

UNIVERSIDAD TÉCNICA FEDERICO SANTA MARÍA
DEPARTAMENTO DE ELECTRÓNICA E INFORMÁTICA
CONCEPCIÓN - CHILE



**Visualización automatizada de microporosidad
basada en análisis Brunauer-Emmett-Teller con
herramientas de Python**

LIUDMILA NOVOSELOVA

**MEMORIA PARA OPTAR AL TÍTULO DE
INGENIERO EN INFORMÁTICA**

Profesor Guía: Jorge Portilla Gómez



CONSTANCIA DE VALIDACIÓN Y CONFIDENCIALIDAD DE MONOGRAFÍA A REPOSITORIO ACADÉMICO

1.- IDENTIFICACIÓN DEL TRABAJO ACADÉMICO

Tipo de monografía (marcar una opción): ☒ Memoria o trabajo de título ☐ Tesis de Postgrado

Título del trabajo: Visualización automatizada de microporosidad basada en análisis Brunauer-Emmett-Teller con herramientas de Python

Nombre del candidato(a): Liudmila Novoselova

Carrera / Grado: Ingeniería en informática TESIS

Yo, JORGE ALEXIS PORTILLA GÓMEZ, en mi calidad de profesor(a) guía/director(a) del trabajo académico mencionado anteriormente **DEJO CONSTANCIA** que:

- He revisado esta versión del documento y corresponde a la versión final aprobada del trabajo.
- El trabajo cumple con los requisitos académicos y de formato establecidos por la institución.

3.- EVALUACIÓN DE CONFIDENCIALIDAD POR PROPIEDAD INDUSTRIAL (marcar una opción)

☒ El trabajo **NO contiene** información que amerite confidencialidad y puede ser publicado de inmediato en repositorio con acceso abierto.

☐ El trabajo **CONTIENE** información con potenciales implicancias de propiedad industrial o intelectual y requiere un periodo de confidencialidad (embargo) por (marcar una opción):

☐ 6 meses ☐ 12 meses ☐ 2 años ☐ 3 años ☐ 5 años ☐ 10 años

Fundamentación de la necesidad de confidencialidad (obligatorio si se solicita embargo):

4.- FIRMAS

Profesor(a) guía o director(a) de memoria o tesis:

Fecha: 03/08/26 Firma: _____

JORGE ALEXIS
PORTILLA
GOMEZ

Firmado digitalmente
por JORGE ALEXIS
PORTILLA GOMEZ
Fecha: 2026.08.03
19:04:38 -04'00'

Estudiante o Candidato(a):

Fecha: 18/07/2026 Firma: _____

Este formulario debe ser insertado como página 2 de la memoria o tesis, completado y firmado por estudiante y profesor(a) antes de la entrega en portal PRISMA de Biblioteca USM.

DEDICATORIA

Este trabajo está dedicado a todos los profesionales de la geología, nanotecnología farmacéutica y de la minería que, día a día, enfrentan desafíos en el laboratorio y buscan soluciones informáticas que optimicen sus procesos. Su constante búsqueda de innovación ha sido una fuente de inspiración para el desarrollo de esta memoria y de la aplicación PoreMap.

AGRADECIMIENTOS

Agradezco profundamente a mi padre por facilitar la práctica que dio origen a este trabajo, permitiéndole conectar la teoría con la experiencia real de laboratorio. A mis compañeros de grupo de estudio, gracias por su constante apoyo, ideas y colaboración en el desarrollo y mejora de la aplicación *PoreMap*. A mi profesor guía, por su paciencia y orientación durante todo el proceso, y por introducirme en el mundo de la redacción científica, motivándome a avanzar con seguridad y rigor académico. Finalmente, a la jefatura de carrera, por inspirarme a enfocar mi memoria y trabajo de título en una solución informática aplicada al ámbito de laboratorio, y por fomentar la vinculación entre el conocimiento técnico y su aplicación práctica.

RESUMEN

En el laboratorio de química del Instituto de Geología Económica Aplicada (GEA) se procesan muestras de roca solicitadas por empresas como ENAP, CODELCO y otras del rubro minero y de la construcción. Estas muestras requieren distintos tipos de análisis especializados. Este trabajo se centra en el uso del equipo Nova-BET Analyzer, cuyo encargado elabora informes de las muestras, realiza el mapeo de microporos según su tamaño, exporta histogramas desde el software NovaWin y visualiza manualmente la estructura de los poros. La solución informática desarrollada, denominada PoreMap, automatiza parcialmente estas tareas. El encargado solo debe ingresar el *dataframe* con los resultados del análisis y configurar ciertos parámetros iniciales. Esto convierte a PoreMap en una herramienta eficaz para optimizar la generación de informes en el laboratorio GEA, mejorando significativamente la eficiencia y reduciendo la carga operativa.

Palabras Clave— Visualización de datos; BET; microporosidad; análisis de poros; software científico.

ABSTRACT

In the chemistry laboratory of the Institute of Applied Economic Geology (GEA), rock samples requested by companies such as ENAP, CODELCO, and other mining or construction-related firms are analyzed. These companies require various types of specialized tests. This study focuses on the use of the Nova-BET Analyzer, a device whose operator generates sample reports, maps micropores based on their size, exports histograms from the NovaWin software, and manually visualizes pore structures. The proposed software solution, named PoreMap, partially automates these tasks. The operator only needs to input a *dataframe* containing the analysis results and configure a few initial settings. As a result, PoreMap becomes an effective tool for streamlining report generation at the GEA laboratory, significantly enhancing efficiency and reducing operational workload.

Keywords— Data visualization; BET; Microporosity; Pore analysis; Scientific software.

LISTA DE SIGLAS

AWS: Amazon Web Services

BET: Brunauer-Emmett-Teller (método de determinación del área superficial)

BJH: Barrett-Joyner-Halenda (método de determinación de la distribución del tamaño de poro)

CPU: Unidad Central de Procesamiento (*Central Processing Unit*)

DAX: Expresiones de Análisis de Datos (*Data Analysis Expressions*)

DFT: Teoría de los Funcionales de la Densidad (*Density Functional Theory*)

EXE: archivo ejecutable (*Executable*).

FHH: Frenkel-Halsey-Hill (método o modelo para el análisis de la rugosidad superficial y dimensión fractal)

IA: Inteligencia Artificial

IP: Protocolo de Internet (*Internet Protocol*).

MAE: Error Absoluto Medio (*Mean Absolute Error*).

NK: Novakov-Kiselev (método o modelo aplicado en el análisis de adsorción y porosidad)

PDF: Formato de Documento Portátil (*Portable Document Format*).

PNG (Portable Network Graphics): Formato de archivo de imagen digital que permite almacenar gráficos con alta calidad utilizando compresión sin pérdida de información. Es ampliamente utilizado en imágenes con transparencias, diagramas, capturas de pantalla e ilustraciones digitales, ya que preserva la calidad visual del contenido.

QPS (Quantachrome Parameter/Proprietary Data File): Extensión de archivo utilizada por el software NovaWin de Quantachrome para almacenar datos y parámetros asociados a los análisis de caracterización de materiales por adsorción de gases. Este formato contiene información generada durante la medición, como datos de isothermas de adsorción-desorción, condiciones experimentales y resultados de los modelos de análisis aplicados.

RAM: Memoria de Acceso Aleatorio (*Random Access Memory*)

RMSE: Raíz del Error Cuadrático Medio (*Root Mean Squared Error*).

SO: Sistema Operativo

URL (Uniform Resource Locator): Dirección utilizada para identificar y acceder a un recurso específico en Internet, como una página web, documento, imagen o archivo. Está compuesta por elementos como el protocolo de comunicación (por ejemplo, HTTP o HTTPS), el dominio y la ruta del recurso.

VPN (Virtual Private Network): Tecnología de red que permite establecer una conexión privada y segura a través de Internet mediante el cifrado de los datos transmitidos, facilitando el acceso remoto a recursos de una red interna y protegiendo la privacidad de la comunicación.

VPS: Servidor Privado Virtual (*Virtual Private Server*)

XLSX: formato de libro de Microsoft Excel basado en Office Open XML.

GLOSARIO

Análisis Microestructural BET: Técnica basada en la adsorción física (fisisorción) de un gas, usualmente nitrógeno a 77 K.

Ångström (Å): Unidad empleada para medir longitudes de onda y distancias moleculares y atómicas, equivalente a 10^{-10} metros.

Arcilla: Material de grano fino compuesto por minerales laminares con elevada capacidad de adsorción.

Barrett–Joyner–Halenda: Método desarrollado por Barrett, Joyner y Halenda, complementario al método BET, utilizado para analizar la distribución del tamaño de poros en materiales porosos.

Bias: Sesgo

Bottle Ink: Forma geométrica de un poro que se asemeja a un frasco; sus medidas se sitúan en los rangos < 10 nm para el diámetro del cuello y entre 10 y 50 para el diámetro de la cavidad interna.

Carbón activado: Material carbonoso altamente poroso con gran área superficial, utilizado como adsorbente.

Clúster: Grupo de observaciones con características similares.

Constante BET K: Factor de corrección utilizado en la calibración, que relaciona la señal medida con la concentración del gas durante el análisis microestructural BET.

Corporación Nacional del Cobre (Codelco): Empresa estatal chilena dedicada a la explotación minera cuprífera.

Centroide: Punto que representa el centro de un clúster en algoritmos de agrupamiento como K-Means

Cylindrical: Forma geométrica de un poro que se asemeja a un cilindro. Sus medidas se sitúan en el rango de 2- 50 nm.

DataFrame: Estructura de datos bidimensional y etiquetada, similar a una tabla de una base de datos relacional o a una hoja de cálculo de Excel.

Density Functional Theory: Método de la física cuántica y la química computacional utilizado para estudiar la estructura electrónica de átomos, moléculas y materiales sólidos.

Difracción de rayos X: Herramienta analítica que permite describir la geometría tridimensional de materiales cristalinos.

Ecuación de Kelvin: Ecuación que describe el cambio de la presión de vapor debido a la interfaz curva líquido-vapor, como la superficie de una gota.

Empresa Nacional del Petróleo (ENAP): Empresa estatal chilena creada el 19 de junio de 1950, durante el gobierno del presidente Gabriel González Videla.

Fractal: Objeto o patrón geométrico que se repite a diferentes escalas, presentando autosimilitud; partes pequeñas se parecen al conjunto completo.

Framework: Estructura de trabajo compuesta por un conjunto de herramientas, librerías, reglas y componentes reutilizables que facilitan el desarrollo de aplicaciones de software. Un framework proporciona una base organizada para construir sistemas, lo que reduce el tiempo de desarrollo y promueve buenas prácticas de programación.

Frenkel–Halsey–Hill: Modelo de adsorción basado en una ley de potencia que describe la formación de multicapas de adsorbato sobre una superficie porosa.

Horváth–Kawazoe: Modelo teórico que permite calcular el tamaño de los microporos (generalmente menores a 2 nm) a partir de datos de adsorción de gases, típicamente nitrógeno (N₂) o dióxido de carbono (CO₂).

Micro: Forma geométrica de los poros más pequeños que pueden encontrarse en la muestra. Sus medidas están en el rango de 1.5 a 2 nm.

Nanómetro (nm): Unidad de longitud equivalente a 10⁻⁹ metros, o a 10 Å.

Neimark–Kiselev: Modelo utilizado para describir superficies con rugosidad fractal mediante isothermas de adsorción y desorción de gases.

Nova BET Analyzer: Equipo utilizado para realizar el análisis microestructural BET.

NovaWin: Software que opera el equipo Nova BET Analyzer.

Plate: Forma geométrica de un poro que se asemeja a una placa, usualmente de 2-20 nm.

VPS: Instancia virtual creada a partir de la fragmentación de un servidor físico. Mediante la tecnología de virtualización, se le asignan recursos de procesamiento, memoria y almacenamiento exclusivos, operando de forma completamente aislada de los usuarios. Esto permite aislar los entornos de desarrollo y fortalecer la seguridad de la información.

Teoría de BET: Técnica ampliamente utilizada en ciencia de materiales para medir el área superficial específica de sólidos porosos.

Unclassified: Término que se refiere a los poros no clasificados en ninguna de las categorías específicas (Cylindrical, Plate o Bottle Ink) y que suelen medir más de 50 nm.

Zeolita: Mineral aluminosilicato microporoso utilizado como adsorbente y catalizador.

Índice de contenido

MEMORIA PARA OPTAR AL TÍTULO DE INGENIERO EN INFORMÁTICA.....	1
DEDICATORIA	2
AGRADECIMIENTOS.....	3
Índice de contenido	10
Índice de figuras.....	13
Índice de tablas	14
INTRODUCCIÓN.....	15
CAPÍTULO 1: DEFINICIÓN DEL PROBLEMA.....	17
1.1 Problemática principal.....	17
1.2 Objetivos	17
1.3 Alcances y contribuciones.....	17
1.4 Organización del informe	17
CAPÍTULO 2: MARCO CONCEPTUAL	19
2.1 Métodos de análisis de la porosidad de la superficie	19
2.1.1 Brunauer, Emmett y Teller	19
2.1.2 Density Functional Theory	19
2.1.3 Barret, Jayner y Halenda	19
2.1.4 Horvath-Kawazoe	19
2.1.5 Modelo Frenkel-Halsey-Hill	20
2.1.6 Modelo Neimark-Kiselev	20
2.2 Técnicas de visualización de la microporosidad	21
2.2.1 Visualización y análisis de BET	21
2.2.2 Visualización y análisis de BJH.....	21
2.2.3 Visualización y análisis de DFT	22
2.2.4 Visualización y análisis de HK.....	23
2.2.5 Visualización como una imagen 2D tipo texturas	23
2.2.6 Reconstrucción 3D simple.....	24
2.2.7 Modelo geométrico de los poros	25
2.2.8 PCA.....	25
2.2.9 K-Means	26

2.3	Herramientas de visualización de datos	26
2.1.1	Power BI	27
2.1.2	Tableau	27
2.1.3	Librerías	27
2.4	Django.....	27
2.4.1	Modelo-Vista-Template.....	27
2.4.2	Almacenamiento en la nube AWS	28
CAPÍTULO 3: PROPUESTA DE SOLUCIÓN.....		29
3.1	Requerimientos.....	29
3.2	<i>Dataframe</i>	29
3.3	Almacenamiento en la nube.....	30
3.4	Versión local.....	30
3.5	Exportación a Excel	30
3.6	MVT aplicado en PoreMap	31
3.7	Caso típico de uso del sistema.....	31
3.8	Generación de informe con PoreMap y su integración al dataset.....	32
3.8.1	Cálculo de número fractal FHH.....	34
3.8.2	Cálculo de número fractal NK.....	34
3.8.3	Diagrama de flujo para encontrar los tipos de poros presentes	35
3.8.4	Volumen total de microporos y mesoporos.....	36
3.8.5	Single BET.....	37
3.8.6	Desviación estándar asociada al ajuste BET.....	37
3.9	Experiencia de usuario	38
3.10	<i>Dashboard</i> web	39
3.10.1	Índice de los usuarios	40
3.10.2	Índice de los informes	40
3.10.3	Índice de las Empresas	40
3.10.4	Índice del dataset.....	41
3.10.5	Panel de configuración.....	41
3.11	Visualizaciones para cada muestra	42
3.11.1	BJH	42
3.11.2	DFT.....	43

3.11.3	HK43	
3.11.4	BET	44
3.11.5	Modelo fractal de porosidad.....	44
3.12	Estructura y Formato de los Informes.....	45
3.13	Algoritmos de clasificación y predicción de las muestras	45
3.13.1	PCA.....	45
3.13.2	K-MEANS.....	47
3.13.3	V-Test.....	47
CAPÍTULO 4: VALIDACIÓN DE LA SOLUCIÓN.....		49
4.1	Introducción	49
4.2	Estrategia de Validación.....	49
4.2.1	Pruebas funcionales.....	49
4.2.2	Validación con usuarios expertos	49
4.2.3	Comparación con el proceso manual.....	50
4.2.4	Validación estadística.....	50
4.2.4.1	Precisión del algoritmo para construir el dataframe.....	51
4.2.4.2	Promedio de Barret-Joyner-Halenda	51
4.2.4.3	Procedimiento para buscar números fractales	52
4.2.4.4	Desviación estándar y Single BET	53
4.2.4.5	Evaluación de los tipos de poros presentes	54
4.2.4.6	Generación de modelo de porosidad.....	55
4.2.4.7	Suma de área de los poros encontrados.....	56
4.2.4.8	Validación de las gráficas de los isothermas	56
4.2.4.9	Validación de dataset.....	58
4.2.4.10	Validación del informe generado	58
4.2.4.11	Validación de PCA y K-Means.....	58
4.2.4.12	Resultados de la validación estadística	60
CAPÍTULO 5: CONCLUSIONES		62
5.1	Conclusiones Generales	62
5.2	Trabajo Futuro	62
REFERENCIAS		63

Índice de figuras

Figura 1: Curva BET	21
Figura 2: Curvas BJH adsorción y desorción	22
Figura 3: Ejemplo de una zeolita microporosa (izquierda) y una zeolita mesoporosa obtenida por fusión de zeolitas ZMesoD y MMesol (derecha). Adaptado de López et al. (2012).....	22
Figura 4: Curva DFT	23
Figura 5: Curva HK.....	23
Figura 6: Visualización de una imagen 2D de tipo textura	24
Figura 7: Reconstrucción 3D de las isothermas DFT, BET y BJH	24
Figura 8: Modelo geométrico de los poros de dos muestras distintas.....	25
Figura 9: Dispersión de variables químicas del dataset Wine	26
Figura 10: K-means aplicado sobre el dataset Wine	26
Figura 11: Modelo-Vista-Template	28
Figura 12: MVT en el PoreMap	31
Figura 13: Diagrama de Secuencia de interacción Usuario-Sistema	32
Figura 14: Diagrama de flujo de generación de informe con PoreMap	33
Figura 15: Flujo para detectar los tipos de poros.....	36
Figura 16: Listas desplegables.....	38
Figura 17: Barra de estado en el panel de configuración de informes.....	38
Figura 18: Filtro de búsqueda	38
Figura 19: Selector de fecha en el formulario	38
Figura 20: Django Admin	39
Figura 21: Diálogo de carpeta en el panel de configuración	39
Figura 22: Dashboard web	39
Figura 23: Vista de usuarios	40
Figura 24: Vista de informes	40
Figura 25: Vista de empresas	40
Figura 26: Índice de dataset.....	41
Figura 27: Panel de Configuración.....	42
Figura 28: gráfico Barrett-Joyner-Halenda	43
Figura 29: gráfica de la teoría del funcional de la densidad.....	43
Figura 30: gráfica de Horváth-Kawazoe.....	44
Figura 31: Gráfica del método Brunauer-Emmett-Teller	44
Figura 32: Modelo fractal de la porosidad	45
Figura 33: Matriz de correlación de las variables fisicoquímicas empleadas	46
Figura 34: Curva de varianza explicada	46
Figura 35: PCA muestra que la mayoría de las muestras se.....	46
Figura 36: Formulario para clústeres.....	47
Figura 37: Proyección de los clústeres obtenidos	47
Figura 38: Modelo de porosidad para PAH	56
Figura 39: DFT graficado manualmente y en PoreMap.....	57
Figura 40: BJH graficado manualmente y en PoreMap.....	57
Figura 41: Comparación de gráficos HK: cálculo manual versus PoreMap.....	57
Figura 42: Análisis comparativo de la isoterma BET obtenida en NovaWin y en PoreMap.....	57
Figura 43: PCA y K-Means aplicados sobre el dataset.....	59

Índice de tablas

Tabla 1: DataFrame de isoterma BJHA.....	30
Tabla 2: Composición del dataset.....	33
Tabla 3: Registros en el dataset	33
Tabla 4: DataFrame de FHH	34
Tabla 5: DataFrame de NK	35
Tabla 6: Categorías de poros.....	35
Tabla 7: valores correspondientes a áreas de los microporos y mesoporos.....	37
Tabla 8: DataFrame BET.....	37
Tabla 9: Signo del estadístico V-test para las variables de cada clúster.....	48
Tabla 10: casos de prueba de inicio de sesión	49
Tabla 11: Resultado de validación con usuarios.....	50
Tabla 12: Comparación de tiempos de producción promedio de informe manual y con PoreMap.....	50
Tabla 13: isoterma DFT en el informe muestra PAH creado manualmente	51
Tabla 14: isoterma DFT en el informe de la muestra PAH creado en PoreMap	51
Tabla 15: isoterma BJH en el informe de la muestra PAH creado con PoreMap.....	52
Tabla 16: isoterma BJH en el informe de la muestra PAH creado manualmente.....	52
Tabla 17: NK generado por el PoreMap y el generado en informe manual	53
Tabla 18: FHH generado por el PoreMap y el generado en informe manual	53
Tabla 19: Métrica de error aplicada a FHH y NK	53
Tabla 20: Single BET en informe manual y el encontrado por la aplicación	54
Tabla 21: Métricas de error para SingleBET	54
Tabla 22: Métricas de error para Desviación estándar BET	54
Tabla 23: Desviación estándar BET en informe manual y el encontrado por la aplicación	54
Tabla 24: Poros de tipo Micropores encontrados en las muestras	55
Tabla 25: Poros de tipo Unclassified encontrados en las muestras	55
Tabla 26: Poros de tipo Plate encontrados en las muestras	55
Tabla 27: Métricas de error para detectar los tipos de poros.....	55
Tabla 28: Validación de área total de volumen de poros calculada.....	56
Tabla 29: Paso de valores al dataset	58
Tabla 30: Concordancia de resultados del K-Means frente a la clasificación real.....	60

INTRODUCCIÓN

El Instituto de Geología Económica Aplicada (GEA) ofrece servicios de análisis de muestras geológicas a empresas del sector industrial. Uno de los análisis más demandados es la determinación del área superficial específica y de la porosidad mediante la técnica de Brunauer-Emmett-Teller (BET).

El BET determina la superficie del área específica de un sólido. Establece el área total de unidad por masa que reacciona con un líquido o un gas y la expresa en m^2/g . Algunos compuestos, como el carbón, pueden alcanzar hasta $1000 \text{ m}^2/\text{g}$. El BET se aplica a polvos, rocas y otros sólidos (Área superficial específica SBET: Exposición, s. f.).

Para obtener una estimación más precisa del tamaño de los poros se emplean los métodos Density Functional Theory (DFT) y Horváth–Kawazoe (HK). Finalmente, el método Barrett–Joyner–Halenda (BJH) se aplica para calcular el volumen y la distribución de tamaño de los poros, especialmente en la región mesoporosa (Vallejos-Burgos, 2008).

Además, los métodos fractales Neimark – Kiselev (NK) y Frenkel – Halsey – Hill (FHH) se emplean para determinar la dimensión fractal de la superficie del material, aportando información sobre su grado de rugosidad y complejidad estructural a partir de datos de $\log(r)$. Este procedimiento se realiza con un equipo especializado, el Nova BET-Analyzer, que opera en conjunto con el software licenciado NovaWin, el cual permite interpretar y exportar los resultados obtenidos.

El presente trabajo de título aborda el desarrollo y validación de una metodología integral para la visualización automatizada de microporosidad basada en los análisis BET, HK, DFT, BJH, NK y FHH utilizando herramientas de Python para mejorar la efectividad, el tiempo de respuesta y la creación de reportes automatizados. La muestra, una vez ingresada a Taller de Cortes y asignado su respectivo envase, puede ser derivada a distintos laboratorios para la realización de múltiples análisis, entre los cuales el cliente puede seleccionar aquellos que requiera, incluyendo el Taller de Análisis Microestructural BET.

En este trabajo se abordará el análisis microestructural mediante la técnica BET. Una vez en el Taller BET, la muestra debe pesarse junto con el recipiente. Posteriormente, la muestra ingresa al equipo Nova-BET-Analyzer y se somete a nitrógeno dentro del equipo. El gas se incorpora y luego se libera lentamente del material.

Se genera el archivo con una extensión propia de la aplicación NovaWin (QPS) donde están los valores de la presión relativa, volumen. De este archivo se extraen resultados de varios métodos (BET, DFT, HK, BJH y métodos de dimensión fractal, como FHH y NK) que permiten visualizar estructuras diferentes y pueden exportarse a histogramas y a archivos separados por comas (Comma-Separated Values o CSV). Ya en este paso, el encargado del equipo gestiona y organiza las gráficas obtenidas y sus archivos CSV correspondientes de cada método en un informe final, donde también se incluye la imagen que representa la textura aproximada de los poros, que él mismo dibuja basándose en las medidas del poro y el timbre de GEA.

Este trabajo propone una herramienta llamada PoreMap para abordar las limitaciones de los métodos actuales. PoreMap tiene como propósito realizar todo este trabajo por parte del encargado, lo que hace que el proceso de envío de los resultados al cliente sea más rápido y eficaz. PoreMap es una aplicación en desarrollo que no requiere muchos recursos: un equipo, preferiblemente con Windows 10/11 y NovaWin instalado. La aplicación trabaja estrictamente con resultados del análisis microestructural BET, por lo tanto, no puede aplicarse a otros análisis como los de la microscopía.

CAPÍTULO 1: DEFINICIÓN DEL PROBLEMA

1.1 Problemática principal

Actualmente, la producción de informes del análisis microestructural BET depende en su totalidad de un operador especializado, que debe realizar la interpretación manual de los resultados generados por NovaWin, elaborar el informe técnico final y crear visualizaciones complejas, como mapas de microporos y dibujos fractales. Esto genera una alta carga de trabajo, costos laborales fijos y una considerable inversión de tiempo en la preparación de cada informe, especialmente cuando se trata de múltiples muestras o de solicitudes simultáneas. Esta situación no solo reduce la eficiencia operativa del laboratorio, sino que también representa un riesgo a largo plazo para la sostenibilidad del servicio. Entre las consecuencias están los retrasos en la entrega de resultados al cliente, una mayor dependencia de un único especialista, lo que genera cuellos de botella, un impacto negativo en la reputación del instituto por no cumplir los plazos comprometidos y, además, la pérdida de competitividad, ya que los clientes pueden optar por contratar servicios de otras instituciones más eficientes.

1.2 Objetivos

El objetivo general de este trabajo es diseñar e implementar una herramienta informática basada en Python para automatizar la visualización y la generación de informes de análisis microestructurales BET realizados con el equipo Nova BET-analyzer, reducir el tiempo necesario para la elaboración de los informes, disminuir la dependencia operativa del personal especializado y mejorar la eficiencia del servicio de análisis del Instituto GEA.

Los objetivos específicos se listan a continuación:

- Desarrollar una interfaz gráfica que permita al operador definir la ruta de generación de informes y localizar el ejecutable de NovaWin, garantizando un funcionamiento flexible y sin intervención técnica adicional.
- Diseñar visualizaciones automáticas en forma de histogramas y gráficas comparativas (curvas BET, distribuciones de porosidad y métricas fractales) que representen la distribución de porosidad y las características fractales a partir de los datos obtenidos.
- Integrar un sistema de almacenamiento en la nube y/o un portal web con autenticación básica que permita a los funcionarios del instituto gestionar los informes generados, convertirlos en formatos de hoja de cálculo de Microsoft Excel (XLSX) y en formato de documento portátil (Portable Document Format o PDF), y descargarlos para su posterior envío a la empresa solicitante.
- Validar la herramienta PoreMap mediante comparaciones con informes elaborados manualmente por operadores expertos.

1.3 Alcances y contribuciones

PoreMap es una aplicación sencilla destinada a los sistemas operativos Windows 10/11 y Linux que trabajará únicamente con *Dataframe* de análisis de equipos de tipo Nova-BET analyzer.

1.4 Organización del informe

A continuación, se presenta la organización de este informe de trabajo de título:

- Capítulo 2: se introducen las metodologías a utilizar en este trabajo: los métodos científicos, las librerías de Python y las APIs de desarrollo.
- Capítulo 3: se presenta una propuesta concreta de solución al problema.
- Capítulo 4: se valida los requerimientos.

- Capítulo 5: se cierra la conclusión.

CAPÍTULO 2: MARCO CONCEPTUAL

2.1 Métodos de análisis de la porosidad de la superficie

En este capítulo se definen los conceptos que se abordan en el software *PoreMap*, como los métodos de análisis de la porosidad de la superficie, las técnicas de visualización de datos y técnicas de *machine learning*. Los poros se clasifican por su tamaño en las categorías Bottle Ink, Plate y Cylindrical. A continuación, se describen los métodos para detectar los diferentes tipos de poros.

2.1.1 Brunauer, Emmett y Teller

La Teoría BET tiene como objetivo explicar la adsorción de gases en sólidos de manera gradual y sirve de base para un análisis importante, en el que suele usarse nitrógeno líquido, pero también se emplean dióxido de carbono, argón y agua de la superficie que entra en contacto con el aire (Modelo BET, s. f.). Esta teoría se deriva de la teoría de Langmuir, que establece que el gas puede adsorberse infinitas veces en un sólido; que el gas solo puede pasar a capas adyacentes; y que el valor de la capa superior es siempre constante para las demás capas (Brunauer et al., 1938). Se grafican las curvas de los valores de adsorción y desorción del gas nitrógeno en el sólido durante el análisis. El análisis BET se aplica al material y el resultado es una gráfica con la cantidad de gas adsorbido en el eje de las ordenadas y la presión relativa en el eje de las abscisas. La cantidad de gas adsorbido es mayor si el poro es más grande. Los poros se pueden clasificar en microporos (menores a 20 Å), mesoporos entre 20 y 500 Å y macroporos mayores a 500 Å (Virtanen et al., 2020).

2.1.2 Density Functional Theory

El método DFT mide la distribución detallada del tamaño de poros, incluyendo micro y mesoporos. Usa principios de la teoría funcional de la densidad para simular cómo un gas interacciona con las paredes de poros de diferentes superficies; a diferencia de BJH, no asume que todos los poros sean cilíndricos (Bagayoko & Diakité, 2023).

2.1.3 Barret, Jayner y Halenda

El método BJH presenta un modelo geométrico-físico de la desorción basado en la ecuación de Kelvin. Supone que los poros son cilíndricos y que la cantidad de adsorbato en equilibrio con la fase vapor se produce mediante adsorción física en las paredes y condensación capilar; por lo tanto, es adecuado para el análisis de sólidos mesoporosos (Chempedia, s. f.).

2.1.4 Horvath-Kawazoe

Es un método ampliamente utilizado para determinar la distribución de microporos en materiales adsorbentes. Este método se basa en la resolución de la ecuación de potencial de interacción entre moléculas de gas adsorbido y las paredes del poro, considerando que los microporos presentan una geometría tipo slit o cilíndrica (Jagiello & Olivier, 2013). A diferencia de métodos basados en la ecuación de Kelvin, como BJH, el modelo HK no asume condensación capilar, sino que describe el llenado completo de los microporos mediante fuerzas de dispersión. Por ello, resulta especialmente preciso para caracterizar diámetros de poro inferiores a 2 nm. En este trabajo, el análisis HK se empleó como complemento de los resultados obtenidos por DFT, confirmando la presencia de una fracción significativa de microporosidad en el rango subnanométrico (Dombrowski et al., 2001).

2.1.5 Modelo Frenkel–Halsey–Hill

El modelo FHH (Frankel-Halsey-Hill) describe la formación de multicapas de adsorbato sobre una superficie sólida, considerando la interacción entre el adsorbato y el sustrato. El modelo establece una relación de ley de potencia entre el espesor de la capa adsorbida y la presión relativa del gas, lo que permite caracterizar la rugosidad y el comportamiento fractal de la superficie (Liu et al., 2021). El cálculo de la dimensión fractal FHH se basa en la relación entre el volumen adsorbido y la presión relativa en la isoterma. Para ello, se realiza una transformación logarítmica de los datos experimentales:

$$\log(V_{ads}) = m \log(\log(P/P_0)) + b,$$

Ecuación 1: Relación FHH para la determinación de la dimensión fractal

donde V_{ads} corresponde al volumen adsorbido, P/P_0 representa la presión relativa que es la relación entre la presión de equilibrio del adsorbato (P) y su presión de saturación (P_0), m es la pendiente obtenida mediante regresión lineal y b corresponde al intercepto (Frenkel et al., 1940).

Para el cálculo se selecciona un rango adecuado de presión relativa, en este caso entre 0,05 y 0,35, con el objetivo de utilizar la región donde el modelo FHH presenta comportamiento lineal. La dimensión fractal de la superficie se obtiene a partir de la pendiente de la regresión:

$$Df = 3 + m,$$

Ecuación 2: Cálculo de la dimensión fractal FHH

donde 3 corresponde a la dimensión euclidiana del espacio tridimensional y m representa la pendiente obtenida del ajuste lineal (Avnir & Jaroniec, 1989; Pomonis & Tsaousi, 2009).

2.1.6 Modelo Neimark-Kiselev

El modelo NK (Neimark-Kiselev) describe la adsorción de gases en materiales microporosos considerando la geometría y la rugosidad de la superficie de los poros. Este modelo se basa en la teoría del potencial de adsorción y permite relacionar la cantidad de gas adsorbido con las características estructurales de los microporos (Liu et al., 2021). El cálculo del número fractal NK se realiza mediante la relación entre las variables transformadas $\log(r)$ y $\log(a)$ correspondientes al logaritmo del radio de poro y al logaritmo del área adsorbida, respectivamente. Estas variables se utilizan para realizar un ajuste mediante regresión lineal:

$$\log(a) = m \log(r) + b,$$

Ecuación 3: Relación NK para la determinación de la dimensión fractal

donde m corresponde a la pendiente obtenida del ajuste lineal y b representa el intercepto. Para el cálculo se selecciona el rango de $\log(r)$ entre 30 y 150, correspondiente a la región donde los datos presentan un comportamiento aproximadamente lineal. Finalmente, el número fractal NK se obtiene mediante:

$$Df = 2 - m,$$

Ecuación 4: Cálculo de la dimensión fractal FHH

donde Df es la dimensión fractal y 2 corresponde a la dimensión del plano considerado en el modelo NK (Avnir & Jaroniec, 1989; Dubinin, 1989).

2.2 Técnicas de visualización de la microporosidad

Cuando se trabaja en laboratorio geológico con análisis microestructural BET y se desea estudiar la reactividad y la morfología de muestras como minerales, carbón activado, sílices y zeolitas, es necesario visualizar e interpretar los resultados de cada análisis, así como los modelos asociados a la microporosidad. Las técnicas de visualización permiten analizar, de manera cualitativa y cuantitativa, el comportamiento de adsorción de los materiales porosos, facilitando la identificación del tipo de porosidad y de su distribución. A continuación, se describen las metodologías de visualización más relevantes empleadas en este estudio.

2.2.1 Visualización y análisis de BET

La curva BET se utiliza para calcular el área superficial. La gráfica permite identificar fenómenos como la formación de monocapas y capilaridad. En la Figura 1 se observa la gráfica de una curva isotérmica de adsorción-desorción y la forma característica de la isoterma, que indica el tipo de porosidad (Análisis superficial BET, s. f.). La curva BET mostró una isoterma tipo IV con un incremento significativo del volumen adsorbido en el rango medio de presiones relativas, lo que indica la presencia de poros mesoporosos (Bolívar, 2019).

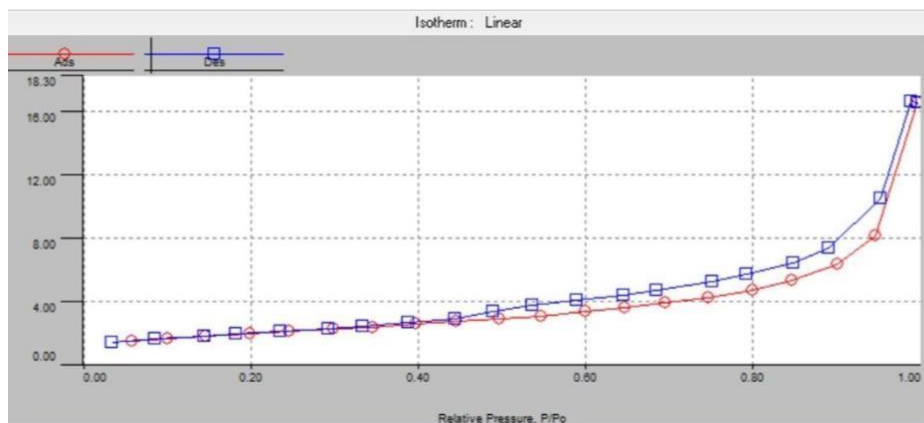


Figura 1: Curva BET

2.2.2 Visualización y análisis de BJH

Caracteriza la distribución del tamaño de los poros en la región mesoporosa. Se representa mediante una gráfica del diámetro de poro (nm) en función del volumen acumulado de adsorbato (cc/g). La distribución BJH permite identificar la presencia y la predominancia de poros con diámetros específicos, en la que los picos de la curva corresponden a los tamaños de poro predominantes (ver Figura 2). A partir de esta representación, es posible determinar si la muestra presenta una distribución uniforme de tamaños de poro o una amplia variación en

dichos tamaños.

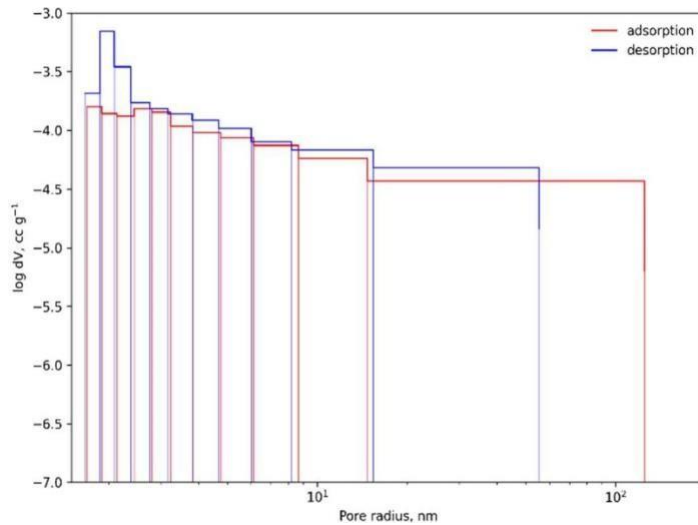


Figura 2: Curvas BJH adsorción y desorción

2.2.3 Visualización y análisis de DFT

Los materiales porosos se clasifican según el diámetro de sus poros. Los microporos corresponden a poros con diámetros inferiores a 2 nm (20 Å), mientras que los mesoporos presentan diámetros comprendidos entre 20 y 50 nm (20-500 Å). La Figura 3 muestra un ejemplo de una zeolita microporosa (izquierda) y de una zeolita mesoporosa obtenida mediante la fusión de zeolitas ZMesOD y MMesol (derecha) (López et al., 2012).

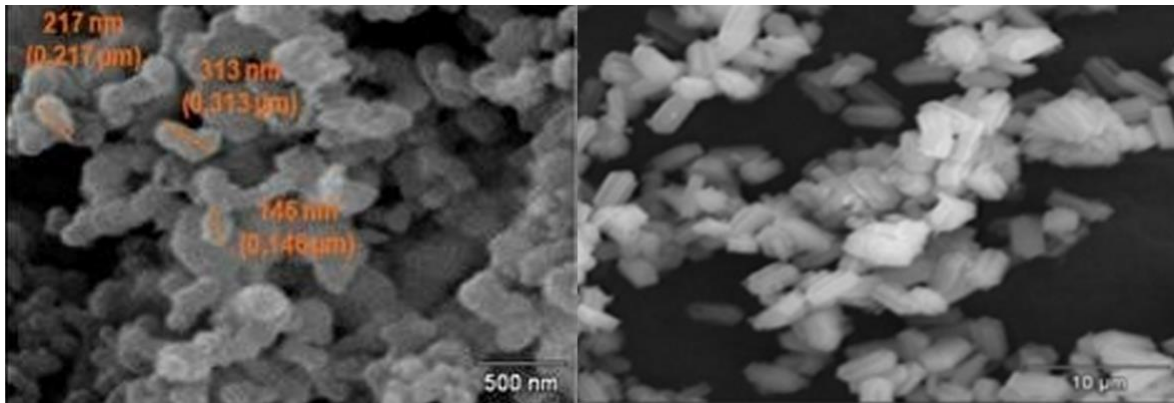


Figura 3: Ejemplo de una zeolita microporosa (izquierda) y una zeolita mesoporosa obtenida por fusión de zeolitas ZMesOD y MMesol (derecha). Adaptado de López et al. (2012).

La distribución detallada de microporos y mesoporos puede determinarse mediante DFT. Este método genera una gráfica del diámetro de poro en función de volumen diferencial adsorbido (cc/g/nm), proporcionando una caracterización más precisa de la microporosidad, especialmente para poros menores a 2 nm. Además, permite distinguir entre microporos estrechos y anchos complementando la información obtenida mediante los métodos BET y BJH. En las muestras analizadas, la distribución DFT indicó una proporción significativa de microporos con diámetros cercanos a 1 nm, lo que sugiere una estructura predominantemente

microporosa (véase la Figura 4).

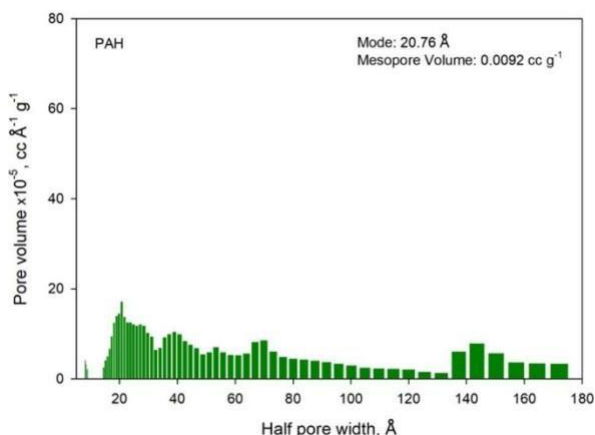


Figura 4: Curva DFT

2.2.4 Visualización y análisis de HK

Sirve para evaluar la microporosidad según un modelo teórico específico de microporos. La gráfica es similar a la DFT, con énfasis en la región microporosa. En la Figura 5, la curva HK respalda la microporosidad detectada mediante DFT. Y puede mostrar diferencias sutiles en el tamaño y la distribución de los microporos. El análisis HK confirmó la presencia de microporos con un diámetro medio de aproximadamente 0,8 nm, lo cual se alinea con los resultados de DFT.

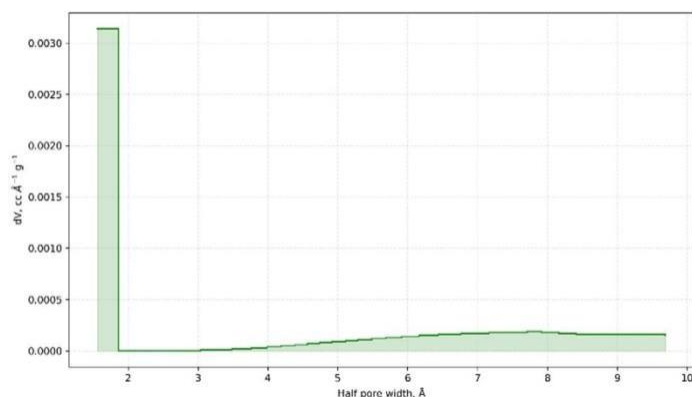


Figura 5: Curva HK

2.2.5 Visualización como una imagen 2D tipo texturas

Se pueden representar la uniformidad y la variación espaciales simuladas de parámetros como el volumen adsorbido o la distribución de poros mediante imágenes de tipo textura. Se creó un mapa de calor 2D (heatmap) que replicó los valores obtenidos en los análisis (BET, BJH, DFT, HK), generando una imagen que simula la textura superficial o la distribución espacial de los poros. Estas texturas permiten observar patrones de variación y regiones con mayor o menor adsorción o volumen de poros. La Figura 6 muestra la textura BET, que revela zonas homogéneas de alta adsorción, lo que indica uniformidad en la superficie. Las texturas BJH y DFT resaltaron la heterogeneidad en la distribución de tamaños de poros, mostrando áreas con predominio de poros de un tamaño específico. En conjunto, estas texturas visualizan la complejidad y la distribución espacial teórica de la estructura porosa. Los mapas de calor 2D generados a partir de los datos BET y BJH evidencian patrones de distribución de la adsorción y de los tamaños de poro, con zonas bien definidas de alta y baja concentración. Estas visualizaciones permiten una interpretación intuitiva de la rugosidad y la heterogeneidad de la superficie, aspectos fundamentales para aplicaciones de adsorción y catalización.

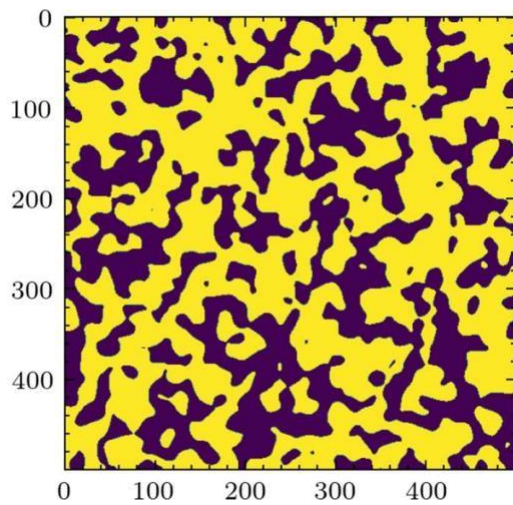


Figura 6: Visualización de una imagen 2D de tipo textura.

2.2.6 Reconstrucción 3D simple

Se puede modelar la superficie porosa como una topografía tridimensional, como en la Figura 7, para analizar su relieve y las variaciones del volumen adsorbido o de la distribución de los poros. Se construyeron superficies 3D a partir de matrices simuladas que reproducen la información obtenida mediante BET, BJH y DFT. Se usaron gráficos de superficie 3D que permiten observar visualmente los altibajos de la textura superficial. En esta visualización, las superficies 3D mostraron picos y valles que corresponden a zonas de alta y baja concentración de adsorbato o de porosidad. Esta representación facilita la comprensión espacial de las estructuras microporosa y mesoporosa, destacando la variabilidad local que no se aprecia en gráficos 2D tradicionales. La visualización tridimensional de la textura superficial ofrece una perspectiva más completa de la heterogeneidad en la distribución de poros y en la adsorción. Las variaciones topográficas reflejan la complejidad estructural de la muestra y aportan información valiosa para optimizar procesos basados en la interacción superficie-material.

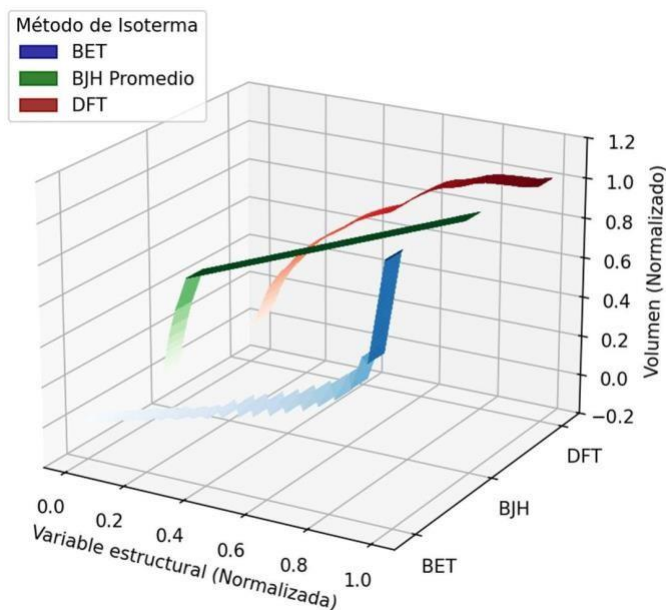


Figura 7: Reconstrucción 3D de las isothermas DFT, BET y BJH

2.2.7 Modelo geométrico de los poros

Es una metodología que se aplica en laboratorios de geología para graficar los microporos. En la Figura 8 se muestran dos modelos geométricos de porosidad: la muestra PAH (a la izquierda) y la muestra PCC (a la derecha). Cada rectángulo representa un *kernel*, un tipo de poro, que parte del mayor y termina en los más pequeños. Las categorías siempre aparecen en orden ascendente; en el informe se listan como *Cylindrical*, *Plate*, *Bottle-ink*, *Unclassified* y, finalmente, *Micro*. Casi siempre alguna de las categorías de poros no está presente. El modelo se dibuja en un cuadro asignado a una escala de 200 nm. Los *kernels* se superponen hasta llegar a las clases de poros más pequeñas, que se dibujan como hojas anejas a los *kernels* anteriores. El área de cada *kernel* es igual al área total que ocupan los poros de las clases que representa. Cuando un *kernel* no cabe en el espacio asignado dentro del cuadro, se divide en dos ramas inclinadas que se anexan al *kernel* anterior, como se muestra en la imagen de la derecha. Aunque los distintos tipos de poros no se resaltan con colores distintos, sí se representan con formas (*shapes*) distintas. Por ejemplo, el *kernel* que representa los poros de tipo placa se dibuja como un rectángulo estrecho y alto. Los poros no clasificados (*Unclassified*) se dibujan como pequeños rectángulos alrededor de otros *kernels*, y los microporos se representan como pequeños rectángulos inclinados alrededor de los *kernels* anteriores.

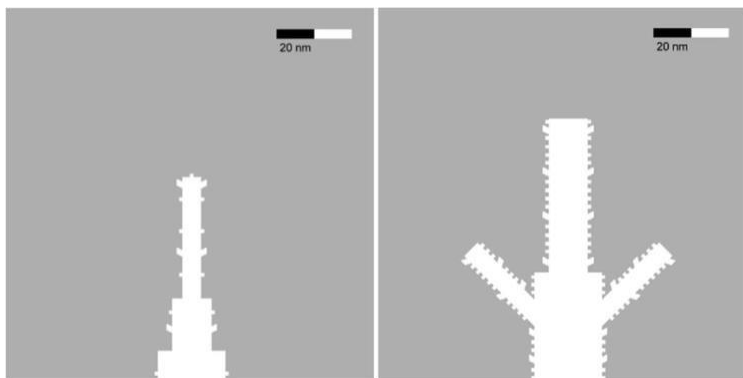


Figura 8: Modelo geométrico de los poros de dos muestras distintas

2.2.8 PCA

El PCA es una técnica estadística multivariante de aprendizaje no supervisado que transforma un conjunto de variables correlacionadas en un nuevo conjunto de variables no correlacionadas, denominadas componentes principales. Estos componentes corresponden a combinaciones lineales de las variables originales y se ordenan según la cantidad de varianza que explican (James et al., 2023). La reducción dimensional mediante PCA no está limitada a un número específico de variables, sino que depende del objetivo del análisis y de la cantidad de información que se desea conservar. Para fines de visualización, generalmente se representan dos o tres componentes principales, ya que permiten observar patrones y agrupamientos en un espacio de menor dimensión. Sin embargo, en aplicaciones de modelamiento o de análisis estadístico pueden conservarse más componentes para mantener una mayor cantidad de información. El cálculo de los componentes principales se basa en la descomposición de la matriz de covarianza de los datos. Los autovectores obtenidos representan las direcciones de máxima varianza de las características originales, mientras que los autovalores indican la cantidad de varianza explicada por cada una de ellas. Por lo tanto, un autovector corresponde a una dirección en el espacio de variables en la que los datos presentan mayor variabilidad y no representa la concentración máxima de las muestras. En la Figura 9 se muestran los autovectores asociados a las variables analizadas, donde cada vector indica una dirección de máxima contribución a la variabilidad del conjunto de datos.

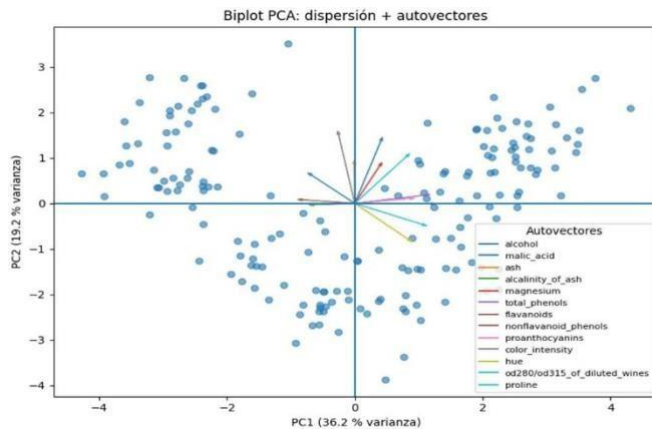


Figura 9: Dispersión de variables químicas del dataset Wine

2.2.9 K-Means

K-Means es un método de aprendizaje no supervisado utilizado para el agrupamiento de datos, que particiona el conjunto de datos en K grupos previamente definidos (James et al., 2023). Cada clúster se caracteriza por su centroide, que es el promedio de los puntos que lo componen. El algoritmo asigna las observaciones a los clústeres cuyos centroides están a menor distancia, medida comúnmente mediante la distancia euclidiana. Los centroides se recalculan de forma iterativa hasta que el algoritmo converge y no se producen cambios significativos en la asignación de los puntos a los clústeres. K-Means es ampliamente utilizado por su simplicidad y eficiencia computacional (James et al., 2023). En la Figura 10 se presenta un ejemplo de aplicación de K-Means sobre el dataset Wine, utilizando las variables originales, donde el eje x representa la concentración de alcohol y el eje y la concentración de ácido málico (Dua & Graff, 2019).

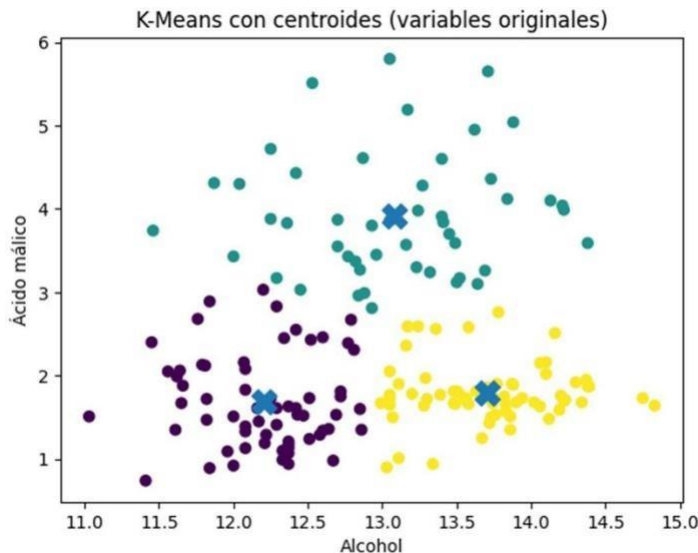


Figura 10: K-means aplicado sobre el dataset Wine

2.3 Herramientas de visualización de datos

Python es un lenguaje de programación ampliamente utilizado para el análisis de datos y el *machine learning*. Hay varias librerías de Python que pueden utilizarse para el preprocesamiento y la limpieza de datos.

2.1.1 Power BI

Es una API de visualización de datos desarrollada por Microsoft, ampliamente utilizada en los ámbitos empresarial y de la salud para transformar datos en informes interactivos y paneles visuales. Power BI es ideal para integrar, analizar y visualizar grandes volúmenes de datos provenientes de diversas fuentes, lo que facilita la toma de decisiones informadas. Algunas de sus características incluyen la creación de *dashboards* interactivos y reportes dinámicos, la conexión con múltiples fuentes de datos, como bases de datos, archivos de Excel y servicios en la nube, entre otros, así como la posibilidad de aplicar filtros, segmentaciones y análisis de tendencias mediante herramientas visuales y funcionalidades de análisis avanzadas, como expresiones *Data Analysis Expressions* (DAX) y Power Query.

2.1.2 Tableau

Es una herramienta de visualización de datos ampliamente utilizada en diversos sectores, incluido el área de la salud, para explorar, analizar y comunicar datos de forma visual. Tableau permite crear visualizaciones interactivas que facilitan la identificación de patrones, tendencias y relaciones en los datos. Es ideal para usuarios que necesitan generar reportes comprensibles a partir de grandes volúmenes de datos. Algunas de sus características son la creación de visualizaciones interactivas, como gráficos de líneas, barras, mapas y *dashboards*, la integración con múltiples fuentes de datos, tanto locales como en la nube, la posibilidad de aplicar filtros, segmentaciones y análisis comparativos entre grupos de datos, una interfaz intuitiva basada en arrastrar y soltar, con soporte para análisis avanzado mediante cálculos personalizados.

2.1.3 Librerías

En esta sección se abordan algunas de las librerías más comunes para la visualización y el procesamiento de datos. Además, se definen los conceptos abordados en el software PoreMap, la clasificación de los poros, los tipos de análisis para encontrarlos y distintas formas de visualizar los resultados. Las librerías que utiliza PoreMap son Pywinauto que se utiliza para interactuar con aplicaciones del entorno Windows, ya que ofrece herramientas que permiten controlar elementos de la interfaz mediante la API de Windows, Tkinter que se emplea para la creación de la interfaz gráfica, incluyendo componentes como botones, ventanas y cuadros de diálogo, Openpyxl y Pandas que son bibliotecas que se usan para la generación y manipulación de informes en formato Excel, facilitando tanto la lectura como la escritura de datos, Matplotlib y Numpy que se utilizan para la visualización de datos y el procesamiento numérico, permitiendo representar gráficamente los resultados de forma clara y efectiva, Subprocess que se utiliza para ejecutar programas externos, Threading que se emplea para ejecutar procesos en paralelo, Queue que se usa para compartir datos entre los hilos de una manera segura y Traceback que se utiliza para la gestión de excepciones.

2.4 Django

Es un software desarrollado en Python que se puede utilizar para crear aplicaciones web de forma rápida y eficiente. Cuenta con varias funciones comunes, como la autenticación y la recuperación de información. Tiene la ventaja de ser gratuito, de código abierto, fácil de implementar y con protección contra ciberataques. Su arquitectura es Modelo-Vista-Template.

2.4.1 Modelo-Vista-Template

El patrón Modelo-Vista-Template (MVT, por sus siglas en inglés) es la arquitectura utilizada por Django para estructurar el desarrollo de aplicaciones web. La solicitud del usuario llega desde la página del navegador al módulo `views.py` (2), con su URL mapeada previamente (1). El siguiente paso es realizar una consulta a la base de datos (3). Luego, los datos se envían a

los *templates* como *index.html* (4), que son plantillas HTML, pasando nuevamente por *views.py*, y finalmente se visualizan en el navegador (5). La Figura 11 explica este proceso.

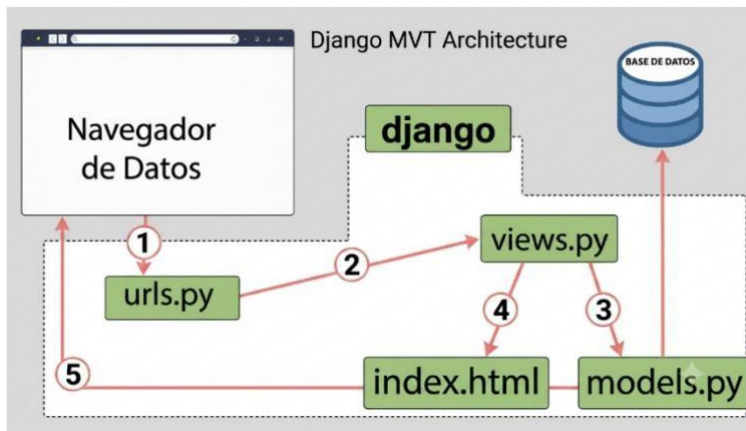


Figura 11: Modelo-Vista-Template

2.4.2 Almacenamiento en la nube AWS

AWS es una plataforma de servicios en la nube ofrecida por Amazon que permite crear y gestionar entornos virtuales, bases de datos y sistemas de almacenamiento. La nube posibilita el despliegue completo de soluciones informáticas accesibles desde cualquier dispositivo, sin requerir instalaciones locales, ya sea para aplicaciones de escritorio o web. Sin embargo, uno de sus principales inconvenientes es que conlleva un costo económico que puede variar según la complejidad del proyecto y las etapas tempranas de su desarrollo. Existen alternativas a AWS como Hetzner, que es una empresa alemana con centros de datos distribuidos en EE. UU. y Europa, que arrienda VPS al desarrollador, además de la CPU, la RAM y el almacenamiento. Su principal fortaleza es la minimización de costos frente a AWS. Las desventajas son que no cuenta con herramientas de IA preconstruidas y puede presentar limitaciones relacionadas con el licenciamiento y el soporte de determinados sistemas operativos, como Windows, dependiendo del servicio contratado.

CAPÍTULO 3: PROPUESTA DE SOLUCIÓN

En este capítulo se describe la metodología seguida para diseñar e implementar la aplicación PoreMap. La construcción de la solución informática se compone de etapas que incluyen la generación automática de informes de laboratorio, su posterior almacenamiento y la posibilidad de clasificar las muestras según sus propiedades. PoreMap trabaja con *DataFrames* para el análisis de materiales, a través de los cuales construye gráficas de los análisis de superficie realizados y los fusiona en un informe final, incluyendo la composición y la conversión a PDF del informe. Las siguientes secciones detallan los pasos a seguir, las herramientas empleadas y la forma en que los bloques se conectaron para construir un sistema modular, escalable y reproducible. La aplicación PoreMap se desarrolla en Python. Su propósito es automatizar el flujo de confección del informe análisis microestructural BET.

3.1 Requerimientos

PoreMap requiere la instalación de un software licenciado denominado NovaWin, indispensable para convertir archivos con la extensión QPS al formato de texto (TXT). PoreMap se encarga de consolidar las hojas de cálculo de los distintos análisis en una única hoja de cálculo de Excel. Asimismo, el usuario puede generar gráficos asociados a los análisis HK, DFT, BJH, BET, NK y FHH. La solución PoreMap puede instalarse de forma local como un archivo ejecutable o desplegarse desde la nube, donde se encuentra en su estado original.

3.2 Dataframe

Durante el procesamiento de los informes generados por NovaWin, PoreMap utiliza estructuras de datos denominadas *DataFrame*, proporcionadas por la biblioteca Pandas de Python. Un *DataFrame* es una estructura tabular bidimensional en la que cada columna representa una variable o característica medida y cada fila corresponde a una observación registrada. Esta estructura permite almacenar, manipular y analizar los datos experimentales antes de realizar los cálculos y las visualizaciones. En PoreMap, los datos provenientes de NovaWin se exportan inicialmente a un archivo TXT que contiene los resultados de los diferentes métodos de caracterización de la porosidad, como BET, BJH, DFT, HK, FHH y NK.

El sistema identifica los encabezados o *captions* correspondientes a cada método y utiliza esta información para separar las variables asociadas a cada análisis. A partir de estos encabezados, PoreMap genera un *DataFrame* independiente para cada método. Cada columna del *DataFrame* corresponde a una variable proporcionada por NovaWin, mientras que cada fila representa un punto experimental asociado a un valor de diámetro de poro o de volumen acumulado. Para el método BJH de adsorción (BJHA), el *DataFrame* contiene las columnas *Radius* (radio de poro), *Pore Volume* (volumen acumulado de poro), *Pore Surf Area* (área superficial acumulada), $dV(r)$ (distribución diferencial del volumen de poro respecto al radio), $dS(r)$ (distribución diferencial del área superficial respecto al radio), $dV(\log r)$ (distribución diferencial del volumen de poro respecto al logaritmo del radio) y $dS(\log r)$ (distribución diferencial del área superficial respecto al logaritmo del radio). Cada fila corresponde a una medición de la distribución del tamaño de poro obtenida mediante el método BJH.

La Tabla 1 presenta un ejemplo del *DataFrame* generado para el método BJH de adsorción. Este conjunto contiene 12 observaciones correspondientes a distintos radios de poro expresados en Å. Posteriormente, estas variables pueden utilizarse para generar curvas de distribución del tamaño de poro e histogramas, así como para realizar análisis comparativos entre muestras.

Tabla 1: DataFrame de isoterma BJHA

Radius	Pore Volume	Pore Surf Area	$dV(r)$	$dS(r)$	$dV(\log r)$	$dS(\log r)$
17,0309	1,13E-04	1,33E-01	5,75E-05	6,76E-02	2,25E-03	2,65E+00
19,1497	2,29E-04	2,53E-01	5,09E-05	5,31E-02	2,24E-03	2,34E+00
21,5524	3,45E-04	3,62E-01	4,60E-05	4,27E-02	2,28E-03	2,12E+00
24,4256	4,76E-04	4,69E-01	4,08E-05	3,34E-02	2,29E-03	1,88E+00
28,0125	6,26E-04	5,76E-01	3,79E-05	2,71E-02	2,44E-03	1,74E+00
32,5372	7,96E-04	6,80E-01	3,34E-05	2,05E-02	2,49E-03	1,53E+00
38,5406	1,01E-03	7,93E-01	3,13E-05	1,62E-02	2,77E-03	1,44E+00
47,4434	1,32E-03	9,24E-01	2,85E-05	1,20E-02	3,10E-03	1,31E+00
60,9491	1,71E-03	1,05E+00	2,40E-05	7,87E-03	3,35E-03	1,10E+00
86,943	2,40E-03	1,21E+00	1,92E-05	4,42E-03	3,79E-03	8,73E-01
150,8544	3,48E-03	1,35E+00	1,18E-05	1,56E-03	3,97E-03	5,26E-01
1207,7407	7,03E-03	1,41E+00	1,75E-06	2,91E-05	3,37E-03	5,58E-02

3.3 Almacenamiento en la nube

Como alternativa de despliegue, se evaluó la utilización de una instancia e de AWS, la cual permitió ejecutar una versión web de PoreMap accesible mediante una dirección IP pública. Esta implementación permitió verificar la factibilidad de alojar la aplicación en un entorno remoto y acceder al sistema mediante un navegador web. Sin embargo, debido a que el objetivo principal de aplicación corresponde a un entorno de laboratorio, la validación final se realizó principalmente utilizando la versión local compilada del sistema. La instancia utilizada permitía el acceso mediante su dirección IP pública. En esta etapa no se implementaron mecanismos adicionales de seguridad de infraestructura, como restricciones de red, VPN o control de acceso basado en IP debido a que despliegue correspondía a una prueba de factibilidad del sistema por lo tanto las medidas de seguridad formarán parte del trabajo futuro.

3.4 Versión local

Como segunda opción, para los casos en los que el usuario no cuenta con acceso a internet (una situación común en los laboratorios), se ha desarrollado una versión compilada de PoreMap en un archivo ejecutable (EXE). Esta compilación se realizó utilizando Python y la librería PyInstaller, siendo el único requisito contar con la instalación previa del software NovaWin. PoreMap tiene el sistema de autenticación integrado de Django llamado *contrib auth*. Actualmente la aplicación utiliza una única credencial administrativa almacenada en la base de datos local, creada durante la instalación inicial del sistema. Este mecanismo permite restringir el acceso al portal web y evitar que usuarios no autorizados utilicen las funcionalidades de generación de informes. Debido a que la aplicación está diseñada para un entorno interno de laboratorio y no como un servicio multiusuario, actualmente no se implementa una gestión avanzada de usuarios, roles ni separación de información por cliente.

3.5 Exportación a Excel

Durante la mayor parte del flujo de trabajo se trabajará con *DataFrames* que se guardarán en una hoja de cálculo de Excel. Para trabajar con Excel, se emplean las librerías Openpyxl y Pandas para exportar los *DataFrames* a una hoja de cálculo de Excel. El archivo exportado es el resultado de la unión de varios análisis clave para dar a conocer los tipos de poros presentes y clasificar las muestras.

3.6 MVT aplicado en PoreMap

PoreMap fue desarrollado utilizando el *framework* Django y, en consecuencia, adopta la arquitectura MVT, en la que el flujo de datos se estructura en tres capas bien definidas. En la primera etapa, el usuario ingresa la información a través de la interfaz web en el navegador; esta acción da lugar a la resolución de la URL correspondiente a la *request* (solicitud). En la segunda etapa, la solicitud se dirige al módulo *views.py* y, de acuerdo con el mapeo de la URL, se ejecuta la lógica de la aplicación, que constituye el núcleo funcional de PoreMap. Esta capa es responsable de generar el informe completo o, alternativamente, de continuar con la tercera etapa, en la que se consultan los modelos del sistema y se realizan las operaciones correspondientes sobre la base de datos. Los modelos implementados en PoreMap corresponden a las entidades *Usuario*, *Empresa*, *Informe* y *Dataset*, cada una de ellas asociada a su respectiva tabla en la base de datos. Como resultado de este proceso, el informe final queda completamente preparado para su envío a la organización solicitante. Véase la Figura 12 para una representación gráfica del flujo descrito.

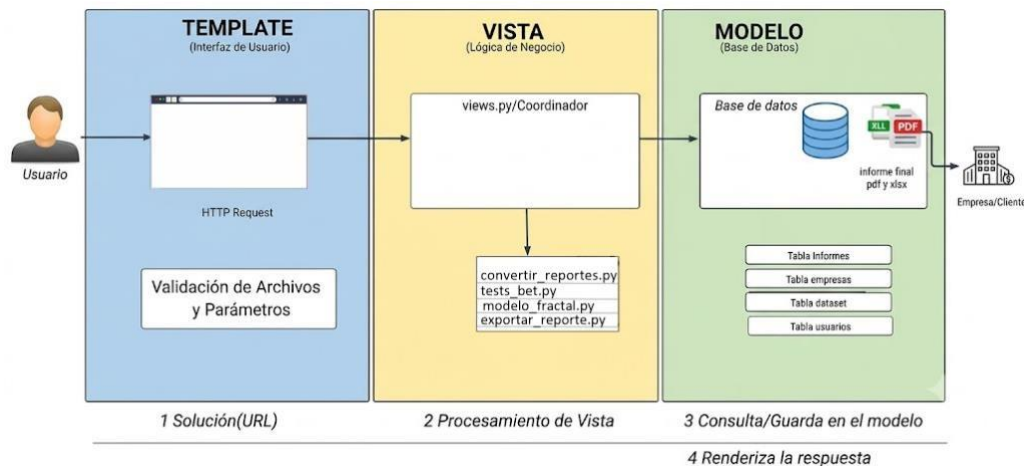


Figura 12: MVT en el PoreMap

3.7 Caso típico de uso del sistema

La Figura 13 muestra un diagrama de secuencia que describe la interacción entre el usuario y el sistema durante la generación de nuevos informes. El flujo comienza con el inicio de sesión del encargado, tras lo cual el sistema muestra la página principal. Posteriormente, el usuario selecciona la opción para generar nuevos informes y completa los datos requeridos en el panel de configuración. A continuación, el sistema crea un nuevo registro de informe y permite seleccionar los registros que se integrarán en el dataset. Finalmente, el usuario ejecuta los algoritmos PCA y K-Means, y el sistema devuelve una vista con los resultados obtenidos a partir del análisis del dataset.

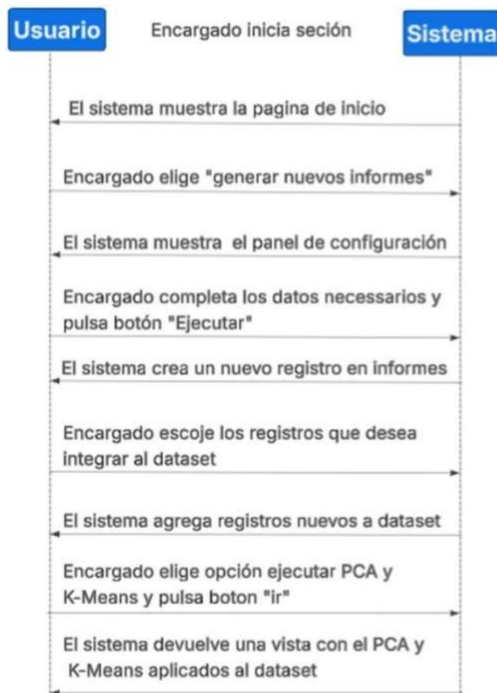


Figura 13: Diagrama de Secuencia de interacción Usuario-Sistema

3.8 Generación de informe con PoreMap y su integración al dataset

La rama de PoreMap, ubicada en la carpeta *scripts* que se muestra en la Figura 14 y encargada de la creación de informes, funciona de la siguiente manera: desde el panel de configuración se leen los archivos QPS ubicados en la carpeta especificada por el usuario, junto con los parámetros de calibración aplicados durante el análisis microestructural. Posteriormente, se ejecuta el módulo *main.py*, que procesa de forma cíclica todos los archivos de la carpeta, uno por uno. A continuación, se describe el procedimiento para cada archivo. Inicialmente, se ejecuta el software NovaWin, que abre el archivo correspondiente y lo exporta como un reporte en formato de texto.

Una vez realizada esta exportación, NovaWin deja de ser necesario y se cierra. El módulo *main.py* invoca a continuación al módulo *convertir_reporte.py*, responsable de convertir el archivo de texto en una planilla de Excel. Durante este proceso, se crean *DataFrames* individuales para cada isoterma, cada uno de los cuales representa una página con su nombre correspondiente. Las isotermas que se agregan son BJH (promedio entre BJH de adsorción y BJH desorción), DFT y HK. Además, se incluyen dos métodos fractales denominados FHH y NK, ambos correspondientes a adsorción.

Una vez creada la plantilla, se procede a identificar los poros presentes en la muestra mediante la ejecución del módulo *tests.py*, que genera como salida una planilla adicional con la información relativa a los poros detectados. Con esa información, y mediante la ejecución del módulo *models.py*, se construyen los modelos de visualización de los poros, tanto fractales como geométricos, los cuales presentan ciertas diferencias. Como resultado, se obtiene un formato de imagen PNG (*Portable Network Graphics*) del modelo fractal de los poros. Luego, el proceso vuelve a trabajar con las isotermas. El módulo *visualizaciones.py* se encarga de graficar estas isotermas en gráficos representativos.

El penúltimo paso consiste en concatenar las imágenes generadas, agregar texto informativo y exportar todo en formato PDF, tarea realizada por el módulo *exportar_reportes.py*. Finalmente, desde el propio módulo *main.py*, tanto el informe en formato PDF como el archivo XLSX se guardan en la base de datos, donde el modelo de la arquitectura MVT realiza la consulta correspondiente para almacenarlos.

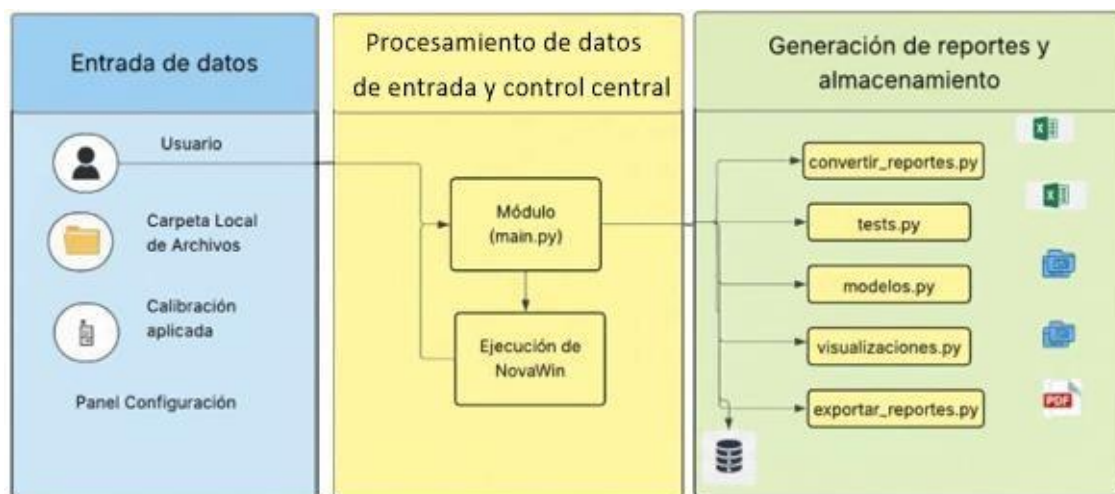


Figura 14: Diagrama de flujo de generación de informe con PoreMap

Posteriormente, el usuario puede seleccionar los informes que desea incorporar al dataset utilizado en los análisis posteriores, incluidos los de PCA y K-Means. El dataset presenta una estructura tabular compuesta por nueve variables. La primera corresponde al identificador del informe asociado a cada registro, las siete variables siguientes representan las propiedades fisicoquímicas obtenidas directamente del informe o calculadas a partir de sus resultados; y la última almacena la fecha de creación del registro en el dataset. La descripción de estas variables se presenta en la Tabla 2, mientras que un ejemplo de 10 registros del dataset se muestra en la Tabla 3.

Tabla 2: Composición del dataset

Variable	Descripción	Tipo de dato
Informe	Identificador alfanumérico de la muestra asociada al informe	Texto
BJH pore volume avg	Volumen promedio de poros BJH	Decimal
HK volume cc/g	Volumen de microporos HK	Decimal
DFT pore volume	Volumen de poros DFT	Decimal
FHH	Dimensión fractal FHH	Decimal
NK	Dimensión fractal NK	Decimal
Single BET	Área superficial BET	Decimal
Volumen total de porosidad (cc/g)	Volumen total de poros	Decimal
Created at	Fecha de creación del registro	Fecha/hora

Tabla 3: Registros en el dataset

Informe	Single BET (m ² /g)	BJH pore volume avg (cc/g)	HK volume (cc/g)	DFT pore volume (cc/g)	FHH	NK	Volumen total de porosidad (cc/g)
DK12A	73,6888	0,014033	0,1165	0,009464	179,9981	3,169	0,009464
DK12C	16,7671	0,012064	0,0927	0,007382	179,9981	3,3478	0,007382
DK13A	34,7193	0,008102	0,088	0,00592	179,9981	3,384	0,00592

3.8.1 Cálculo de número fractal FHH

Para calcular el número fractal FHH se utilizan las columnas $\log(\log(P/P_0))$ correspondiente a la transformación logarítmica de la presión relativa P/P_0 y $\log(V_{ads})$ correspondiente al logaritmo del volumen adsorbido V_{ads} del *DataFrame* de la isoterma FHH presentado en la Tabla 4. Se crea una variable X que toma el rango de la columna $\log(\log(P/P_0))$ de -1,60 a -0,75, y la variable Y es igual a la $\log(V_{ads})$. Se crea una regresión lineal con la máscara de parámetros, y el valor de FHH es igual a la pendiente de esta regresión, más la constante 3 (Frenkel et al., 1940).

Tabla 4: DataFrame de FHH

$\log(\log(P/P_0))$	$\log(V_{ads})$
-2,67E+04	1,24E+04
-1,62E+04	9,42E+03
-1,34E+04	8,29E+03
-1,14E+04	7,43E+03
-1,01E+04	6,88E+03
-9,09E+03	6,44E+03
-8,10E+03	6,00E+03
-7,25E+03	5,62E+03
-6,52E+03	5,30E+03
-5,88E+03	5,01E+03
-5,23E+03	4,71E+03
-4,55E+03	4,38E+03
-4,00E+03	4,10E+03
-3,36E+03	3,75E+03
-2,77E+03	3,43E+03
-2,18E+03	3,11E+03
-1,52E+03	2,77E+03
-7,89E+02	2,41E+03
1,25E+01	2,02E+03
1,09E+03	1,53E+03

3.8.2 Cálculo de número fractal NK

Para calcular el número fractal NK se utilizan los logaritmos de columnas de *Radius of curvature* (radio de curvatura del menisco líquido dentro del poro) y *Vapor-Liquid Interface Area* (área superficial de menisco líquido) del *dataframe* de NK de la Tabla 5 (Neimark, 1992; Sandoval-Díaz et al., 2017). Se selecciona el rango óptimo de *Radius of curvature* entre 30 y 150. Se realiza una regresión lineal con *Radius of curvature* y *Vapor-Liquid Interface Area* en el rango seleccionado anteriormente. A partir de esta regresión se obtiene la pendiente m , considerando $x = \text{Radius of curvature}$ y $y = \text{Vapor-Liquid Interface Area}$. Finalmente, el número fractal NK se calcula restando la pendiente m de la constante 2, que corresponde a las dimensiones en las que opera el fractal.

Tabla 5: DataFrame de NK

Radius of curvature	Vapor-Liquid Intrface Area
1,95E+07	0
1,74E+06	8,33E+03
9,08E+05	1,35E+04
5,67E+05	1,89E+04
4,27E+05	2,31E+04
3,36E+05	2,70E+04
2,67E+05	3,14E+04
2,20E+05	3,56E+04
1,86E+05	3,97E+04
1,60E+05	4,36E+04
1,38E+05	4,79E+04
1,18E+05	5,32E+04
1,04E+05	5,80E+04
8,97E+04	6,44E+04
7,84E+04	7,05E+04
6,84E+04	7,71E+04
5,88E+04	8,47E+04
4,97E+04	9,35E+04
4,13E+04	1,04E+05
3,23E+04	1,18E+05

3.8.3 Diagrama de flujo para encontrar los tipos de poros presentes

Como se observa en la Figura 15, la clasificación de los tipos de poros se basa en la información contenida en las hojas DFT y BET del informe de adsorción. El procedimiento comienza con la lectura de la hoja DFT, en la que se realiza un preprocesamiento de los datos mediante la eliminación de espacios en blanco, el reemplazo de las comas decimales por puntos y la conversión de los valores numéricos al tipo de datos *float*. Posteriormente, se analizan las columnas *Half Pore Width* (radio de poro), y $dV(r)$, correspondiente al volumen diferencial de poro. A partir de estas variables se calcula el volumen asociado a distintos intervalos de tamaño de poro definidos en el diccionario utilizado para almacenar la clasificación inicial obtenida mediante el método DFT. Los intervalos considerados corresponden a las categorías de la Tabla 6:

Tabla 6: Categorías de poros

Categoria de poros	Rango de valores de <i>Half Pore Width</i>
Micropores	7,37–10,10 Å
Unclassified	10,56–18,13 Å
BottleInk	18,97–23,75 Å
Plate I	24,85–48,81 Å
Plate II	51,05–104,89 Å
Cylindrical	109,72–180,00 Å

De acuerdo con el método DFT, el volumen de cada intervalo se obtiene a partir de la diferencia entre los de $dV(r)$ en los límites superior e inferior de dicho intervalo, y los resultados se almacenan posteriormente en el diccionario *lista_poros* (Lastoskie, Gubbins & Quirke, 1993). En esta etapa, las categorías *Micropores* (*microporos*) y *Unclassified* (*poros no especificados*) quedan completamente determinadas y no requieren procesamiento adicional.

A continuación, se procesa la hoja BET, aplicando un preprocesamiento equivalente sobre las columnas *Relative Pressure* (P/P_0) que corresponde a presión relativa y a transformación matemática

$$\frac{1}{W(P/P_0 - 1)},$$

Ecuación 5: Forma linealizada del modelo BET

obtenida a partir del volumen adsorbido (W) y Relative Pressure (P/P_0). Posteriormente, mediante la función *clasificar_bet()*. Se hace una separación de la columna *Relative Pressure* (P/P_0) en el punto donde los valores empiezan a disminuir, y estos dos rangos se clasifican como adsorción y desorción respectivamente, se calculan tres indicadores que permiten identificar las geometrías *BottleInk* (poros con forma de cuello de botella), *Plate* (poros en forma de rendija) y *Cylindrical* (poros en forma de cilindro). Para la detección de poros *BottleInk*, la rama de adsorción de la isoterma se divide en los intervalos de presión relativa 0,45–0,55 y 0,55–0,75. En cada intervalo se calcula el promedio de la columna de transformación matemática del volumen adsorbido y, posteriormente, se obtiene la razón entre ambos promedios. Si dicha razón es superior a 1, el poro se clasifica como *BottleInk*. La identificación de poros *Plate* se realiza comparando los promedios del mismo parámetro en el intervalo de presión relativa 0,60–0,75 para las ramas de adsorción y desorción; cuando la razón entre ambos promedios es mayor que 1, el poro se clasifica como *Plate*.

Finalmente, para identificar poros *Cylindrical* se calcula el promedio de la columna de transformación de volumen en la rama de adsorción para el intervalo de presión relativa 0,90–0,99. Si el promedio obtenido es superior a 100, la muestra se clasifica como *Cylindrical*. Estos criterios de clasificación se fundamentan en el comportamiento de las isotermas de adsorción y en las geometrías de poro descritas por la IUPAC (Thommes et al., 2015). Como etapa final, los resultados obtenidos mediante los análisis DFT y BET se integran en el diccionario *volumenes_finales*. Si se detecta la presencia de poros *Plate*, los volúmenes de las categorías relacionadas se consolidan bajo dicha clasificación; en caso contrario, los volúmenes que no pueden asociarse a una geometría específica se asignan a la categoría *Unclassified* (No diferenciados). Finalmente, los volúmenes calculados para cada tipo de poro se almacenan en la hoja *POROS_FINALES* del informe *XLSX* generado por la aplicación.

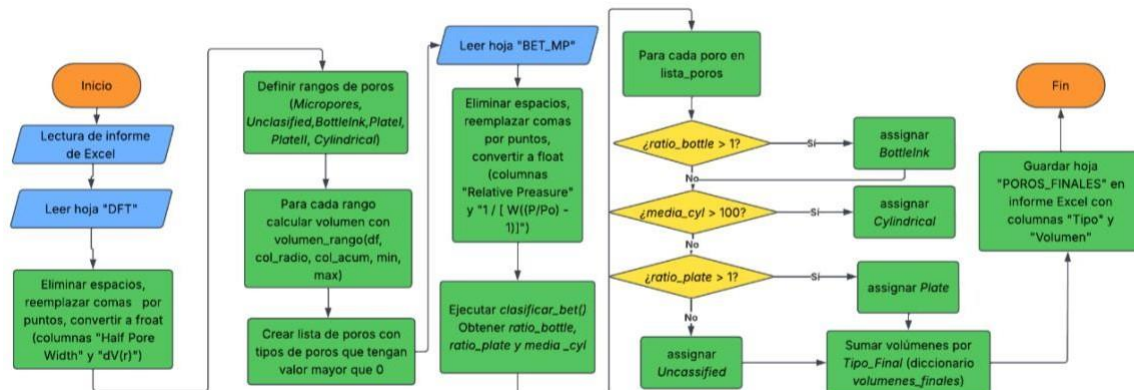


Figura 15: Flujo para detectar los tipos de poros

3.8.4 Volumen total de microporos y mesoporos

Los volúmenes totales de microporos y mesoporos no se recalculan en PoreMap, sino que corresponden a valores previamente estimados por NovaWin y disponibles en los sumarios de cada método de análisis. En el sumario del método HK se reporta el volumen total de microporos en el intervalo de tamaño comprendido entre 1,6 y 9,7 Å. Por su parte, el sumario del método DFT entrega el volumen total de poros para el rango de 7,7 a 180 Å, mientras que los sumarios de los métodos BJHA y BJHD contienen el volumen total de poros correspondiente al intervalo de 15 a 1767 Å. Durante el procesamiento del informe de texto, PoreMap extrae automáticamente esta información y la almacena en las hojas de sumario de HK (HK_SUM), sumario de DFT (DFT_SUM), y promedio de sumarios de BJHA y BJHD

(BJHA_SUM y BJHD_SUM) del informe XSLX generado. Los valores extraídos se muestran en la Tabla 7. Posteriormente, estos valores se utilizan para calcular el volumen total de microporos y mesoporos incorporado al dataset, *lo que permite* disponer de variables consolidadas para los análisis estadísticos y de aprendizaje automático descritos en las secciones siguientes.

Tabla 7: valores correspondientes a áreas de los microporos y mesoporos

Método	Hoja del informe Excel	Variable extraída	Intervalo de tamaño de poro (Å)
HK	HK_SUM	Volumen de microporos	1,6–9,7
DFT	DFT_SUM	Volumen de mesoporos	7,7–180
BJHA	BJHA_SUM	Volumen de mesoporos	15–1767
BJHD	BJHD_SUM	Volumen de mesoporos	15–1767

3.8.5 Single BET

El método constituye una estimación aproximada del área superficial y se utiliza para formar parte del dataset global de todos los informes. Se obtiene extrayendo el valor de la columna *surf* o área de superficie en la línea donde el valor de la columna *Relative Pressure* o presión relativa es aproximadamente 0,25.

3.8.6 Desviación estándar asociada al ajuste BET

Es el área superficial BET y mide qué tan dispersos están los datos experimentales respecto al ajuste lineal BET. Cuando la desviación estándar es baja, indica un buen ajuste BET y un área superficial confiable, cuando es alta, indica un mal ajuste, un rango de *Relative Pressure* P/P_0 (presión relativa) incorrecto o datos ruidosos. Se obtiene a partir de las columnas *Relative Pressure* P/P_0 y *Volume @ STP* (cantidad del gas adsorbido por la muestra) del *DataFrame* de la isoterma BET (Tabla 8), mediante la fórmula correspondiente:

$$SD = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}{n - 1}},$$

Ecuación 6: Desviación estándar BET

donde x_i es el área superficial calculada usando el i -ésimo punto de ajuste, $\bar{x}$ es el valor promedio del área superficial y n es el número del ajuste final. Se calcula la desviación estándar asociada a los rangos entre 0,05 y 0,35 de la columna *Relative Pressure* P/P_0 .

Tabla 8: DataFrame BET

Relative Pressure P/P_0	Volume @ STP	$1/[W((P/P_0) - 1)]$	Slope	Surf. Area
5,78E-02	0,7916	6,20E+01	1072,821	3,2461
1,05E-01	0,8953	1,05E+02	998,3146	3,4884
1,54E-01	0,9769	1,49E+02	968,4977	3,5958
2,06E-01	1,0575	1,97E+02	953,189	3,6535
2,53E-01	1,1345	2,38E+02	943,5837	3,6907
3,00E-01	1,202	2,85E+02	950,784	3,6628
3,51E-01	1,2955	3,34E+02	951,4387	3,6603
4,02E-01	1,3621	3,95E+02	982,7813	3,5435
4,51E-01	1,4454	4,55E+02	1008,214	3,4541
5,00E-01	1,5317	5,23E+02	1045,5559	3,3308
5,50E-01	1,6288	6,00E+02	1091,2309	3,1914

3.9 Experiencia de usuario

PoreMap ofrece una experiencia de usuario (UX) centrada en la facilidad de uso, mediante un entorno gráfico intuitivo que solo funciona en Windows 10 y 11. Para el diseño de la interfaz web se destaca la librería Django, que permite centralizar los datos para su edición y visualización, y controles que favorecen la experiencia de usuario, tales como ayudas contextuales en los campos de los formularios, botones, barras de navegación y barras de estado cómo un ejemplo en la Figura 17), paginaciones que están presente en todas las vistas , menús desplegables (véase la Figura 16), cuadros de diálogo para buscar carpetas (véase la Figura 21), selectores de fechas cómo en la Figura 19, Django admin para navegar entre varias vistas (Figura 20) y filtros de búsqueda cómo filtro de las empresas de la Figura 18.

En la capa de aplicación, destacan librerías como Pywinauto y subprocess, que contribuyen a reducir errores humanos y a agilizar el flujo de trabajo. Matplotlib aporta directamente a la visualización de los datos, eliminando la necesidad de usar NovaWin para este fin, mientras que pandas y openpyxl mejoran la UX al permitir exportar los datos a formatos legibles para el usuario final, como hojas de cálculo XLSX o informes en PDF.



Figura 16: Listas desplegables



Figura 17: Barra de estado en el panel de configuración de informes

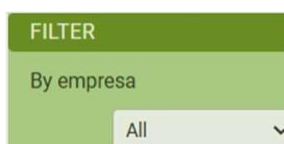


Figura 18: Filtro de búsqueda

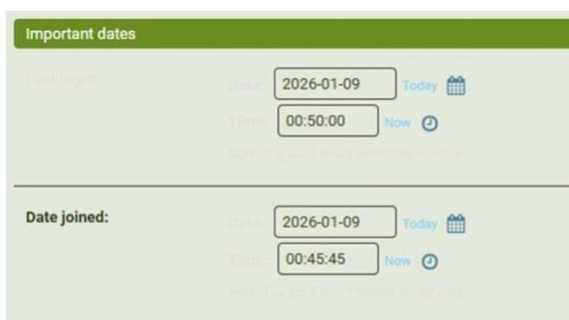


Figura 19: Selector de fecha en el formulario

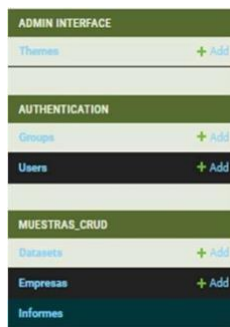


Figura 20: Django Admin

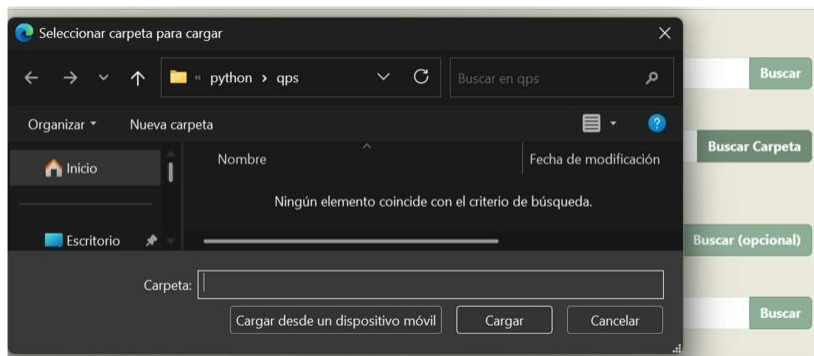


Figura 21: Diálogo de carpeta en el panel de configuración

3.10 Dashboard web

El *dashboard* de la plataforma (ver Figura 22) presenta una interfaz organizada que incluye botones de navegación entre diversas vistas (1), un carrusel informativo sobre las funcionalidades de PoreMap (2) y las leyendas correspondientes (3). Desde este panel, el usuario puede visualizar, agregar, editar y eliminar sus informes publicados. Cada informe se carga en formato de planilla de Excel y puede explorarse por pestañas; además, el sistema permite la descarga en formatos XLSX y PDF, facilitando su envío a las empresas o entidades solicitantes.



Figura 22: Dashboard web

3.10.1 Índice de los usuarios

Los usuarios son los encargados de cada laboratorio del instituto. Cada usuario gestiona sus propios informes, por lo tanto, es necesario estar autenticado en el sistema para acceder a ellos y administrarlos (ver Figura 23).



Figura 23: Vista de usuarios

3.10.2 Índice de los informes

En esta sección se pueden visualizar todos los informes creados previamente y descargar el archivo de Excel o el PDF del informe directamente desde la Tabla (2). Para procesar múltiples archivos, existe el botón *Generar nuevos informes* (1), que abre un panel de configuración para especificar los parámetros iniciales de generación. Posteriormente, para cargar informes al *dataset* o bien eliminar registros de forma individual o masiva, se debe utilizar el menú desplegable (3). También, cuando hay muchos informes, se pueden listar las páginas (4) (ver Figura 24).

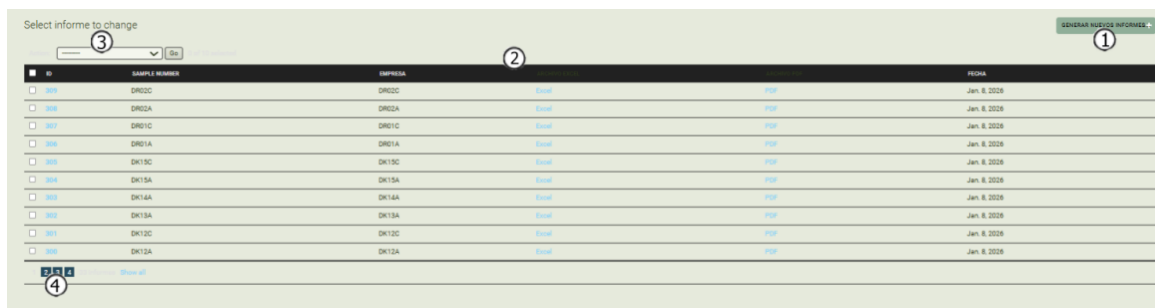


Figura 24: Vista de informes

3.10.3 Índice de las Empresas

Aquí se pueden listar las empresas a las que pertenecen los informes de la Tabla 4; se pueden agregar con el botón agregar (3) y, finalmente, editar, listar, agregar y borrar a través del control desplegable. Una empresa puede tener muchos informes. (Ver Figura 25).



Figura 25: Vista de empresas

3.10.4 Índice del dataset

Los registros integrados en el dataset corresponden a promedio de los últimos valores acumulativos extraídos de las columnas *Pore Volume* de las hojas BJHA y BJHD, *Volume cc/g* (hoja HK), *Half Pore Width* y *Pore Volume* (hoja DFT), los dos números fractales FHH y NK, el valor de *Single BET* y el volumen total ocupado por los poros presentes en la muestra, correspondiente a las clases de poros mencionadas previamente (véase Figura 26). A través del menú desplegable (1), el usuario puede seleccionar diversas acciones, tales como eliminar los ítems seleccionados, descargar fragmentos del dataset en formato XSLX o CSV, exportar el dataset completo, borrar todos los registros o visualizar los análisis de PCA y K-Means. Los datos actuales del dataset se muestran en la tabla de la vista (2). Dado que habitualmente se manejan grandes volúmenes de información, se ha implementado un sistema de paginación en la parte.

Select dataset to change

4

1

2

INFORME	SINGLE BET	BJH PORE VOLUME AVG	HK VOLUME CC G	DFT PORE VOLUME	FHH	NK	VOLUMEN TOTAL DE POROSIDAD (CC/G)
Informe 277 - PAH - None	19.139303	0.0140085	9.6875	179.9981	0.085292	3.4051	0.007552
Informe 278 - PAHred_2 - None	1.064393	0.00806005	9.6875	179.9981	0.10908	3.2236	0.006116
Informe 279 - test - None	40.811093	0.024565	9.6875	179.9981	0.092696	3.3475	0.015002
Informe 280 - DK01A - None	11.464187	0.013536	9.6875	179.9981	0.091361	3.3578	0.008948
Informe 281 - DK01C - None	40.811093	0.024565	9.6875	179.9981	0.092696	3.3475	0.015002
Informe 282 - DK02A - None	40.811093	0.024565	9.6875	179.9981	0.092696	3.3475	0.015002
Informe 283 - DK02C - None	9.974971	0.00635345	9.6875	179.9981	0.09133	3.3581	0.004964
Informe 284 - DK04A - None	52.243807	0.0339225	9.6875	179.9981	0.095439	3.3265	0.01820299999999997
Informe 285 - DK04C - None	72.187723	0.020193000000000003	9.6875	100.278	0.085032	3.4071	0.015305
Informe 286 - DK05A - None	8.523223	0.015139	9.6875	179.9981	0.091765	3.3547	0.008912

3

2 3 4 Show all

Figura 26: Índice de dataset

3.10.5 Panel de configuración

En el panel de configuración mostrado en la Figura 27 se configuran las ubicaciones del software y de los archivos en el equipo. Asimismo, se especifica el desglose del análisis microestructural al que fueron sometidas las muestras. En la figura se observan los campos requeridos para generar un informe técnico final correspondiente a todo el lote de muestras analizadas. En primer lugar, se debe especificar la ruta del software NovaWin, seguida de un campo para cargar la carpeta que contiene los archivos QPS. Opcionalmente, es posible ingresar únicamente la ruta de los archivos. Posteriormente, se debe indicar la ruta de la carpeta donde se guardarán los reportes, que, en la mayoría de los casos, ya está predefinida por el software NovaWin. El siguiente paso consiste en especificar los datos de las muestras procesadas: el tipo de análisis realizado, el tipo de muestras según el criterio del operador y el nombre completo del operador. A continuación, se debe indicar el nombre del solicitante, el nombre de la empresa (si corresponde) y la orden de trabajo, que corresponde a un código asociado a la ejecución del análisis microestructural de dichas muestras. Además, se debe agregar una observación del análisis microestructural en el campo de texto correspondiente, cargar el archivo de imagen de la firma del operador y, finalmente, una vez completados todos los campos, presionar el botón *Ejecutar análisis*.

Configuración de Ejecución

Ejecutable de NovaWin (.exe)

Seleccione el archivo NovaWin.exe Buscar...

Esta ruta se guardará para futuros análisis.

Subir Carpeta con archivos .qps:

Nombre de la carpeta subida aparecerá aquí Buscar Carpeta

Selecciona la carpeta que contiene tus archivos .qps.

Carpeta exportación:

C:\QCdata\Reports Buscar

Información del Análisis Microestructural

Fecha: dd-mm-aaaa 	Equipo: Ej: Quantachrome NOVA 2200e	Duración de procesamiento: Ej: 8 horas
Tipo de análisis: Seleccione tipo de análisis 	Tipo de muestra: Ej: ripio	
Nombre del operador:	Cargo:	
Datos de contacto: Correo, WhatsApp, etc.	Nombre del solicitante:	
Nombre de la empresa:	Orden de trabajo:	
Archivos anexos (opcional): Elegir archivos Sin archivos seleccionados	Firma del operador (PNG): Seleccionar archivo Sin archivos seleccionados	

Ejecutar análisis
Volver

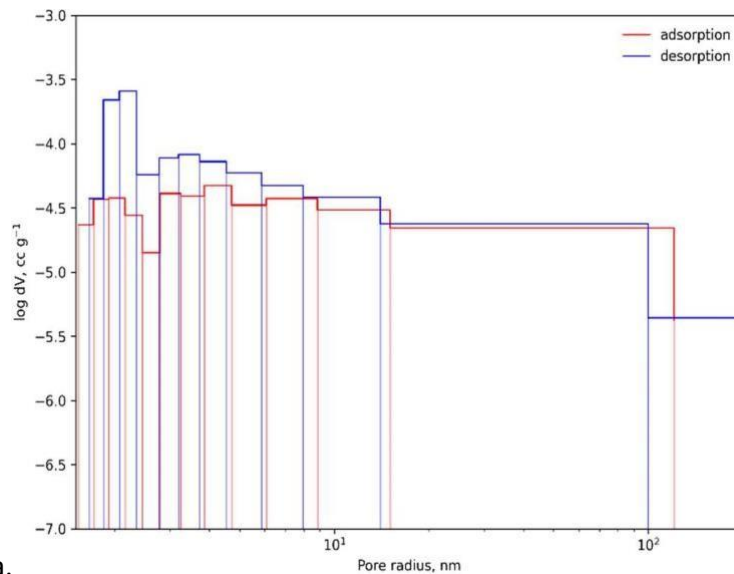
Figura 27: Panel de Configuración

3.11 Visualizaciones para cada muestra

Las visualizaciones de las isotermas correspondientes a cada análisis se incluyen en el informe final en formato PDF para cada muestra, presentadas como histogramas que evidencian su estructura porosa interna. Además, se incluye el modelo de porosidad.

3.11.1 BJH

Se grafican dos *DataFrame*, BJHA y BJHD. En la Figura 28 se combinan la isoterma de adsorción y la de desorción. El eje x muestra el tamaño de poro. Si las unidades son Å, el rango máximo de 2000 Å equivale a 200 nm, lo que indica que el análisis se extiende al rango de macroporos (aunque con menor precisión). El eje y mide la contribución del volumen total de poros en cada rango de radio ($\frac{dv}{dr}$). Los picos altos indican los radios de poro más frecuentes



en la muestra.

Figura 28: gráfico Barrett–Joyner–Halenda

3.11.2 DFT

Se grafica el *DataFrame* DFT. En la Figura 29, el eje x representa el área superficial acumulada, mientras que el eje y denota el volumen de poro por la mitad del ancho del poro, proporcionando una función acumulativa esencial para la comprensión de las contribuciones de área superficial en función del tamaño de poro.

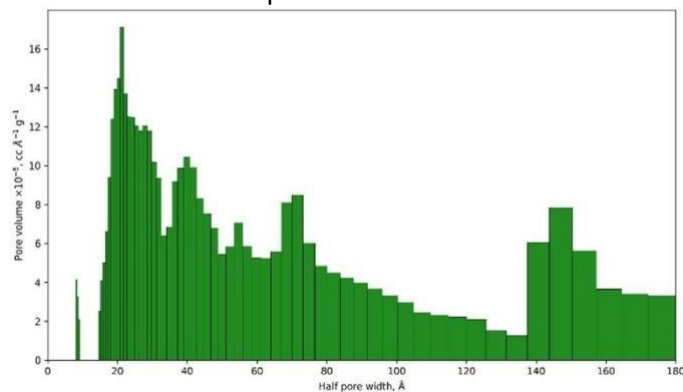


Figura 29: gráfica de la teoría del funcional de la densidad

3.11.3 HK

Se grafica el *DataFrame* HK. En la Figura 30, el eje x cuantifica con precisión *Half pore width* (ancho del poro) medido en Å, mientras que el eje y indica la contribución de $dV()$ volumen diferencial del poro que los microporos de ese tamaño específico aportan al volumen total de la muestra. Este enfoque es crucial para comprender la capacidad de adsorción y las propiedades superficiales de los materiales.

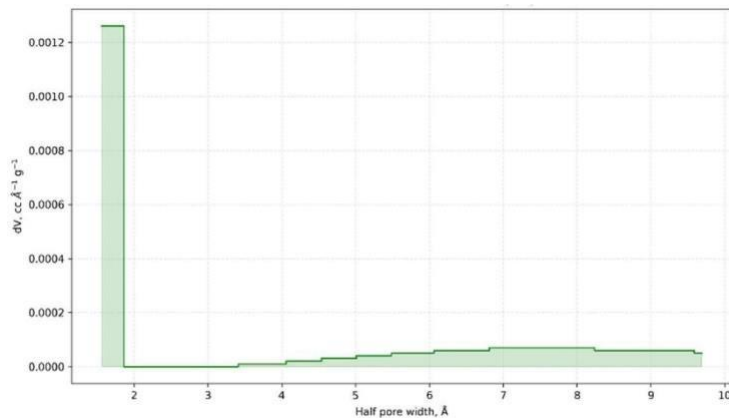


Figura 30: gráfica de Horváth-Kawazoe

3.11.4 BET

Se grafica el *DataFrame* BET. El eje x (*Relative Pressure P/P_0*) corresponde a la presión relativa del gas en cada tiempo durante el análisis microestructural BET, y el eje y (*Volume @ STP*) corresponde a los volúmenes de los poros encontrados, lo que se puede observar en la Figura 31.

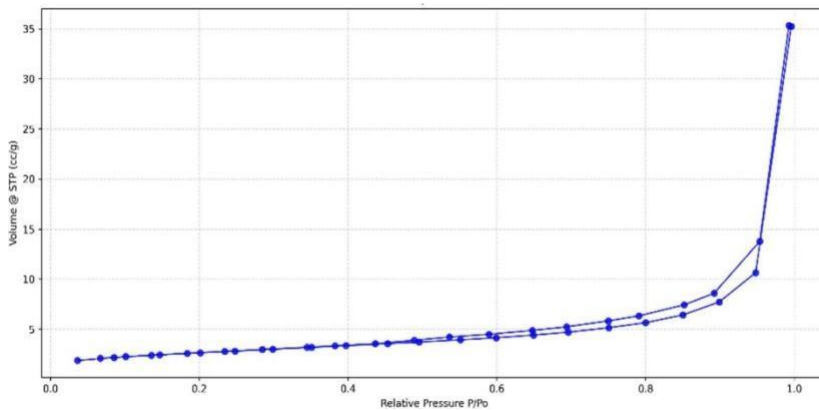


Figura 31: Gráfica del método Brunauer-Emmett-Teller

3.11.5 Modelo fractal de porosidad

La arquitectura porosa se conceptualiza mediante un modelo fractal jerárquico que establece una relación dimensional entre los poros dominantes y la microporosidad asociada. La estructura se inicia con un bloque central, que representa la porción de poros de mayor diámetro identificados en la muestra (frecuentemente modelados con morfología cilíndrica). A partir de este núcleo central, se extienden ramificaciones sucesivas que, en su totalidad, engloba la contribución de los poros de menor tamaño. En esta analogía, los microporos de menor tamaño detectados actúan como los elementos terminales del árbol fractal. El nivel de complejidad y la tasa de ramificación están definidos por la relación k^i , donde i es el nivel jerárquico del poro (desde $i = 0$ en el núcleo hasta $i = n$, que corresponde a la totalidad de poros presentes). Esta organización jerárquica es crítica para el análisis de la conectividad de los poros entre sí y puede ser visualizada en detalle en la Figura 32, acompañada de una leyenda que explica a qué color se asocia cada tipo de poro.

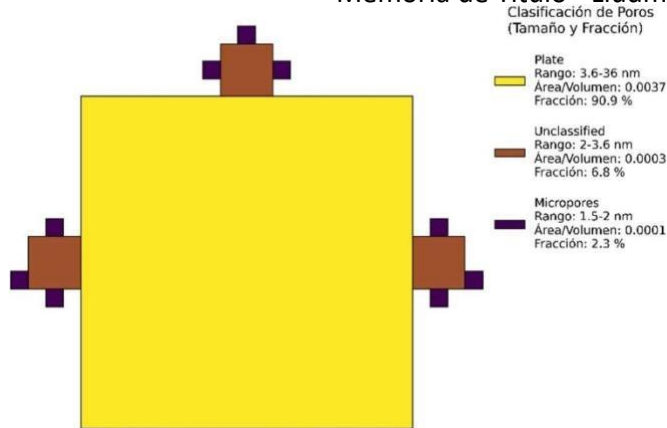


Figura 32: Modelo fractal de la porosidad

3.12 Estructura y Formato de los Informes

El informe es individual para cada muestra y consiste en un encabezado y en las gráficas, que se señalan como figuras. El encabezado contiene la información que el encargado del laboratorio ingresó en el panel de configuración. Contiene la información de los parámetros globales de la muestra, que son: la desviación estándar del ajuste de Brunauer-Emmett-Teller, el volumen de microporos, el volumen de mesoporos y los dos números fractales. El cuerpo del informe incluye todas las isotermas, agrupadas en cuatro, con sus respectivos nombres. Debajo de las isotermas, en la sección final, se muestra la información sobre los tipos de poros detectados en una tabla y la imagen del modelo de poros. Por último, se incluye la observación del análisis BET, que se repite en cada informe del mismo lote.

3.13 Algoritmos de clasificación y predicción de las muestras

Se usan algoritmos de clasificación lineal aplicados a las muestras según las características de sus microporos, que corresponden a las filas del dataset. En PoreMap se usa PCA para preprocesamiento del dataset y reducción de dimensionalidad y K-Means que clasifica las muestras en grupos de materiales predeterminados de gran importancia en geología.

3.13.1 PCA

El modelo se construyó utilizando tres de las seis variables fisicoquímicas del dataset global seleccionadas mediante PCA, tal como se mencionó en la Sección 3.8. A través de la matriz de covarianza (véase la Figura 33), se evaluó la dispersión y la estructura de variabilidad conjunta entre las propiedades texturales (incluyendo el volumen de poros BJH y DFT, la superficie BET y las dimensiones fractales FHH y NK). El PCA se aplicó para transformar las variables originales en un nuevo conjunto de componentes principales ordenados según la cantidad de varianza que explica. Posteriormente, se seleccionaron los tres primeros componentes principales para el análisis, ya que concentran la mayor parte de la información contenida en los datos, como se observa en la curva de varianza explicada de la Figura 34. Para facilitar la visualización de las muestras las proyecciones se representaron en un plano bidimensional utilizando la primera y la segunda componente principal. El algoritmo calculó las componentes principales a partir de la matriz de correlación, identificando las direcciones de máxima variabilidad. Las muestras se representan en un gráfico de dispersión, donde cada punto azul corresponde a una muestra individual, como se observa en la Figura 35.

Memoria de Título - Liudmila Novoselova

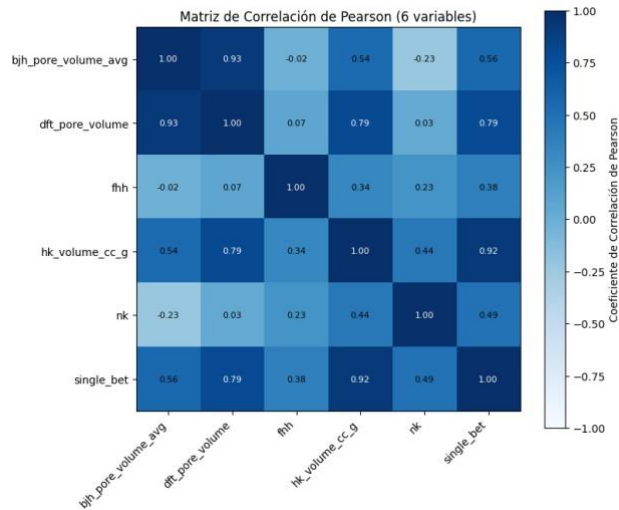


Figura 33: Matriz de correlación de las variables fisicoquímicas empleadas

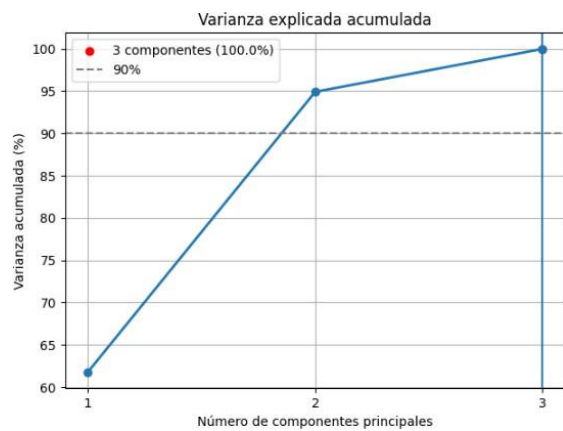


Figura 34: Curva de varianza explicada

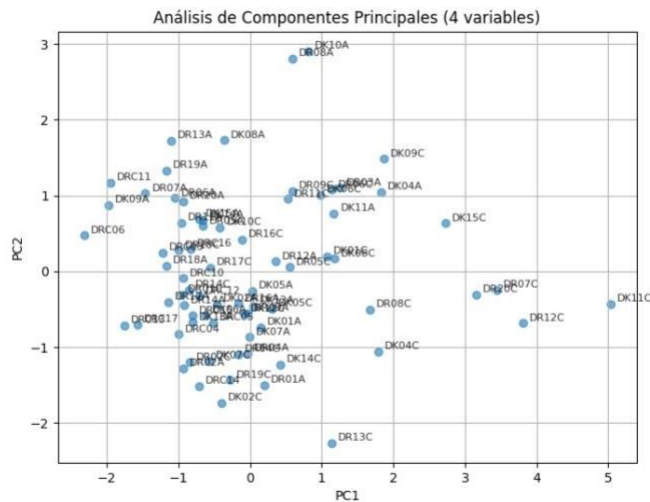


Figura 35: PCA muestra que la mayoría de las muestras se agrupa en una región central lo que sugiere que presentan propiedades fisicoquímicas similares.

3.13.2 K-MEANS

Los resultados clasificados en el PCA se agrupan en n clústeres, cuyos nombres son definidos por el usuario que conoce los minerales del dataset. En la Figura 36, el formulario permite elegir el número de clústeres y cómo se denominarán. Posteriormente, en el K-Means (ver Figura 37), estos nombres aparecerán cerca de cada clúster, junto a los centroides, con sus respectivos nombres y las flechas o autovectores que apuntan a distintas direcciones del gráfico. Los nombres que aparecen en la leyenda representan la dirección y la contribución de las variables originales en el plano definido por las dos primeras componentes principales, y cuanto más la flecha apunta a un clúster, más influenciado está por esta variable. Para una mejor interpretabilidad, los puntos en el *scatterplot* o las muestras aparecen con una leyenda.

Número de clústeres:

NOMBRES DE CLÚSTERES

Cluster 0

Cluster 1

Cluster 2

Cluster 3

Figura 36: Formulario para clústeres

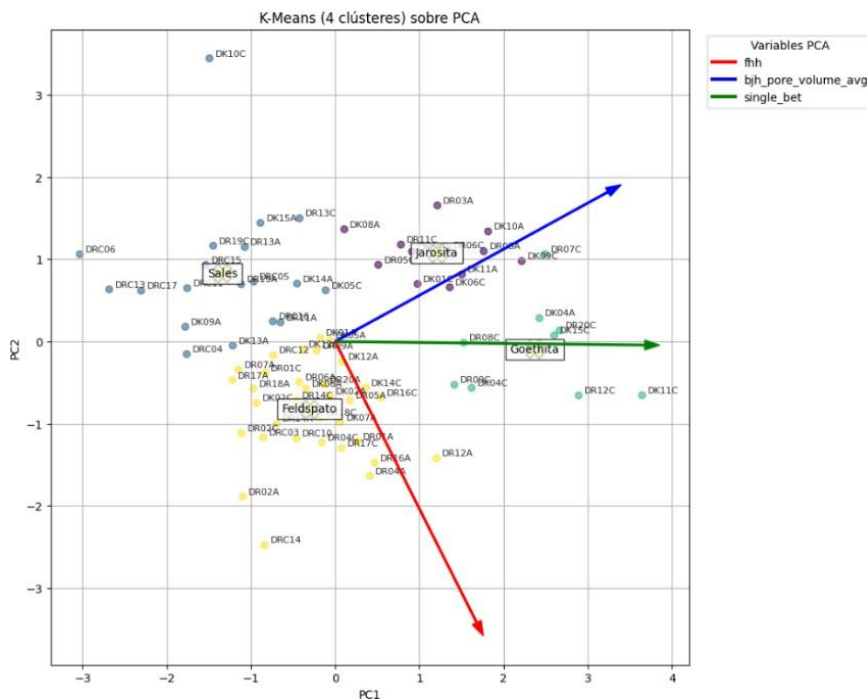


Figura 37: Proyección de los clústeres obtenidos

3.13.3 V-Test

El análisis mediante el estadístico V-test permite identificar la predominancia de las variables en cada clúster. El signo + indica que una variable posee valores superiores dentro de un clúster, el signo – indica que una variable posee valores significativamente menores, y NS (no significativo) indica que la variable no presenta diferencias estadísticas dentro de los demás grupos, como se puede observar en la Tabla 9.

Memoria de Título - Liudmila Novoselova

Tabla 9: Signo del estadístico V-test para las variables de cada clúster.

Variable	Feldespató	Goethita	Jarosita	Sales
nk	NS	+	NS	-
fhh	+	+	NS	-
dft_pore_volume	-	+	+	-
single_bet	NS	+	+	-
bjh_pore_volume_avg	-	+	+	-
hk_volume_cc_g	-	+	NS	-

CAPÍTULO 4: VALIDACIÓN DE LA SOLUCIÓN

4.1 Introducción

En este capítulo se evalúa la eficiencia de PoreMap para automatizar el proceso de confección de informes, así como la validez de los cálculos del sistema. Su objetivo es comprobar si PoreMap reduce significativamente los tiempos de producción y si los análisis generados presentan una precisión comparable a la obtenida mediante el procedimiento manual realizado por expertos.

4.2 Estrategia de Validación

Para validar la solución, se aplicaron las siguientes estrategias: pruebas de funcionalidad y validaciones estadísticas, que consistieron en verificar los cálculos realizados. Se evaluó el ahorro de tiempo, expresado en porcentaje, en comparación con el proceso manual de elaboración del informe, así como la exactitud de los cálculos generados por PoreMap frente a los obtenidos mediante el proceso manual.

4.2.1 Pruebas funcionales

Se verificó que los módulos principales de PoreMap funcionaban correctamente. El primer paso consistió en validar la creación automática del *DataFrame* mediante la automatización de NovaWin, asegurando la inclusión de las hojas de todas las isothermas requeridas. Se verificó que el cálculo del promedio de las isothermas de adsorción y desorción de BJH fuera exacto, y que el cálculo de los parámetros fractales FHH y NK, la detección de tipos de microporos y el cálculo de su área fueran correctos. Asimismo, se verificó el correcto funcionamiento del mecanismo de autenticación básica detallado en la Tabla 10 implementado mediante *contrib.auth* de Django, comprobando que el acceso era posible únicamente al ingresar las credenciales definidas para la aplicación durante las pruebas.

Tabla 10: casos de prueba de inicio de sesión

Caso de prueba	Usuario	Contraseña	Resultado esperado
Credenciales válidas	admin1	admin1234	Acceso permitido
Usuario y/o contraseña incorrecta	admin2	admin1234	Acceso denegado
Usuario y/o contraseña incorrecta	admin1	admin123	Acceso denegado

El siguiente paso fue comprobar la creación de un nuevo registro en la tabla de informes, el acceso a los informes y la descarga de archivos en formatos PDF y XLSX. En el archivo PDF, se constató que las gráficas presentaban valores precisos y estaban libres de errores de código. El penúltimo paso consistió en revisar los registros del dataset para verificar la ausencia de espacios en blanco (condición obligatoria para el sistema). Finalmente, se verificó que los algoritmos PCA y K-Means se ejecutaron sin errores.

4.2.2 Validación con usuarios expertos

Anteriormente, la aplicación ya se presentó en la Feria de Software, donde se demostró su rendimiento ante los visitantes. Sin embargo, debido a las actualizaciones recientes, durante el último mes se realizaron pruebas de PoreMap con 3 personas distintas. El encargado de equipo BET con 8 años de experiencia en el cargo y dos estudiantes. Se les encuestó sobre la facilidad de uso de la interfaz, la claridad del flujo de trabajo, la calidad de diseño de la interfaz y el aspecto de los informes. Como se observa en la Tabla 11, en general señalaron que la interfaz es bastante intuitiva y el flujo de trabajo es claro. Sin embargo, hubo quejas de tener que configurar NovaWin para que generara el reporte de texto con los métodos correctos y de que no había un botón de inicio para ver los últimos informes creados.

Tabla 11: Resultado de validación con usuarios

Persona 1	Persona 2	Persona 3
El diseño del software es intuitivo, sobre flujo también se puede decir lo mismo. Lo que se podría implementar es una alerta que notifique cuando los informes se dejen de procesar y un botón en el inicio que pueda llevar a los informes creados recientemente.	El informe que se genera es legible y claro, pero es agotador tener que configurar NovaWin para que incluya los métodos necesarios en el reporte de texto.	La aplicación funciona bastante rápido y la interfaz es intuitiva.

4.2.3 Comparación con el proceso manual

Se midieron los tiempos de los procesos realizados manualmente en comparación con los del proceso automatizado mediante PoreMap. Según un funcionario de GEA (UDEEC) con 8 años de experiencia que trabaja con el equipo BET, el tiempo promedio para la creación de un informe se aproxima a 4 horas debido a la cantidad de mediciones necesarias, a la calidad del informe final y a la elaboración del modelo geométrico de poros. Por lo tanto, se compara con el proceso manual realizado para 9 informes, simplificado por la propia autora del trabajo, que resalta los aspectos automatizados por esta herramienta, en el que se cronometraron los tiempos de cada procedimiento, con los tiempos empleados en las ejecuciones únicas de la aplicación con 9 muestras realizadas por 3 operadores. El tiempo total de procesamiento con PoreMap fue de 31,87 segundos en promedio, frente a los 40 minutos y 20 segundos requeridos manualmente para una versión simplificada del informe completo. Esto representa un ahorro drástico del 98,7 % en el tiempo de ejecución, lo cual, además de optimizar los tiempos de producción, reduce significativamente la fatiga mental del operador del equipo BET. La Tabla 12 resume detalladamente el tiempo requerido para cada paso con PoreMap en comparación con el método manual.

Tabla 12: Comparación de tiempos de producción promedio de informe manual y con PoreMap

Etapas	Informe	PoreMap operador 1	PoreMap operador 2	PoreMap operador 3
Carga de archivo y exportación	9 min 22 s	28,4 s	27,7 s	27,8 s
Cálculo de valores	7 min 4 s	1,1 s	0,3 s	0,48 s
Cálculo de los tipos de poros presentes	10 min	0,16 s	0,1 s	0,14 s
Dibujo de graficas de los isothermas, y el modelo de porosidad	10,54 min	6,3 s	1,5 s	1,53 s
Exportación a informe final	3 min	0,03 s	0,03 s	78,4 s

4.2.4 Validación estadística

Se compararon los informes creados por la autora del proyecto con los generados por un operador que utiliza el algoritmo de PoreMap, a fin de medir la precisión de ambos en la generación de informes y en la categorización de tipos de poros. Asimismo, se evaluó el desempeño del algoritmo en el cálculo de los valores de la isoterma BJH, de los parámetros fractales FHH y NK, de la detección de tipos de poros, de la construcción del modelo fractal de porosidad y, finalmente, de la clasificación mediante PCA y K-Means. En este caso particular, se realizaron pruebas con 9 muestras, idénticas a las utilizadas en las pruebas anteriores. Para el análisis de PCA y K-Means, se incluyeron otras muestras de la misma serie, provenientes del informe histórico y de los registros de la base de datos BET Database Final, donde se compararon los resultados de los algoritmos con las muestras cargadas por el operador, mediante PCA y K-Means, sobre todas las muestras de BET Database Final de una fuente externa.

4.2.4.1 Precisión del algoritmo para construir el dataframe

PoreMap exporta los datos del reporte generado en *NovaWin* a una hoja de cálculo con pestañas asignadas correctamente para cada isoterma. Este proceso se puede observar en las tablas Tabla 13 y Tabla 14, aplicadas a la muestra denominada PAH (isoterma DFT) se comparan los valores de la hoja del informe creado manualmente y del informe generado con PoreMap.

Tabla 13: isoterma DFT en el informe muestra PAH creado manualmente

Half Pore Width	Cumulative Pore Volume	Cumulative Surface Area	$dV(r)$	$dS(r)$
8,0683	1,94E-04	3,87E-01	4,14E-05	5,13E-02
8,4397	2,06E-04	4,02E-01	3,29E-05	3,89E-02
8,8282	2,15E-04	4,11E-01	2,12E-05	2,40E-02
9,2345	2,15E-04	4,11E-01	0,00E+00	0,00E+00
9,6595	2,15E-04	4,11E-01	0,00E+00	0,00E+00
10,1041	2,15E-04	4,11E-01	0,00E+00	0,00E+00
10,5692	2,15E-04	4,11E-01	0,00E+00	0,00E+00
11,0557	2,15E-04	4,11E-01	0,00E+00	0,00E+00
11,5646	2,15E-04	4,11E-01	0,00E+00	0,00E+00
12,0969	2,15E-04	4,11E-01	0,00E+00	0,00E+00
12,6537	2,15E-04	4,11E-01	0,00E+00	0,00E+00
13,2361	2,15E-04	4,11E-01	0,00E+00	0,00E+00
13,8453	2,15E-04	4,11E-01	0,00E+00	0,00E+00
14,4826	2,31E-04	4,22E-01	2,53E-05	1,75E-02
15,1492	2,58E-04	4,40E-01	4,11E-05	2,71E-02
15,8465	2,93E-04	4,62E-01	5,00E-05	3,16E-02
16,5758	3,41E-04	4,91E-01	6,64E-05	4,01E-02
17,3388	4,13E-04	5,33E-01	9,42E-05	5,43E-02

Tabla 14: isoterma DFT en el informe de la muestra PAH creado en PoreMap

Half Pore Width	Cumulative Pore Volume	Cumulative Surface Area	$dV(r)$	$dS(r)$
8,0683	1,94E-04	3,87E-01	4,14E-05	5,13E-02
8,4397	2,06E-04	4,02E-01	3,29E-05	3,89E-02
8,8282	2,15E-04	4,11E-01	2,12E-05	2,40E-02
9,2345	2,15E-04	4,11E-01	0,00E+00	0,00E+00
9,6595	2,15E-04	4,11E-01	0,00E+00	0,00E+00
10,1041	2,15E-04	4,11E-01	0,00E+00	0,00E+00
10,5692	2,15E-04	4,11E-01	0,00E+00	0,00E+00
11,0557	2,15E-04	4,11E-01	0,00E+00	0,00E+00
11,5646	2,15E-04	4,11E-01	0,00E+00	0,00E+00
12,0969	2,15E-04	4,11E-01	0,00E+00	0,00E+00
12,6537	2,15E-04	4,11E-01	0,00E+00	0,00E+00
13,2361	2,15E-04	4,11E-01	0,00E+00	0,00E+00
13,8453	2,15E-04	4,11E-01	0,00E+00	0,00E+00
14,4826	2,31E-04	4,22E-01	2,53E-05	1,75E-02
15,1492	2,58E-04	4,40E-01	4,11E-05	2,71E-02
15,8465	2,93E-04	4,62E-01	5,00E-05	3,16E-02
16,5758	3,41E-04	4,91E-01	6,64E-05	4,01E-02
17,3388	4,13E-04	5,33E-01	9,42E-05	5,43E-02

4.2.4.2 Promedio de Barret-Joyner-Halenda

Como ya se mencionó en el Capítulo 3, el *NovaWin* exporta 2 isotermas de BJH correspondientes a los valores de adsorción y de desorción. El *DataFrame* final de BJH es el promedio de los valores de ambas isotermas. Se verificó la exactitud de estos valores comparando los promedios de adsorción (hoja BJHA) y desorción (hoja BJHD) del informe generado en PoreMap (Tabla 15) con el informe generado manualmente (Tabla 16) de una de las 9 muestras, llamada PAH. Con esto se verificó que la conversión a valores decimales funciona correctamente y que los valores son consistentes.

Tabla 15: isoterma BJH en el informe de la muestra PAH creado con PoreMap

Radius	Pore Volume	Pore Surf Area	$dV(r)$	$dS(r)$	$dV(\log r)$	$dS(\log r)$
15,9634	4,4875E-05	0,05601	3,0296E-05	0,0376655	0,00112305	1,39415
17,7538	0,00032367	0,362115	0,00012835	0,1411	0,0053735	5,9036
19,9099	0,00066555	0,696125	0,00014775	0,14445	0,0069561	6,7969
22,4799	0,00079275	0,807475	4,2557E-05	0,0373765	0,00223165	1,95705
26,05525	0,00102095	0,974705	0,00004592	0,0338865	0,00286307	2,10875
29,9321	0,0012316	1,113515	6,1659E-05	0,040461	0,0043395	2,8364
34,8602	0,00160576	1,32228	5,5745E-05	0,0314615	0,0045554	2,55955
41,9135	0,0020232	1,519405	5,3305E-05	0,0253725	0,0051765	2,4478
52,83645	0,00261695	1,73631	4,0217E-05	0,0151175	0,00495175	1,8405
70,1216	0,00339375	1,95645	3,7868E-05	0,0109799	0,00608055	1,73155
114,2713	0,0051357	2,25385	2,7185E-05	0,00516145	0,0067386	1,218
573,99985	0,0096606	2,45205	1,3199E-05	0,001502	0,0073511	0,56487
1612,2936	0,0140085	2,5238	2,1826E-06	3,5746E-05	0,00432624	0,0699418

Tabla 16: isoterma BJH en el informe de la muestra PAH creado manualmente

Radius	Pore Volume	Pore Surf Area	$dV(r)$	$dS(r)$	$dV(\log r)$	$dS(\log r)$
15,9634	4,4875E-05	0,05601	3,0296E-05	0,0376655	0,00112305	1,39415
17,7538	0,00032367	0,362115	0,00012835	0,1411	0,0053735	5,9036
19,9099	0,00066555	0,696125	0,00014775	0,14445	0,0069561	6,7969
22,4799	0,00079275	0,807475	4,2557E-05	0,0373765	0,00223165	1,95705
26,05525	0,00102095	0,974705	0,00004592	0,0338865	0,00286307	2,10875
29,9321	0,0012316	1,113515	6,1659E-05	0,040461	0,0043395	2,8364
34,8602	0,00160576	1,32228	5,5745E-05	0,0314615	0,0045554	2,55955
41,9135	0,0020232	1,519405	5,3305E-05	0,0253725	0,0051765	2,4478
52,83645	0,00261695	1,73631	4,0217E-05	0,0151175	0,00495175	1,8405
70,1216	0,00339375	1,95645	3,7868E-05	0,0109799	0,00608055	1,73155
114,2713	0,0051357	2,25385	2,7185E-05	0,00516145	0,0067386	1,218
573,99985	0,0096606	2,45205	1,3199E-05	0,001502	0,0073511	0,56487
1612,2936	0,0140085	2,5238	2,1826E-06	3,5746E-05	0,00432624	0,0699418

4.2.4.3 Procedimiento para buscar números fractales

Se verificó que los números fractales de NK y FHH se obtuvieron correctamente o se aproximaron a los valores que calcula el software NovaWin; no obstante, en la Tabla 17 y en la Tabla 18 se pueden observar ciertas diferencias catalogadas como error y error absoluto entre los valores de los informes generados por el PoreMap y de los informes creados manualmente. Para detectar tendencias de errores y sesgos sistemáticos, se calcularon métricas de error, como el *Bias* (sesgo), el MAE y el RMSE. En la Tabla 19 se puede observar que la métrica de error presentó índices bastante bajos para los dos fractales, aunque para FHH este índice fue un poco más grande que para NK; asimismo, se puede observar que el *Bias* para FHH es menor que para NK, pero también más lejano que 0. Y como ambos sesgos son negativos, esto sugiere que los valores calculados por el PoreMap para FHH y NK suelen ser menores que los obtenidos con NovaWin.

Tabla 17: NK generado por el PoreMap y el generado en informe manual

Muestra	NK manual	NK PoreMap	Error	Error absoluto
DK07A	2,8030	2,7826	-0,0204	0,0204
DK07C	2,7202	2,7239	0,0037	0,0037
DK09C	2,6021	2,5735	-0,0286	0,0286
DK10A	2,4507	2,4163	-0,0344	0,0344
DK10C	2,4320	2,4607	0,0287	0,0287
DK11A	2,6309	2,6299	-0,001	0,001
DK11C	2,9574	2,9398	-0,0176	0,0176
PAH	2,5104	2,5385	0,0281	0,0281
DK12C	2,6651	2,6646	-0,0005	0,0005

Tabla 18: FHH generado por el PoreMap y el generado en informe manual

Muestra	FHH manual	FHH PoreMap	Error	Error absoluto
DK07A	2,6611	2,6865	0,0254	0,0254
DK07C	2,6943	2,6638	-0,0305	0,0305
DK09C	2,6129	2,6129	0	0
DK10A	2,4507	2,4163	-0,0344	0,0344
DK10C	2,6321	2,6165	-0,0156	0,0156
DK11A	2,6388	2,6049	-0,0339	0,0339
DK11C	2,7457	2,7495	0,0038	0,0038
PAH	2,5626	2,4751	-0,0875	0,0875
DK12C	2,6390	2,6136	-0,0254	0,0254

Tabla 19: Métrica de error aplicada a FHH y NK

Método	Bias	MAE	RMSE
NK	-0,0047	0,0180	0,0223
FHH	-0,0220	0,0285	0,0372

4.2.4.4 Desviación estándar y Single BET

Se compararon los resultados de Single BET de la Tabla 20 y las desviaciones estándar BET obtenidos mediante PoreMap con los valores incluidos en los nueve informes generados manualmente. Para evaluar el desempeño del algoritmo de búsqueda del valor Single BET, se calcularon los errores individuales y las métricas globales de error (véase la Tabla 21), considerando el *Bias*, el error absoluto medio (MAE) y la raíz del error cuadrático medio (RMSE). En este caso, se puede deducir que, como el *Bias* fue positivo, esto indica que el algoritmo suele aumentar el resultado frente al proceso manual de creación del informe, el MAE y el RMSE fueron iguales que significa que no había *outliers*. Esto demuestra que la implementación del cálculo Single BET reproduce adecuadamente los resultados manuales en la mayoría de las muestras evaluadas. Para la desviación estándar BET (Tabla 23), se obtuvo una concordancia inferior a la de Single BET, por lo que esta metodología debe revisarse en los pasos posteriores. El *Bias* positivo indica que los valores de aplicación suelen superar a los obtenidos manualmente; además, el RMSE crece respecto al MAE debido a la presencia del *outlier* DK11A, como se observa en la Tabla 22.

Tabla 20: Single BET en informe manual y el encontrado por la aplicación

Muestra	Manual	PoreMap	Error	Error absoluto
DK07A	45,0890	45,090	0,0010	0,0010
DK07C	33,0650	33,070	0,0050	0,0050
DK09C	9,3300	9,332	0,0020	0,0020
DK10A	4,6205	4,620	-0,0005	0,0005
DK10C	2,2971	2,297	-0,0001	0,0001
DK11A	8,0959	8,096	0,0001	0,0001
DK11C	24,5208	24,521	0,0002	0,0002
PAH	2,5935	2,594	0,0005	0,0005
DK12C	3,6907	3,691	0,0003	0,0003

Tabla 21: Métricas de error para SingleBET

Bias	MAE	RMSE
0,0009	0,0011	0,0018

Tabla 22: Métricas de error para Desviación estándar BET

Bias	MAE	RMSE
0,1221	0,1413	0,2383

Tabla 23: Desviación estándar BET en informe manual y el encontrado por la aplicación

Muestra	Manual	PoreMap	Error	Error absoluto
DK07A	0,2158	0,3259	0,1101	0,1101
DK07C	0,1042	0,1540	0,0498	0,0498
DK09C	0,3565	0,3894	0,0329	0,0329
DK10A	0,1907	0,2734	0,0827	0,0827
DK10C	0,1075	0,0209	0,0866	0,0866
DK11A	0,3884	1,0529	0,6645	0,6645
DK11C	0,9341	1,1292	0,1951	0,1951
PAH	0,1149	0,1451	0,0302	0,0302
DK12C	0,1429	0,1628	0,0199	0,0199

4.2.4.5 Evaluación de los tipos de poros presentes

Se compararon los resultados de los informes manuales con los generados por PoreMap. La comparación incluyó la detección de los tipos de poros y el cálculo de sus volúmenes, cuyos resultados se presentan en las Tablas 24 a 26 para los tipos *Micro*, *Unclassified* y *Plate*. No se compararon los volúmenes de *Bottle-Ink* y *Cylindrical* porque no fueron encontrados en estas 9 muestras. Para cuantificar el desempeño de la aplicación, se calcularon las métricas de error: Bias, MAE, RMSE y la desviación estándar del error, cuyos resultados se muestran en la Tabla 27. Los microporos presentaron el mejor nivel de concordancia con los resultados manuales, con un Bias de 0,0001, un MAE de 0,0007 y un RMSE de 0,0012, lo que indica errores muy bajos. En el caso de los poros *Unclassified*, tuvo un índice de error mayor de las tres categorías encontradas (Bias = -0,0044, MAE = 0,0042 y RMSE = 0,0082), aunque siguen siendo bajas, lo que indica una buena aproximación a los valores de referencia y para *Plate* el índice de error fue mayor que para *Micropores* pero menor que para *Unclassified*. El Bias negativo sugiere que el algoritmo suele subestimar los resultados frente a cálculos manuales, el MAE indica que el error promedio por muestra fue 0,0024 y RMSE subió por las muestras como DK10A con un alto índice de error.

Tabla 24: Poros de tipo Micropores encontrados en las muestras

Muestra	Manual	PoreMap	Error	Error absoluto
DK07A	0,0006	0,000169	-0,000431	0,000431
DK07C	0,0006	0,00003	-0,000570	0,00057
DK09C	0,0012	0,0001	-0,001100	0,0011
DK10A	0,000004	0	-0,000004	0,000004
DK10C	0,000008	0	-0,000008	0,000008
DK11A	0,0003	0,0001	-0,000200	0,0002
DK11C	0,0003	0,0001	-0,000200	0,0002
PAH	0,0002	0,00002	-0,000180	0,00018
DK12C	0,0005	0,00003	-0,000470	0,00047

Tabla 25: Poros de tipo Unclassified encontrados en las muestras

Muestra	Manual	PoreMap	Error	Error absoluto
DK07A	0,111	0,0008	-0,1102	0,1102
DK07C	0,0004	0,0002	-0,0002	0,0002
DK09C	0,0016	0,0001	-0,0015	0,0015
DK10A	0,0009	0,0006	-0,0003	0,0003
DK10C	0,0001	0,0001	0	0
DK11A	0,0019	0,0016	-0,0003	0,0003
DK11C	0,0019	0,0016	-0,0003	0,0003
PAH	0,0002	0,000019	-0,000181	0,000181
DK12C	0,0006	0,0005	-0,0001	0,0001

Tabla 26: Poros de tipo Plate encontrados en las muestras

Muestra	Manual	POREMAP	Error	Error absoluto
DK07A	0,0071	0,0061	-0,001	0,001
DK07C	0,0051	0,0044	-0,0007	0,0007
DK09C	0,02	0,0168	-0,0032	0,0032
DK10A	0,0186	0,0117	-0,0069	0,0069
DK10C	0,0129	0,0165	0,0036	0,0036
DK11A	0,0193	0,0165	-0,0028	0,0028
DK11C	0,0071	0,0061	-0,001	0,001
PAH	0,0087	0,0078	-0,0009	0,0009
DK12C	0,0087	0,0072	-0,0015	0,0015

Tabla 27: Métricas de error para detectar los tipos de poros

Tipo de poro	Bias	MAE	RMSE
Micropores	-0,000351	0,000351	0,000478
Unclassified	-0,012565	0,012565	0,036742
Plate	-0,001600	0,0024	0,002962

4.2.4.6 Generación de modelo de porosidad

El siguiente paso consistió en revisar el modelo fractal de microporos y verificar que el área ocupada por cada tipo de poro estuviera graficada correctamente. Se validó que los poros de mayor tamaño se ubicaran más cerca de la base del fractal, mientras que los más pequeños presentaran un mayor número de ramificaciones, asegurando además que los cuadrados representativos de las ramas y de la base no se solaparan. Como se observa en la Figura 38, los cuadrados de cada tipo de poro son proporcionales entre sí, representando fielmente los valores reales del área detectada para cada categoría.

Memoria de Título - Liudmila Novoselova

Clasificación de Poros
(Tamaño y Fracción)

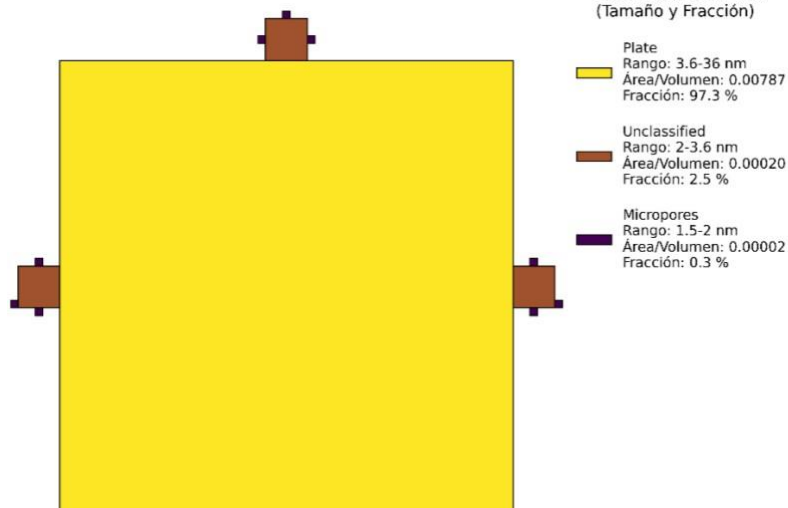


Figura 38: Modelo de porosidad para PAH

4.2.4.7 Suma de área de los poros encontrados

Se comprobó que este valor se registró en el informe con precisión; para ello, se sumaron manualmente los valores correspondientes a volúmenes de los volúmenes de microporos (1.6-9.7 Å) y volúmenes de mesoporos (15-1767 Å) extraídos del reporte TXT de los campos *HK summary*, promedio de *BJHA summary* y *BJHD summary* posteriormente se verificó que los resultados fueran consistentes con los generados por la aplicación lo que muestra la Tabla 28 para la muestra PAH.

Tabla 28: Validación de área total de volumen de poros calculada

Método / Resultado	MANUAL	POREMAP	Promedio
HK_SUM	0,001	0,001	0,001
Promedio (BJHA_SUM + BJHD_SUM)	0,008	0,007	0,0075
Total	0,0145	0,0145	0,0145

4.2.4.8 Validación de las gráficas de los isoterma

Se validó la coherencia entre los datos de los histogramas generados por PoreMap y los exportados directamente de NovaWin. En el caso del modelo DFT, la Figura 39 muestra que los volúmenes de poro fueron idénticos entre la representación manual (izquierda) y la generada por PoreMap (derecha); no obstante, en esta última se observó un tramo más acotado de la isoterma. Por su parte, los modelos BJH y HK, como muestran las Figuras 40 y 41, respectivamente, presentaron una mayor resolución y valores idénticos a los obtenidos manualmente. La única isoterma que permaneció en la misma escala fue la BET (véase la Figura 42), gráfica que puede obtenerse directamente en NovaWin. En el caso de las demás isoterma, las gráficas debían crearse manualmente, ya que el software original no permite su exportación directa.

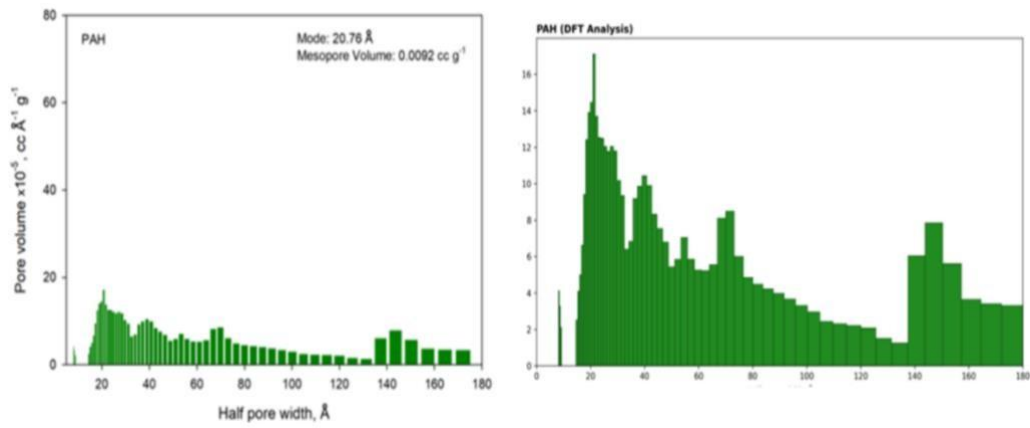


Figura 39: DFT graficado manualmente y en PoreMap

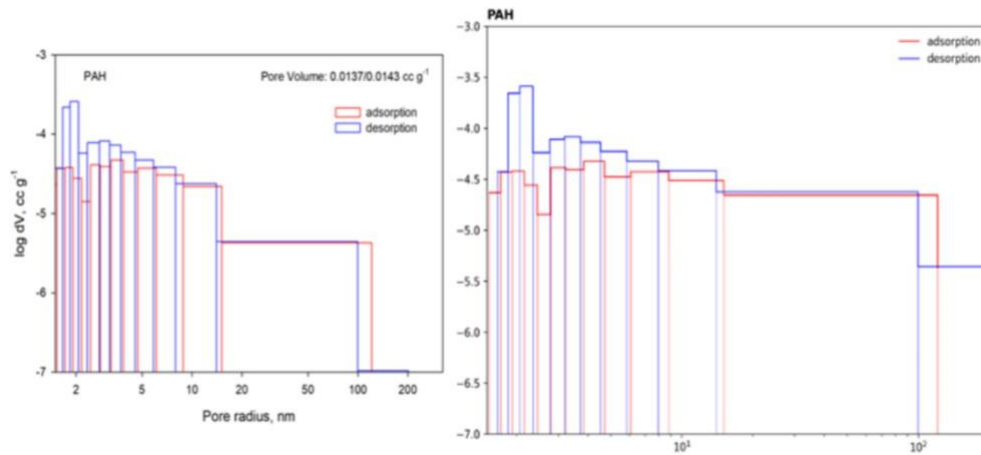


Figura 40: BJH graficado manualmente y en PoreMap

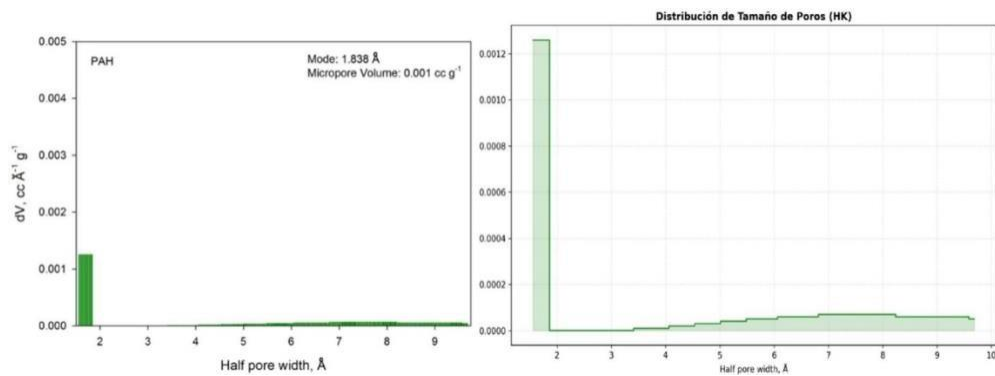


Figura 41: Comparación de gráficos HK: cálculo manual versus PoreMap

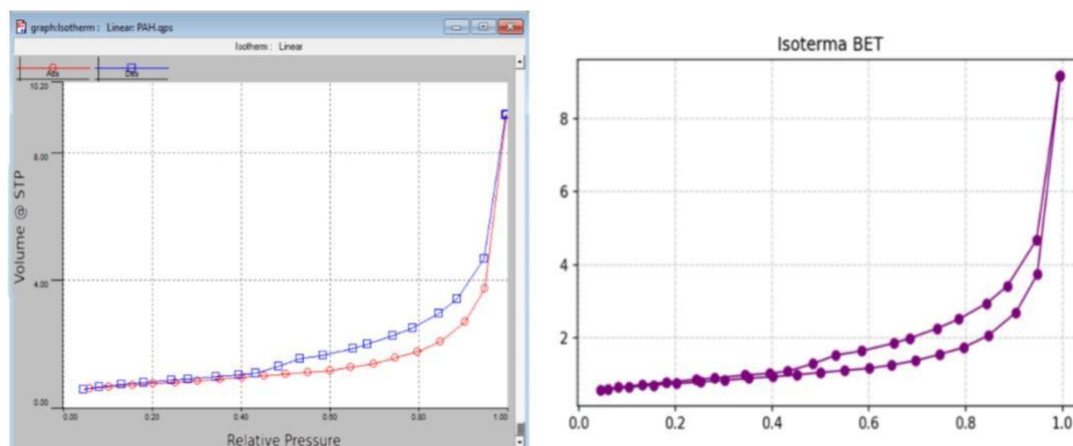


Figura 42: Análisis comparativo de la isoterma BET obtenida en NovaWin y en PoreMap

4.2.4.9 Validación de dataset

Se verificó la consistencia entre los valores de cada informe y sus respectivos registros en el dataset, así como la coherencia entre los resultados del cálculo de *single_bet* y los números fractales (FHH y NK). Las columnas *hk_volume_ccg*, *dft_pore_volume* y *bjh_pore_volume* fueron equivalentes a los valores correspondientes a los campos Volumen de microporos (1.6-9.7 Å), Volumen de mesoporos (7.7-180 Å) y Volumen de mesoporos (15-1767 Å), respectivamente. Asimismo, se comprobó que los valores de *NK*, *FHH* y *volumen_total_de_poros* se incorporaron correctamente al dataset (véase la Tabla 29).

Tabla 29: Paso de valores al dataset

Columna	Informe	Dataset
BJH_PORE_VOLUME	0,0140085	0,0140085
SINGLE_BET	2,594	2,594
HK_VOLUME_CCG	0,001	0,001
DFT_PORE_VOLUME	0,009	0,009
NK	2,574	2,574
FHH	2,475	2,475
VOLUMEN_TOTAL_DE_POROS	0,014	0,0095

4.2.4.10 Validación del informe generado

El informe generado tiene un formato distinto a los informes que produce el encargado. En vez de incluir varias muestras juntas, presenta las isotermas correspondientes a una sola muestra y el modelo de poros en formato individual para cada muestra, repitiendo la observación y los parámetros globales del análisis en cada archivo del lote. Se verificó que en el informe final los datos coincidían. Se comprobaron los resultados de la desviación estándar, del Single BET y de las áreas totales calculadas para los microporos y los mesoporos. Había ciertas discrepancias porque el informe de PoreMap es específico de cada muestra.

4.2.4.11 Validación de PCA y K-Means

El último paso consistió en validar el funcionamiento del PCA y del K-Means, además de verificar que las muestras previamente cargadas en el dataset se representaran correctamente en la visualización. Para esta validación se utilizaron 74 muestras de la base de datos BET Database final, con información completa de caracterización BET. Debido a que las muestras pertenecían a compuestos previamente identificados como Jarosita, Sales, Goethita, Feldespato, los clústeres obtenidos mediante K-Means fueron asociados con estos grupos siguiendo el mismo orden de identificación utilizado en la base de datos. Durante el análisis se detectó que, cuando una misma muestra con datos idénticos era ingresada más de una vez al dataset, el PCA la representaba como un único punto dentro del espacio reducido de componentes principales. Por esta razón, la cantidad de puntos observados en la nube de dispersión puede ser menor que el número total de registros cargados. Como se observa en la Figura 43, la reducción de dimensionalidad mediante Componentes Principales permitió retener la totalidad de la información: la primera componente (PC1) explicó el 60.62% de la varianza total, la PC2 el 33.79% y la PC3 el 5.59%, acumulando conjuntamente el 100.00% de la variabilidad del sistema. Posteriormente, la agrupación mediante K-Means sobre las componentes principales reveló patrones distintivos entre los materiales a partir de la orientación de sus autovectores. En este sentido, el grupo asociado a Feldespato se caracterizó por baja cantidad de microporos clasificados por BET y valores fractales FHH altos ya que se encuentra en dirección favorable de autovector de *fhh*, el clúster Sales se caracterizó por una pequeña cantidad de microporos

mesoporos y fractales en general, el clúster Goethita se caracterizó por alto índice microporos clasificados por BET y en una dirección favorable del autovector *single_bet* y el clúster Jarosita se caracterizó por una mayor cantidad de mesoporos clasificada por BJH ya que está en la dirección favorable de autovector *bjh_pore_volume_avg*. Posteriormente, en la Tabla 30 se presenta el análisis de concordancia del modelo, contrastando las métricas cuantitativas del V-Test a través del estadístico V-Score (magnitud y sentido de la desviación) y su respectivo nivel de significancia *p-value* junto con la localización de cada muestra en el plano factorial del PCA, frente a la caracterización mineralógica teórica establecida por experto sobre el dataset.

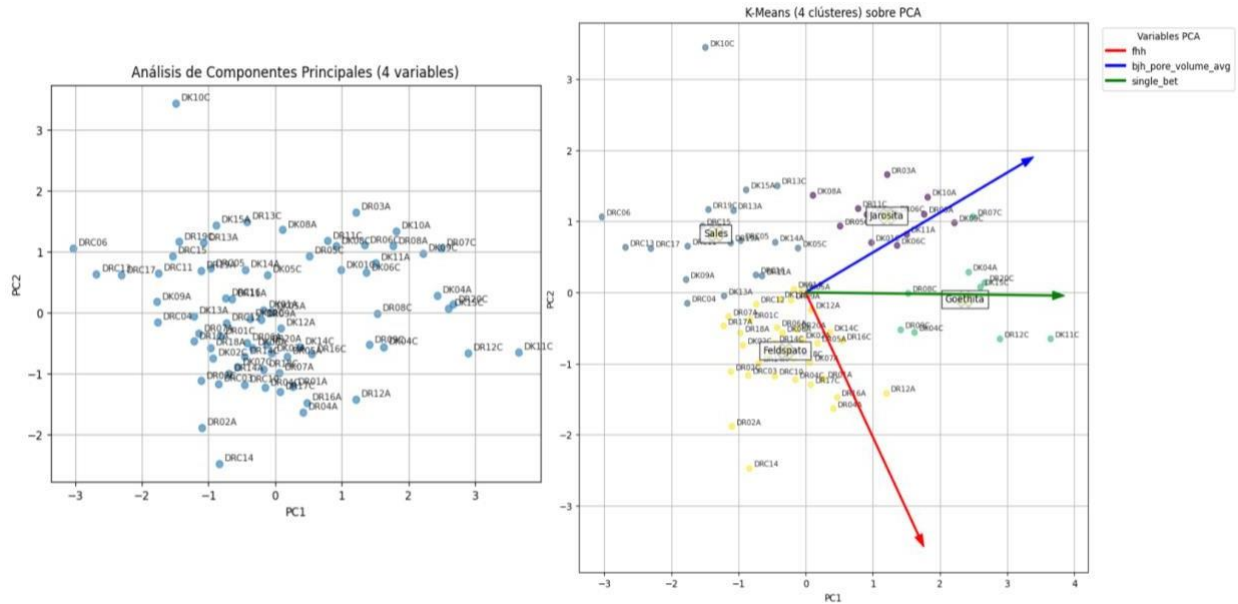


Figura 43: PCA y K-Means aplicados sobre el dataset

Tabla 30: Concordancia de resultados del K-Means frente a la clasificación real

Clúster	Interpretación según experto	V-Test (Resultados Numéricos)	K-Means (Ubicación PCA)	Validación
Feldespatos	Material caracterizado por baja porosidad general (bajos microporos y mesoporos) y valores reducidos en los parámetros fractales.	Muestra un incremento en el fractal <i>fhh</i> ($V=+4,92$, $p<0,0001$), pero reducciones significativas en <i>bjh_pore_volume_avg</i> ($V=-4,55$, $p<0,0001$), <i>dft_pore_volume</i> ($V=-4,14$, $p<0,0001$) y <i>hk_volume_cc_g</i> ($V=-2,46$, $p=0,0138$). Sin diferencia significativa en <i>single_bet</i> ($p=0,1032$).	Se ubica en el cuadrante inferior (PC2 negativa), alineado directamente con la dirección del autovector fractal <i>fhh</i> .	Validado Parcialmente. Se confirma numéricamente la baja mesoporosidad y microporosidad. Sin embargo, estadísticamente presenta el segundo mayor valor en el fractal <i>fhh</i> , lo cual difiere del valor esperado por el experto.
Goethita	Material con desarrollo moderado de mesoporosidad y clara predominancia de microporosidad.	Presenta los mayores valores del dataset en <i>hk_volume_cc_g</i> ($V=+6,71$, $p<0,0001$) y <i>single_bet</i> ($V=+5,88$, $p<0,0001$), acompañados de valores elevados en <i>dft_pore_volume</i> ($V=+5,68$), <i>bjh_pore_volume_avg</i> ($V=+4,08$) y fractales <i>fhh</i> ($V=+2,44$, $p=0,0147$).	Se ubica en el extremo derecho del plano (PC1 positiva), fuertemente alineada con la proyección del autovector <i>single_bet</i> .	Validado Parcialmente. Se confirma la alta concentración de microporos frente al resto. No obstante, las variables fractales resultaron estadísticamente significativas a diferencia del supuesto del experto.
Jarosita	Material con elevada abundancia de mesoporos y altos índices en los demás parámetros volumétricos.	Muestra el valor más alto en <i>bjh_pore_volume_avg</i> ($V=+5,49$, $p<0,0001$), junto con incrementos en <i>dft_pore_volume</i> ($V=+3,94$, $p<0,0001$) y <i>single_bet</i> ($V=+2,34$, $p=0,0192$). Las variables fractales no mostraron diferencias significativas ($p\geq 0,05$).	Se ubica en el cuadrante superior derecho (PC1 y PC2 positivas), desplazada fuertemente en la dirección del autovector <i>bjh_pore_volume_avg</i> .	Validado Parcialmente. Se ratifica cuantitativamente la dominancia en volumen de mesoporos y alto índice de microporos, aunque las variables fractales no destacaron, y <i>hk_pore_volume</i> no destacó.
Sales	Material con la menor porosidad global del dataset e índices fractales mayores a los registrados en Feldespatos.	Registra reducciones estadísticamente significativas en todas las variables: <i>fhh</i> ($V=-6,01$), <i>single_bet</i> ($V=-4,52$), <i>hk_volume_cc_g</i> ($V=-3,30$), <i>dft_pore_volume</i> ($V=-2,85$) y <i>bjh_pore_volume_avg</i> ($V=-2,50$), con $p<0,05$ en todos los casos.	Se localiza en el cuadrante superior izquierdo (PC1 negativa), en la región opuesta a la proyección de todos los autovectores.	Validado Parcialmente. Se valida la condición de mínima porosidad y área superficial. Sin embargo, los fractales <i>fhh</i> y <i>nk</i> obtuvieron los valores más bajos del dataset, siendo menores que en Feldespatos.

4.2.4.12 Resultados de la validación estadística

Los resultados obtenidos evidencian una alta concordancia entre los valores calculados por PoreMap y los obtenidos mediante el procedimiento manual. Esta exactitud se obtuvo al comparar los valores calculados por PoreMap con los del informe manual, considerando correctos los resultados cuya desviación relativa fue inferior al 5 %. Esta métrica se aplicó a los siguientes parámetros: BET, BJH, FHH, NK, identificación de los tipos de poros presentes en la muestra, cálculo del volumen total de poros, cálculo del Single BET y la desviación estándar asociada al ajuste BET. Asimismo, se comprobó la consistencia de los datos tanto en los *DataFrame* como en el dataset, así como el correcto funcionamiento de los métodos de clasificación PCA y K-Means.

La generación de los *DataFrame* presentó alta concordancia: la isoterma BJH se calculó correctamente a partir de los promedios de adsorción y desorción y si cómo se generaron correctamente los demás *DataFrames*. Si bien se detectó una discrepancia en el cálculo de algunos

Memoria de Título - Liudmila Novoselova

parámetros del modelo fractal, la representación gráfica de los tipos de poros se generó correctamente y conservó las proporciones relativas entre las categorías. Finalmente, todos los valores se integraron correctamente al dataset sin pérdida de información, lo que permitió que el PCA y el algoritmo K-Means clasificaran todas las muestras. El algoritmo K-Means logró separar las muestras de acuerdo con sus estructuras de poros sin embargo también detectó discrepancias en clasificación según el fractal o la rugosidad de la superficie (variables NK y FHH). Estos aspectos convierten a PoreMap en una herramienta que reduce drásticamente los tiempos de espera y presenta una alta concordancia con los resultados obtenidos mediante el procedimiento manual. Su implementación permite generar grandes volúmenes de informes, proporcionar visualizaciones de las isothermas y del modelo de poros para cada muestra, y clasificar los materiales según sus tipos de poros. De este modo, facilita el conocimiento de las características de estos materiales y resalta su importancia para la empresa que los solicitó.

CAPÍTULO 5: CONCLUSIONES

En este capítulo se presentan las conclusiones generales derivadas del desarrollo y validación de la aplicación PoreMap, junto con las proyecciones y posibles mejoras futuras para este software en el contexto del Instituto de Geología Económica Aplicada de la Universidad de Concepción.

5.1 Conclusiones Generales

PoreMap logró automatizar el flujo de trabajo asociado a la caracterización BET de materiales porosos. La solución permite generar informes en cuestión de segundos, reduciendo en un 96% el tiempo total del proceso, lo que optimiza la producción y disminuye la fatiga mental del operador. El algoritmo de clasificación basado en microporosidad y el uso de PCA y K-Means demostraron ser herramientas útiles para la organización de datos, con una precisión para clasificar las muestras de acuerdo con su porosidad lo que permite emplear PoreMap para la gestión de informes en GEA. La aplicación integra de manera ordenada cálculos, tablas y gráficos, lo que contribuye de manera significativa a la digitalización del laboratorio y aumenta la trazabilidad de los análisis.

5.2 Trabajo Futuro

Para futuras etapas de desarrollo, se contempla la integración de modelos de *machine learning* que permitan clasificar un mayor volumen de datos, optimizando así la capacidad analítica del sistema. Asimismo, se propone incorporar módulos especializados para el procesamiento de muestras mediante microscopía electrónica de barrido (SEM), QEMSCAN y difracción de rayos X (DRX), a fin de robustecer la caracterización mineralógica y estructural de los materiales analizados.

REFERENCIAS

- Avnir, D., & Jaroniec, M. (1989). An isotherm equation for adsorption on fractal surfaces of heterogeneous porous materials. *Langmuir*, 5(6), 1431–1433. <https://doi.org/10.1021/la00090a032>
- Bagayoko, D., & Diakit , Y. I. (2023). Realizing the potentials of density functional theory (DFT) and of the Materials Genome Initiative (MGI). *MRS Advances*, 8(11), 619–625. <https://doi.org/10.1557/s43580-023-00562-w>
- Barrett, E. P., Joyner, L. G., & Halenda, P. P. (1951). The determination of pore volume and area distributions in porous substances. I. Computations from nitrogen isotherms. *Journal of the American Chemical Society*, 73(1), 373–380. <https://doi.org/10.1021/ja01145a126>
- Brunauer, S., Emmett, P. H., & Teller, E. (1938). Adsorption of gases in multimolecular layers. *Journal of the American Chemical Society*, 60(2), 309–319. <https://doi.org/10.1021/ja01269a023>
- Dombrowski, R. J., Lastoskie, C. M., & Hyduke, D. R. (2001). The Horvath–Kawazoe method revisited. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 187–188, 23–39. [https://doi.org/10.1016/S0927-7757\(01\)00618-5](https://doi.org/10.1016/S0927-7757(01)00618-5)
- Guggiana Nilo, B. T. (2021) Caracter sticas microestructurales de las superficies de los tranques Domeyko y Delirio expuestas a la erosi n e lica en climas  ridos y semi ridos, regiones de Atacama y Coquimbo, Chile [Memoria de t tulo, Universidad de Concepci n]. Repositorio Institucional UdeC. <https://repositorio.udec.cl/handle/11594/9874>
- Halsey, G. (1948). Physical adsorption on non-uniform surfaces. *The Journal of Chemical Physics*, 16(10), 931–937. <https://doi.org/10.1063/1.1746689>
- Hern ndez Salcedo, P. G. (2013). Influencia de los par metros de s ntesis por AACVD en las propiedades de nanop rticulas de magnetita, para su aplicaci n en la adsorci n de ars nico [Tesis de maestr a, Centro de Investigaci n en Materiales Avanzados S.C.]. Repositorio Institucional CIMAV. <http://cimav.repositorioinstitucional.mx/jspui/handle/1004/2254>
- Jagiello, J., & Olivier, J. P. (2013). A simple two-dimensional NLDFT model of adsorption in pores with geometrical constraints. *Adsorption*, 19(2–4), 777–783. <https://doi.org/10.1007/s10450-013-9506-5>
- James, G., Witten, D., Hastie, T., & Tibshirani, R. (2021). An introduction to statistical learning: With applications in R (2.^a ed.). Springer. <https://doi.org/10.1007/978-1-0716-1418-1>
- Lastoskie, C., Gubbins, K. E., & Quirke, N. (1993). Pore size distribution analysis of microporous carbons: A density functional theory approach. *The Journal of Physical Chemistry*, 97(18), 4786–4796. <https://doi.org/10.1021/j100121a035>
- Liu, K., Ostadhassan, M., Jang, H. W., Zakharova, N. V., & Shokouhimehr, M. (2021). Comparison of fractal dimensions from nitrogen adsorption data in shale via different models. *RSC Advances*, 11(4), 2298–2306. <https://doi.org/10.1039/D0RA09052B>

- López, C. M., Uzcategui, R., Seijas, N., Sazo, V., Ríos, M., & Buhman, S. (2012). Síntesis y caracterización de zeolitas mesoporosas. *Revista de la Facultad de Ingeniería UCV*, 27(2), 45–54.
- Neimark, A. V. (1992). A new approach to the determination of the surface fractal dimension of porous solids. *Physica A: Statistical Mechanics and Its Applications*, 191(1–4), 258–262. [https://doi.org/10.1016/0378-4371\(92\)90536-Y](https://doi.org/10.1016/0378-4371(92)90536-Y)
- érez, P., López, C. M., Sazo, V., & Urbina, C. (2010). Síntesis y caracterización de materiales aluminosilicatos compuestos ZSM-5/MCM-41. *Avances en Química*, 5(2), 107–116. <https://www.redalyc.org/pdf/933/93315830006.pdf>
- Pomonis, P. J., & Tsaousi, E. T. (2009). Frenkel–Halsey–Hill equation, dimensionality of adsorption, and pore anisotropy. *Langmuir*, 25(17), 9986–9994. <https://doi.org/10.1021/la901121c>
-