al usuario con el enlace para la revisión de los resultados.</p>
C.U Relacionado:	 <pre> graph LR Cliente((Cliente)) --- EjecutarAnalisis(Ejecutar Analisis) Cliente --- RevisarResultado(Revisar Resultado) EjecutarAnalisis -.-> <<Include>> RevisarResultado RevisarResultado -.-> extension points ConsultarResultado[Consultar Resultado] </pre>

<p>Formulario</p>	 <p>The screenshot shows the BDM2Align web application interface. The top section, 'Datos de Entrada', contains input fields for 'Archivo Alineamiento' (with a file selection button), 'Numero de Evaluaciones' (set to 100), 'Tamaño de la población' (set to 1), 'Banco de datos de proteínas' (with a selection button), and 'Pre Alineamientos' (with a selection button). There is also an 'Email (Opcional, para recuperar el resultado)' field and an 'Ejecutar' button. The bottom section, 'Resultados de Ejecucion', shows an email field with 'jffier_brito@hotmail.com.ar' and a 'Consultar' button. Below this is a table with one row: #1, Fecha: 2018-05-10 14:37:10, Estado: Finalizado, and a red 'ID' icon. At the bottom, there are tabs for 'FUN', 'VAR', and 'RunLog', and a 'Resultado' section displaying a long alphanumeric string.</p>
<p>Base datos</p>	 <p>The diagram illustrates the database schema for BDM2Align. It consists of four tables: 'BDM2Align.Usuario', 'BDM2Align.Trabajo', 'BDM2Align.Maquina', and 'BDM2Align.Proceso'. 'BDM2Align.Usuario' has fields: ID (int(11)), correo (varchar(35)), fecha (datetime), and estado (enum('A','I','B','E')). 'BDM2Align.Trabajo' has fields: ID (int(11)), IDTrabajo (varchar(20)), IDUsuario (int(11)), IDMaquina (int(11)), directorio (varchar(500)), fecha (datetime), status (varchar(15)), and estado (enum('A','I','B','E')). 'BDM2Align.Maquina' has fields: ID (int(11)), sOperativo (varchar(30)), direccionIP (varchar(20)), navegador (varchar(30)), and horaSistema (datetime). 'BDM2Align.Proceso' has fields: ID (int(11)), IDTrabajo (int(11)), PID (varchar(20)), fechinicio (datetime), fechfinal (datetime), status (varchar(15)), and estado (enum('A','I','B','E')). Lines indicate foreign key relationships between the tables.</p>
<p>Procedimientos Almacenados</p>	<pre> Call InsertUsuario("'.\$this->correo.'", "'.\$this->fecha.'", "'.\$this->estado.'"); Call InsertMaquina("'.\$this->navegador.'", "'.\$this->sOperativo.'", "'.\$this->direccionIP.'", "'.\$this->horaSistema.'"); Call InsertTrabajo("'.\$this->IDTrabajo.'", "'.\$this->IDUsuario.'", "'.\$this->IDMaquina.'", "'.\$this->directorio.'", "'.\$this->fecha.'", "'.\$this->status.'", "'.\$this->estado.'"); Call InsertProceso("'.\$this->IDTrabajo.'", "'.\$this->PID.'", "'.\$this->fechinicio.'", "'.\$this->status.'", "'.\$this->estado.'"); Call UpdStaProceso("'.\$this->ID.'", "'.\$this->status.'"); Call UpdFechaProceso("'.\$this->ID.'", "'.\$this->fechfinal.'"); Call UpdStaTrabajo("'.\$this->ID.'", "'.\$this->status.'"); </pre>

Objetos	Usuario, Maquina, Job, DatosMaquina, Trabajo, Process, Proceso, Directorio, Email, Strike, SupervisorProceso, EjecutarBackground.
Métodos	Proceso: ejecutarTrabajo(); Trabajo: iniciarTrabajo(); Trabajo: cgDatosDirecotrio(); Trabajo: crearDirectorio(); Trabajo: crearDirectorio(); Trabajo: datosTrabajo(); Maquina: infMaquina(); Maquina: getBrowser(); Maquina: getOS(); Maquina: getIp(); Usuario: infUsuario(); Usuario: Guardar(); Maquina: Guardar(); Job: Guardar(); Directorio: crearFile(); Proceso: preAlineamientos(); Directorio: crearDirectorio(); Directorio: copy_r(); Directorio :subirArchivo(); Directorio: subirArchivos(); Directorio: armarStringArch(); Directorio: writeFile(); Email: sendMail(); Proceso: ejecutarProceso(); EjecutarBackground: runComando(); EjecutarBackground: runComandoF(); EjecutarBackground: getError(); EjecutarBackground: getPid(); EjecutarBackground: setPid(); Trabajo: actualizarEstado(); Job: Actualizar(); Process: Guardar(); Proceso: iniciarSupervision(); Proceso: SolutionsFileVar(); Strike: crearDirectorio(); Strike: ejecutarStrike();
Validaciones	Número de evaluaciones y Tamaño de la población, solo números enteros. Email, que cumpla con el formato de un correo. Alineamiento, que el archivo escogido sea la extensión de archivos aceptados. Pre-alineamientos, que sea la extensión de archivos aceptados y el número de archivos escogidos sea mayor o igual a 2.

Tabla 4.- Caso de Uso Revisar Resultado.

Caso de Uso:		Revisar Resultado	
Tipo:	Real	Prioridad:	Media
Actor:		Cliente	
Propósito:		Comprobar el estado de la ejecución del software M2Align	
Resumen:		El usuario puede observar el estado de la ejecución que realizó, además se listan ejecuciones anteriores si existiesen, mostrando información tal como el estado, si está en curso o ya finalizó, y los resultados de la ejecución que arrojó el software en caso de que haya finalizado, para posteriormente proceder a descargarlos.	
Precondiciones		1.- Ejecución realizada por parte del usuario del software M2Align.	
Flujo Normal:			
Actor		Sistema	
1.- Clic en la pestaña Resultados .		2.- Muestra el estado y resultado de la ejecución realizada en el caso de uso Ejecutar Análisis y si existen ejecuciones anteriores también las muestra.	
		3. Refresca la lista de las ejecuciones en intervalos de 6 segundos	
4. Visualiza el listado de las ejecuciones.			
Flujo Alternativo:		F.A.1: Ingresar en el buscador el enlace enviado al email ingresado en el caso de uso Ejecutar Análisis . F.A.4: Clic en icono descargar, ir al caso de uso Descargar . Clic en la pestaña FUN, ir al caso de uso Visualizar FUN . Clic en la pestaña VAR, ir al caso de uso Visualizar VAR . Clic en la pestaña RunLog, ir al caso de uso Visualizar RunLog . Clic en la pestaña Visualizar MSA, ir al caso de uso Visualizar MSA .	
Postcondiciones:		Visualizar los resultados de la ejecución en tiempo real.	
C.U Relacionado:			

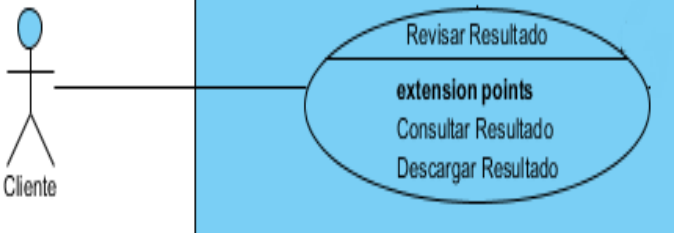
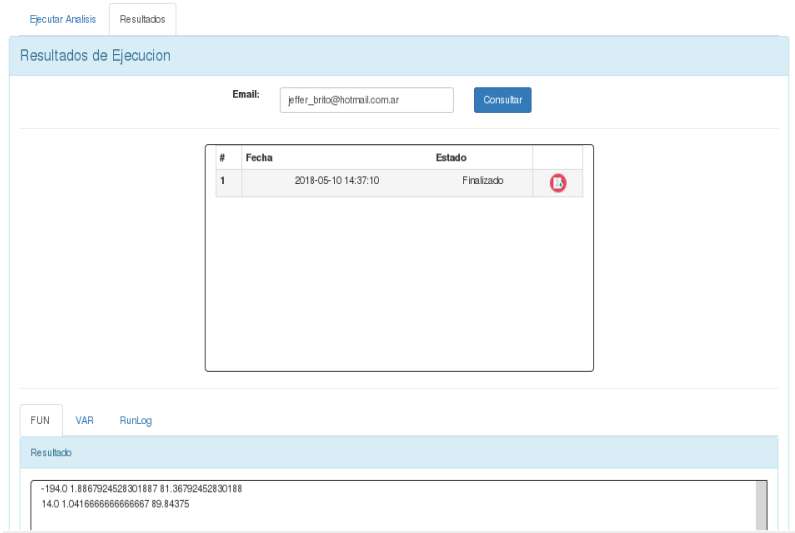
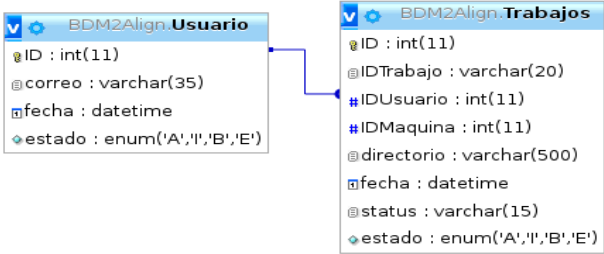
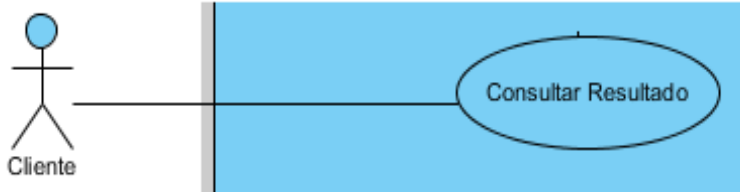
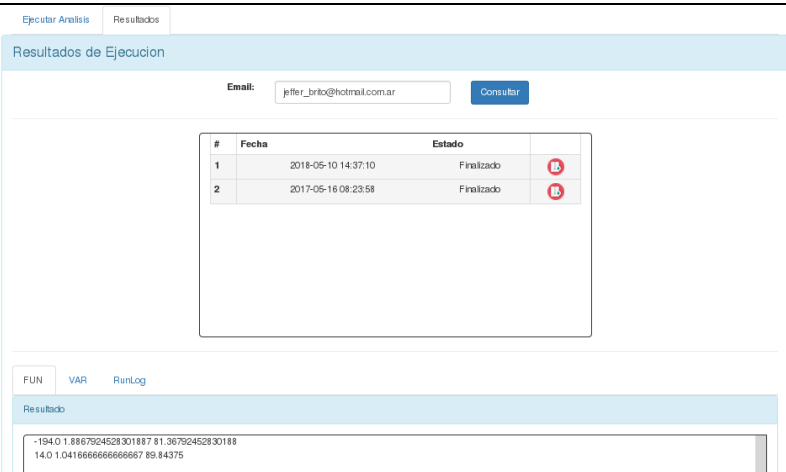
	
Formulario	
Base datos	
Procedimientos Almacenados	Call SelectTrabajo("'" . \$tid . "', '" . \$user . "', 'LISTA');
Objetos	Usuario, Job.
Métodos	Job: getListTrabajo();
Validaciones	El campo Email debe estar lleno. Debe existir el identificador único del trabajo.

Tabla 5.- Caso de Uso Consultar Resultado.

Caso de Uso:		Consultar Resultado	
Tipo:	Real	Prioridad:	Media
Actor:		Cliente	
Propósito:		Consultar los resultados de las ejecuciones del software M2Align.	

Resumen:	El usuario podrá listar toda la lista de las ejecuciones que ha realizado con su respectiva fecha y estado, y ver los resultados arrojados por dichas ejecuciones.
Precondiciones:	1.- Ejecución realizada por parte del usuario del software M2Align.
Flujo Normal:	
Actor	Sistema
1.- Ingresa el email.	
2.- Clic en el botón consultar.	2.- Lista todas las ejecuciones realizadas por email provisto.
	3.- Refresca la lista de las ejecuciones en intervalos de 6 segundos
4.- Visualiza el listado de las ejecuciones.	
Flujo Alternativo:	<p>F.A.4:</p> <p>Clic en icono descargar, ir al caso de uso Descargar Resultado.</p> <p>Clic en la pestaña FUN, ir al caso de uso Visualizar FUN.</p> <p>Clic en la pestaña VAR, ir al caso de uso Visualizar VAR.</p> <p>Clic en la pestaña RunLog, ir al caso de uso Visualizar RunLog.</p>
Postcondiciones:	Resultados de la ejecución visualizados en tiempo real.
C.U Relacionado:	 <pre> graph LR Cliente((Cliente)) --- ConsultarResultado([Consultar Resultado]) </pre>
Formulario	

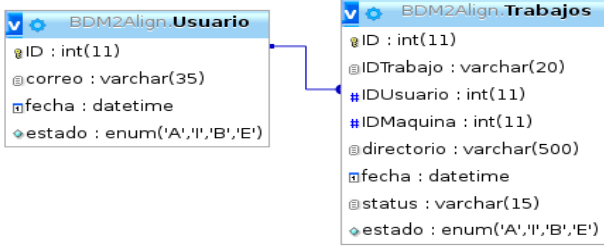
Base datos	
Procedimientos Almacenados	Call SelectTrabajo(" . \$tid . ", " . \$user . ", 'LISTA');
Objetos	Usuario, Job.
Métodos	Job: getListTrabajo();
Validaciones	El campo Email debe estar lleno. Debe existir el identificador único del trabajo.

Tabla 6.- Caso de Uso Descargar Resultado

Caso de Uso:		Descargar Resultado	
Tipo:	Real	Prioridad:	Media
Actor:		Cliente	
Propósito:		Descargar el o los resultados producto de las ejecuciones del software M2Align.	
Resumen:		Por cada ejecución que realiza el usuario se genera una carpeta que contiene los resultados arrojados por el software M2Align, la cual estará disponible para descargar.	
Precondiciones:		1.- Ejecución realizada por parte del usuario del software M2Align.	
Flujo Normal:			
Actor		Sistema	
1.- Clic en el icono de descargar de la lista de resultados		2.- Comprueba que el estado de la ejecución sea Finalizado , es decir que haya concluido.	
		3.- Comprime la carpeta con todo el contenido resultado de ejecución del algoritmo M2Align, la cual fue generada en el caso de uso Ejecutar Análisis .	
4.- Clic en la opción Guardar archivo			
5.- Clic en el botón Guardar.		6.- Descarga toda la carpeta comprimida en el ordenador del usuario.	
Flujo Alterno:		F.A.2: No se procede a descargar, pues la ejecución no ha Finalizado , y se muestra un mensaje informativo “No disponible” .	

	F.A.5: Clic en el botón cancelar, para abortar la descarga.									
Postcondiciones:	Descarga de los resultados obtenidos de la ejecución.									
C.U Relacionado:	<pre>graph TD Cliente((Cliente)) --- E(Ejecutar Analisis) Cliente --- R(Revisar Resultado) R -.-> <<Include>> E R -.-> <<Include>> S(Seleccionar Resultado) S -.-> <<Include>> D(Descargar Resultado) D -.-> <<Extend>> R</pre> <p>extension points Consultar Resultado Descargar Resultado</p>									
Formulario	<p>Resultados de Ejecucion</p> <table><thead><tr><th>#</th><th>Fecha</th><th>Estado</th></tr></thead><tbody><tr><td>1</td><td>2018-05-10 14:37:10</td><td>Finalizado</td></tr><tr><td>2</td><td>2017-05-16 08:23:58</td><td>Finalizado</td></tr></tbody></table> <p>Resultado</p> <p>194.0.1.8867924528.301887 81.367924528.30188 14.0.1.041666666666667 89.84375</p> <p>Abriendo M2AlignResult.zip</p> <p>Ha elegido abrir: M2AlignResult.zip que es: archivador Zip (6,9 KB) de: http://localhost</p> <p>¿Qué debería hacer Firefox con este archivo?</p> <p><input type="radio"/> Abrir con gedit (predeterminada)</p> <p><input checked="" type="radio"/> Guardar archivo</p> <p><input type="checkbox"/> Hacer esto automáticamente para estos archivos a partir de ahora.</p> <p>Cancelar Aceptar</p>	#	Fecha	Estado	1	2018-05-10 14:37:10	Finalizado	2	2017-05-16 08:23:58	Finalizado
#	Fecha	Estado								
1	2018-05-10 14:37:10	Finalizado								
2	2017-05-16 08:23:58	Finalizado								
Base datos	<p>BDM2Align.Trabajos</p> <ul style="list-style-type: none">ID : int(11)IDTrabajo : varchar(20)IDUsuario : int(11)IDMaquina : int(11)directorio : varchar(500)fecha : datetimestatus : varchar(15)estado : enum('A','I','B','E')									

Procedimientos Almacenados	Call SelectTrabajo("'" . \$tid . "'", 'PORID');
Objetos	Job, Directorio
Métodos	Job: getTrabajo(); Directorio: bucarTodoArchivo(); Zipper: generarZip();
Validaciones	Estado de la ejecución, debe ser Finalizado para poder descargar.

Tabla 7.- Caso de Uso Visualizar FUN

Caso de Uso:	Visualizar FUN		
Tipo:	Real	Prioridad:	Baja
Actor:	Cliente		
Propósito:	Visualizar la aproximación frontal de Pareto.		
Resumen:	Vista previa del archivo que contiene las soluciones arrojadas por el software M2Align. Para cada solución, este archivo contiene una línea con los tres valores objetivos.		
Precondiciones:	1.- Ejecución realizada por parte del usuario del software M2Align.		
Flujo Normal:			
Actor	Sistema		
1.- Clic en la Pestaña FUN	2.- Lee el archivo FUN.tsv generado por la ejecución		
	3.- Muestra el archivo en el contenedor de la pestaña FUN		
	4.- Refresca el contenido en intervalos de 3 segundos.		
5.- Visualiza la aproximación frontal de Pareto.			
Flujo Alternativo:	No existe flujo alternativo.		
Postcondiciones:	Visualizar el contenido del archivo FUN.tsv		
C.U Relacionado:	<pre> graph LR Cliente((Cliente)) --- RevisarResultado(Revisar Resultado) RevisarResultado -.-> <<Include>> SeleccionarResultado(Seleccionar Resultado) SeleccionarResultado -.-> <<Include>> VisualizarFUN(Visualizar FUN) RevisarResultado --- ExtensionPoints[extension points Consultar Resultado Descargar Resultado] </pre>		

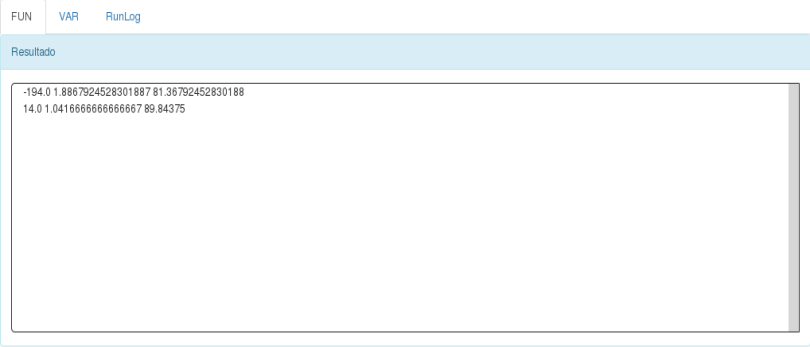
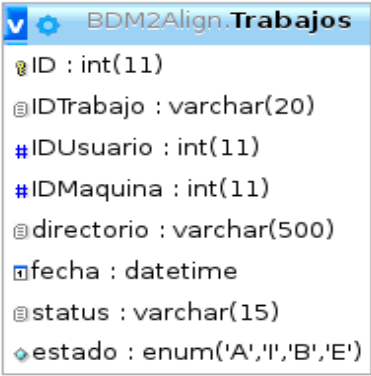
Formulario	
Base datos	
Procedimientos Almacenados	Call SelectTrabajo("'" . \$tid . "',",'PORID');
Objetos	Job
Métodos	Job: getTrabajo();
Validaciones	No hay validaciones.

Tabla 8.- Caso de Uso Visualizar VAR.

Caso de Uso:	Visualizar VAR		
Tipo:	Real	Prioridad:	Baja
Actor:	Cliente		
Propósito:	Visualizar la aproximación del conjunto de Pareto		
Resumen:	Vista previa del archivo que contiene las soluciones arrojadas por el software M2Align. Cada solución está representada en formato FASTA.		
Precondiciones:	1.- Ejecución realizada por parte del usuario del software M2Align.		
Flujo Normal:			
Actor	Sistema		
1.- Clic en la Pestaña VAR	2.- Lee el archivo VAR.tsv generado por la ejecución		

	3.- Muestra el archivo en el contenedor de la pestaña VAR
	4.- Refresca el contenido en intervalos de 3 segundos.
5.- Visualiza las soluciones en formato FASTA.	
Flujo Alternativo:	No hay flujo alternativo.
Postcondiciones:	Visualizar el contenido del archivo VAR.tsv
C.U Relacionado:	<pre> graph LR Cliente((Cliente)) --- UC1(Revisar Resultado extension points Consultar Resultado Descargar Resultado) UC1 -.-> <<Include>> UC2(Seleccionar Resultado) UC2 -.-> <<Include>> UC3(Visualizar Var) </pre>
Formulario	
Base datos	
Procedimientos Almacenados	Call SelectTrabajo(" . \$tid . "," , 'PORID');
Objetos	Job
Métodos	Job: getTrabajo();
Validaciones	No hay validaciones.

Tabla 9.- Caso de Uso Visualizar RunLog.

Caso de Uso:		Visualizar RunLog	
Tipo:	Real	Prioridad:	Baja
Actor:		Cliente	
Propósito:		Visualizar los eventos o acciones de ejecución.	
Resumen:		Visualizar el registro de eventos o acciones que se realizaron al ejecutar el Software M2Align. En la cual se encontrará información como el tiempo de ejecución, la fecha entre otros.	
Precondiciones:		1.- Ejecución realizada por parte del usuario del software M2Align.	
Flujo Normal:			
Actor		Sistema	
1.- Clic en la Pestaña RunLog		2.- Lee el archivo jMetal.log generado por la ejecución	
		3.- Muestra el archivo en el contenedor de la pestaña RunLog	
		4.- Refresca el contenido en intervalos de 3 segundos.	
5.- Visualiza registro de ejecución.			
Postcondiciones:		Visualizar el contenido del archivo jMetal.log	
Flujo Alternativo:		No hay flujo alternativo.	
C.U Relacionado:		<pre> graph LR Cliente((Cliente)) --- RevisarResultado(Revisar Resultado) RevisarResultado -.-> <<Include>> SeleccionarResultado(Seleccionar Resultado) SeleccionarResultado -.-> <<Include>> VisualizarRunLog(Visualizar RunLog) RevisarResultado -.-> extension points ConsultarResultado(Consultar Resultado) RevisarResultado -.-> extension points DescargarResultado(Descargar Resultado) </pre>	
Formulario			

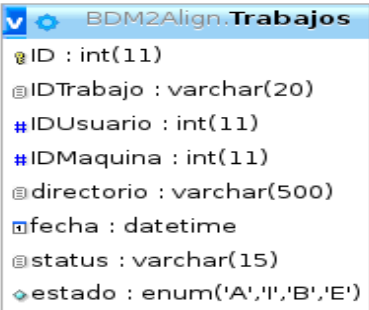
Base datos	
Procedimientos Almacenados	Call SelectTrabajo("'" . \$tid . "',",'PORID');
Objetos	Job
Métodos	Job: getTrabajo();
Validaciones	No hay validaciones

Tabla 10.- Caso de Uso Visualizar MSA.

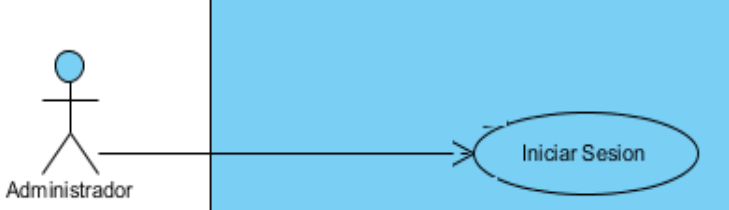

Caso de Uso:		Visualizar MSA	
Tipo:	Real	Prioridad:	Baja
Actor:		Cliente	
Propósito:		Mostrar los alineamientos en el componente MSAViewer	
Resumen:		Visualizar de forma rápida y fácil los datos de alineación de secuencias múltiples de cualquier tamaño en el componente JavaScript MSAViewer .	
Precondiciones:		1.- Ejecución realizada por parte del usuario del software M2Align.	
Flujo Normal:			
Actor		Sistema	
1.- Clic en la Pestaña Visualizar MSA		2.- Seleccionar una solución de la lista de soluciones.	
		3.- Carga el alineamiento de secuencia en el componente MSAViewer .	
		4.- Carga el componente MSAViewer con las opciones que este posee para el manejo datos de alineación de secuencias.	
5.- Interpreta los datos de alineamiento de secuencias.			
Postcondiciones:		Visualizar las soluciones del archivo de soluciones VAR.tsv	

Flujo Alternativo:	No hay flujo alternativo.
C.U Relacionado:	<pre> graph LR Cliente((Cliente)) --- UC1([extension points Revisar Resultado Consultar Resultado Descargar Resultado]) UC1 -.-> <<Include>> UC2([Seleccionar Resultado]) UC2 -.-> <<Include>> UC3([Visualizar MSA]) </pre>
Formulario	
Base datos	Los datos se extraen del conjunto de soluciones que genera la ejecución del software
Procedimientos Almacenados	No existen procedimientos almacenados.
Objetos	Job, Directorio
Métodos	Job: getTrabajo(); Directorio: leerDirectorio();
Validaciones	Exista el directorio con las soluciones.

4.1.3.5. Caso de uso extendido (Administrador).

Tabla 11.- Caso de Uso Iniciar Sesión.

Caso de Uso:	Iniciar Sesión		
Tipo:	Real	Prioridad:	Alta
Actor:	Administrador		
Propósito:	Loguearse para administrar y ver historial de los procesos y actualizar sus datos.		
Resumen:	Iniciar sesión con sus credenciales para tener acceso a administrar y ver el historial de los procesos que se han llevado a cabo, a modificar cambios en sus credenciales.		
Precondiciones:	1.- Usuario Ingresa a la página web inicial “W-M2Align”		

Flujo Normal:	
Actor	Sistema
1.- Dar clic en el icono “user” ubicado en el pie de página.	2.- Presenta el formulario para ingresar las credenciales.
3.- Ingresar su Usuario	
4.- Ingresar su Contraseña	
5.- Clic en el botón enviar	6.- Comprueba que las credenciales sean válidas.
	7.- Redirecciona a la página inicial del administrador.
Flujo Alternativo:	F.A.3: El usuario da clic en el botón cerrar o en la “x” en la parte superior del formulario, cancelando el inicio de sesión.
Postcondiciones:	Acceso a las opciones de administrador.
C.U Relacionado:	
Formulario	

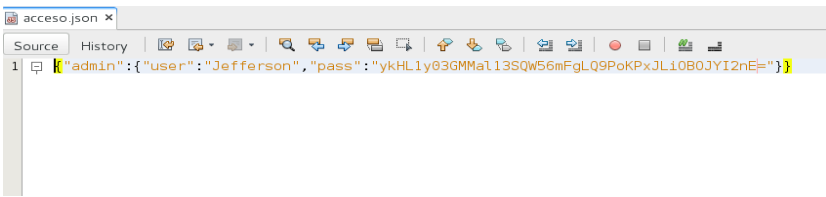
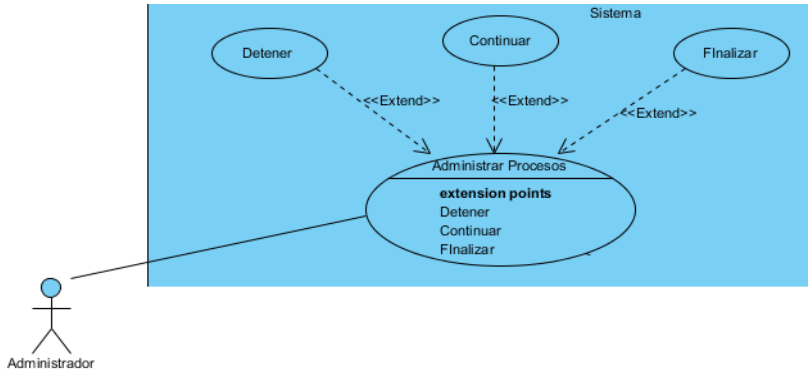
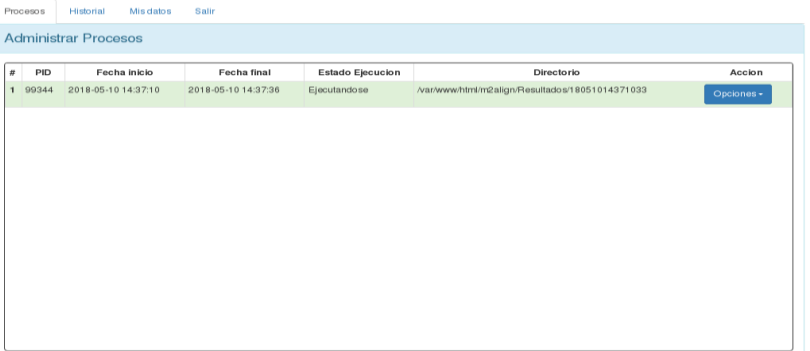
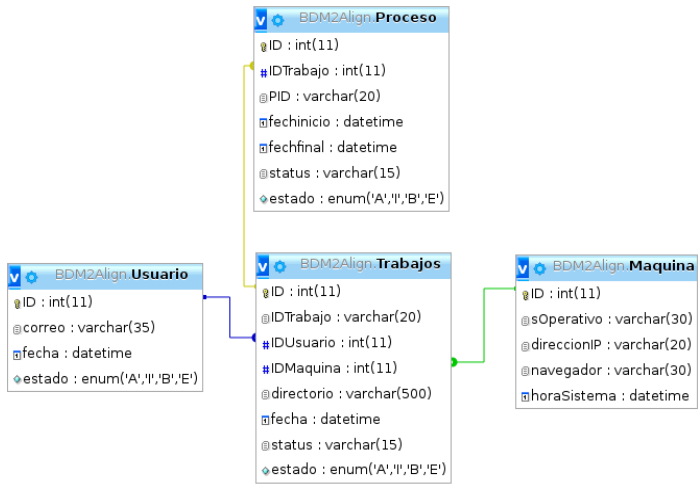
Base datos	<p>Los datos están almacenados en un archivo con formato JSON</p>  <pre>1 [{"admin":{"user":"Jefferson","pass":"ykHL1y03GMMa1.13SQw56mFgLQ9P0kPxJL10B0JYI2nE="}}]</pre>
Procedimientos Almacenados	No hay procedimientos almacenados.
Objetos	Login, Encriptación
Métodos	Login: valida_user(); Login: validarIngreso(); Encriptacion:decrypt(); Login: crear_sesion();
Validaciones	Usuario y contraseña, solo números y letras.

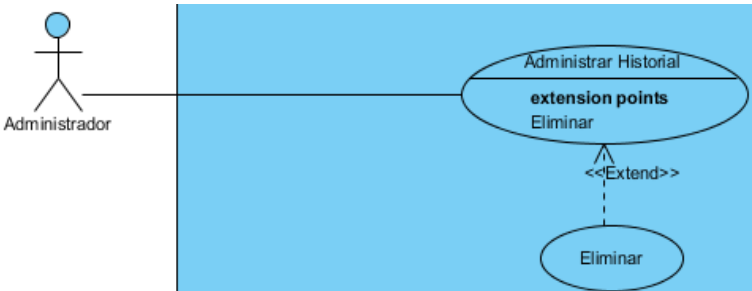
Tabla 12.- Caso de Uso Administrar Procesos.

Caso de Uso:		Administrar Procesos	
Tipo:	Real	Prioridad:	Media
Actor:		Administrador	
Propósito:		Administrar los Procesos que se encuentra ejecutándose.	
Resumen:		Se visualiza los procesos (ejecuciones realizadas por el usuario) que se encuentran activos, es decir cuyo estado sea “Ejecutándose” , para poderlos pausarlos, continuarlos o finalizarlos.	
Precondiciones:		1.- Inicio de sesión del usuario administrador.	
Flujo Normal:			
Actor		Sistema	
		1.- Lista los procesos que se encuentra en ejecución.	
2.- Identifica el proceso que quiere cambiarle el estado			
3.- Selecciona la acción que desee del combo de opciones (Detener, Continuar, Finalizar)		4.- Realiza la acción, dependiendo de la opción escogida, mediante la ejecución de un comando en la terminal(console).	
		5.- Actualiza el estado del proceso en la Base de datos.	

6.- Visualiza los procesos con el estado actualizado.	
Flujo Alternativo:	No hay flujo alternativo.
Postcondiciones:	Se Detiene – Continúa - Finaliza el proceso según la opción escogida.
C.U Relacionado:	
Formulario	
Base datos	
Procedimientos Almacenados	Call SelectProceso('' . \$status . '', 'LISTA');
Objetos	Process, EjecutarBackground
Métodos	Process: getListProceso();

	EjecutarBackground::stopT(); EjecutarBackground::contP(); EjecutarBackground::stopF();
Validaciones	Estado de ejecución, debe ser Ejecutándose.

Tabla 13.- Caso de Uso Administrar Historial.

Caso de Uso:	Administrar Historial		
Tipo:	Real	Prioridad:	Media
Actor:	Administrador		
Propósito:	Administrar las ejecuciones ya finalizadas realizadas al software		
Resumen:	Se lista todos los procesos los cuales son las ejecuciones realizadas al software M2Align mostrando información tales como: número de proceso, fecha inicial y final de ejecución entre otros, y brindando la posibilidad de eliminar el registro seleccionado.		
Precondiciones:	1.- Ejecución realizada por parte del usuario del software M2Align. 2.- Inicio de sesión del usuario administrador.		
Flujo Normal:			
Actor	Sistema		
1.- Clic en la Pestaña Historial	2.- Lista los procesos que se encuentra en estado Finalizado		
3.- Clic en el botón eliminar, del registro que desee	4.- Elimina de la lista de procesos el registro seleccionado		
	5.- Refresca el contenido de la lista de procesos.		
6.- Visualiza la lista de los procesos.			
Flujo Alternativo:	No hay flujo alternativo.		
Postcondiciones:	El registro seleccionado se elimina de la lista de procesos.		
C.U Relacionado:	 <pre> graph LR Admin[Administrador] --- AdminHist([Administrar Historial]) AdminHist -.-> <<Extend>> Eliminar([Eliminar]) </pre>		

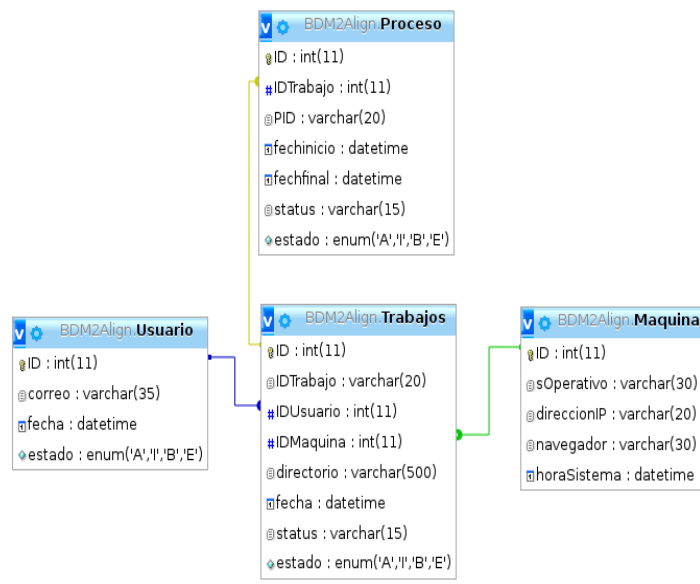
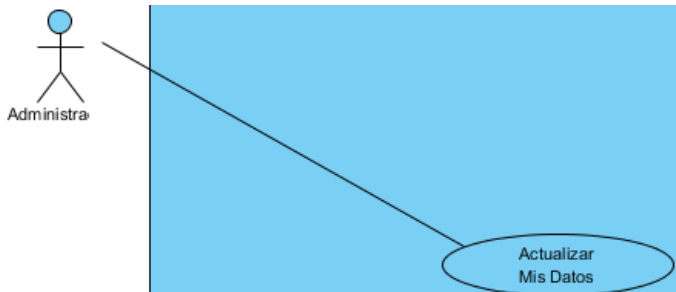
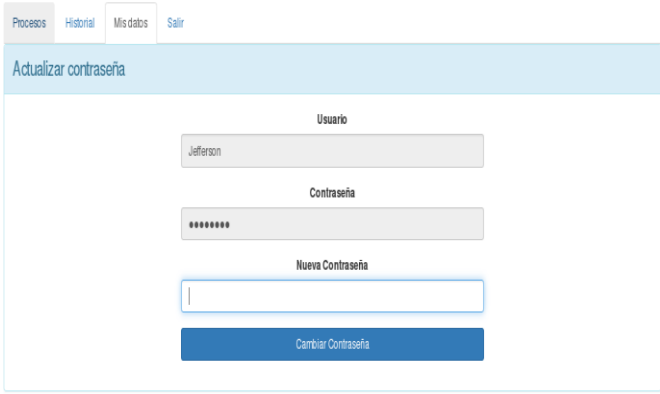
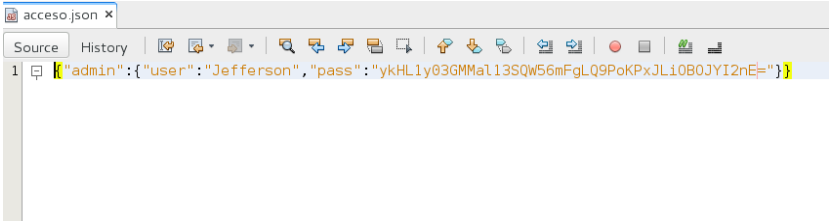
Formulario	
Base datos	
Procedimientos Almacenados	Call SelectProceso('".\$id."', 'TODOFIN');
Objetos	Process
Métodos	Process: getHistorialProceso ();
Validaciones	Estado de ejecución, debe ser Finalizado.

Tabla 14.- Caso de Uso Actualizar mis datos.

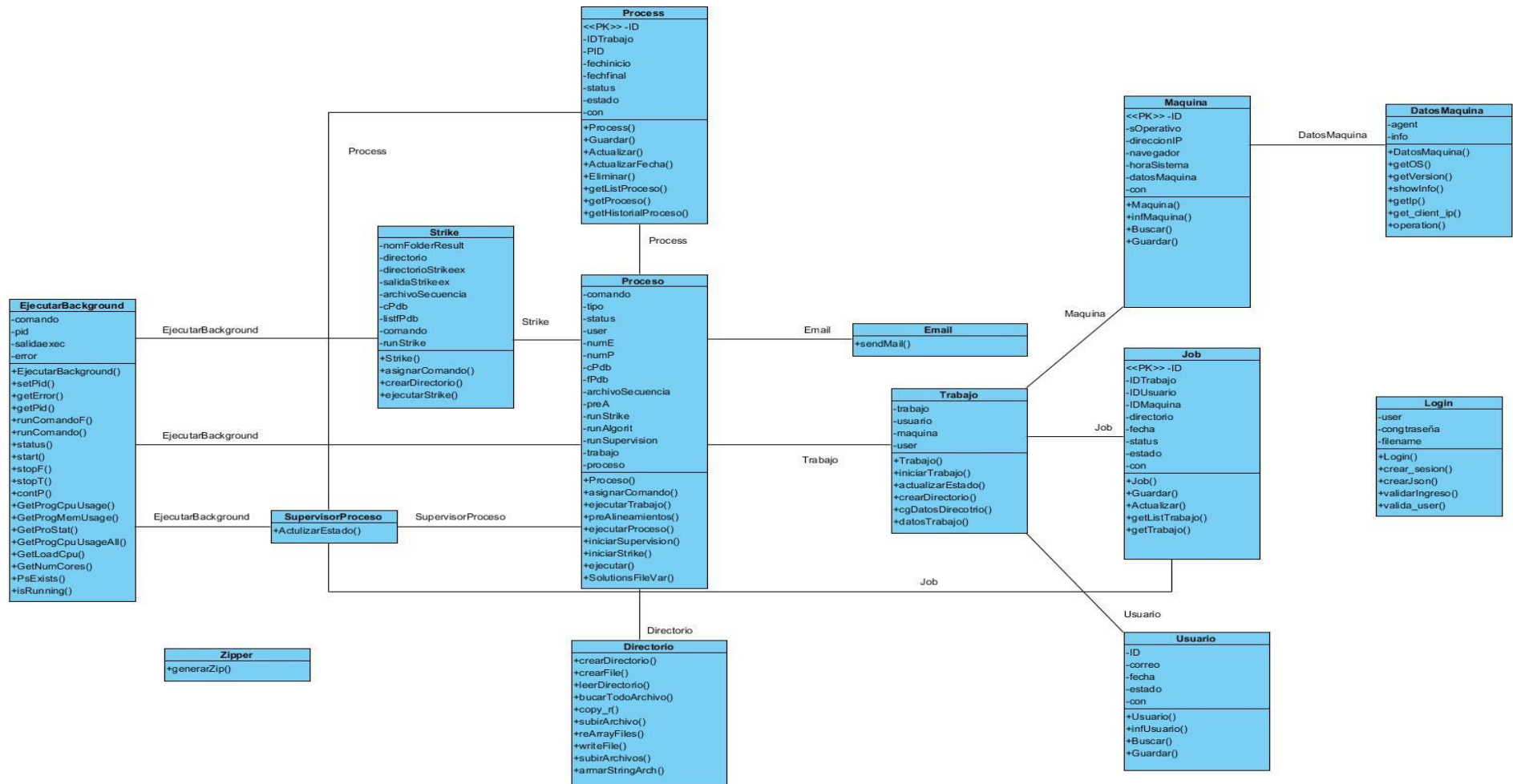
Caso de Uso:		Actualizar mis datos	
Tipo:	Real	Prioridad:	Media
Actor:	Administrador		
Propósito:	Actualizar la contraseña del administrador		

Resumen:	Permite proceder a cambiar la contraseña en caso de que al administrador tenga la necesidad de hacerlo.
Precondiciones:	1.- Inicio de sesión del usuario administrador.
Flujo Normal:	
Actor	Sistema
1.- Clic en la Pestaña Mis datos	2.- Muestra el formulario para cambiar la contraseña.
3.- Ingresa la nueva contraseña	
4.- Clic en el botón cambiar contraseña.	5.- Valida que el valor campo contraseña nueva no sea igual a la anterior y no este vacío.
	6.- Actualiza la contraseña en el archivo con formato json y muestra un mensaje de “contraseña cambiada”.
Flujo Alternativo:	F.A.5: Si las contraseñas coinciden muestra un mensaje de alerta, y no se realiza ninguna acción.
Postcondiciones:	Se actualiza la contraseña del administrador.
C.U Relacionado:	
Formulario	
Base datos	Los datos están almacenados en un archivo con formato JSON

	
Procedimientos Almacenados	No hay procedimientos almacenados
Objetos	Login
Métodos	Login: valida_user(); Login: crearJson ();
Validaciones	Nueva contraseña, solo números y letras.

4.1.3.6. Diagrama de Clases.

Figura 4.- Diagrama de Clases.



4.1.3.7. Diagrama de Secuencias.

Teniendo en consideración que las acciones guardar, actualizar y eliminar datos son repetitivas en todos los procedimientos, se tomaron en consideración los diagramas de secuencias más relevantes.

4.1.3.7.1. Secuencia Ejecutar Análisis.

Figura 5.- Diagrama de secuencia Ejecutar Análisis. (Parte 1)

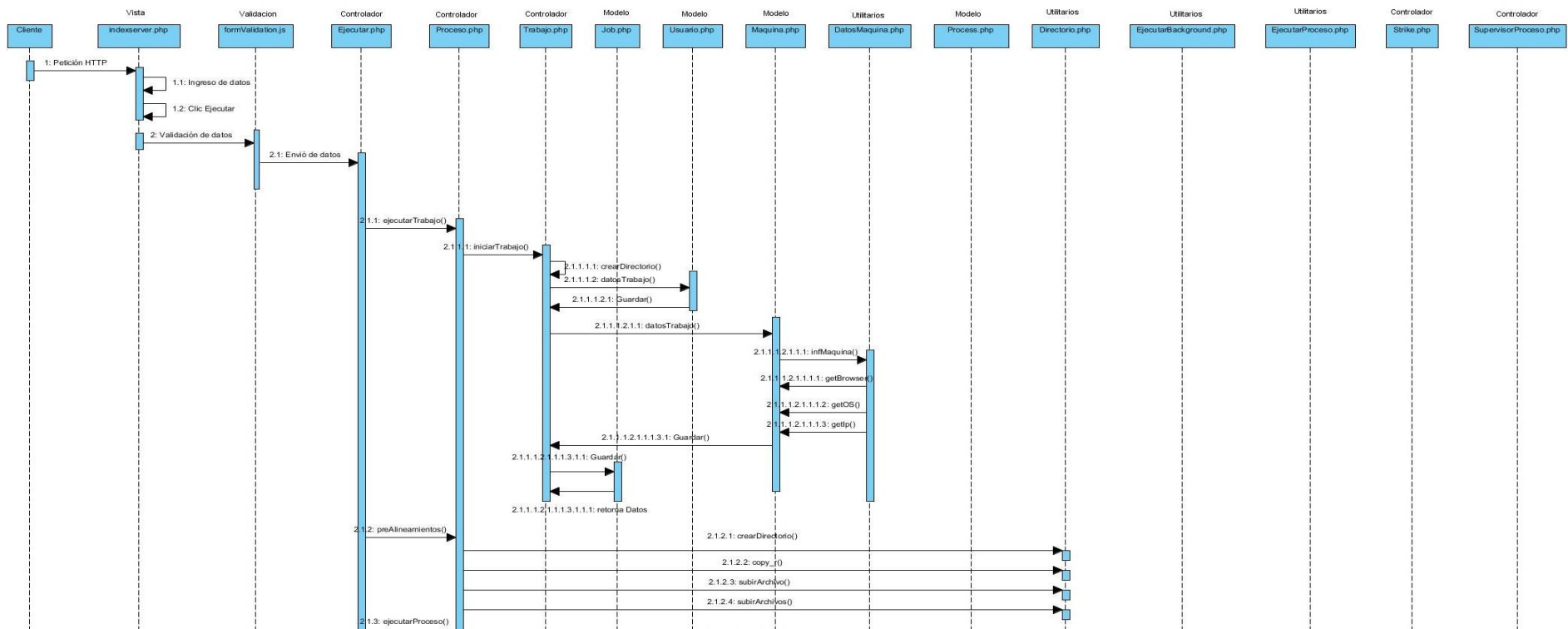
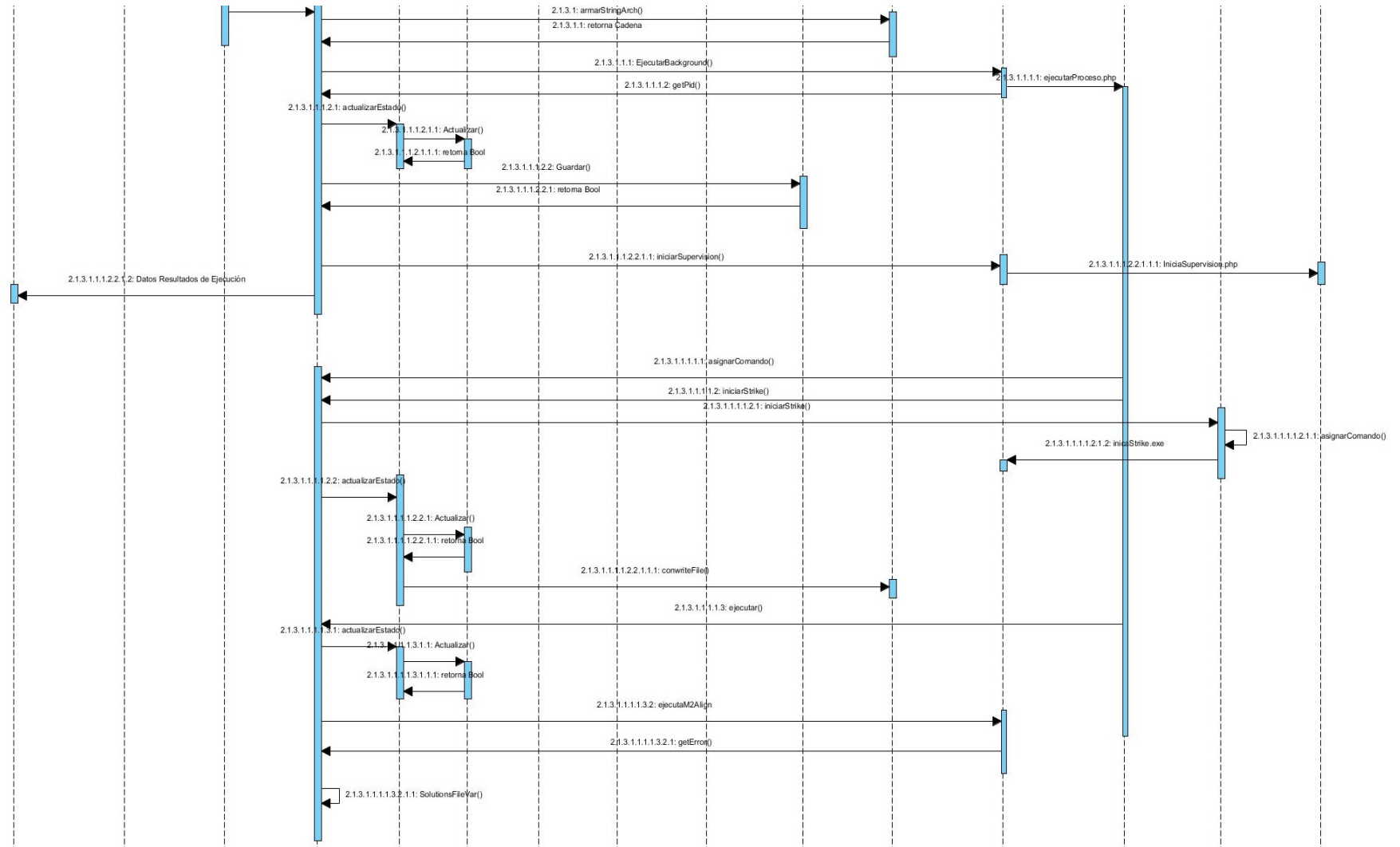
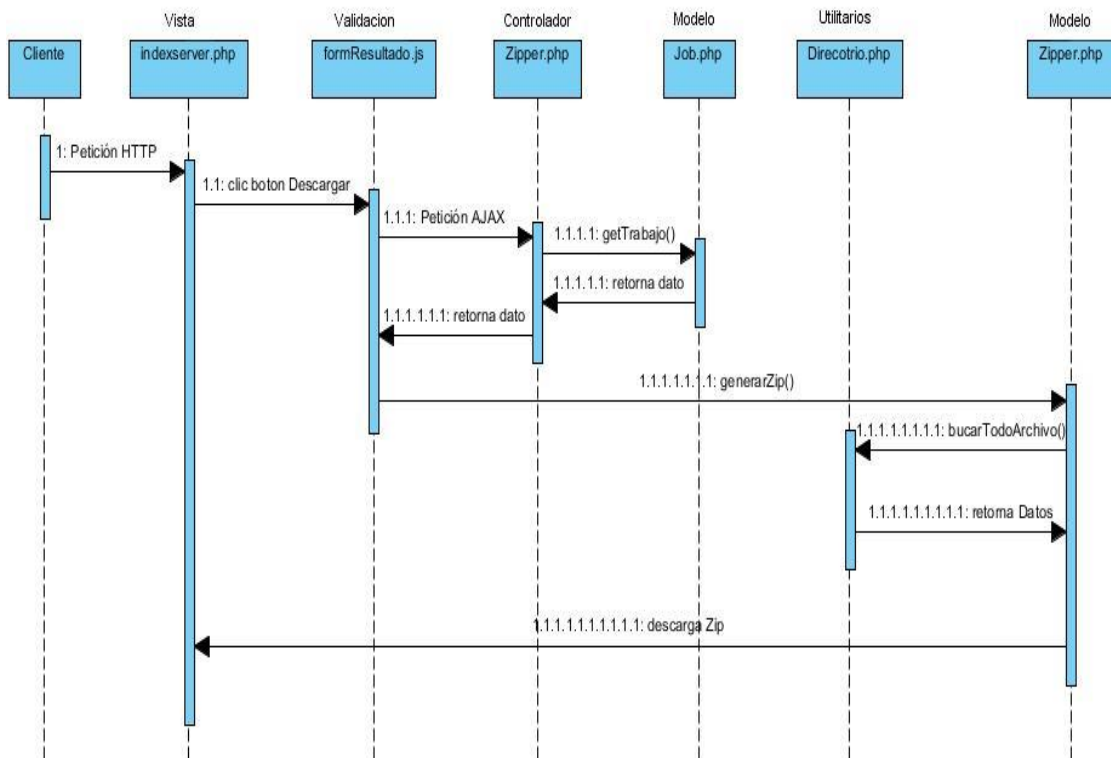


Figura 6.- Diagrama de secuencia Ejecutar Análisis. (Parte 2)



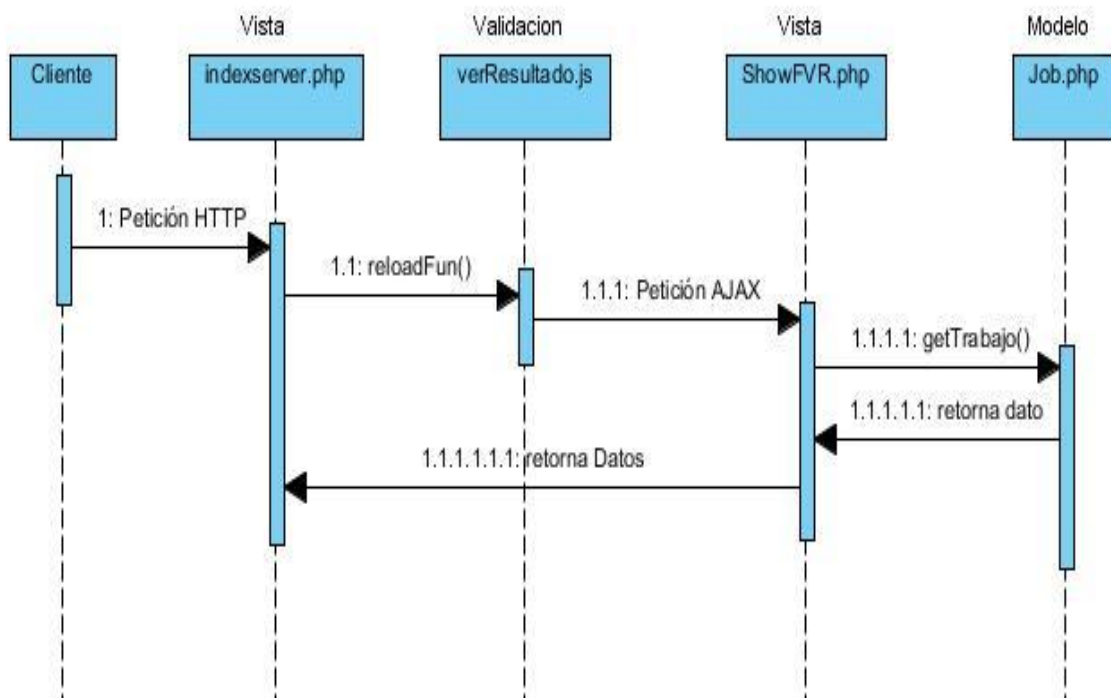
4.1.3.7.2. Secuencia Descargar Resultado.

Figura 7.- Diagrama de secuencia Descargar Resultado.



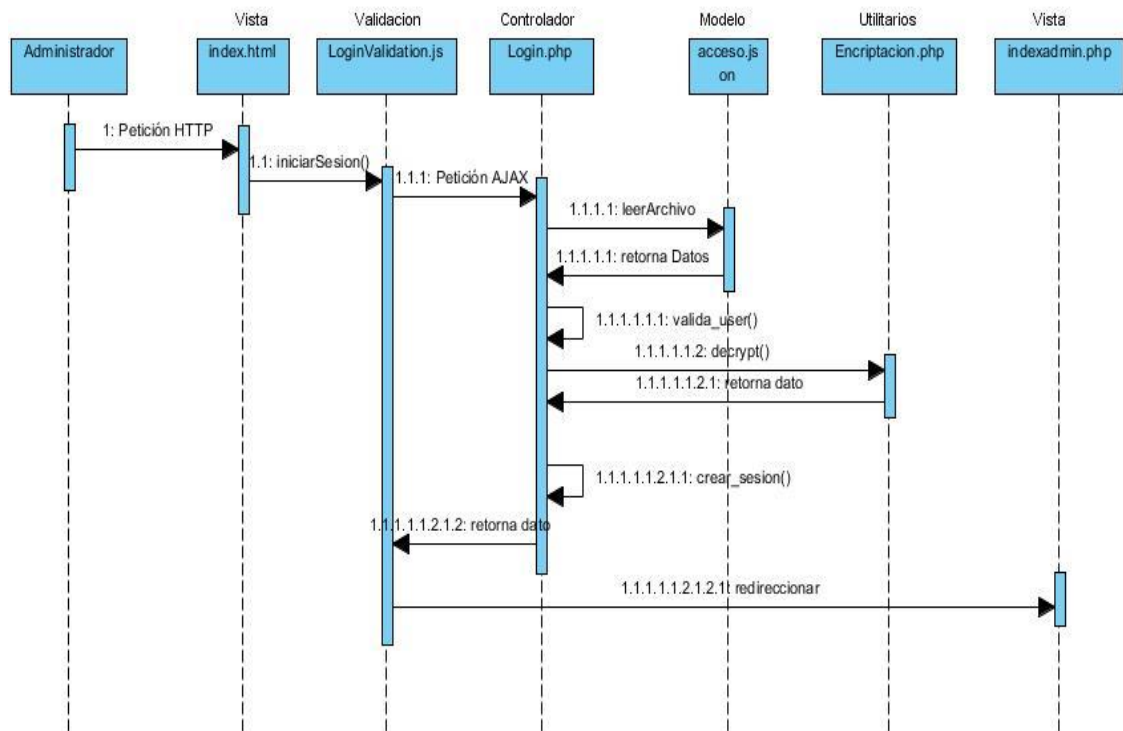
4.1.3.7.3. Secuencia Visualizar (FUN-VAR-RunLog).

Figura 8.- Diagrama de secuencia Visualizar(FUN-VAR-RunLog).



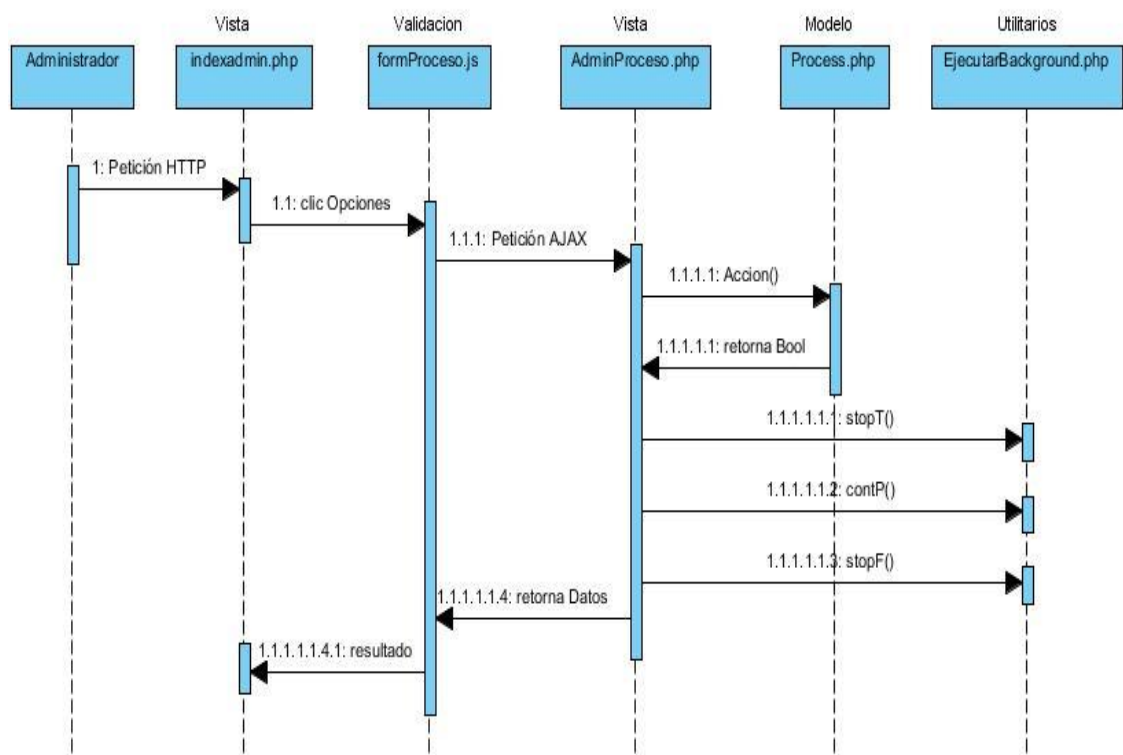
4.1.3.7.4. Secuencia Iniciar Sesión.

Figura 9.- Diagrama de secuencia Iniciar Sesión.



4.1.3.7.5. Secuencia Administrar Proceso.

Figura 10.- Diagrama de secuencia Administrar Proceso.



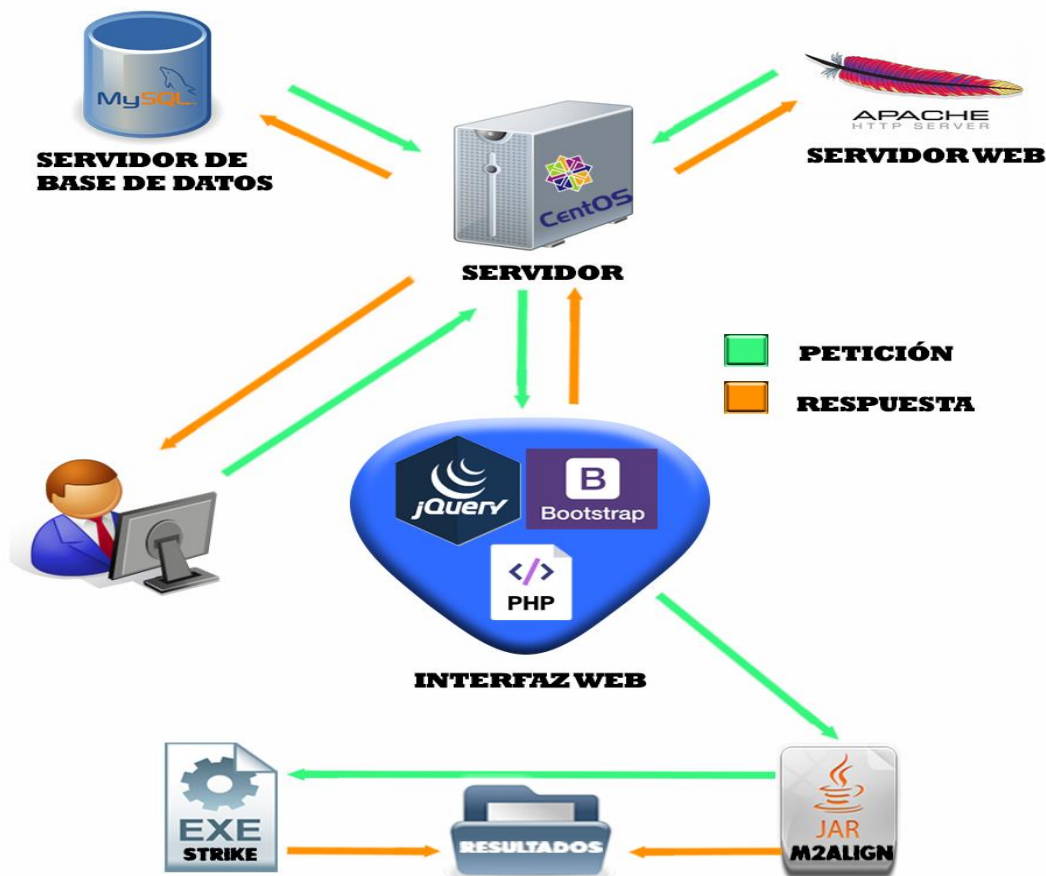
4.1.4. Implementación.

En este apartado se detalla el proceso que se llevó a cabo para la subida de los diversos archivos y directorios al servidor, necesarios para poner en funcionamiento la Interfaz Web y que esta sea accesible desde el internet para los usuarios, así también las configuraciones que se realizaron al servidor Apache para la habilitación de funcionales.

4.1.4.1. Arquitectura de comunicación de la Interfaz Web.

La arquitectura que se estableció para la comunicación de los diferentes recursos de los que hace uso la interfaz web cuando el usuario hace una ejecución es la siguiente:

Figura 11.- Arquitectura de comunicación Interfaz Web



Se realiza una petición al servidor web, el cual responde con la carga de la interfaz web, cuando el usuario efectúe la ejecución del software M2Align, solicitará a la interfaz la ejecución del software M2align(.jar) y del generador de contactos (.exe) , los cuales una vez terminado la ejecución arrojaran los archivos producto del análisis efectuado y serán almacenados en un directorio de resultados.

4.1.4.2. Recursos instalados en el Servidor CentOS.

Tabla 15.- Recursos Servidor CentOS.

SERVIDOR WEB	
Apache	Version: Apache/2.4.6 (CentOS) Hostname: Port: 10.1.1.5:0 Server Root: /etc/httpd
PHP	Version: PHP 7.0.21 (CLI)
SERVIDOR DE BASE DE DATOS	
MySQL	Version: 5.6.37 MySQL Community Server (GPL)
GESTOR DE BASE DE DATOS	
phpMyAdmin	Version: 4.4.15.10

FUENTE: CONOCIMIENTOS PROPIOS.

ELABORADO: AUTOR.

4.1.4.3. Estructura del directorio M2Align.

El directorio “m2align” contiene todos los scripts necesarios para el funcionamiento de la interfaz web W-M2Align, scripts que se encuentran clasificados por la funcionalidad que cada uno desempeña. A continuación, se muestra la estructura de este directorio (Figura 12).

Figura 12.- Estructura directorio m2align.

Nombre	Tamaño	Modificado	Permisos
..		8/8/2017 23:25:50	rwxt-r-x
Vista		3/8/2017 13:34:58	rwxt-r-x
Resultados		2/8/2017 22:52:59	rwxt-r-x
Controlador		2/8/2017 19:11:26	rwxt-r-x
Utilitarios		29/6/2017 20:21:38	rwxt-r-x
Modelo		29/6/2017 20:16:55	rwxt-r-x
example		29/6/2017 20:12:39	rwxt-r-x
nbproject		29/6/2017 20:12:34	rwxt-r-x
documentacion.html	14 KB	9/8/2017 07:46:01	rwxt-r-x
acceso.json	1 KB	5/8/2017 15:25:15	rwxt-r-x
Manual M2Align.pdf	313 KB	3/8/2017 15:25:51	rwxt-r-x
index.html	10 KB	3/8/2017 13:39:20	rwxt-r-x
.htaccess	1 KB	3/8/2017 12:46:46	rwxt-r-x
jMetalMSA1.2-1.0-SNAPSHOT-jar-with-dependencies.jar	13,150 KB	2/8/2017 18:42:47	rwxt-r-x
jMetalMSA1.2-1.0-SNAPSHOT.jar	408 KB	2/8/2017 18:42:35	rwxt-r-x
Configuracion.php	1 KB	30/6/2017 01:08:04	rwxt-r-x
strike_pdbcontactsgenerator	99 KB	30/6/2017 01:08:02	rwxt-r-x

4.1.4.4. Directorio de Resultados.

El directorio para almacenar los resultados de ejecución del software M2Align se formó de una combinación de la fecha, hora, más dos números aleatorios con la finalidad de obtener directorios con diferente denominación (Figura 13).

Figura 13.- Directorio Resultados.



El contenido de esta carpeta estará conformado por lo siguiente:

Tabla 16.- Resultados de ejecución.

Resultado	Explicación
BB11001	Directorio que contiene los Archivos: Alineamientos de secuencia- *.pdb y *.contacts- Alineamientos Pre Computarizados.
VARsolutions	Directorio con archivos de cada solución que se encuentran en formato FASTA, provenientes de VAR.tsv.
FUN.tsv	Contiene la aproximación frontal de Pareto. Para cada solución, este archivo contiene una línea con los valores de los tres objetivos.
VAR.tsv	Contiene la aproximación de Pareto. Cada solución está representada en formato FASTA.
jMetal.log	Contiene el registro de eventos o acciones que se realizaron al ejecutar el Software M2Align. En la cual se encontrará información como el tiempo de ejecución, la fecha entre otros.

FUENTE: CONOCIMIENTOS PROPIOS.

ELABORADO: AUTOR.

4.1.4.5. Adaptación del Software M2Align.

Para lograr la utilización del software escrito en java “M2align mediante la interfaz web se tuvo que implementar cambios en el código fuente de este (Figura 14 y Figura 15), con el objetivo de que los resultados arrojados producto de la ejecución del mismo se almacenen en una dirección en específico, se aumentó un parámetro de entrada en el que se enviara la ruta que se encuentra ubicado el directorio.

Figura 14.- Código MOSAStrERunner.java sin modificar.

```
public static void main(String[] args) throws Exception {
    Standard_MSAPProblem problem;
    Algorithm<List<MSASolution>> algorithm;
    CrossoverOperator<MSASolution> crossover;
    MutationOperator<MSASolution> mutation;
    SelectionOperator selection;

    if (args.length != 5) {
        throw new JMetalException("Wrong number of arguments") ;
    }

    String msaFile = args[0];
    String dataDirectory = args[1];
    String preComputedAlignments = args[2];
    Integer maxEvaluations = Integer.parseInt(args[3]);
    Integer populationSize = Integer.parseInt(args[4]);

    //Salida de Resultados
    DefaultFileOutputContext varFile = new DefaultFileOutputContext("VAR.tsv");
    varFile.setSeparator("\n");
    DefaultFileOutputContext funFile = new DefaultFileOutputContext("FUN.tsv");
    funFile.setSeparator("\t");
}
```

Figura 15.- Código MOSAStrERunner.java modificado.

```
public static void main(String[] args) throws Exception {
    Standard_MSAPProblem problem;
    Algorithm<List<MSASolution>> algorithm;
    CrossoverOperator<MSASolution> crossover;
    MutationOperator<MSASolution> mutation;
    SelectionOperator selection;

    if (args.length != 6) {
        throw new JMetalException("Wrong number of arguments") ;
    }

    String msaFile = args[0];
    String dataDirectory = args[1];
    String preComputedAlignments = args[2];
    Integer maxEvaluations = Integer.parseInt(args[3]);
    Integer populationSize = Integer.parseInt(args[4]);
    String outResult= args[5];

    //Salida de Resultados
    DefaultFileOutputContext varFile = new DefaultFileOutputContext(outResult+"VAR.tsv");
    varFile.setSeparator("\n");
    DefaultFileOutputContext funFile = new DefaultFileOutputContext(outResult+"FUN.tsv");
    funFile.setSeparator("\t");
}
```

Una vez hecha la adaptación del código del software, se procedió a la compilación del mismo para generar el ejecutable (*.jar), el cual se utiliza para la ejecución del software.

4.1.4.6. Compilación del programa STRIKE.

Strike es un programa que utiliza el software M2Align para generar los archivos de contacto (*.contacts) de una secuencia dada, para que este programa funcione necesita de la información estructural (*.pdb) de la secuencia, la cual es proveída por el software.

Puesto que es una herramienta que utiliza el software M2Align y sirve para automatizar la generación de los archivos de contactos se procedió a la descarga y compilación del código fuente del STRIKE que se encuentra programado en C++.

4.1.4.7. Ejecución del software M2Aling.

Para la ejecución del software se utilizó la función que brinda php para ejecutar programas externos mediante líneas de comandos. Debido a que se necesitaba llevar acabo la ejecución del programa Strike previo a la ejecución del software M2Align se planteó 2 maneras de ejecución:

4.1.4.7.1. Ejecución en primer plano.

El programa Strike se lo ejecutó en Foreground o primer plano con la finalidad de poder tomar la decisión de si se debe ejecutar o no el software m2align en base a los resultados de obtenidos. Los resultados arrojados por el programa son indispensables puesto que son parte de uno de los parámetros de entrada que necesita el software M2Align (Figura 16).

Figura 16.- Código para ejecutar en Foreground.

```
private function runComandoF(){  
    if($this->comando === null) {  
        return;  
    }  
    $command = $this->comando.' >> '.$this->salidaexec.' 2>&1; echo $?';  
    exec($command , $op);  
    $this->error=(int)$op[0];  
}
```

4.1.4.7.2. Ejecución en segundo plano.

El software M2Aling debido a que su ejecución puede tardar desde unos pocos segundos hasta unas cuantas horas o incluso días, se lo ejecutó en segundo plano o Background, facilitando seguir con el hilo de ejecución de la interfaz web, eliminando el tiempo de espera innecesario para el usuario, dejando por detrás corriendo el software hasta que este termine de procesar y arroje los resultados posteriormente.

Se aplicó el comando **nohup** para mantener activa la ejecución del software M2Align que se realiza desde la Interfaz Web de forma independiente a la sesión que efectuó el usuario al abrir el navegador. Se redireccionaron tanto la salida y el error estándar a un archivo para registrar en este todos los eventos y acciones que realiza el software M2Align y los errores en caso de que existiesen (Figura 17).

Figura 17.- Código para ejecutar en Background.

```
private function runComando(){
    if($this->comando === null) {
        return;
    }
    $command = 'nohup ' . $this->comando . ' >> ' . $this->salidaexec . ' 2>&1 & echo $!';
    exec($command, $op);
    $this->pid = (int)$op[0];
}
```

4.1.4.8. Estado del servidor.

Para ver el estado de carga del servidor, es decir para ver la carga de trabajo que ha tenido el servidor. En la Interfaz Web W-M2Align se la implementó mediante la obtención de los valores promedio de carga del servidor (Figura 18) que brinda Linux de los últimos minutos (1 min, 5 min, 15 min) y el número de cores (núcleos) que posee el procesador para ejecutar procesos de manera simultánea (Figura 19).

Figura 18.-Carga promedio del Servidor.

```
public static function GetLoadCpu (){
    exec ( "cat /proc/loadavg | awk '{print $3}'" , $lcpu);
    return $lcpu[0];
}
```

Figura 19.- Número de núcleos del Servidor.

```
public static function GetNumCores (){
    exec ( "grep processor /proc/cpuinfo | wc -l" , $numC);
    return $numC[0];
}
```

Con estos datos se procedió hacer el cálculo para obtener el valor de la carga del servidor, mediante la relación de que cada core puede tener 1 de carga.

$$\frac{\text{GetLoadCpu} * 100}{\text{GetNumCores}} = \% \text{ carga_servidor}$$

4.1.4.9. Configuración para compresión del directorio de resultados.

Para que los resultados obtenidos de la ejecución del software M2Align sean accesible desde la interfaz web y puedan ser descargados en formato Zip se debió activar la funcionalidad que brinda php para comprimir archivos, puesto a que ésta viene desactivada en el archivo de configuración php.ini.

zlib.output_compression=On

4.1.4.10. Configuración de permisos del directorio M2Align.

Los permisos principales que se aplicaron para que el funcionamiento de la Interfaz Web una vez subida al servidor se lleve a cabo con éxito fueron hechos al directorio m2align y a todos sus scripts, y se detallan a continuación:

Permisos 755 root (ejecutables):

- m2align-1.0-SNAPSHOT-jar-with-dependencies.jar
- strike_pdbcontactsgenerator.exe

Permiso 766 root (archivo):

- ✓ acceso.json

Permiso 755 apache (directorio):

- ✓ Resultado

4.1.4.11. Configuración del Servicio de correos SSMTP.

Si en los parámetros de entrada se especificó una cuenta de correo electrónico, una vez iniciado la ejecución del software M2Align mediante la Interfaz Web W-M2align se enviará a la bandeja de entrada de la cuenta proporcionada un mensaje que contendrá el enlace para que el usuario pueda revisar posteriormente el avance o resultado de la ejecución del software. Esta acción se la realizó mediante un programa de entrega de correos electrónico conocido SSMTP que brinda muchas facilidades en su configuración para que este realice su tarea.

Se creó una cuenta de correo en el servicio gratuito de Google conocido como Gmail. Esta es la cuenta mediante la cual se realiza el envío. A continuación, se muestra la

configuración necesaria que se efectuó para el envío de correos electrónicos mediante este programa.

```
# Use SSL/TLS certificate to authenticate against smtp host.
#UseTLSCert=YES
mailhub=smtp.gmail.com:587
UseSTARTTLS=YES
AuthUser=m2align@gmail.com
AuthPass=jesbl294

# Use this RSA certificate.
#TLSCert=/etc/pki/tls/private/ssmtp.pem

# Get enhanced (*really* enhanced) debugging information in the logs
# If you want to have debugging of the config file parsing, move this option
# to the top of the config file and uncomment
#Debug=YES
FromLineOverride=YES
```

Ilustración 4.- Configuración archivo /etc/ssmtp/ssmtp.conf.

Comando para habilitar el envío de mensaje a Apache:

```
setsebool -P httpd_can_sendmail=1
```

Comando para visualizar si ya se encuentra activado el envío de mensajes de Apache:

```
/usr/sbin/getsebool -a | grep httpd
```

4.1.4.12. Administración de Procesos.

Cuando se efectúa una ejecución del software M2Align mediante la interfaz web W-M2Align éste lanza mediante comando de consola a correr un proceso en segundo plano el cual se va a encontrar activo hasta que se termine de efectuar el análisis de las secuencias dadas en el momento del ingreso de los parámetros de entrada que se encuentran especificados en la interfaz web.

Como estos procesos puede llegar a tardar poco o mucho tiempo, haciendo uso del procesador del servidor por minutos, horas o días, se procedió a crear la opción para administrar cada uno de estos procesos mediante la implementación de funciones que ejecutan comandos de consola en el caso de que la ejecución quiera ser:

4.1.4.12.1. Detenida

```
public static function stopI($pid){  
    try {  
        $command = 'kill -STOP ' . $pid;  
        exec($command);  
        return true;  
    }  
    catch (Exception $e)  
    {  
        return false;  
    }  
    return false;  
}
```

Ilustración 5.- Función para detener un Proceso.

4.1.4.12.2. Continuada

```
public static function contP($pid){  
    try {  
        $command = 'kill -CONT ' . $pid;  
        exec($command);  
        return true;  
    }  
    catch (Exception $e)  
    {  
        return false;  
    }  
    return false;  
}
```

Ilustración 6.- Función para continuar un Proceso.

4.1.4.12.3. Finalizada

```
public static function stopF($pid){  
    try {  
        $command = 'kill -9 ' . $pid;  
        exec($command);  
        if (EjecutarBackground::status($pid) == false){return true;}  
        else {return false;}  
    }  
    catch (Exception $e)  
    {  
        return false;  
    }  
    return false;  
}
```

Ilustración 7.- Función para terminar un Proceso.

4.1.5. Pruebas.

En esta etapa se detallan las pruebas y cambios que se realizaron luego de haber identificado las correcciones que se debían hacer para que la interfaz web quede correctamente implementada y brinde una mayor usabilidad.

4.1.5.1. Ejecución del software M2Align mediante la Interfaz Web.

Para verificar que la ejecución del software M2Align mediante la Interfaz Web se esté realizando correctamente se llevó a cabo una prueba cargando como parámetros de entrada los siguiente archivos y valores:

Instancia BB11001.

Alineamiento: BB11001.tfa.

Numero de Evaluaciones: 25000.

Tamaño de la población: 100.

Prealineamientos:

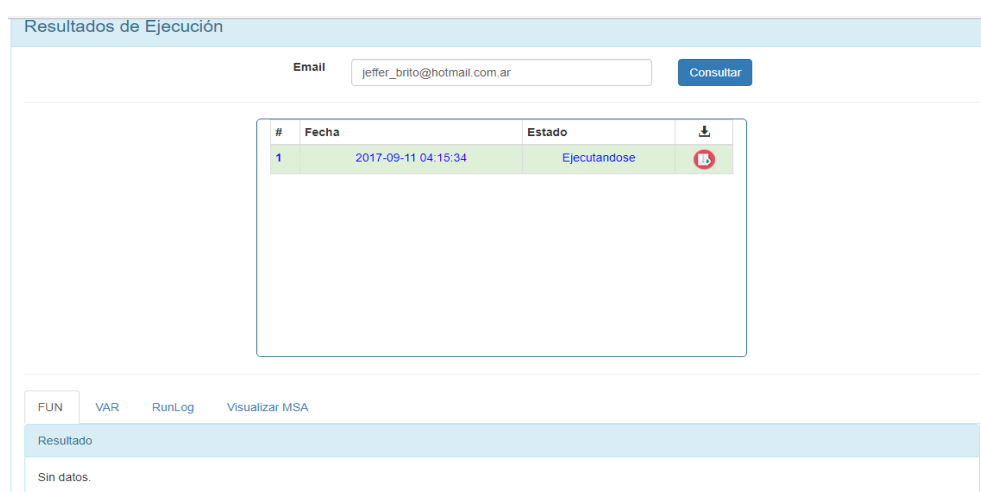
BB11001.msf	BB11001.msf_tfa	BB11001.tfa_clu
BB11001.tfa_fsa	BB11001.tfa_kalign	BB11001.tfa_mafft
BB11001.tfa_muscle	BB11001.tfa_probcons	BB11001.tfa_realign


Email: jeffer_brito@hotmail.com.ar

Los prealineamientos fueron generados por 8 enfoques representativos de estado del arte, tales como Muscle, ClustalW, Ma t, T-Co ee, Kalign, RetAlign, ProbCons y FSA.

Una ves subido los archivos al servidor, el software realizó su debido proceso de ejecución, mientras procesaba la informacion redirecció a la seccion de resultados mostrando la hora y fecha de ejecución y el estado de la misma, la cual se esta refrescando continuamente junto con los demas resultados se de la ejecución que se visualizan en las respectivas secciones (Figura 20).

Figura 20.- Sección Resultados de ejecución.



#	Fecha	Estado	
1	2017-09-11 04:15:34	Ejecutandose	

FUN VAR RunLog Visualizar MSA

Resultado

Sin datos.

Como se proporcionó un email, se enviará a éste un mensaje a su buzón de correo el enlace con el cual se puede acceder para verificar el avance de la ejecución en el momento que se desee (Figura 21).

Figura 21.- Correo generado por la Interfaz Web

Resultados: M2Align



Para revisar el resultado por favor de clic en el siguiente link:

http://186.46.90.102/m2align/Vista/indexserver.php?tid=17091104153428&email=jeffer_brito@hotmail.com.ar

Este trabajo se ejecutó en el Servidor Web W-M2Align

Concluida la ejecución del software se pudo ver el cambio de estado de “Ejecutándose” a “Finalizado”. En este punto se procedió a la descarga de los resultados los cuales fueron bajados sin ninguna novedad.

Los resultados arrojados por el software fueron mostrados correctamente en cada una de las secciones con las que cuenta la interfaz para los archivos resultados de la ejecución, y se detallan a continuación:

4.5.1.1.1. FUN.

FUN	VAR	RunLog	Visualizar MSA
Resultado			
3.01600220882963	2.7777777777777777	79.86111111111111	
1.0182640717155054	3.225806451612903	92.74193548387096	
3.010904077180631	1.9047619047619047	82.14285714285714	
1.0182640717155054	3.225806451612903	92.74193548387096	
2.71088917323002	6.0	86.25	
2.941164032457247	4.504504504504505	77.7027027027027	
1.6637098856529908	2.150537634408602	92.74193548387096	
1.6637098856529908	2.150537634408602	92.74193548387096	
3.01600220882963	2.7777777777777777	79.86111111111111	
2.488300592546928	4.123711340206185	88.91752577319588	

Ilustración 8.- Contenido del archivo FUN.tsv.

4.5.1.1.2. VAR.

FUN	VAR	RunLog	Visualizar MSA
Resultado			
<pre>>1aab_ GKGD---PKKPRG-KMSSYAFFVQTSREEHKKHPDAS-VNFSEFSKKCSERWKTMSAKE---KGG-FEDMAKADKARYEREMKTYI-----PPKGE >1j46_A MQDR---VKRP---MNAFIVWSRDQRRKMALENPRM-R-N-SEISKQLGYQWKMTEA---KW---PFFQEAQKLQAIHREKYPNYK---Y----RPRRKAKMLPK--- >1k99_A MKKLLKKHPDFPKKP-LTPYFRFFMEKRAKYAKLHPEHS-N-LD-LTKILSKYKELP---EKK-KM-KYIQDFQREKQEFERNLARF---REDHPDLIQ-----NAKK >21ef_A M---H---IKKPLN---AFMLYMEKIRANVVAE-STL-K-ESAAINQILGRRIWALSREE---QAK---YYELARKERQLHIQLYPGWSARD---NYGKK-KKRK---REK >1aab_ GKGDPPKPRGKMSSYAFFVQTSREEHKKHPDASVNFSEFSKKCSERWKTMSAKEKGGFEDMAKADKARYEREMKTYI-----PPKGE >1j46_A MQDRVKRP---MNAFIVWSRDQRRKMALENPRMSEISKQLGYQWKMTEA---EKWPFFQEAQKLQAIHREKYPNYKPRRKAKMLPK--- >1k99_A MKKLLKKHPDFPKKPLTPYFRFFMEKRAKYAKLHPEHSNLDLTKILSKYKELPEKK---KPKYIQDFQREKQEFERNLARFREDHPDLIQNAKK</pre>			

Ilustración 9.- Contenido del archivo VAR.tsv.

4.5.1.1.3. RunLog.

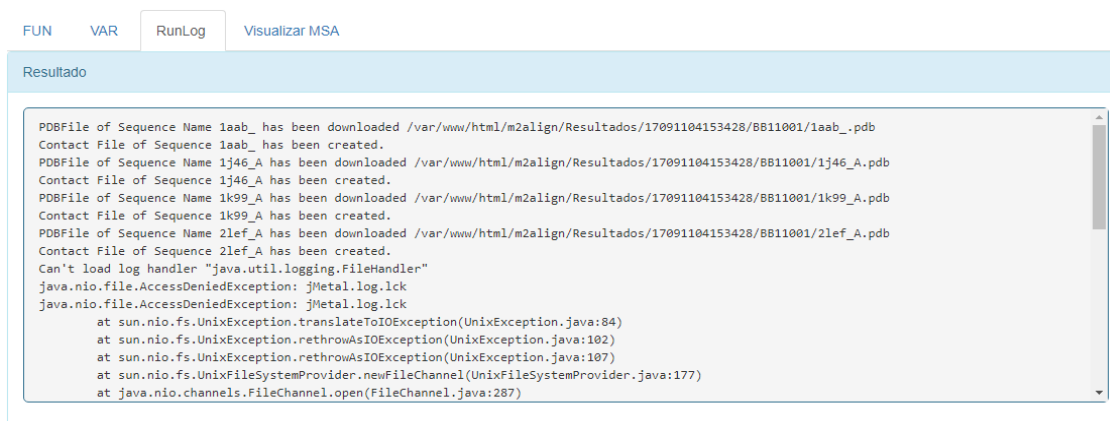


Ilustración 10.- Contenido del archivo jMetal.log

4.5.1.1.4. Visualizar MSA.

Como el parámetro “Tamaño de la población” se ingresó el valor de 100, el archivo **VAR.tsv** nos proporciona 100 soluciones en formato fasta, las cuales son representadas de manera gráfica mediante un componente conocido como MSAViewer [8] .

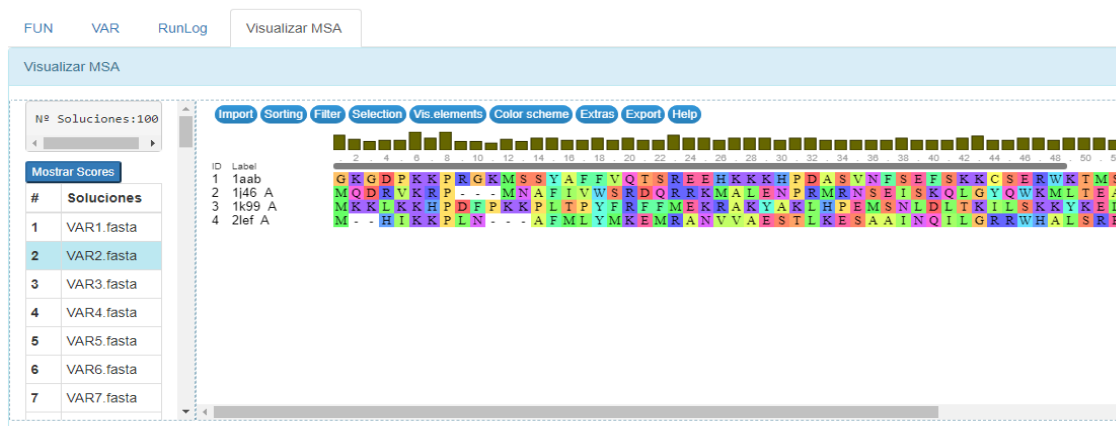


Ilustración 11.- Contenido del archivo VAR.tsv presentado en el componente MSAViewer.

4.5.1.2. Adaptación del software M2Align para descargas de PDB de forma opcional.

En su principio el usuario no tenía la posibilidad de ingresar la información estructural de la secuencia (*.pdb) mediante la interfaz web, puesto que de esta tarea se encarga el propio software M2align descargando desde el Banco de datos de proteínas⁵ esta información.

⁵ <http://www.rcsb.org/pdb/home/home.do>

Se efectuaron cambios en el código del software M2Align (Figura 22 y Figura 23) para que si el usuario desea ingresar sus propios archivos (*.pdb) lo pueda hacer mediante la Interfaz Web. Estos cambios se muestran a continuación:

Figura 22.- Código GenerateStructuralInformation.java sin modificar.

```
public static void main(String[] args) throws Exception {
    if (args.length != 3) {
        throw new JMetalException("Wrong number of arguments") ;
    }

    String dataFile=args[0]; //alignment file
    String path=args[1]; //Path to save th pdb's files
    String strikeGeneratorPath=args[2]; //Path to StrikeGenator Executable

    String sequenceName;
    String pdbFileName;

    LinkedHashMap<String, ProteinSequence> sequences = FastaReaderHelper.readFastaProteinSequence(new File(dataFile));
    for (Map.Entry<String, ProteinSequence> entry : sequences.entrySet()) {
        sequenceName = entry.getValue().getOriginalHeader();

        pdbFileName = path + "/" + sequenceName + ".pdb";
        if (downloadPDB(sequenceName, pdbFileName)) {
            System.out.println("PDBFile of Sequence Name " + sequenceName + " has been downloaded " + pdbFileName);

            if (exeStrikeContactGenerator(strikeGeneratorPath, sequenceName, pdbFileName, "#", path)) {
                System.out.println("Contact File of Sequence " + sequenceName + " has been created.");
            } else {
                System.out.println("ERROR. Generating Contact File of Sequence " + sequenceName);
                throw new JMetalException("ERROR. Generating Contact File of Sequence " + sequenceName);
            }
        }
        else {
            System.out.println("ERROR. Download PDBFile of Sequence Name " + sequenceName);
            throw new JMetalException("ERROR. Download PDBFile of Sequence Name "+sequenceName) ;
        }
    }
}
```

Figura 23.- Código GenerateStructuralInformation.java modificado.

```
public static void main(String[] args) throws Exception {
    if (args.length != 5) {
        throw new JMetalException("Wrong number of arguments") ;
    }

    String dataFile=args[0]; //alignment file
    String path=args[1]; //Path to save th pdb's files
    String strikeGeneratorPath=args[2]; //Path to StrikeGenator Executable

    Integer downloadBand=Integer.parseInt(args[3]); //1 download - 0 no download
    String filesPdb= args[4]; // files PDB

    String sequenceName;
    String pdbFileName;
```

```

if (downloadBand == 1) {
    LinkedHashMap<String, ProteinSequence> sequences = FastaReaderHelper.readFastaProteinSequence(new File(dataFile));

    for (Map.Entry<String, ProteinSequence> entry : sequences.entrySet()) {

        sequenceName = entry.getValue().getOriginalHeader();

        pdbFileName = path + "/" + sequenceName + ".pdb";
        if (downloadPDB(sequenceName, pdbFileName)) {
            System.out.println("PDBFile of Sequence Name " + sequenceName + " has been downloaded " + pdbFileName);

            if (exeStrikeContactGenerator(strikeGeneratorPath, sequenceName, pdbFileName, "#", path)) {
                System.out.println("Contact File of Sequence " + sequenceName + " has been created.");
            } else {
                System.out.println("ERROR. Generating Contact File of Sequence " + sequenceName);
                throw new JMetalException("ERROR. Generating Contact File of Sequence " + sequenceName);
            }
        }
        else
        {
            System.out.println("ERROR. Download PDBFile of Sequence Name " + sequenceName);
            throw new JMetalException("ERROR. Download PDBFile of Sequence Name "+sequenceName) ;
        }
    }
}
else {
    String[] filePdbList = filesPdb.split("-");
    if (filePdbList.length < 1) {
        throw new JMetalException("Wrong number of File PDB, Minimum 1 files are required");
    }
    for (String nameFilePdb : filePdbList) {

        pdbFileName = path + "/" + nameFilePdb;
        String name= nameFilePdb.split("\\.")[0];

        if (exeStrikeContactGenerator(strikeGeneratorPath, name, pdbFileName, "#", path)) {
            System.out.println("Contact File of Sequence " + name + " has been created.");
        } else {
            System.out.println("ERROR. Generating Contact File of Sequence " + name+" . Invalid PDBFile");
            throw new JMetalException("ERROR. Generating Contact File of Sequence " + name+" . Invalid PDBFile.") ;
        }
    }
}

```

4.5.1.3. Descarga PDB desde Servicio Web.

Se implementó una sección en la Interfaz Web denominada **Descarga PDB** la cual brinda opción de descargar los archivos pdb directamente del Banco de datos de proteínas mediante la conexión a un servicio⁶ Https que permite la descarga de manera individual de los datos en diversos formatos (PDB, PDBx /mmCIF, XML).

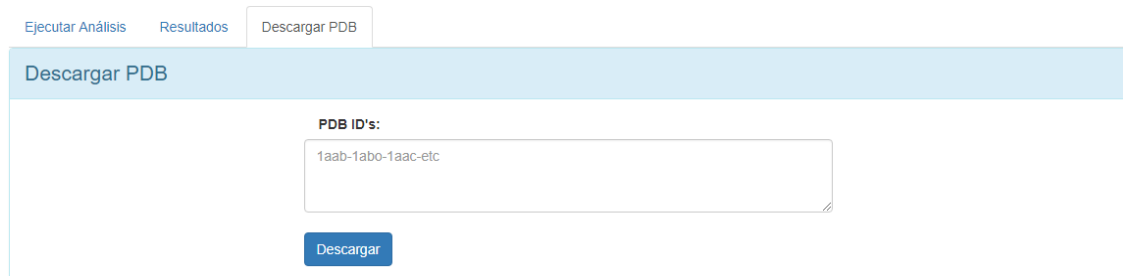
El servicio disponible funciona mediante la concatenación de la url más el ID PDB, como se muestra a continuación:

https://files.rcsb.org/download/1aac.pdb	
<div style="border-top: 1px solid black; width: 100%; margin: 0 auto;"></div> URL	<div style="border-top: 1px solid black; width: 100%; margin: 0 auto;"></div> ID PDB

⁶ <https://www.rcsb.org/pdb/static.do?p=download/http/index.html>

El usuario puede ingresar todos los ID PDB que necesite separados con un guion y descargar en conjunto los archivos en formato pdb comprimidos en un solo Zip (Figura 24).

Figura 24.- Sección Descargar PDB.



The screenshot shows a web interface with three tabs at the top: 'Ejecutar Análisis', 'Resultados', and 'Descargar PDB'. The 'Descargar PDB' tab is active. Below the tabs, there is a section titled 'Descargar PDB'. Inside this section, there is a label 'PDB ID's:' followed by a text input field containing the text '1aab-1abo-1aac-etc'. Below the input field is a blue button labeled 'Descargar'.

CAPITULO V

RESULTADOS

5.1. Interfaz web W-M2Align para la ejecución del software M2align.

La Interfaz Web permite la ejecución de software M2Align de forma rápida y fácil, es amigable, sencilla y brinda los mecanismos necesarios para el ingreso de los parámetros que se necesitan para comenzar la ejecución.

5.1.1. Tecnologías aplicadas en el desarrollo de la Interfaz Web.

El uso de software libre y open source es cada vez más grande, la plataforma con la que se contó para el desarrollo de la interfaz web contaba con el sistema operativo “CentOS” y con el servidor web “Apache”, estos catalogados como software libre.

Basándonos en esto se procedió a determinar el lenguaje que proporcione todas las características necesarias y que sea compatible con la plataforma ya existente. Para esto se realizó un cuadro comparativo de 4 lenguajes de programación web conocidos, y se presenta a continuación:

Tabla 17.- Cuadro comparativo de lenguajes de programacion web.

Lenguajes Características	PHP	JSP	ASP.NET	PYTHON
MULTIPLATAFORMA	✓	✓		✓
SOFTWARE LIBRE	✓			✓
POO	✓	✓	✓	✓
COMPATIBILIDAD CON APACHE	✓			✓
ABUNDANTE DOCUMENTACIÓN	✓	✓	✓	
FÁCIL APRENDIZAJE	✓			

FUENTE: CONOCIMIENTO PROPIO.

ELABORADO: AUTOR.

Para el almacenamiento y manejo de los datos se utilizó el motor de base de datos MySQL debido a que su licencia es software libre lo cual brinda gran compatibilidad con la plataforma ya instalada y cuenta además con una buena conectividad con el lenguaje de programación PHP.

5.1.2. Interfaz Principal.

Cuenta con una página inicial en la cual se muestra información sobre las diferentes herramientas que se utilizan en la interfaz web, con un enlace a la Interfaz Web W-M2Align y con otro a la sección de documentación en la que se explica cómo se debe utilizarla teniendo la opción de poder descargar la documentación en forma de manual.



Ilustración 12.- Página principal de la Interfaz Web.

5.1.3. Documentación.

Se muestra una breve descripción sobre lo que es el software M2Align y la Interfaz Web W-M2Align, haciendo énfasis en esta última, detallando en tres secciones todas las funcionalidades que brinda y cuál es su forma uso (Figura 25).

Figura 25.- Documentación M2Align y W-M2Align.



5.1.3.1. Ejecutar de Análisis.

Se detalla la lista de los parámetros de entradas necesarios para que la interfaz web W-M2Align empiece la ejecución del software M2Align y una visualización del entorno para el ingreso de los parámetros (Figura 26).

Figura 26.- Documentación parámetros de entrada W-M2Align.

Ejecutar Análisis.

Los parámetros de entrada necesarios para poner en marcha el análisis de alineamientos de secuencias son:

- Archivo con los alineamientos de secuencia en formato FASTA.
- Número de evaluaciones máximas del algoritmo.
- Tamaño de la población del algoritmo.
- Archivos PDB (Opciones: Generar automáticamente - Subir manualmente).
- Archivos con los Alineamientos Pre Computarizados.

Antes de poner en ejecución el trabajo. Si usted provee un email, se enviará a su buzón de correo un mensaje que contendrá el enlace con el cual podrá acceder a verificar el avance de la ejecución.

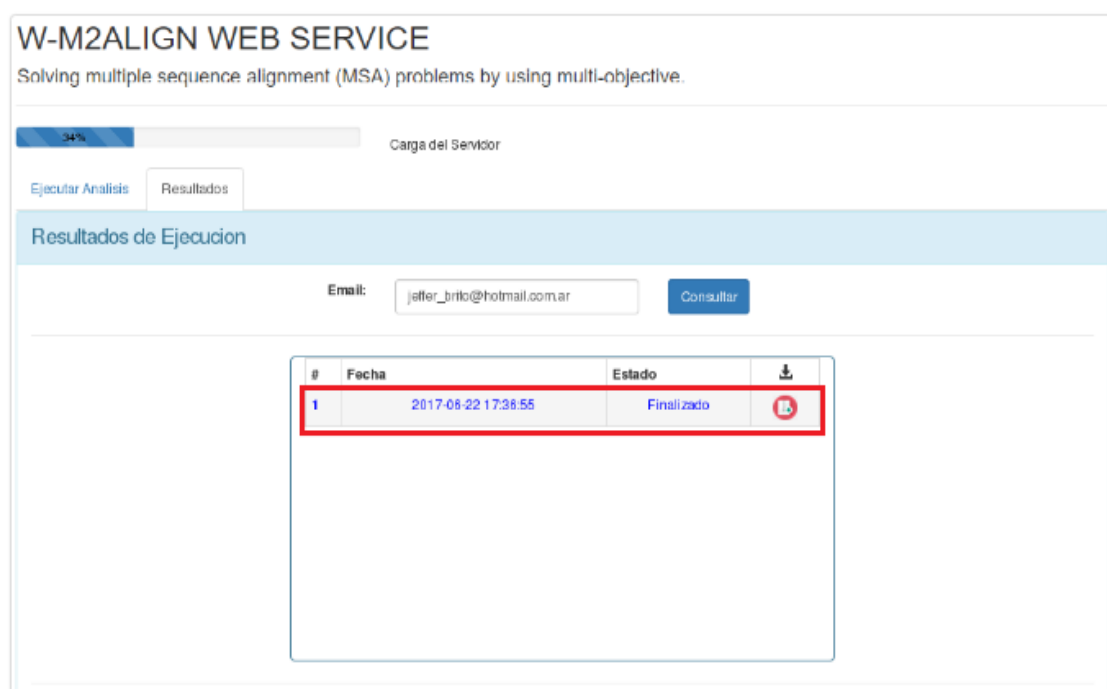
5.1.3.2. Resultados.


Se muestra la pantalla que el usuario visualizará luego de la ejecución del software con una descripción de la información que se estará reflejando en esta sección de resultados y las opciones que se pueden elegir (Figura 27).

Figura 27.- Documentación sección Resultados.

Resultados

Se encuentran listados todos los trabajos (ejecuciones realizadas), con información correspondiente a su fecha y hora de ejecución, y su correspondiente estado (Ejecutándose, Finalizado, Error). Cuenta con la posibilidad de **descargar los resultados** producto de la ejecución en **formato Zip** desde el icono de color rojo de descarga.



#	Fecha	Estado	
1	2017-06-22 17:38:55	Finalizado	

Los resultados también pueden ser visualizados en esta sección, mostrando aquí los archivos tales como:

Resultado	Explicación
FUN.tsv	Contiene la aproximación frontal de Pareto. Para cada solución, este archivo contiene una línea con los valores de los tres objetivos.
VAR.tsv	Contiene la aproximación de Pareto. Cada solución está representada en formato FASTA.
jMetal.log	Contiene el registro de eventos o acciones que se realizaron al ejecutar el Software M2Align. En la cual se encontrará información como el tiempo de ejecución, la fecha entre otros.

5.1.3.3. Descargar PDB

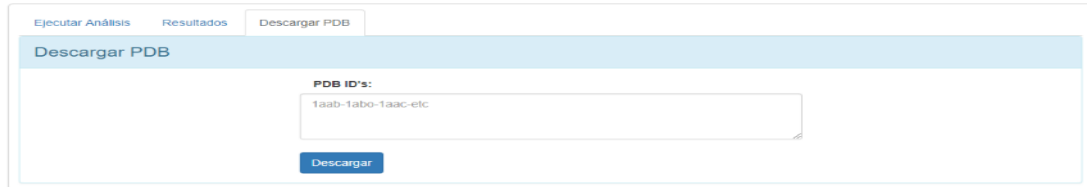
Se detalla cual es el propósito de esta sección, la fuente desde la que se descargan los archivos en formato PDB, y se muestra además como se deben ingresar los ID PDB poder descargar y obtener la resulta (Figura 28).

Figura 28.- Documentación sección Descargar PDB

Descargar PDB

Aquí se encuentra una utilidad que le facilitará la descarga de los archivos *.pdb de manera conjunta. Los archivos son descargados directamente del Banco de Datos de Proteínas la cual brinda un servicio Https que permite la descarga de forma individual de los datos en diferentes formatos (PDB, PDBx, /mmCIF, XML). Puede visitar el sitio desde <https://www.rcsb.org/pdb/home/home.do> su página oficial.

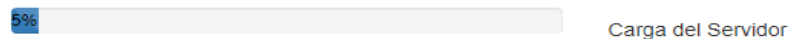
Proporcione una lista de los ID PDB y dele clic al botón descargar y se procederá a bajar todos los archivos que proporcionó en la lista, comprimidos en formato Zip.



5.1.4. Interfaz W-M2Align (Servicio Web).

Es la pantalla que el usuario va a utilizar para mandar a ejecutar el software M2Align. Cuenta con un indicador en la que se refleja el porcentaje de la carga de trabajo que ha tenido el servidor durante los últimos 15 minutos (Figura 29).

Figura 29.- Carga del Servidor.



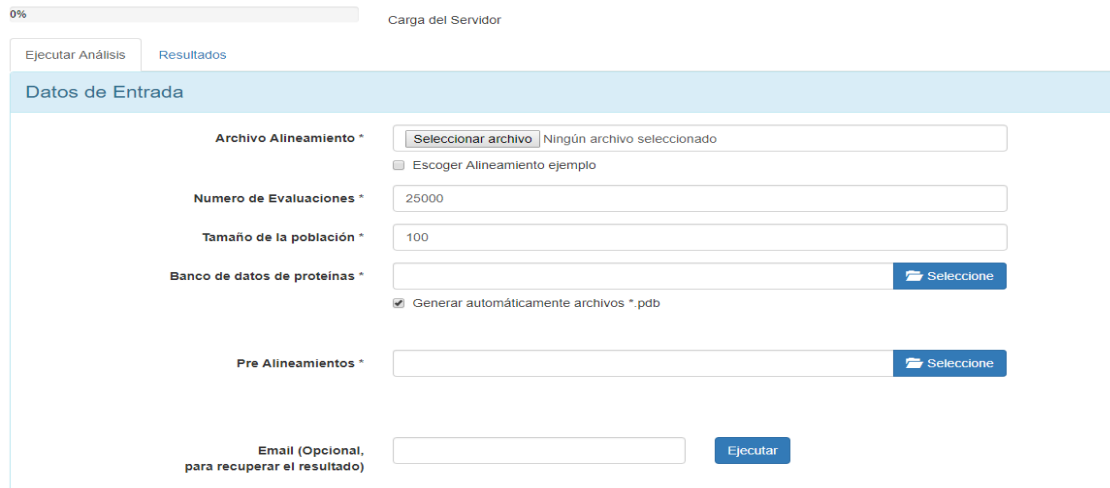
5.1.4.1. Ejecutar Análisis.

Se encuentran los mecanismos encargados de recibir los parámetros de entradas para que la interfaz web éste se encargue de resolver los problemas de alineamiento múltiple de secuencia (Figura 30).

Figura 30.- Sección Ejecutar Análisis.

W-M2ALIGN WEB SERVICE

Solving multiple sequence alignment (MSA) problems by using multi-objective.



Al usuario se le brinda tres diferentes tipos de ejecuciones, las que se detallan a continuación:

- ✓ Escoger un alineamiento de ejemplo y ejecutar.
- ✓ Cargar el alineamiento, los prealineamientos y ejecutar.
- ✓ Cargar el alineamiento, los pdb's, los prealineamientos y ejecutar.

Si se ingresa un email este servirá para que el usuario pueda tener un historial de las ejecuciones que ha realizado y los más importante le permitirá acceder en cualquier momento a verificar el estado del análisis que mando a ejecutar mediante un enlace que se envía al email especificado.

5.1.4.2. Resultados.

Se encontrarán listados todos los trabajos (ejecuciones realizadas) del usuario con información correspondiente a su fecha y hora de ejecución (Figura 31), y su correspondiente estado (Ejecutándose, Finalizado, Error) según el avance de la ejecución. También se brinda la posibilidad de que los resultados producto de la ejecución puedan ser descargados en formato Zip mediante el icono descarga de color rojo.

Figura 31.- Sección Resultados.

Resultados de Ejecución			
Email: jeffer_brito@hotmail.com.ar Consultar			
#	Fecha	Estado	📄
1	2017-08-11 04:15:34	Finalizado	📄
2	2017-09-12 04:23:06	Ejecutandose	📄

5.1.4.3. Sección FUN.

Se muestra el contenido del archivo **FUN.tsv**, que son los valores de la aproximación frontal de Pareto que se obtuvieron resultado de la ejecución. Para cada solución, este archivo contiene una línea con tres valores objetivos (Figura 32).

Figura 32.- Valores objetivo de las soluciones.

FUN	VAR	RunLog	Visualizar MSA
Resultado			
1.4283948098323187	0.9345794392523364	45.79439252336449	
1.0078990832149104	0.0	50.77720207253886	
1.9759739736505255	0.39215686274509803	38.431372549019606	
1.0078990832149104	0.0	50.77720207253886	
1.9598479874138395	0.7782101167315175	38.13229571984436	
1.4302380646158397	0.0	47.11538461538461	
1.9759739736505255	0.39215686274509803	38.431372549019606	
1.2558687877623003	0.49504950495049505	48.51485148514851	
1.0262781923234492	0.0	50.256410256410255	
1.1698456930261776	0.0	50.0	

5.1.4.4. Sección VAR.

Contiene la aproximación de Pareto la cual se encuentra escrita en el archivo resultado de la ejecución **VAR.tsv**. Cada solución en este archivo se encuentra representada en formato FASTA (Figura 33).

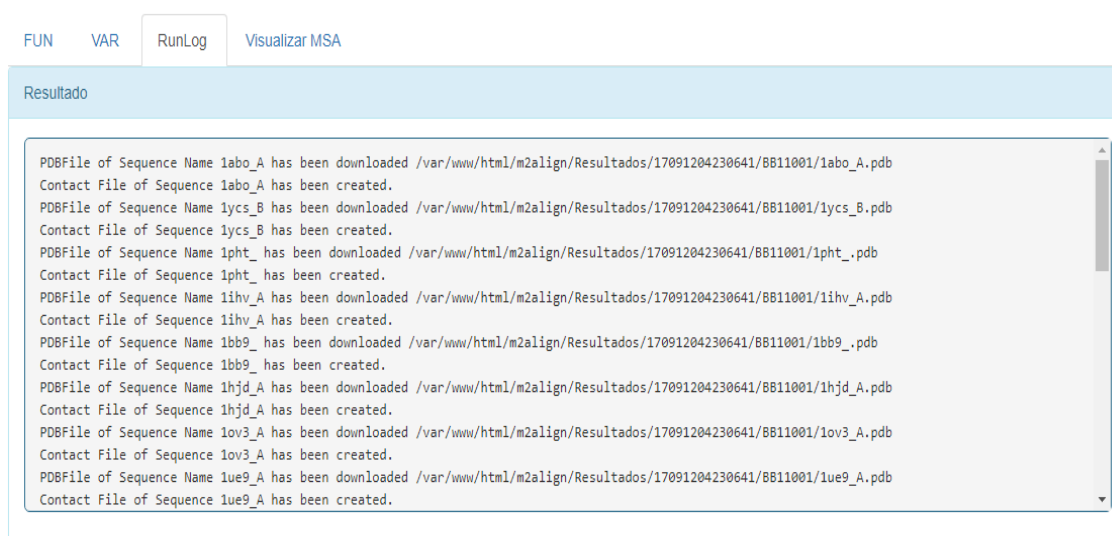
Figura 33.- Soluciones en formato Fasta.

FUN	VAR	RunLog	Visualizar MSA
Resultado			
<pre> >labo_A -----NLFLVLYDFV-----ASGDNTLS-ITKGEKLRVLGYNHNG----- >lycs_B PLALLDSSLEGEFDLVQRIIEVDDPSLPNDEGITALHNAVCAHTEIVKFLVQFGVWNAADSDGWTPLHCAASCNNVQCKFLVESGAAVFAMTYSDMQTAADKCEEMEEGYTQCSQFLYGVQKMGIMNKGVIYALNDYEPQ >1pht_ AEG-----YQYRALYDYKKEREED-----ID-LHLGDILTVNKGSLVA---LGFSQGQE---ARP >1ihv_A -----MIQNFVRVYRDSRDP-----VWKGPAKLLWK-----GE----- >1bb9_ TTGR--L-----DLP--PG-----FMFKVQAQHDYT-----ATDTDELQ-LKAGDVLVIPFQNPPEEQDEGLMG-----VKE >1hjd_A ADRKLC-----DQECSS--HPISMAVALQDYM-----APDCRFLT-IHRGQVYVFSKLGKRG--RLFWGGSVQGDYYG >1ov3_A -----LGSPFE-----IILQTY-----RAIADYEKTSGSEHALS--TG--DVVEVWEKSESGWIFCQMKAKRGWIPASFLEPLDSPDETDEPEPN-YAGEPYVAIKAYTAVEGDEVSLLEG---EAVEV >1ue9_A -----G-----SSGS--SG-----EIAQVTSAYV-----ASGSEQLS-LAPGQLILILKKNTSG----LWQGEQARGKK </pre>			

5.1.4.5. Sección RunLog.

Se refleja el contenido del archivo jMetal.log que contiene el registro de eventos y acciones que se realizaron al ejecutar el Software M2Align. En la cual se encontrará información como el tiempo de ejecución, la fecha entre otros (Figura 34).

Figura 34.- Registro de eventos y acciones.



5.1.4.6. Sección Visualizar MSA.

En esta sección se encuentra implementado "MSAViewer" un componente JavaScript de visualización y análisis rápido y fácil para los datos de alineación de secuencias múltiples de cualquier tamaño. Permite la descarga del alineamiento en formato PNG, la exportación del alineamiento que se está visualizando entre otras (Figura 35).

Para que el usuario pueda visualizar en este componente las soluciones producto de la ejecución, se debe seleccionar de la lista de soluciones, la solución que desee dando clic en la misma, teniendo además la opción de poder mostrar los scores a lado de cada solución.

Figura 35.- Soluciones representadas en componente MSAViewer.



5.1.5. Interfaz de Administración de Procesos.

Las ejecuciones que se ejecutan mediante la Interfaz Web W-M2Align corren procesos en el servidor por cada ejecución realizada. Estos procesos no dejan de correr mientras el software M2Align haya arrojado los resultados al finalizar su ejecución. Por esto se implementó secciones que ayudan al manejo de estos.

5.1.5.1. Sección Procesos.

Esta sección está pensada para que un único administrador tenga las opciones de Detener, Continuar o Finalizar los procesos que se encuentren activos (Figura 36) según sea la necesidad.

Figura 36.- Sección de Administración de Procesos.

W-M2ALIGN WEB SERVICE

Bienvenido Jefferson

Carga del Servidor

Procesos

Historial

Mis datos

Salir

Administrar Procesos

#	PID	Fecha inicio	Fecha final	Estado Ejecucion	Directorio	Accion
1	4725	2017-09-12 05:38:19		Ejecutandose	/var/www/html/m2align/Resultados/17091205381973	Opciones ▾
2	8991	2017-09-12 05:41:15		Ejecutandose	/var/www/html/m2align/Resultados/17091205411590	Opciones ▾

5.1.5.2. Sección Historial.

Muestra un listado de todos los procesos que se han llevado a cabo en el servidor por motivo de las ejecuciones realizadas del software M2Align mediante la Interfaz W-M2Align y que ya se encuentran en estado finalizado, mostrando información tal como la fecha, el usuario, el estado y el directorio donde se encuentran los resultados de la ejecución. (Figura 37).

Figura 37.- Listado de procesos ejecutados y finalizados.

Procesos

Historial

Mis datos

Salir

Historial Procesos

#	PID	Usuario	Maquina	Fecha inicio	Fecha final	Estado Ejecucion	Directorio	Accion
8	10368	jeffer14brito@gmail.com	Google Chrome 60.0.3112. 186.42.104.216	2017-09-12 05:42:10	2017-09-12 05:44:36	Finalizado	/var/www/html/m2align/Resultados/17091205421042	Quitar
6	6440	czambrano@uteq.edu.ec	Google Chrome 60.0.3112. 186.42.104.216	2017-09-12 05:39:26	2017-09-12 05:42:14	Finalizado	/var/www/html/m2align/Resultados/17091205392666	Quitar
4	35672	r.m.p.v94@gmail.com	Google Chrome 60.0.3112. 186.42.104.216	2017-07-06 05:24:11	2017-07-06 05:31:34	Finalizado	/var/www/html/m2align/Resultados/17070605241143	Quitar
3	33811	r.m.p.v94@gmail.com	Google Chrome 60.0.3112. 186.42.104.216	2017-07-09 05:22:27	2017-07-09 05:30:42	Finalizado	/var/www/html/m2align/Resultados/17070905222728	Quitar
2	29104	jeffer_brito@hotmail.com.ar	Google Chrome 60.0.3112. 186.42.104.216	2017-08-12 04:23:06	2017-08-12 04:24:14	Finalizado	/var/www/html/m2align/Resultados/17081204230641	Quitar
1	18054	jeffer_brito@hotmail.com.ar	Google Chrome 60.0.3112. 186.42.105.117	2017-08-11 04:15:34	2017-08-11 04:15:58	Finalizado	/var/www/html/m2align/Resultados/17081104153428	Quitar

< Prev

1

Next >

Refrescar

5.2. Ejecución del Software M2Align con diferentes Instancia Balibase a través de la Interfaz Web.

A continuación, se detallan los parámetros de entrada que se utilizaron en la ejecución del software M2Align.

Cabe recalcar que los prealineamientos fueron generados por 8 enfoques representativos de estado del arte, tales como Muscle, ClustalW, Ma t, T-Co ee, Kalign, RetAlign, ProbCons y FSA.

5.2.1. Instancia del Balibase BB11001.

Alineamiento: BB11001.tfa.

Numero de Evaluaciones: 25000.

Tamaño de la población: 100.

Prealineamientos:

BB11001.msf	BB11001.msf_tfa	BB11001.tfa_clu
BB11001.tfa_fsa	BB11001.tfa_kalign	BB11001.tfa_mafft
BB11001.tfa_muscle	BB11001.tfa_probcons	BB11001.tfa_retalign

Email: jeffer_brito@hotmail.com.ar

Tiempo de ejecución: 14676 ms.

Resultados:

Para revisar el resultado por favor de clic en el siguiente link:

http://186.46.90.102/m2align/Vista/indexserver.php?tid=17081104153428&email=jeffer_brito@hotmail.com.ar

Este trabajo se ejecutó en el Servidor Web W-M2Align

Ilustración 13.- Correo enviado para revisión de resultados del problema Balibase BB11001.

W-M2ALIGN WEB SERVICE

Solving multiple sequence alignment (MSA) problems by using multi-objective.

0% Carga del Servidor

[Ejecutar Análisis](#) [Resultados](#)

Resultados de Ejecución

Email [Consultar](#)

#	Fecha	Estado	↓
1	2017-08-11 04:15:34	Finalizado	
2	2017-08-12 04:23:06	Finalizado	

Ilustración 14.- Resultado de ejecución del problema Balibase BB11001.

[FUN](#) [VAR](#) [RunLog](#) [Visualizar MSA](#)

Resultado

3.01600220882963	2.77777777777777	79.86111111111111
1.0182640717155054	3.225806451612903	92.74193548387096
3.010904077180631	1.9047619047619047	82.14285714285714
1.0182640717155054	3.225806451612903	92.74193548387096
2.71088917323002	6.0	86.25
2.941164032457247	4.504504504504505	77.7027027027027
1.6637098856529908	2.150537634408602	92.74193548387096
1.6637098856529908	2.150537634408602	92.74193548387096
3.01600220882963	2.77777777777777	79.86111111111111
2.488380592546928	4.123711340206185	88.91752577319588

Ilustración 15.- Frente de Pareto resultado de la ejecución del problema Balibase BB11001.

FUNVARRunLogVisualizar MSA

Resultado

```

>1aab_
GKGD--PPKKPRG-KMSSYAFFVQTSREEHKKHPDAS-VNFSEFSKKCSERWKTMSAKE---KGK-FEDMAKADKARYEREMKTYI-----PPKGE
>1j46_A
MQDR--VKRP---MNAFIVWSRDQRRKMALENPRM-R-N-SEISKQLGYQWMLTEAE--KW--PFFQEAQKLQAHREKYPNYK--Y----RPRRKAKMLPK---
>1k99_A
MKKLKKHPDFPKP-LTPYFRFFMEKRAKYAKLHPEMS-N-LD-LTKILSKKYKELP--EKK-KM-KYIQDFQREKQEFERNLARF---REDHPLIQ-----NAKK
>2lef_A
M--H---IKKPLN----AFHLYMKEMRANVVAE-STL-K-ESAAINQILGRRWHLALSREE--QAK--YYELARKERQLHWIQLYPGWSARD---NYGKK-KKRRK--REK

>1aab_
GKGDPPKPRGKMSSYAFFVQTSREEHKKHPDASVNFSEFSKKCSERWKTMSAKEKGKFEDMAKADKARYEREMKTYI-----PPKGE
>1j46_A
MQDRVKRP---MNAFIVWSRDQRRKMALENPRMRNSEISKQLGYQWMLTEAE--EKNPFFQEAQKLQAHREKYPNYKYRPRRKAKMLPK---
>1k99_A
MKKLKKHPDFPKPLTPYFRFFMEKRAKYAKLHPEMSNLDLTKILSKKYKELPEKK--KNKYIQDFQREKQEFERNLARFREDHPLIQNAKK

```

Ilustración 16.- Soluciones FASTA resultado de la ejecución del problema Balibase BB11001.

FUNVARRunLogVisualizar MSA

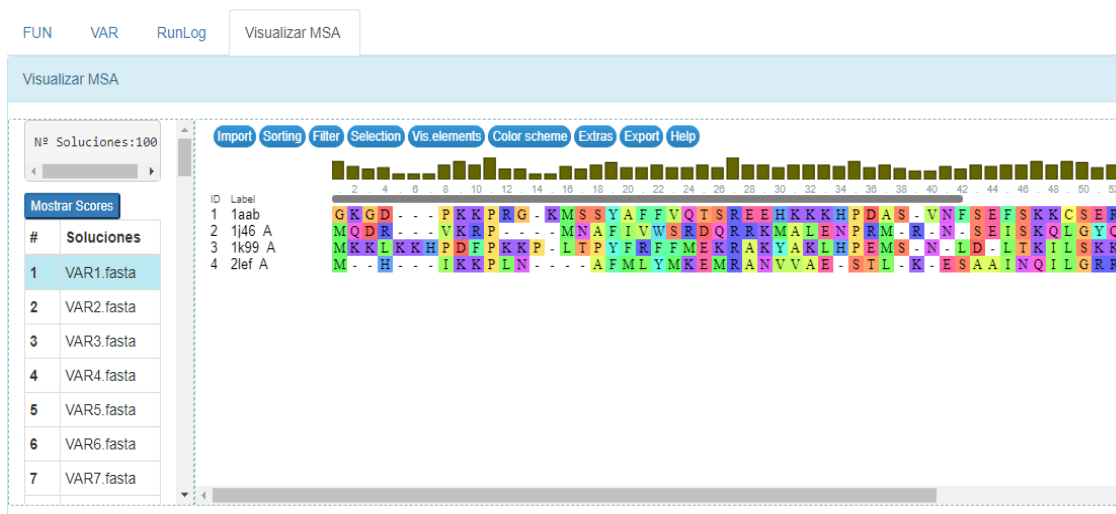
Resultado

```

PDBFile of Sequence Name 1aab_ has been downloaded /var/www/html/m2align/Resultados/17091104153428/BB11001/1aab_.pdb
Contact File of Sequence 1aab_ has been created.
PDBFile of Sequence Name 1j46_A has been downloaded /var/www/html/m2align/Resultados/17091104153428/BB11001/1j46_A.pdb
Contact File of Sequence 1j46_A has been created.
PDBFile of Sequence Name 1k99_A has been downloaded /var/www/html/m2align/Resultados/17091104153428/BB11001/1k99_A.pdb
Contact File of Sequence 1k99_A has been created.
PDBFile of Sequence Name 2lef_A has been downloaded /var/www/html/m2align/Resultados/17091104153428/BB11001/2lef_A.pdb
Contact File of Sequence 2lef_A has been created.
Can't load log handler "java.util.logging.FileHandler"
java.nio.file.AccessDeniedException: jMetal.log.lck
java.nio.file.AccessDeniedException: jMetal.log.lck
    at sun.nio.fs.UnixException.translateToIOException(UnixException.java:84)
    at sun.nio.fs.UnixException.rethrowAsIOException(UnixException.java:102)
    at sun.nio.fs.UnixException.rethrowAsIOException(UnixException.java:107)
    at sun.nio.fs.UnixFileSystemProvider.newFileChannel(UnixFileSystemProvider.java:177)
    at java.nio.channels.FileChannel.open(FileChannel.java:287)

```

Ilustración 17.- Registro de eventos y acciones resultado de la ejecución del problema Balibase BB11001.



5.2.2. Instancia del Balibase BB11002.

Alineamiento: BB11002.tfa.

Numero de Evaluaciones: 25000.

Tamaño de la población: 100.

Prealineamientos:

BB11002.msf	BB11002.msf_tfa	BB11002.tfa_clu
BB11002.tfa_fsa	BB11002.tfa_kalign	BB11002.tfa_mafft
BB11002.tfa_muscle	BB11002.tfa_probcons	BB11002.tfa_realign

Email: jeffer_brito@hotmail.com.ar

Tiempo de ejecución: 48374 ms.

Resultados:

Para revisar el resultado por favor de clic en el siguiente link:

http://186.46.90.102/m2align/Vista/indexserver.php?tid=17081204230641&email=jeffer_brito@hotmail.com.ar

Este trabajo se ejecutó en el Servidor Web W-M2Align

Ilustración 19.- Correo enviado para revisión de resultados del problema Balibase BB11002.

W-M2ALIGN WEB SERVICE

Solving multiple sequence alignment (MSA) problems by using multi-objective.

0% Carga del Servidor

[Ejecutar Análisis](#) [Resultados](#)

Resultados de Ejecución

Email [Consultar](#)

#	Fecha	Estado	↓
1	2017-08-11 04:15:34	Finalizado	✖
2	2017-08-12 04:23:06	Finalizado	✖

Ilustración 20.- Resultado de ejecución del problema Balibase BB11002.

FUN	VAR	RunLog	Visualizar MSA
Resultado			
1.428394808323187	0.9345794392523364	45.79439252336449	
1.0078990832149104	0.0	50.77720207253886	
1.9759739736505255	0.39215686274509803	38.431372549019606	
1.0078990832149104	0.0	50.77720207253886	
1.9598479874138395	0.7782101167315175	38.13229571984436	
1.4302380646158397	0.0	47.11538461538461	
1.9759739736505255	0.39215686274509803	38.431372549019606	
1.2558687877623003	0.49504950495049505	48.51485148514851	
1.0262781923234492	0.0	50.256410256410255	
1.1698456930261776	0.0	50.0	

Ilustración 21.- Frente de Pareto resultado de la ejecución del problema Balibase BB11002.

FUN	VAR	RunLog	Visualizar MSA
Resultado			
<pre> >labo_A -----NLFVALYDFV-----ASGDNLTLS-----ITKGEKLRVLGYNH >lycs_B PLALLDSSLEGEFDLVQRIIEVDOPSLPNDEGITALHNAVCAHTEIVKFLVQFGVNNNAADSDGWTPLHCAASCNNVQVCKFLVESGAADFHTYSDMQTAADKCEEMEEGYTQCSQFLYGVQEKIMNKGVIALNDYEPQ >1pht_ AEG-----YQYRALYDYKKEREED-----ID-----LHLGDILTVNKGSLV >1ihv_A -----MIQNFVRVYRDSRDP-----VWKGPAKLLNK----- >1bb9_ TTGR--L-----DLP--PG-----FMFKVQAQHDYT-----ATDTDELQ-----LKAGDVVLVIFQNP >1hjd_A ADRKLC-----DQEC-----HPISMAVALQDYM-----APDCRFLT-----IHRGQVVVYFSKLG >1ov3_A -----L-----GSPEF-----IILQTYRAIADYEKTSGEMLALS--TG--DVVEVKESESGWFCQMKAKRGWIPASFLEP-----LDSPDETEPEPNYA-GEPEYVAIKAYTA >1ue9_A </pre>			

Ilustración 22.- Soluciones FASTA resultado de la ejecución del problema Balibase BB11002.

FUN	VAR	RunLog	Visualizar MSA
Resultado			
<pre> PDBFile of Sequence Name labo_A has been downloaded /var/www/html/m2align/Resultados/17091204230641/BB11001/labo_A.pdb Contact File of Sequence labo_A has been created. PDBFile of Sequence Name lyes_B has been downloaded /var/www/html/m2align/Resultados/17091204230641/BB11001/lycs_B.pdb Contact File of Sequence lyes_B has been created. PDBFile of Sequence Name 1pht_ has been downloaded /var/www/html/m2align/Resultados/17091204230641/BB11001/1pht_.pdb Contact File of Sequence 1pht_ has been created. PDBFile of Sequence Name 1ihv_A has been downloaded /var/www/html/m2align/Resultados/17091204230641/BB11001/1ihv_A.pdb Contact File of Sequence 1ihv_A has been created. PDBFile of Sequence Name 1bb9_ has been downloaded /var/www/html/m2align/Resultados/17091204230641/BB11001/1bb9_.pdb Contact File of Sequence 1bb9_ has been created. PDBFile of Sequence Name 1hjd_A has been downloaded /var/www/html/m2align/Resultados/17091204230641/BB11001/1hjd_A.pdb Contact File of Sequence 1hjd_A has been created. PDBFile of Sequence Name 1ov3_A has been downloaded /var/www/html/m2align/Resultados/17091204230641/BB11001/1ov3_A.pdb Contact File of Sequence 1ov3_A has been created. PDBFile of Sequence Name 1ue9_A has been downloaded /var/www/html/m2align/Resultados/17091204230641/BB11001/1ue9_A.pdb Contact File of Sequence 1ue9_A has been created. </pre>			

Ilustración 23.- Registro de eventos y acciones resultado de la ejecución del problema Balibase BB11002.

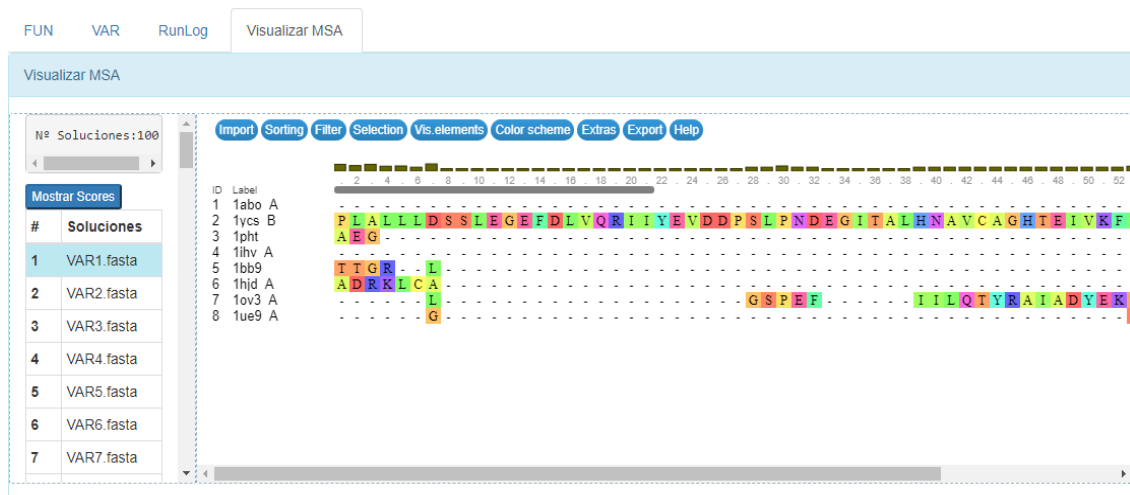


Ilustración 24.- Soluciones Fasta resultado de la ejecución del problema Balibase BB11002 representadas en componente MSAViewer.

5.2.3. Instancia del Balibase BB11003.

Alineamiento: BB11003.tfa.

Numero de Evaluaciones: 25000.

Tamaño de la población: 100.

Prealineamientos:

BB11003.msf	BB11003.msf_tfa	BB11003.tfa_clu
BB11003.tfa_fsa	BB11003.tfa_kalign	BB11003.tfa_mafft
BB11003.tfa_muscle	BB11003.tfa_probcons	BB11003.tfa_realign

Email: r.m.p.v94@gmail.com

Tiempo de ejecución: 482776 ms.

Resultados:

Para revisar el resultado por favor de clic en el siguiente link:

<http://186.46.90.102/m2align/Vista/indexserver.php?tid=17070905222728&email=r.m.p.v94@gmail.com>

Este trabajo se ejecutó en el Servidor Web W-M2Align

Ilustración 25.- Correo enviado para revisión de resultados del problema Balibase BB11003.

W-M2ALIGN WEB SERVICE

Solving multiple sequence alignment (MSA) problems by using multi-objective.

0% Carga del Servidor

[Ejecutar Análisis](#) [Resultados](#)

Resultados de Ejecución

Email [Consultar](#)

#	Fecha	Estado	
1	2017-07-09 05:22:27	Finalizado	
2	2017-07-06 05:24:11	Finalizado	

Ilustración 26.- Resultado de ejecución del problema Balibase BB11003.

[FUN](#) [VAR](#) [RunLog](#) [Visualizar MSA](#)

Resultado

0.7333984012077692	0.5444646098003629	85.2994555353902
1.3129761936113273	4.522613065326633	78.72696817420436
1.7165763331275934	1.8425460636515913	78.72696817420436
1.5774668213685732	3.8402457757296466	72.19662058371736
0.7333984012077692	0.5444646098003629	85.2994555353902
0.7347498254212503	0.5434782608695652	85.14492753623189
0.9592629642662842	1.2658227848101267	84.99095840867993
0.7347498254212503	0.5434782608695652	85.14492753623189
0.9823225090941758	0.7220216606498195	84.8375451263538
1.0098093298366595	0.7207207207207207	84.68468468468468

Ilustración 27.- Frente de Pareto resultado de la ejecución del problema Balibase BB11003.

[FUN](#) [VAR](#) [RunLog](#) [Visualizar MSA](#)

Resultado

```
>1ad3_A
-----SISDTVKRAREAFNSGKTRSLQFRIQQLEALQRMINENKLSISGALAS--DLGKNE-----WTSYY-----EEVAHVL-----EELDTTI--KELPDWAEDE-----
>1uzb_A
MTVEPFRNEPIETFTQTEARRAMREALRRVREF--GRHYPLYIGGEWDTKERHVS LNPSAPSEVVGT TAKAGKAEAAEAALHAKFTWKDHPQEDRSRL LKAAALHRRRKRELEATLVYEVGKNWVEASADVAE AIDFIEY
>1eyy_A
TDNVFYATNAF--TGEALPLAFVH---TEVEVQAATAAAKVARDFRLLNNSKRASLLRTIASEL EARS--DIARAHLETALPEVRLTGEIARTA--NQLRLFADV VNSGSYHQAILDTPNPTRAPLPKPDIRRQQIALGPV
>1o20_A
-----DELLEKAKKVRANDVLRNATTREKNKAIKKIAEKLDERRKEILEANRI--DVEKARERGVKESLVDRLALN----DKRIDEXIKACETVIGLKDPVG-----EVIDSHVRED-----

>1ad3_A
-----SISDTVKRAREAFNSGKTRSLQFRIQQLEALQRMINENKLSISGALAS--DLGKNE-----WTSY-----YEEVAHVL-----EE-----L-----DTTI-----KEL--PDWA
>1uzb_A
MTVEPFRNEPIETFTQTEARRAMREALRRVREF--GRHYPLYIGGEWDTKERHVS LNPSAPSEVVGT TAKAGKAEAAEAALHAKFTWKDHPQEDRSRL LKAAALHRRRKRE-----LEAT----L-----VYEVGKNW
>1eyy_A
```

Ilustración 28.- Soluciones FASTA resultado de la ejecución del problema Balibase BB11003.



Ilustración 29.- Registro de eventos y acciones resultado de la ejecución del problema Balibase BB11003.

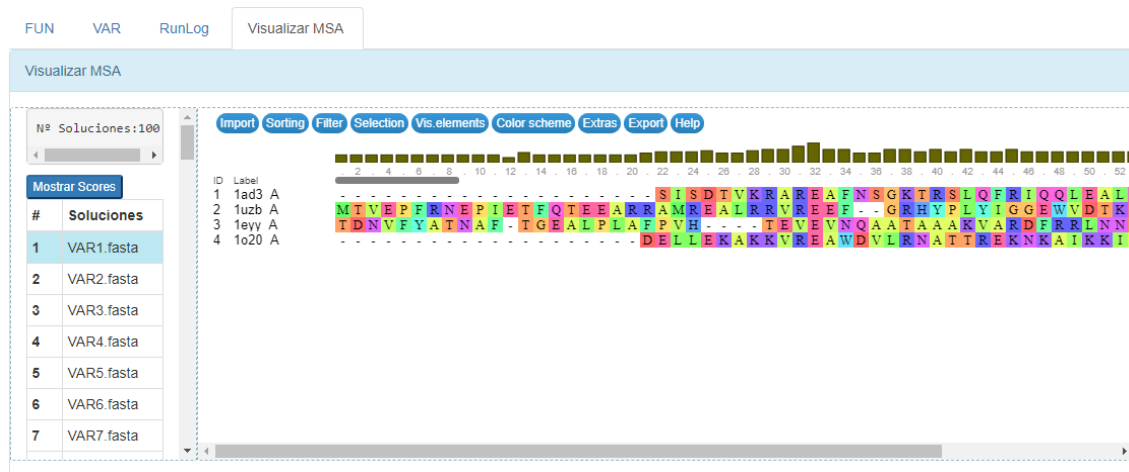


Ilustración 30.- Soluciones Fasta resultado de la ejecución del problema Balibase BB11003 representadas en componente MSAViewer.

5.2.4. Instancia del Balibase BB11004.

Alineamiento: BB11004.tfa.

Numero de Evaluaciones: 25000.

Tamaño de la población: 100.

Prealineamientos:

BB11004.msf	BB11004.msf_tfa	BB11004.tfa_clu
BB11004.tfa_fsa	BB11004.tfa_kalign	BB11004.tfa_mafft
BB11004.tfa_muscle	BB11004.tfa_probcons	BB11004.tfa_realign

Email: r.m.p.v94@gmail.com

Tiempo de ejecución: 431774 ms.

Resultados:

Para revisar el resultado por favor de clic en el siguiente link:

<http://186.46.90.102/m2align/Vista/indexserver.php?tid=17070605241143&email=r.m.p.v94@gmail.com>

Este trabajo se ejecutó en el Servidor Web W-M2Align

Ilustración 31.- Correo enviado para revisión de resultados del problema Balibase BB11004.

W-M2ALIGN WEB SERVICE

Solving multiple sequence alignment (MSA) problems by using multi-objective.

0% Carga del Servidor

[Ejecutar Análisis](#) [Resultados](#)

Resultados de Ejecución

Email [Consultar](#)



#	Fecha	Estado	↓
1	2017-07-09 05:22:27	Finalizado	
2	2017-07-06 05:24:11	Finalizado	

Ilustración 32.- Resultado de ejecución del problema Balibase BB11004.

[FUN](#) [VAR](#) [RunLog](#) [Visualizar MSA](#)

Resultado

1.568981571604314	3.2367972742759794	71.7206132879046
0.9091239384939251	0.43478260869565216	91.52173913043478
1.9178697318920022	1.7828200972447326	68.23338735818476
1.0498940781900876	0.21008403361344538	88.4453781512605
1.9178697318920022	1.7828200972447326	68.23338735818476
0.8467006593878774	1.2875536480686696	90.34334763948499
0.9365639662627054	0.6437768240343348	90.34334763948499
1.7455638459149303	3.0303030303030303	70.87542087542087
1.2024027892337026	1.3916500994035785	83.69781312127238
1.0782488027812367	1.6563146997929608	87.16356107660455

Ilustración 33.- Frente de Pareto resultado de la ejecución del problema Balibase BB11004.



Ilustración 34.- Frente de Pareto resultado de la ejecución del problema Balibase BB11004.



Ilustración 35.- Registro de eventos y acciones resultado de la ejecución del problema Balibase BB11004.

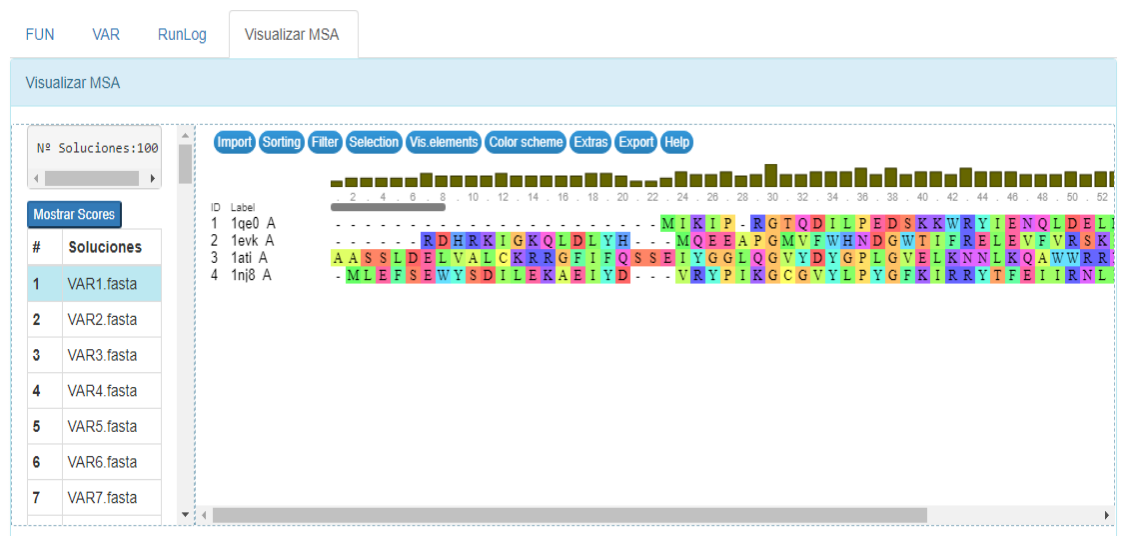


Ilustración 36.- Soluciones Fasta resultado de la ejecución del problema Balibase BB11004 representadas en componente MSAViewer.

5.2.5. Instancia del Balibase BB11005.

Alineamiento: BB11005.tfa.

Numero de Evaluaciones: 25000.

Tamaño de la población: 100.

Prealineamientos:

BB11005.msf	BB11005.msf_tfa	BB11005.tfa_clu
BB11005.tfa_fsa	BB11005.tfa_kalign	BB11005.tfa_mafft
BB11005.tfa_muscle	BB11005.tfa_probcons	BB11005.tfa_realign

Email: czambrano@uteq.edu.ec

Tiempo de ejecución: 1330523 ms.

Resultados:

Para revisar el resultado por favor de clic en el siguiente link:

<http://186.46.90.102/m2align/Vista/indexserver.php?tid=17091205381973&email=czambrano@uteq.edu.ec>

Este trabajo se ejecutó en el Servidor Web W-M2Align

Ilustración 37.- Correo enviado para revisión de resultados del problema Balibase BB11005.

W-M2ALIGN WEB SERVICE

Solving multiple sequence alignment (MSA) problems by using multi-objective.

The screenshot shows the W-M2ALIGN WEB SERVICE interface. At the top, there is a progress bar and the text 'Carga del Servidor'. Below this, there are two tabs: 'Ejecutar Análisis' and 'Resultados', with 'Resultados' being the active tab. The main heading is 'Resultados de Ejecución'. Below this, there is a form with an 'Email' field containing 'czambrano@uteq.edu.ec' and a 'Consultar' button. Below the form, there is a table with the following data:

#	Fecha	Estado	↓
1	2017-09-12 05:38:19	Finalizado	
2	2017-09-12 05:39:26	Finalizado	

Ilustración 38.- Resultado de ejecución del problema Balibase BB11005.

FUN	VAR	RunLog	Visualizar MSA
Resultado			
1.0271789975182377	0.0	74.66559657570893	
1.0676603271352125	0.37243947858473	74.24847033785582	
1.7287008140258113	0.31446540880503143	62.69092542677448	
1.0271789975182377	0.0	74.66559657570893	
1.2153107618254444	0.0	73.56352134949921	
1.7253714757233027	0.315955766192733	62.9880388174227	
1.7208266109277974	0.3257328990228013	64.93718008375988	
1.1673617877090667	0.37174721189591076	74.11046202867763	
1.2431101834370737	0.3683241252302026	73.42804525124966	
1.5152247252681141	0.35335689045936397	70.4442200908632	

Ilustración 39.- Frente de Pareto resultado de la ejecución del problema Balibase BB11005.

FUN	VAR	RunLog	Visualizar MSA
Resultado			
<pre> >1b8g_A -----MLSRNATSSYFLGWQEYKPNPYHEVHNTNGIIQVGLAENQLCFDLESWLAKNPEAAAFKKNGESIFAELALFQDYHGLPAFKKAMVDFMAEIR-----GNKVTDFDPNH >1lc5_A -----LFNTAHGGNIREPATVLGISPDQLLDFSANI----NPLGHPVSVKRALIDNLCIERYPDADYFHLHQLARHHQ-----VPASW >1bw0_A -----WDVSHSNHAGLVFNPIRTVSDNAKSPSPKPIIKLSVGDOPTLDKNLTSAAQIKKLEAIDSQECNGYFPTVGSPEAREAVATWNRNSFVHKKEEL-----KSTIVKDN >1d2f_A -----LLPFTISDMDFATAPCIIEALN-----QRLMHGVFGYSRNKDEFLAAIAHMFSTQHYT-----AIDSQT >1dty_A -----MTTDDLAFDERHIHPYTSMTSPVPVVAEGCELILSDGRRLVDGSHSSWMAAHGYNHQPQNAAMKSQLDAMSHVMFGEITHAPAEICRKLVAHTPQP-----LECVFLADS >2dkb_ -----LNDDATFWRNARHHLVRYGGTFEPMIIERAKGSFVYDADGRAILDFTSGQMSAVLGHCHPEIVSVIGEYAG-KLDHLFSEMLSRPVVDLATRLANITP-----PGLDRA >2gsa_A FKTIK-----SDEIFAAQKLMPPGVSSPVRAFKSVGGQPIVFDKVKDAYAMDVDGNRYIDYVGTWPAICGHAHPEVEALKVAMEKGTSTFGAPCALENVLAEMVN-----DAVPISIEHV >1ohv_A </pre>			

Ilustración 40.- Frente de Pareto resultado de la ejecución del problema Balibase BB11005.

FUN	VAR	RunLog	Visualizar MSA
Resultado			
<pre> PDBFile of Sequence Name 1b8g_A has been downloaded /var/www/html/m2align/Resultados/17091205381973/BB11001/1b8g_A.pdb Contact File of Sequence 1b8g_A has been created. PDBFile of Sequence Name 1lc5_A has been downloaded /var/www/html/m2align/Resultados/17091205381973/BB11001/1lc5_A.pdb Contact File of Sequence 1lc5_A has been created. PDBFile of Sequence Name 1bw0_A has been downloaded /var/www/html/m2align/Resultados/17091205381973/BB11001/1bw0_A.pdb Contact File of Sequence 1bw0_A has been created. PDBFile of Sequence Name 1d2f_A has been downloaded /var/www/html/m2align/Resultados/17091205381973/BB11001/1d2f_A.pdb Contact File of Sequence 1d2f_A has been created. PDBFile of Sequence Name 1dty_A has been downloaded /var/www/html/m2align/Resultados/17091205381973/BB11001/1dty_A.pdb Contact File of Sequence 1dty_A has been created. PDBFile of Sequence Name 2dkb_ has been downloaded /var/www/html/m2align/Resultados/17091205381973/BB11001/2dkb_.pdb Contact File of Sequence 2dkb_ has been created. PDBFile of Sequence Name 2gsa_A has been downloaded /var/www/html/m2align/Resultados/17091205381973/BB11001/2gsa_A.pdb Contact File of Sequence 2gsa_A has been created. PDBFile of Sequence Name 1ohv_A has been downloaded /var/www/html/m2align/Resultados/17091205381973/BB11001/1ohv_A.pdb Contact File of Sequence 1ohv_A has been created. </pre>			

Ilustración 41.- Registro de eventos y acciones resultado de la ejecución del problema Balibase BB11005.

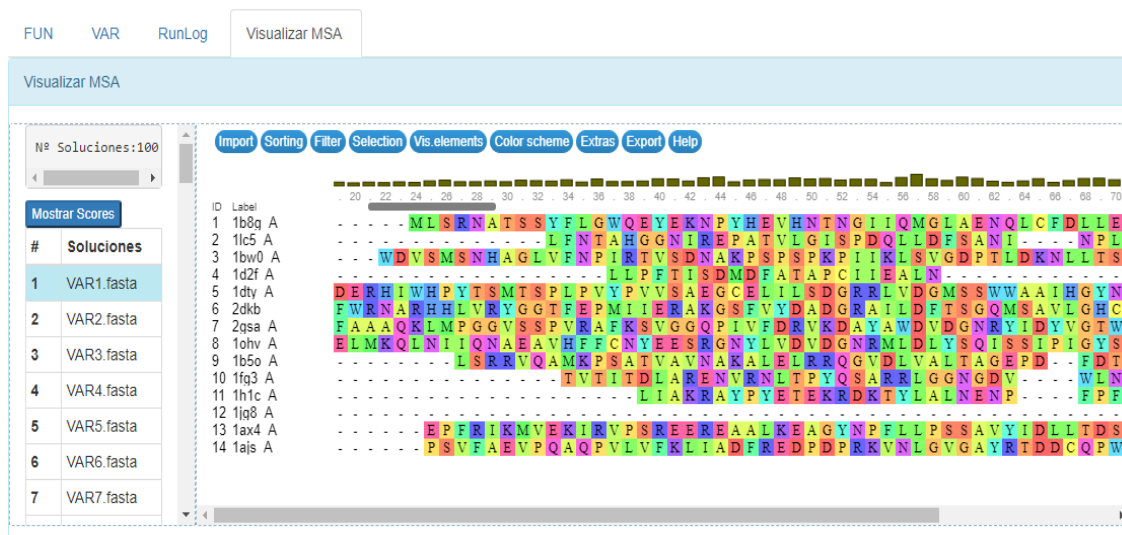


Ilustración 42.- Soluciones Fasta resultado de la ejecución del problema Balibase BB11005 representadas en componente MSAViewer.

5.2.6. Instancia del Balibase BB11006.

Alineamiento: BB11006.tfa.

Numero de Evaluaciones: 25000.

Tamaño de la población: 100.

Prealineamientos:

BB11006.msf	BB11006.msf_tfa	BB11006.tfa_clu
BB11006.tfa_fsa	BB11006.tfa_kalign	BB11006.tfa_mafft
BB11006.tfa_muscle	BB11006.tfa_probcons	BB11006.tfa_realign

Email: czambrano@uteq.edu.ec

Tiempo de ejecución: 156396 ms.

Resultados:

Para revisar el resultado por favor de clic en el siguiente link:

<http://186.46.90.102/m2align/Vista/indexserver.php?tid=17091205392666&email=czambrano@uteq.edu.ec>

Este trabajo se ejecutó en el Servidor Web W-M2Align

Ilustración 43.- Correo enviado para revisión de resultados del problema Balibase BB11006.

W-M2ALIGN WEB SERVICE

Solving multiple sequence alignment (MSA) problems by using multi-objective.

0% Carga del Servidor

Ejecutar Análisis Resultados

Resultados de Ejecución

Email: [Consultar](#)

#	Fecha	Estado	↓
1	2017-09-12 05:38:19	Finalizado	
2	2017-09-12 05:39:26	Finalizado	

Ilustración 44.- Resultado de ejecución del problema Balibase BB11006.

FUN VAR RunLog Visualizar MSA

Resultado

0.8525914531683595	0.8695652173913043	70.94202898550725
1.014396150443789	0.5698005698005698	69.72934472934473
0.7739452333077033	0.0	77.94585987261146
0.7739452333077033	0.0	77.94585987261146
0.7519025875864616	0.3125	76.484375
1.0049929598785137	0.8241758241758241	67.23901098901099
0.7519025875864616	0.3125	76.484375
0.9792400928676468	0.29411764705882354	71.98529411764706
0.9599145351787524	0.0	72.84226190476191
1.014396150443789	0.5698005698005698	69.72934472934473

Ilustración 45.- Frente de Pareto resultado de la ejecución del problema Balibase BB11006.

FUN VAR RunLog Visualizar MSA

Resultado

```

>1bbt_ac
-----GIFPVACSDGYGLVTTDPKTADPVYG--KVFNPPRNQLPGRFTNLLDVAEACPTFLRFEG-----GVPYVTTKTOSDRVLAQFDHSL-----AAKHISNTFLAG-----L
>1a12_ad
GLPVMNTPGNSQYLTAADNFQSPALPEFDVTPPIDPGEVKNMELAEIDTIMIPDLSATKKNTMEHY-----RVRL-----SDK--PHTDDPILCLSLSPASDPLRSLHTMLGE-----I
>1b35_c
-----SKPTVQKIGECKLRGQGRNANFDGMDHSHKHALSSTNEIETNEGLAGTSLDVMDSRVLSIPNYDRFTW--KTSVDINTVLWQNYVSPFKVKPYSATI-----TDRFCTHMGK-----V
>1bbt_ab
-----LLEDRIILTNRGHTTSTTQSSVGVTYGYA-----TAEDFVSGPNTSGLETRVVQAEFFK-----THLFDWITSDFSGRCHLLELPT-----DHKGVYGS-----L
>1mec_aa
-----GVNAEKGVTEENTDATDFVAQPVYLPENQ--TKVAFFYDRSSPIGRFAVKSGSLESGFAPFSNKACPNVILTPGPQFDPAYDQLRPQRLTEIWNGNEETSEVFLKTKQDYSFCL
>1bbt_aa
-----TTSAGESADPVTTTVENYGETQIQRRQHTDVSFIID-----RFVK-----VTPQMQINIIDLIMQVP-----SHTLVGG-----L
>1a12_ab
-----AATSRDALPNTAEAGPSTHKEIPALTAVETGATNLPVSDTVQTRHV--QHRSRSESSIESFFA-----RGAC-----VTIMTVD-----NPASTTNKDKLFAVWKITYKDTVQLRR-----K
>1a12_ac

```

Ilustración 46.- Frente de Pareto resultado de la ejecución del problema Balibase BB11006.

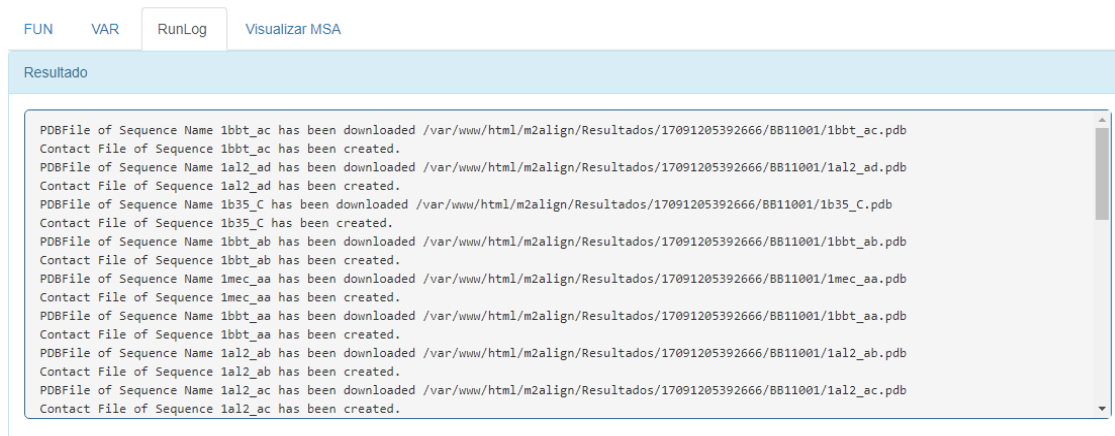


Ilustración 47.- Registro de eventos y acciones resultado de la ejecución del problema Balibase BB11006.

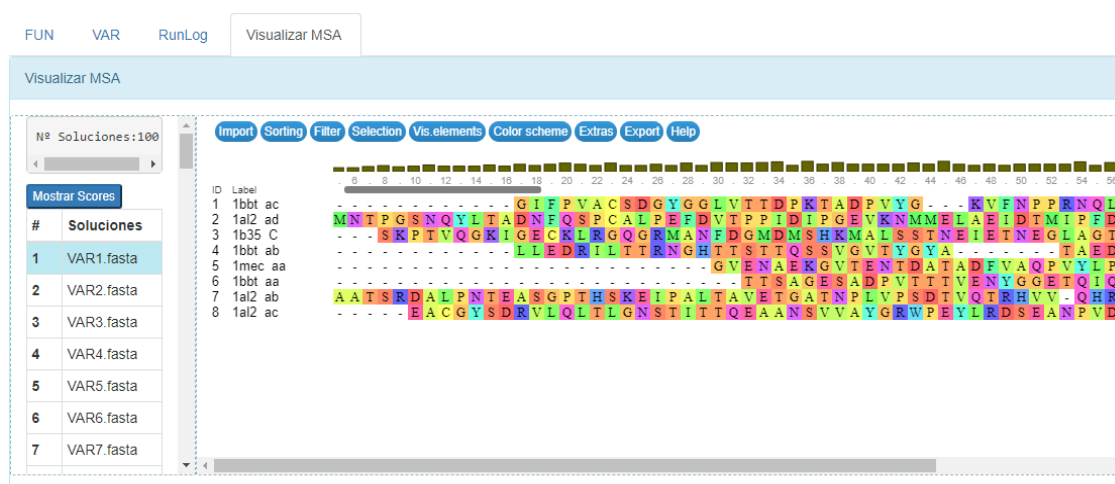


Ilustración 48.- Soluciones Fasta resultado de la ejecución del problema Balibase BB11006 representadas en componente MSAViewer.

El número total de ejecuciones de pruebas realizadas fueron 6, con instancias Balibase diferentes para cada una de éstas, es decir que los problemas de alineamientos fueron distintos, de los cuales todos se ejecutaron con éxito y arrojaron los resultados esperados, los mismos que fueron visualizados en las respectivas secciones de la Interfaz Web.

Por cada ejecución se envió al correo proporcionado un enlace con el cual se pudo acceder a verificar el avance o estado de la ejecución realizada en el momento deseado.

Tabla 18.- Resultados de ejecución de los distintos problemas Balibase.

Problema Balibase	Alineamiento	Número evaluaciones	Tamaño población	Prealineamientos	Email (Usuario)	Tiempo de Ejecución	Estado de Ejecución
BB11001	BB11001.tfa	25000	100	Problema_Balibase.msf	jeffer_brito@hotmail.com.ar	14676 ms.	Finalizada
BB11002	BB11002.tfa	25000	100	Problema_Balibase.tfa_fsa Problema_Balibase.tfa_muscle	jeffer_brito@hotmail.com.ar	48374 ms.	Finalizada
BB11003	BB11003.tfa	25000	100	Problema_Balibase.msf_fta Problema_Balibase.tfa_kalign	r.m.p.v94@gmail.com	482776 ms.	Finalizada
BB11004	BB11004.tfa	25000	100	Problema_Balibase.tfa_probcons	r.m.p.v94@gmail.com	431774 ms.	Finalizada
BB11005	BB11005.tfa	25000	100	Problema_Balibase.tfa_clu Problema_Balibase.tfa_mafft	czambrano@uteq.edu.ec	1330523 ms.	Finalizada
BB11006	BB11006.tfa	25000	100	Problema_Balibase.tfa_realign	czambrano@uteq.edu.ec	156396 ms.	Finalizada

FUENTE: CONOCIMIENTO PROPIO.

ELABORADO: AUTOR.

CAPITULO VI
CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

5.1. Conclusiones.

- Se desarrolló una Interfaz Web que permite la ejecución del software de alineamiento múltiple de secuencia con metaheurística multiobjetivo M2Align de manera rápida y fácil, gracias a su correcta implementación y al óptimo rendimiento del servidor de la UTEQ donde se encuentra alojada la interfaz.
- La determinación de las tecnologías sirvió para plantear la arquitectura de comunicación entre la Interfaz Web y el software M2Align, y establecer PHP como el lenguaje de programación y MySql como motor de base de datos para el desarrollo de la interfaz web por las buenas características y funcionalidades que brindan.
- Los mecanismos implementados en la Interfaz Web para la carga y ajuste de los parámetros de entrada del software M2Align permiten ahorrar tiempo y evitan que existan errores en virtud a que la forma de ejecutar el software por parte del usuario ya no se la realiza ingresando manualmente comandos de consola.
- Se estableció tres estados que reflejan el progreso de la ejecución del software M2Align: Ejecutándose, Finalizada y Error, los cuales pueden ser visualizados en tiempo real en la sección de resultados de la interfaz, a la que se puede acceder por medio del enlace enviado al correo del usuario.
- La herramienta MSASViewer se utilizó para la presentación numérica, textual y visual de los datos de los alineamientos de secuencia en formato FASTA, y permitió la navegación interactiva a través de los alineamientos que genera el software M2Align. Es una herramienta compatible con cualquier navegador y no requerirá la instalación de complemento alguno.

5.2. Recomendaciones.

- Estudiar los beneficios que se tendría tanto en la capacidad de cálculo y velocidad de respuesta al implementar un clúster de alto rendimiento que se dedique exclusivamente a la recepción de las peticiones de ejecución del software M2align efectuadas mediante la Interfaz Web.
- Investigar constantemente sobre las nuevas tecnologías para así seguir implementando mejoras a la Interfaz Web desarrollada.
- Limitar el uso del servidor por parte de las ejecuciones realizadas por el usuario, dando como tiempo máximo 36 horas en que una ejecución pueda tardar en finalizar y arrojar los resultados.
- Aprovechar la información arrojada en el archivo FUN.tsv producto de la ejecución del software M2Align que contiene los Frentes de Pareto y graficarlos en un componente en 3D.

CAPÍTULO VI

BIBLIOGRAFÍA

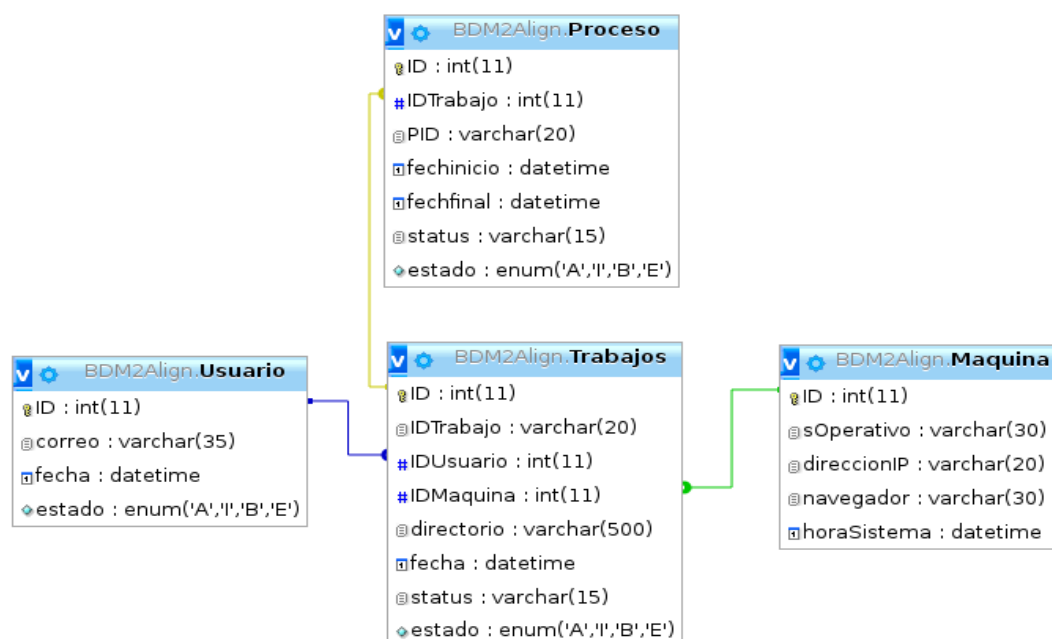
6.1. Bibliografía

- [1] C. G. Zambrano-Vega, M. Cárdenas-Zea y R. Aguirre-Pérez, «Un enfoque Multi-Objetivo a la optimización del Alineamiento Múltiple de Secuencias (MSA),» *LATIN AMERICAN JOURNAL OF COMPUTING*, vol. 3, nº 1, pp. 43-51, 2016.
- [2] C. G. Zambrano-Vega, A. J. Nebro, J. J. Durillo, J. García-Nieto y J. F. Aldana-Montes, «Multiple Sequence Alignment with Multiobjective Metaheuristics. A Comparative Study,» *International Journal of Intelligent Systems*, vol. 32, nº 8, pp. 843-861, 2017.
- [3] C. G. Zambrano-Vega, A. J. Nebro, J. García-Nieto y J. F. Aldana-Montes, «Comparing multi-objective metaheuristics for solving a three-objective formulation of multiple sequence alignment,» *Progress in Artificial Intelligence*, vol. 6, nº 3, p. 195–210, 2017.
- [4] C. G. Zambrano-Vega, A. J. Nebro, J. García-Nieto y J. F. Aldana-Montes, «M2Aling: parallel multiple sequence alignment with a multi-objective metaheuristic,» *Bioinformatics*, vol. 33, nº 19, pp. 3011-3017, 2017.
- [5] C. G. Zambrano-Vega, A. J. Nebro, J. García-Nieto y J. F. Aldana-Montes, «A Multi-Objective Optimization Framework for Multiple Sequence Alignment with Metaheuristics,» *Bioinformatics and Biomedical Engineering*, pp. 245-256, 2017.
- [6] P. Membrey, T. Verhoeven y R. Angenendt, *The Definitive Guide to CentOS*, United States of America: Apress, 2009.
- [7] C. G. Zambrano-Vega, «GitHub,» GitHub, 5 10 2016. [En línea]. Available: <https://github.com/cristianzambrano/strikeContactGenerator>. [Último acceso: 29 5 2017].
- [8] G. Yachdav, S. Wilzbach, B. Rauscher, R. Sheridan, I. Sillitoe, J. Procter, S. E. Lewis, B. Rost y T. Goldberg, «MSAViewer: interactive JavaScript visualization of multiple sequence alignments.,» *Bioinformatics*, vol. 32, nº 22, p. 3501–3503, 2016.
- [9] M. Ryan, C. Lameter y D. Collier-Brown, «Ssmtp,» 04 02 2005. [En línea]. Available: <https://linux.die.net/man/8/ssmtp>. [Último acceso: 01 06 2017].
- [10] S. Sæther Bakken, A. Aulbach, E. Schmid, J. Winstead, L. Torben Wilson, R. Lerdorf, A. Zmievski y J. Ahto, *Manual de PHP*, Mexico: Rafael Martínez (Coordinador)-Víctor Fernández-Leonardo Boshell, 2002.
- [11] Thornton, M. Otto y Jacob, «w3schools,» w3schools, 13 02 2014. [En línea]. Available: https://www.w3schools.com/bootstrap/bootstrap_get_started.asp. [Último acceso: 14 06 2017].
- [12] Dedoimedo y I. Ljubuncic aka, «Dedoimedo,» 13 02 2011. [En línea]. Available: <https://sites.duke.edu/workblog/files/2014/12/www.dedoimedo.com-apache-web-server-lm.pdf>. [Último acceso: 20 06 2017].

- [13] P. DuBois, K. Aldale, M. J. Miller Jr, Y. Cailin, J. Flaherty, P. Southworth, R. Loyzaga, T. Gilbert y J.-M. Pouyot, *MySQL 5.0 Reference Manual*, Argentina: Oracle, 2014.
- [14] J. Trifinopoulos, L.-T. Nguyen, A. von Haeseler y M. Bui Quang, «W-IQ-TREE: a fast online phylogenetic tool for maximum likelihood analysis,» *Nucleic Acids Research*, vol. 44, nº W1, pp. W232-W235, 2016.
- [15] B. Quang Minh, J. Trifinopoulos, D. Schrempf y H. A. Schmidt, «IQ-TREE version 1.5.5: Tutorials and Manual,» 07 06 2017. [En línea]. Available: <http://www.iqtree.org/doc/iqtree-doc.pdf>. [Último acceso: 29 06 2017].
- [16] S. Guindon, F. Lethiec, P. Duroux y O. Gascuel, «PHYML Online—a web server for fast maximum likelihood-based phylogenetic inference,» *Nucleic Acids Research*, vol. 33, nº suppl_2, pp. W557-W559, 2005.
- [17] S. Guindon, J.-F. Dufayard, V. Lefort, M. Anisimova, W. Hordijk y O. Gascuel, «PhyML 3.0: new algorithms, methods and utilities,» 14 02 2010. [En línea]. Available: <http://www.atgc-montpellier.fr/phyml/usersguide.php?type=online>. [Último acceso: 23 06 2017].
- [18] A. Boc, A. B. Diallo y V. Makarenkov, «T-REX: a web server for inferring, validating and visualizing phylogenetic trees and networks,» *Nucleic Acids Research*, vol. 40, nº W1, pp. W537-W579, 2012.

CAPITULO VII
ANEXOS

Anexo 1: Modelado Físico de la Base de Datos.



Anexo 2: Diccionario de datos.

ENTIDAD: Usuario				
NOMBRE	TIPO	LONG	DESCRIPCIÓN	RESTRIC
ID	INT	11	Clave primaria	NO NULO
correo	VARCHAR	35		NO NULO
fecha	DATETIME			NO NULO
estado	ENUM	('A', 'I', 'B', 'E')		NO NULO

FUENTE: CONOCIMIENTO PROPIO.

ELABORADO: AUTOR.

ENTIDAD: Maquina				
NOMBRE	TIPO	LONG	DESCRIPCIÓN	RESTRIC
ID	INT	11	Clave primaria	NO NULO
sOperativo	VARCHAR	30		NO NULO
direccionIP	VARCHAR	20		NO NULO
navegador	VARCHAR	30		
horaSistema	DATETIME			NO NULO

FUENTE: CONOCIMIENTO PROPIO.

ELABORADO: AUTOR.

ENTIDAD: Trabajos				
NOMBRE	TIPO	LONG	DESCRIPCIÓN	RESTRIC
ID	INT	11	Clave primaria	NO NULO
IDTrabajo	VARCHAR	20	ID personalizado	NO NULO
IDUsuario	INT	11	Clave foránea	NO NULO
IDMaquina	INT	11	Clave foránea	NO NULO
directorio	VARCHAR	500		NO NULO
fecha	DATETIME			NO NULO
status	VARCHAR	15	Estados	
estado	ENUM	('A', 'I', 'B', 'E')	ejecución.	NO NULO

FUENTE: CONOCIMIENTO PROPIO.

ELABORADO: AUTOR.

ENTIDAD: Trabajos				
NOMBRE	TIPO	LONG	DESCRIPCIÓN	RESTRIC
ID	INT	11	Clave primaria	NO NULO
IDTrabajo	INT	11	Clave foránea	NO NULO
PID	VARCHAR	20	ID generado	NO NULO
fechinicio	DATETIME			NO NULO
fechfinal	DATETIME			
status	VARCHAR	15	Estados proceso.	NO NULO
estado	ENUM	('A', 'I', 'B', 'E')		NO NULO

FUENTE: CONOCIMIENTO PROPIO.

ELABORADO: AUTOR.