

# Tutorial para processamento dos dados da leitura de CDOM

## I. Preparando a tabela com as medidas

Para iniciar o processamento, é preciso que a tabela com os dados de saída do espectrofotômetro tenha 1 nm de resolução espectral, caso não esteja (Fig. 1a), é necessário interpolar. Esse ajuste pode ser feito em ambiente R (*script* já disponível na pasta das rotinas) com a tabela original em formato “.csv”. A tabela interpolada deve ser salva em formato “.txt”, com decimal separado por ponto (.) (Fig. 1b).

a)

Wavelength nm.	Billings Ar 1 vs Ar 1	Billings Agua 1 vs Agua 1	Billings Amostra 01 vs Agua 1	Billings Amostra 02 vs Agua 1	Billings Amostra 03 vs Agua 1	Bil
220,00	-0,000	0,001	3,919	3,911	3,880	3,926
221,00						3,717
222,00	0,000	0,001	3,849	3,843	3,877	3,817
223,00						2,344
224,00	-0,000	-0,000	3,539	3,516	3,558	3,607
225,00						2,278
226,00	0,000	0,000	3,109	3,040	3,104	3,165
227,00						2,214
228,00	-0,001	0,000	2,639	2,594	2,635	2,688
229,00						2,151
230,00	-0,001	0,001	2,270	2,215	2,231	2,269

b)

wavelength_nm	Billings Agua 1 vs Agua 1	Billings Amostra 01 vs Agua 1	Billings Amostra 02 vs Agua 1
220 0.0010	3.9190	3.9110	3.8800
221 0.0010	3.8840	3.8770	3.8785
222 0.0010	3.8490	3.8430	3.8770
223 0.0005	3.6940	3.6795	3.7175
224 0.0000	3.5390	3.5160	3.5580
225 0.0000	3.3240	3.2780	3.3310
226 0.0000	3.1090	3.0400	3.1040
227 0.0000	2.8740	2.8170	2.8695
228 0.0000	2.6390	2.5940	2.6350
229 0.0005	2.4545	2.4045	2.4330
230 0.0010	2.2700	2.2150	2.2310

**Fig. 1:** Tabela de dados original com resolução espectral de 2 nm (a) e tabela interpolada para 1 nm (b).

Com a tabela já interpolada, ela deve ser organizada com as colunas na sequência: **wavelength, branco, amostras, branco**. Não é necessária a inclusão de uma coluna de leitura do ar. O branco se refere à leitura “água vs água” feita no espectrofotômetro (Tabela 1).

É importante que a tabela seja dividida em grupos de amostras de mesmo tamanho entre os “brancos”. Por exemplo, se foram coletadas 15 amostras, poderão ser feitos 3 grupos de 5 amostras entre brancos ou 5 grupos de 3 amostras. É importante ter atenção à essa formatação, pois ela vai definir uma modificação essencial no código.

**Tabela 1:** Exemplo de formatação da tabela de entrada para processamento do CDOM em Matlab.

wavelength	Branco1	Amostra1	Amostra2	Amostra3	Branco2	Amostra4	Amostra5	Amostra6	Branco3
220	0	3.602	3.563	3.69	0	3.651	3.649	2.681	0
221	0	3.4268	3.3722	3.5164	0	3.4644	3.4696	2.514	0
...	0	3.2516	3.1814	3.207	0	3.2778	3.2902	2.347	0
800	0	0.003	-0.001	-0.003	0	0.002	0.003	0.002	0

A amostra de branco deve ser escolhida pelo usuário, levando em consideração o dado mais estável. Se assim optar, também poderá utilizar uma média dos brancos entre os grupos de leituras que foram feitas no espectrofotômetro (Fig. 2). Recomenda-se que se use o primeiro

branco como “branco1” (indicado por 1 na Fig. 2); o segundo branco pode ser uma média entre os grupos 2 e 3 ou somente 3; e o último branco uma média do grupo 4.

```

3 Cubeta UV - UV para a direita
4
5 Tarde 1
6
7 Zerado Ar
8 Baseline Billings_Ar_1
9 Billings_Ar_1_vs_Ar_1
10 Baseline Billings_Agua_1
11 Billings_Agua_1_vs_Agua_1 1
12 Billings_Amostra_P20_vs_Agua_1_cubetaUV
13 Billings_Amostra_P19_vs_Agua_1_cubetaUV
14 Billings_Amostra_P02_vs_Agua_1_cubetaUV
15 Billings_Amostra_P03_vs_Agua_1_cubetaUV
16 Billings_Amostra_P12_vs_Agua_1_cubetaUV
17 Billings_Agua_2_vs_Agua_1_cubetaUV
18 Billings_Agua_3_vs_Agua_2_cubetaUV 2
19 Billings_Agua_4_vs_Agua_3_cubetaUV
20
21 Zerado Ar
22 Baseline Billings_Ar_1A
23 Billings_Ar_1A_vs_Ar_1A
24 Baseline Billings_Agua_1A
25 Billings_Agua_1A_vs_Agua_1A 3
26 Billings_Amostra_P01_vs_Agua_1A_cubetaUV
27 Billings_Amostra_P17_vs_Agua_1A_cubetaUV
28 Billings_Amostra_P18_vs_Agua_1A_cubetaUV
29 Billings_Amostra_P09_vs_Agua_1A_cubetaUV
30 Billings_Amostra_P21_vs_Agua_1A_cubetaUV
31 Billings_Agua_5_vs_Agua_4_cubetaUV
32 Billings_Agua_6_vs_Agua_5_cubetaUV 4
33 Billings_Agua_7_vs_Agua_6_cubetaUV
34

```

**Fig. 2:** Exemplo de "branco" a serem utilizados entre os grupos de amostras separadas para entrada na rotina de processamento do CDOM.