

Manual do usuário do PYSERSPEC

1. Introdução

PySerSpec é um software para controlar um espectrofotômetro Shimadzu UV-Mini 1240.

Baseia-se na implementação dos comandos descritos na documentação oficial do fabricante do dispositivo¹.

A linguagem de programação utilizada é o Python, na versão 3.42. Bibliotecas adicionais são usadas: matplotlib3 (permite desenhar gráficos a partir dos dados recuperados) e pyserial4 (permite se comunicar por porta serial com o espectrofotômetro).

Este programa é distribuído sob licença livre (GNU/GPLv3), o código-fonte está disponível gratuitamente em GitHub⁵. Este programa é distribuído gratuitamente, sem qualquer garantia. O autor deste programa não pode ser responsabilizado por avarias, erros e outros problemas que possam ser encontrados.

2 Pré-requisitos

Alguns programas devem ser instalados para que o PySerSpec funcione:

1. Python: versão 3.4 ou superior.
2. Matplotlib.
3. PySerial.

Esses programas estão disponíveis em seus sites oficiais (consulte as notas de rodapé para obter os links).

NB: lembre-se de instalar também as dependências destes programas: pytz, cycpler, six, python-dateutil, numpy, pyparsing.

3 Uso

3.1 Primeiros passos

Para iniciar o aplicativo, execute **PySerSpec.py**.

Por exemplo, sob GNU/Linux:

```
python PySerSpec.py
```

1 https://extranet.fisher.co.uk/webfiles/fr/Pjointes/Mdemploi/SHI001_FR%20SPECTROPHOTOMETER%201240.pdf

2 <https://www.python.org/download/releases/3.4.0/>

3 <http://matplotlib.org/> 4 <https://pythonhosted.org/pyserial/> 5 <https://github.com/paulbnjl/PySerSpec>

3.2 Escolha da porta serial

O primeiro menu que aparece permite definir a porta serial à qual o espectrofotômetro está conectado.

```
##### CONFIGURAÇÕES DA PORTA ##### # ###
```

Selecione a porta serial conectada ao espectrofotômetro:

- 1: COM1
- 2: COM2
- 3: COM3
- 4: COM4
- 5: /dev/ttyS0 (GNU/Linux) 6: /dev/
ttyUSB0 (GNU/Linux)
- 7: Outra porta (especificar)
- 8: Sair

As interfaces COM1 a COM4 são específicas para sistemas Microsoft Windows®. As interfaces /dev/** são específicas para sistemas Unix (GNU/Linux, *BSD, MacOS).

Normalmente, /dev/ttyS* corresponde a uma verdadeira interface serial, enquanto /dev/ttyUSB* corresponde a uma interface serial do adaptador USB. No GNU/Linux, a maneira mais fácil de conhecer sua interface é, após conectar o cabo serial, consultar as referências do sistema: dmesg

No Microsoft Windows®, consulte o gerenciador de dispositivos.

Finalmente, é sempre possível especificar uma porta usando a opção "7: outra porta (especificar)".

Se a porta selecionada estiver correta, o menu deve aparecer, precedido pelas seguintes

```
mensagens: Interface selecionada: /dev/ttyUSB0 Porta aberta.
```

```
A porta selecionada parece estar OK!
```

3.3 Menu principal

O menu principal dá acesso a todas as funções do dispositivo: ajuste do modo (absorvância, transmitância, energia), da fonte de luz (somente para o modo de energia; lâmpada de deutério para a zona UV-visível, tungstênio-iodo para infravermelho), ganho (apenas para modo de energia; ganho variável, de 1 a 6), tempo de acumulação de dados.

```
##### MENU PRINCIPAL ##### # ###
```

- 1: Moda
- 2: Fonte de luz
- 3: Ganho
- 4: Tempo de acumulação de dados
- 5: Scan (valor único)
- 6: Varredura (espectro)
- 7: Escanear (tempo)
- 8: FUNÇÕES NÃO TESTADAS
- 9: Sair

As opções 5, 6, 7 correspondem aos diferentes modos de medição. Eles serão discutidos mais adiante no documento.

A opção 8 corresponde às funções relativas aos vários multitanques e sippers adaptáveis à máquina. Estes não foram testados devido à falta de equipamento.

3.4 Medição única (medição – valor único)

O cardápio fica assim:

```
##### MEDIDA (SINGLE) #####  
1: Em branco  
2: Defina o comprimento de onda (autônomo)  
3: Valor lido  
4: Menu principal  
5: Sair
```

"Definir branco" permite definir um branco de amostra. O branco foi feito se a máquina emitir um som.

"Definir comprimento de onda" permite definir um comprimento de onda, que será armazenado na memória do dispositivo.

```
Insira o comprimento de onda (nm) [padrão: 550nm]:  
779
```

"Read value" permite ler um valor de absorvância/transmitância/energia em um determinado comprimento de onda. Os resultados retornados são da forma:

```
Absorvância a 779,0 nm: 0,329  
Transmitância a 779,0 nm: 46,9  
Energia a 779,0 nm: 0,6
```

Nota: um arquivo .csv também é gerado na pasta /data do programa.

3.5 Medição de espectro (medição – varredura de espectro)

Este modo permite a medição de valores de absorvância/transmitância/energia em uma ampla faixa de comprimentos de onda (190 a 1100 nm).

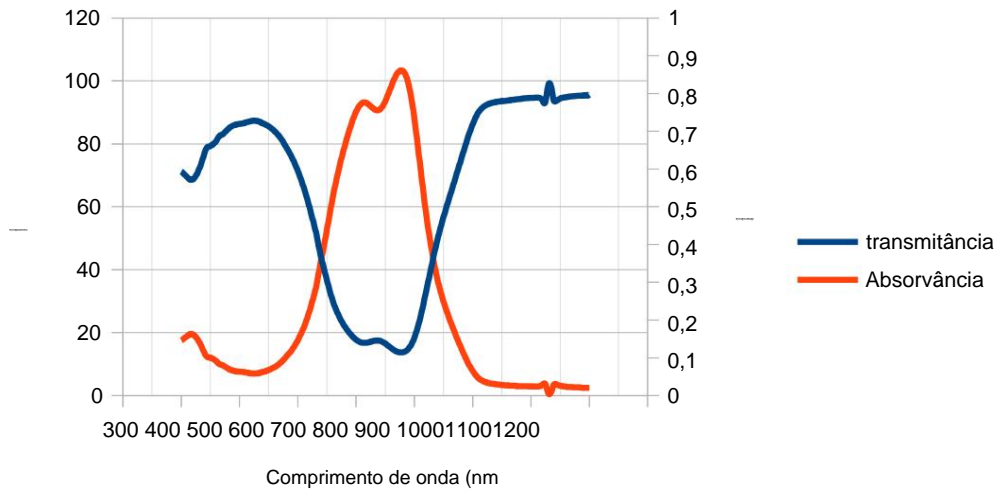
```
Digite o maior comprimento de onda (nm): 1100  
Insira o menor comprimento de onda (nm): 400
```

Vários elementos estão disponíveis:

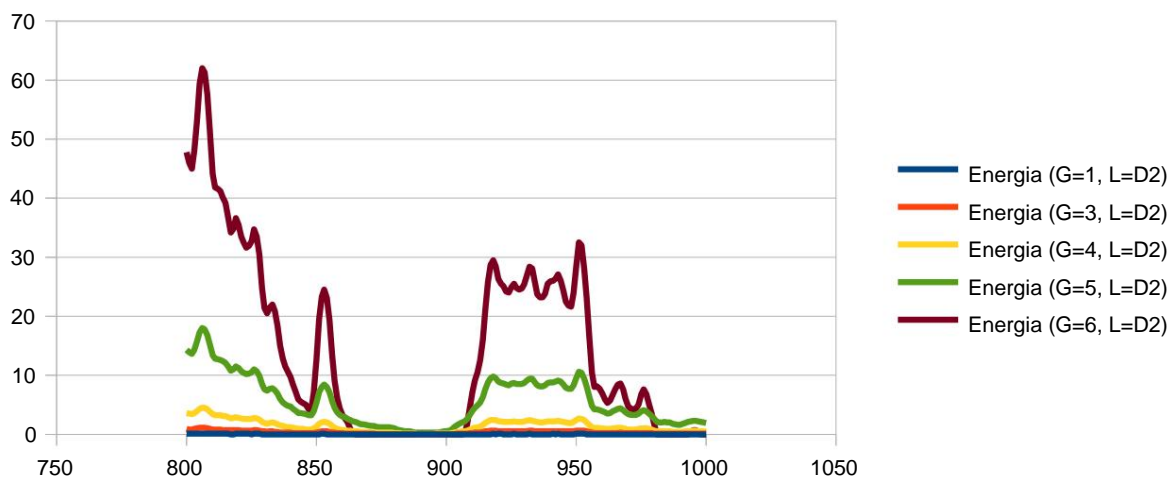
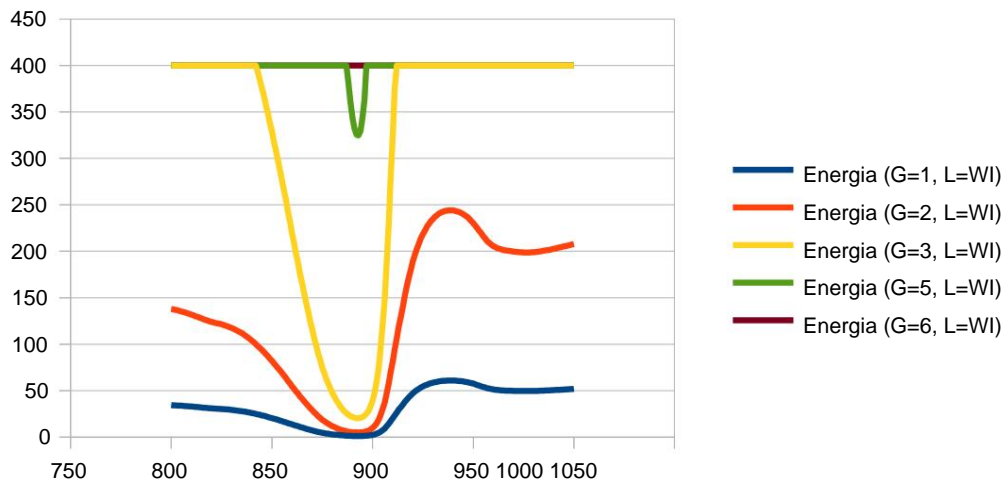
```
1: Definir em branco (correção da linha de base)  
2: Definir faixa de comprimento de onda (autônomo)  
3: Ler espectro  
4: Menu principal  
5: Sair
```

A opção "correção de linha de base" permite medir um branco em uma determinada faixa de comprimento de onda, que será levada em consideração posteriormente pelas medições (opção "leitura").

NB: a execução da "correção da linha de base" leva pelo menos 10 minutos.



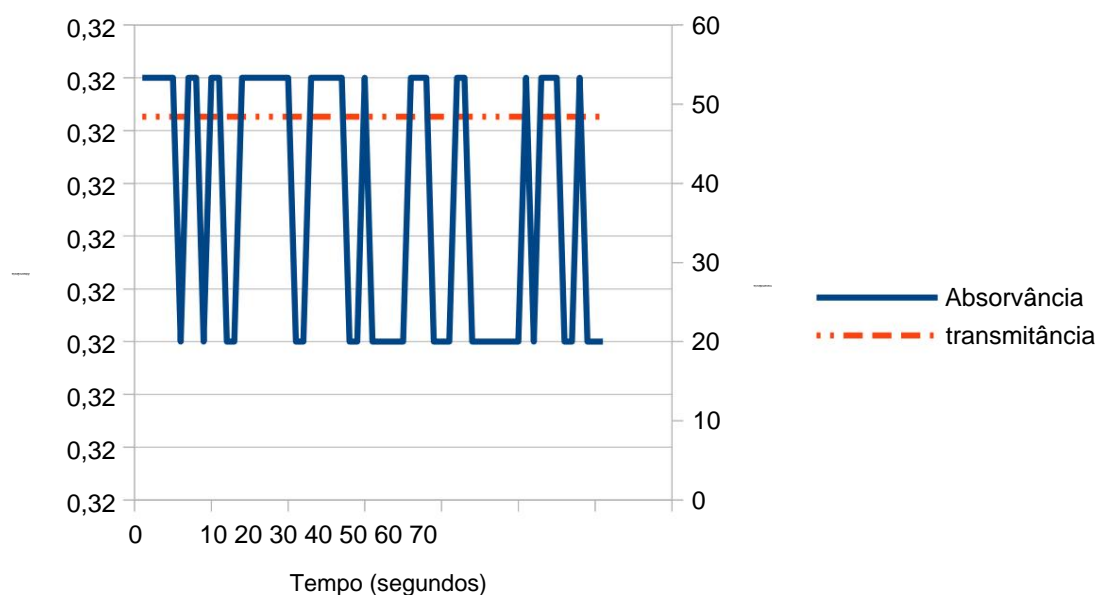
NB: o ajuste do ganho e da fonte de luz só tem influência no modo de energia.



3.6 Medição de tempo (medição – varredura de tempo)

Este modo é usado para medir valores de absorvância/transmitância/energia ao longo do tempo para um comprimento de onda fixo. A unidade é o segundo (no máximo 6500) ou o minuto (no máximo 108). O número de pontos de medição depende da unidade e do intervalo escolhido:

1. Para uma escolha em minutos, um ponto será registrado a cada minuto.
2. Para uma escolha em segundos:
 1. 1 a 10 segundos: um ponto a cada 0,1 segundos.
 2. 10 a 100 segundos: um ponto por segundo.
 3. 100 a 500 segundos: 50 pontos.
 4. Mais de 500 segundos: 10 pontos.



Obs: o espectrofotômetro é mais sensível em absorvância do que em transmitância, como pode ser visto na imagem anterior onde a absorvância oscila entre dois valores quando a transmitância permanece fixa.

4 Gravação de dados

Cada medição é registrada. O programa pedirá sistematicamente para definir um nome para cada um. Os arquivos gerados (no formato csv) são colocados na pasta /data do programa.

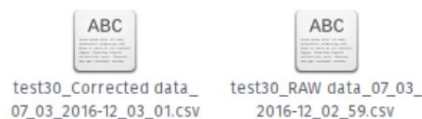
Salvando dados...

Digite um identificador (primeiro para csv de dados brutos, depois csv de dados corrigidos):
 test_abs_ex Digite um identificador (primeiro para csv de dados brutos, depois csv de dados corrigidos): test_abs_ex Dados salvos.

Os dados são registrados em colunas e são facilmente importados com uma planilha clássica (Microsoft Excel®, cálculo LibreOffice).

7	5 0.305	
8	6 0.305	
9	7 0.305	
10	8 0.305	
11	9 0.305	
12	10 0.305	
13	11 0.306	
14	12 0.306	
15	13 0.306	
16	14 0.306	
17	15 0.306	
18	16 0.306	
19	17 0.305	
20	18 0.305	
21	19 0.305	
22	20 0.305	
23	####	
24	Gain :	3
25	Light Source :	D2 lamp
26	Mode :	Absorbance
27	Time :	07/03/2016-13:12:46
28	####	
29		
30		
31		

Dois arquivos são gerados a cada vez: um arquivo "bruto" com a saída de dados brutos do dispositivo e um arquivo "corrigido", levando em consideração o espaço em branco (ou seja: todos os valores negativos retornados pelo dispositivo são zerados).

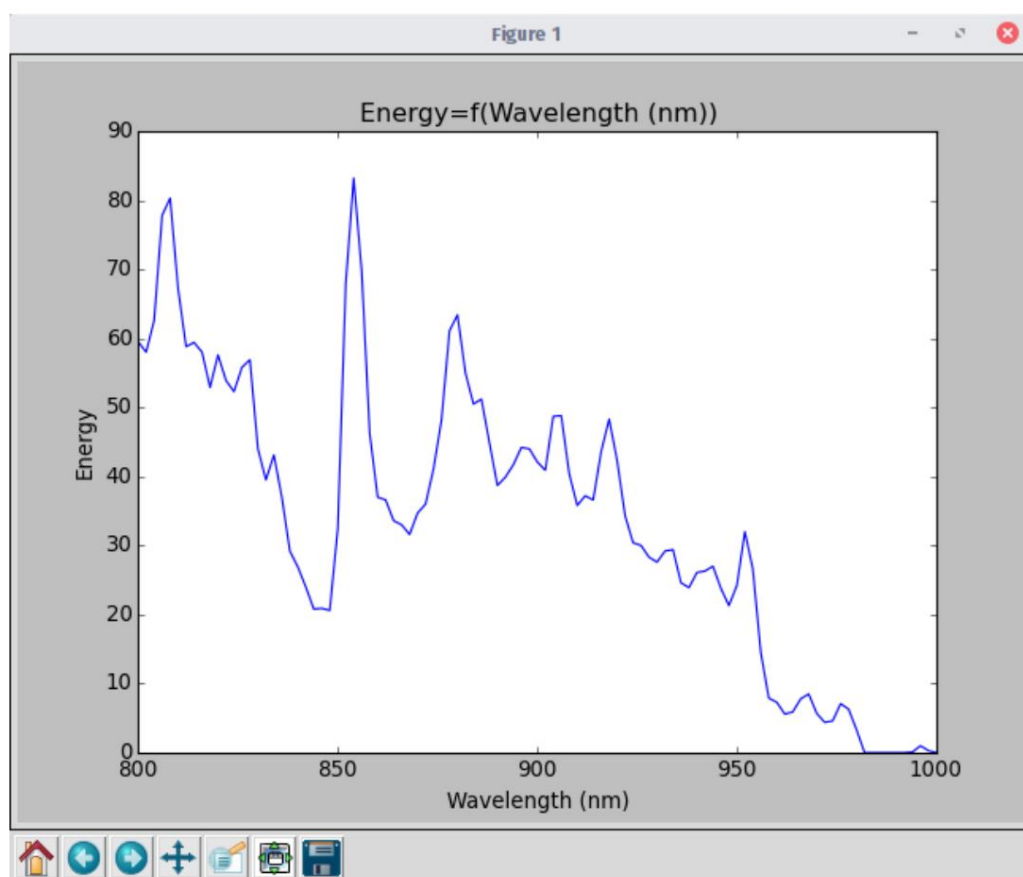


5 Geração de curvas

Após cada medição de espectro ou tempo, o programa oferece a plotagem de curvas a partir dos dados brutos e corrigidos.

Plotar dados corretos? S/N Plotar
dados brutos? S/N

NB: a recusa não bloqueia o registo dos dados. As curvas podem ser traçadas posteriormente a partir dos dados gerados, utilizando uma planilha convencional.



6 Bugs e Limitações Conhecidos

Emitir	Tipo	Solução
A porta serial selecionada está correta, mas o programa se recusa seu uso.	Erro	Tente novamente selecionar a porta (muitas vezes, após uma primeira falha, selecionar a porta correta na primeira vez não funciona). Desligue o computador, verifique se a porta serial está conectada, reinicie e tente novamente.
O programa permanece preso em ENQ ou ACK.	Erro	Saia do modo F4 na máquina e feche o programa e tente novamente. Se a máquina não puder sair do modo F4, sua memória está cheia. Neste caso, desligue-o, espere pelo menos dois minutos e reacender.
Mudar o ganho não muda nada absorção ou transmitância.	Limitação de máquina	A definição do ganho é considerada apenas no modo de energia.
Mudar a fonte de luz não muda nada na absorção ou transmitância.	Limitação de máquina	A definição da fonte de luz só é considerada no modo de energia.
A medição no modo de energia satura a máquina.	Escolha implementação questionável	É necessário definir o ganho e a fonte de luz antes de qualquer medição no modo de energia.
Sair do programa e reiniciá-lo não restaura as opções padrão.	Escolha implementação questionável	Desligar a máquina restaura as configurações padrão (modo de absorção em particular). Caso contrário, ajuste cada parâmetro através do menu principal.
Uma função de vários tanques e/ou sipper, não funciona.	Implementação não testada	/
Os dados exportados em CSV não podem ser usados para desenhar gráficos no LibreOffice (versão Francês).	Escolha implementação questionável	Substitua o " - " por ", ".
A opção "tempo de acumulação de dados" é inútil.	Escolha implementação questionável	A velocidade e o tamanho do passo foram codificados e são fixos. A escolha feita foi levar a maior velocidade possível para uma determinada etapa de medição.
Não é possível definir com precisão a etapa de medição ou a velocidade de operação.	Escolha implementação questionável	O passo de medição e a velocidade dependem do intervalo de medição. Não há muita liberdade de escolha com parâmetros, então foi decidido codificá-los de acordo com o intervalo de comprimento de onda medido. Para uma etapa de medição selecionada, a velocidade de operação é sistematicamente a mais alta possível para este durar.
Medir a absorbância no tempo dá uma alternância entre dois valores.	Limitação de máquina	O sensor do espectrofotômetro é pouco estável e oscila, em baixa absorbância, entre dois valores próximos (menos de 0,005% de diferença).
O programa termina com "ESC" ou "NAK".	erro de máquina	A máquina se recusa a processar um pedido. Motivos possível: satura, é bloqueado em um comando inserido anteriormente. Nesse caso, tente medir novamente e, na pior das hipóteses, reinicie a máquina.