

Manual de **U**suario

MOLABS

Preparado por: Josué Arrieta Salas Adrián López Quesada Seth Stalley

Enero 11, 2017

Hoja de Revision

Version	Fecha	Descripción de la revisión
Version 1.0	06/01/17	Creación del manual de usuarios
Version 2.0	11/01/17	Modificación con nuevas funcionalidades y estándares.

Contenido

1.0	Información General	6
1.1	Resumen del Sistema	6
2.0	Resumen del sistema	8
2.1	Configuración del sistema	8
2.2	Niveles de acceso de los usuarios	8
3.0	Uso del sistema	10
3.1	Inicio de sesión	10
3.2	2 Agregar Archivos	11
3.2	2 Observar Carpeta	13
3.2	2.1 Iniciar el Observador	14
3.2	2.1 Detener el Observador	16
3.3	Obtener Absorbancias	18
3.5	Ingresar concentración manual	19
3.6	6 Generar una calibración	19
3.7	Calcular una concentración	21
3.8	B Eliminar un Sample	22
3.9	Agregar un Sample	24
3.1	0 Eliminar Calibración	24
3.1	1 Eliminar Columna de concentración o absorbancia	25
3.1	1 Salir del programa	26
3.1	2 Copy/Paste	26
3.1	3 Exportación a excel	28
3.1	4 Guardar Proyecto	28
3.1	5 Cargar Proyecto	30
3.1	6 Graficación Manual	31
3.1	6 Exportación de gráficos	32
3.1	7 Manipulación de gráficos	33
4.0	Estándares	36
4.1	Archivo de texto con absorbancias	36
4.1	Ingreso de absorbancias	37

1.0 Información General

1.0 INFORMACIÓN GENERAL

1.1 Resumen del Sistema

El sistema MOLABS tiene como objetivo principal cuantificar las concentraciones de nitratos en muestras obtenidas por un hardware externo. Además, implementa funciones de análisis de datos y automatización en tiempo real de estos mismos datos, con el fin de reflejar cambios importantes en estas concentraciones a tiempo. El sistema permite una alta manipulación de los datos, siendo esta una de las mayores funcionalidades y fortalezas del mismo.

El sistema cuenta con un observador el cual se encarga de analizar los nuevos datos en tiempo real, estos se proyectan de forma visual en los gráficos y en las tablas de información. Para el sistema existen tres tipos de usuarios, los cuales tienen diferentes funcionalidades y privilegios según cada uno, estas diferencias se especificarán más adelante.

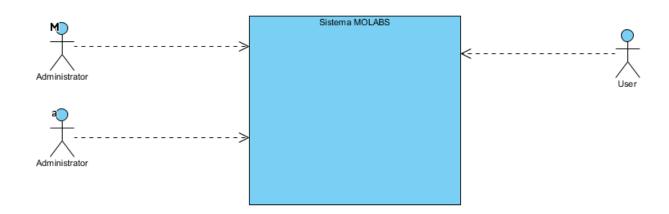
El sistema permite la graficación de datos para facilitar los cambios que se dan y ayudar a la visualización de diferentes datos. Además, permite la exportación de los datos por medio de un copiar y pegar, exportación a un archivo de excel y exportación de una imagen de los gráficos en diferentes formatos.

2.0 Resumen del sistema

2.0 RESUMEN DEL SISTEMA

2.1 Configuración del sistema

Cada empleado utiliza una computadora única con el sistema operativo Windows y el ejecutable con la versión mas nueva del sistema. El usuario debe tener un username y password en la base de datos para poder ingresar al sistema, por lo tanto, se deberá tener conexión a internet en todo momento para poder utilizar el sistema, esto por motivos de seguridad.



2.2 Niveles de acceso de los usuarios

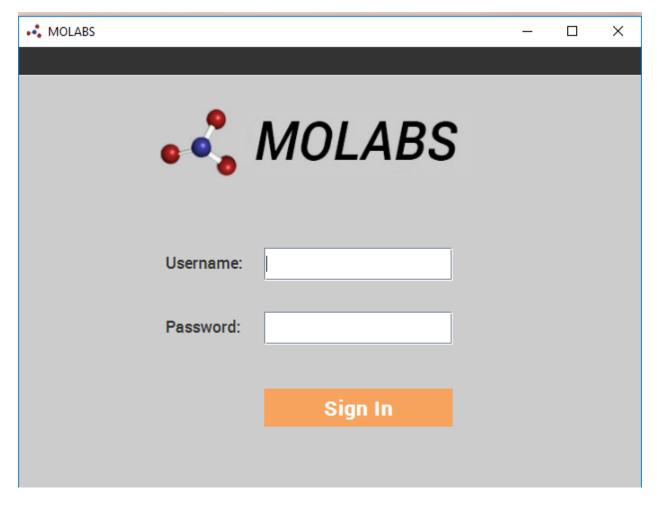
Existen tres tipos de niveles de usuarios, se describen a continuación en orden de mayor privilegios a menor: .

- Owner: el de mayores privilegios, puede manipular todos los datos y agregar nuevos users, administrator u owners.
- Administrator: puede manipular los datos y crear nuevos users
- Users: Solo pueden visualizar los datos de un safe file.

3.0 Uso del sistema

3.0 USO DEL SISTEMA

3.1 Inicio de sesión



Al iniciar el programa esta será la primera vista que se tendrá. Se debe ingresar el usuario y el password que se le asignó para poder ingresar. Posteriormente se le da click en el botón de Sign In para que el sistema pueda verificar que sus credenciales fueron correctas

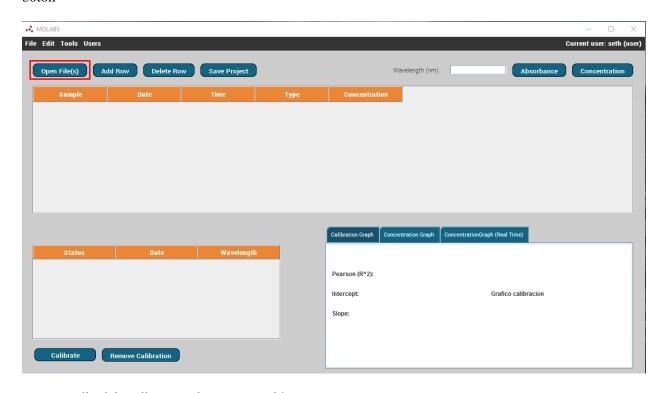
(TIP: se puede presionar la tecla ENTER del teclado en lugar de hacerle click)

En caso de que no ingrese correctamente sus credenciales obtendrá la siguiente pantalla:

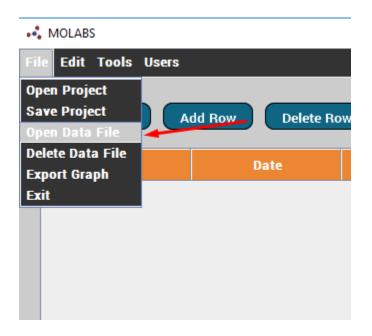


3.2 Agregar Archivos

Cuando ya ha ingresado con el usuario respectivo, se le presenta la pantalla base del sistema, la mayoría de las funcionalidades se llevarán a cabo en esta pantalla. Para agregar archivos se debe presionar este botón

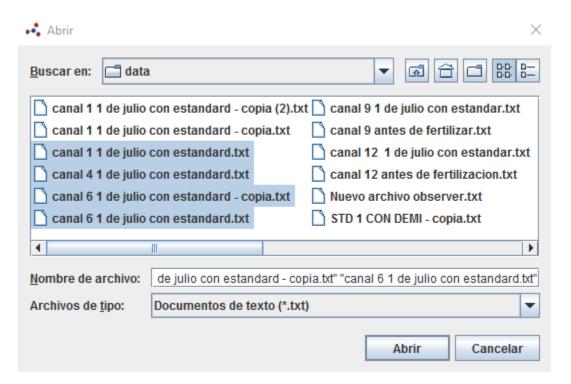


o por medio del toolbar acceder a esta opción:



El sistema le abrirá un explorador de archivos para que seleccione el o los archivos que desee cargar.

(TIP: Puede seleccionar más de un archivo con la tecla shift y el sistema los cargara, no tiene que ir de uno en uno)



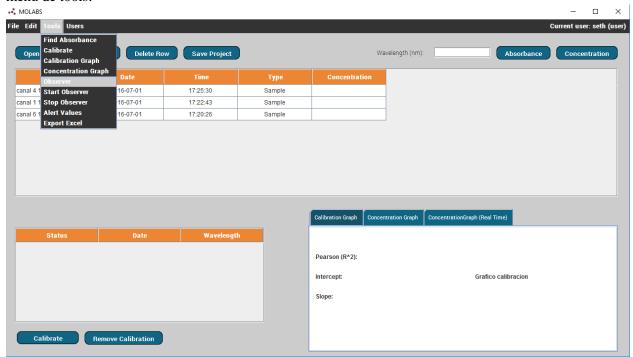
Tras haber realizado este paso, su tabla principal debería tener los datos básicos de el o los archivos que seleccionó.



(TIP: si ya se tienen columnas de absorbancias o concentraciones calculadas al cargar nuevos archivos se calculan estos datos automáticamente.)

3.2 Observar Carpeta

Para que el sistema esté cargando archivos en tiempo real se debe especificar una carpeta en la cual estarán llegando los nuevos archivos. Estos archivos se irán cargando al sistema conforme se van agregando a la carpeta. Para iniciar se debe ir a la ventana del Observer, que puede ser accedida por el menú de tools:



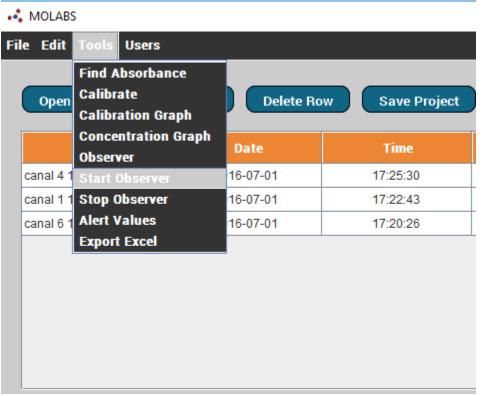


En esta nueva pantalla se puede iniciar y detener el observer o también elegir la carpeta a observar por medio del botón browse. Después de seleccionar la carpeta el sistema mostrará lo siguiente:

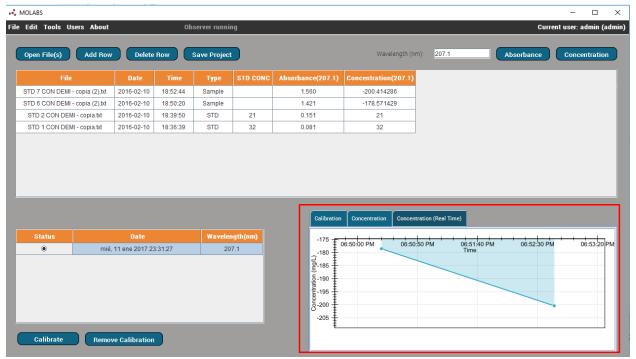


3.2.1 Iniciar el Observador

En la misma pantalla anterior se puede presionar el botón Start para iniciar el observador. También se puede hacer por medio del menú de Tools:



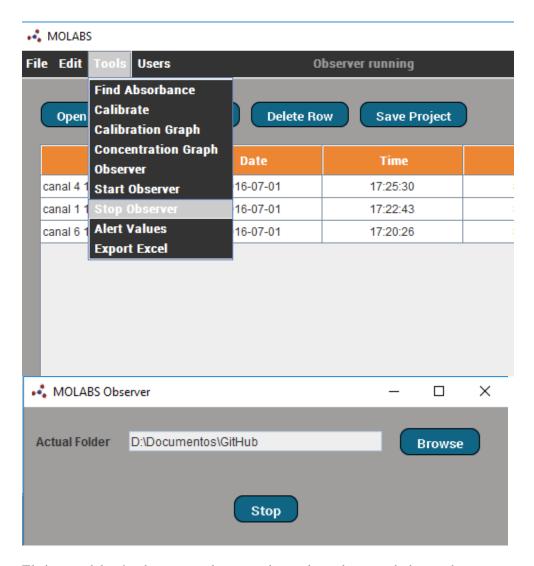
Cabe destacar que la apariencia cambia de color y un tag aparece en la parte superior de la pantalla para reflejar que el observador está corriendo.



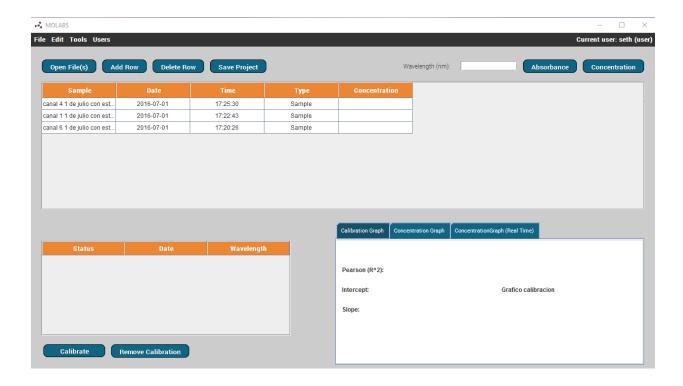
(TIP: En la tercer pestaña de los gráficos se despliega un gráfico con las nuevas absorbancias agregadas por el observador)

3.2.1 Detener el Observador

Hay dos maneras de detener el observado. La primera es por medio del menú de herramientas y la segunda desde la ventana del observador.

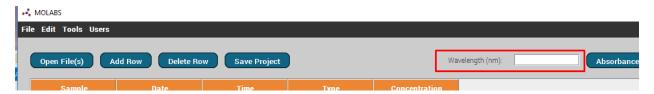


El sistema deberá volver a su color normal cuando se detenga el observador



3.3 Obtener Absorbancias

Cuando se quiera obtener una absorbancia de cualquier archivo ingresado en el sistema se debe ingresar el valor de la longitud de onda (tres dígitos, un punto, y otro dígito es el formato) en el siguiente campo:



Después se presiona el botón Absorbance



y una nueva columna de absorbancia deberá aparecer en su tabla, con los valores respectivos por cada archivo.

Sample	Date	Time	Туре	Concentration	Absorbance(207.1)
canal 4 1 de julio con est	2016-07-01	17:25:30	Sample		0.663
canal 1 1 de julio con est	2016-07-01	17:22:43	Sample		0.863
canal 6 1 de julio con est	2016-07-01	17:20:26	Sample		0.718

(TIP: Se puede presionar la tecla enter en lugar del botón absorbance para generar esta columna)

3.5 Ingresar concentración manual

Cada sample tiene un tipo, puede ser Sample o STD, para poder generar las calibraciones se deben ingresar valores manuales, estos son de tipo STD. Cuando ya se tienen Samples ingresados, al escribir una concentración en el campo de la columna STD CONC se cambia automáticamente el tipo a STD para identificarlo y lograr hacer las calibraciones.

Sample	Date	Time	Туре	STD CONC	Absorbance(20
canal 4 1 de julio con estandard.txt	2016-07-01	17:25:30	Sample		0.663
canal 1 1 de julio con estandard.txt	2016-07-01	17:22:43	Sample		0.863

Sample	Date	Time	Туре	STD CONC	Absorbance(20
canal 4 1 de julio con estandard.txt	2016-07-01	17:25:30	STD	20	0.663
canal 1 1 de julio con estandard.txt	2016-07-01	17:22:43	STD	30	0.863

3.6 Generar una calibración

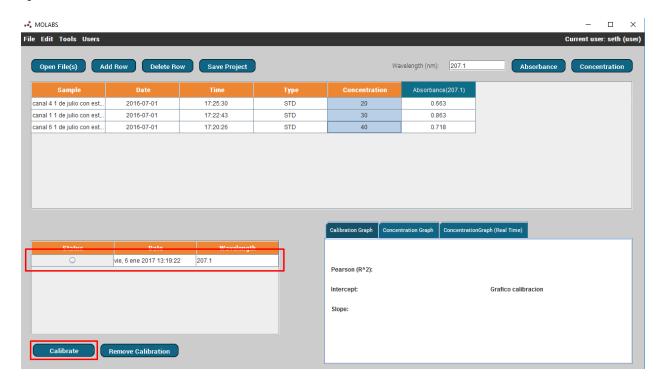
Cuando ya se tengan los valores de concentración en al menos dos samples se puede generar una calibración primero se deben seleccionar los archivos que se deseen usar para la calibración, puede seleccionar cualquier o varias columnas

Sample	Date	Time	Туре	Concentration	Absorbance(207.1)
canal 4 1 de julio con est	2016-07-01	17:25:30	STD	20	0.663
canal 1 1 de julio con est	2016-07-01	17:22:43	STD	30	0.863
canal 6 1 de julio con est	2016-07-01	17:20:26	STD	40	0.718

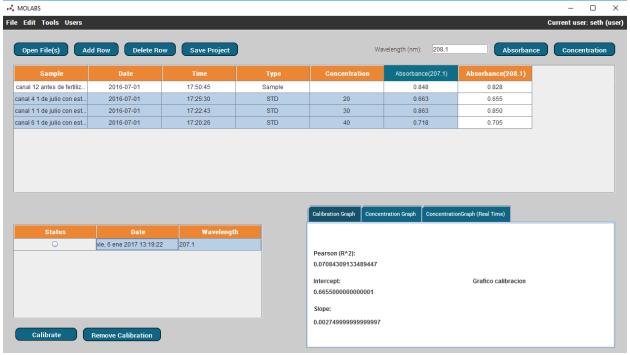
Después se debe seleccionar el nombre/columna de la absorbancia que se va a utilizar para la calibración, ésta se resaltará en color azul.

Sample	Date	Time	Туре	Concentration	Absorbance(207.1)
canal 4 1 de julio con est	2016-07-01	17:25:30	STD	20	0.663
canal 1 1 de julio con est	2016-07-01	17:22:43	STD	30	0.863
canal 6 1 de julio con est	2016-07-01	17:20:26	STD	40	0.718

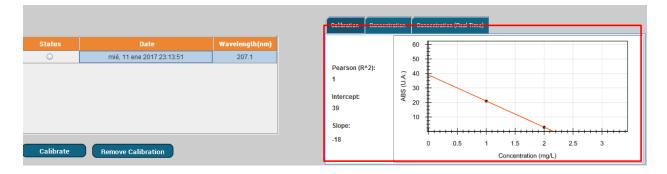
Después de estar seguro de sus selecciones, puede presionar el botón de Calibrate y la nueva calibración aparecerá en la tabla inferior.



(TIP: en caso de que se olvide que valores utilizó para la calibración, si selecciona una fila de las calibraciones esta le resaltará en la tabla principal los valores utilizados).



(TIP: al seleccionar una calibración, a la derecha muestra los de correlación obtenidos de las muestras y su gráfico respectivo)

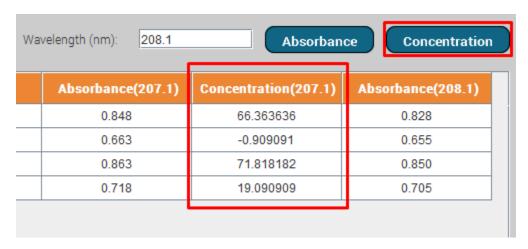


3.7 Calcular una concentración

Cuando se tenga una calibración lista, en lugar de ingresar los valores de concentración de manera automática se puede calcular en base a una calibración. Para esto se debe seleccionar una calibración como activa por medio de botón en la primera columna de la tabla.

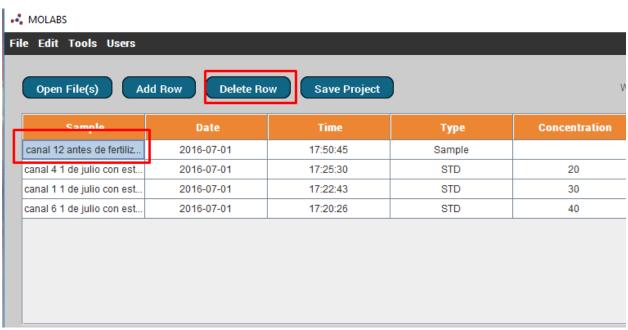
Status	Date	Wavelength
•	vie, 6 ene 2017 13:19:22	207.1
0	vie, 6 ene 2017 13:22:43	208.1

Posteriormente se presiona el botón Concentration y la nueva concentración aparecerá a la par de su absorbancia respectiva.



3.8 Eliminar un Sample

En caso de que no se requiera más información de un Sample, se selecciona su fila en cualquier cela y se presiona el botón Delete Row.



Posteriormente el sample deberá quitarse de la tabla.

Sample	Date	Time	Туре	Concentration
anal 4 1 de julio con est	2016-07-01	17:25:30	STD	20
anal 1 1 de julio con est	2016-07-01	17:22:43	STD	30
anal 6 1 de julio con est	2016-07-01	17:20:26	STD	40

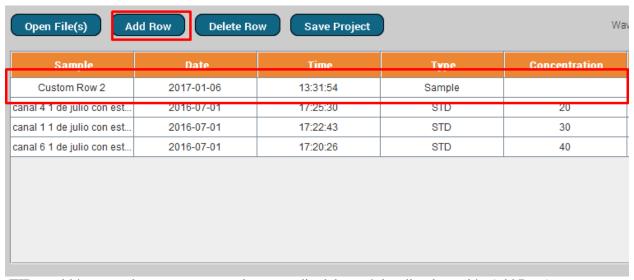
(TIP: también se puede realizar por medio del menú edit y la opción Delete Row)

MOLABS

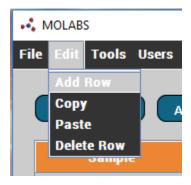


3.9 Agregar un Sample

Se debe seleccionar el botón Add Row y una nueva fila con el nombre Custom Row # se agregara.



(TIP: también se puede agregar un sample por medio del menú de edit y la opción Add Row)



3.10 Eliminar Calibración

Se puede eliminar una calibración al seleccionar de la tabla y presionar el botón de Remove Calibration

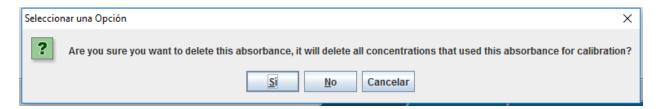
Status	Date	Wavelength
•	vie, 6 ene 2017 13:19:22	207.1
0	vie, 6 ene 2017 13:22:43	208.1
0	vie, 6 ene 2017 13:38:38	208.1
Calibrate	Remove Calibration	
Status	Date	Wavelength
•	vie, 6 ene 2017 13:19:22	207.1
0	vie, 6 ene 2017 13:22:43	208.1

3.11 Eliminar Columna de concentración o absorbancia

Se puede eliminar una columna de la tabla principal al hacerle click derecho sobre el nombre de la columna

Concentration	Absorbance(207.1)	Delete Absorbance	7.1)
20	0.663	-0.909091	
30	0.863	71.818182	
40	0.718	19.090909	

Una opción de eliminar aparecerá y si se selecciona aparecerá la siguiente pantalla para confirmar su elección, esto debido a que son datos de alta relevancia, en caso de un error.



Al presionar que si, la columna será borrada. Cabe destacar que si se borra una columna de absorbancia se borraran todas las de concentración que la utilicen.

Sample	Date	Time	Туре	Concentration
canal 4 1 de julio con est	2016-07-01	17:25:30	STD	20
canal 1 1 de julio con est	2016-07-01	17:22:43	STD	30
canal 6 1 de julio con est	2016-07-01	17:20:26	STD	40

3.11 Salir del programa

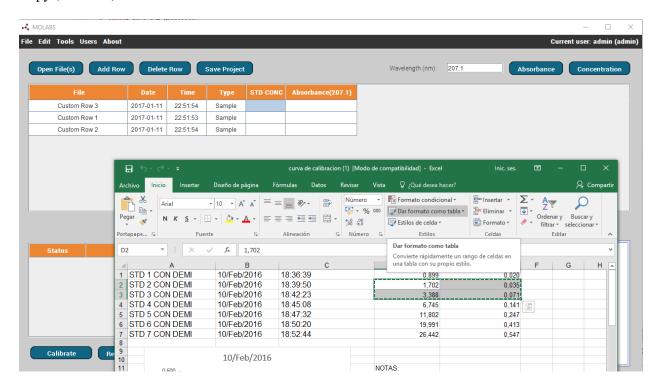
Para salir del programa solo se debe ingresar al menú file y darle la opción exit.



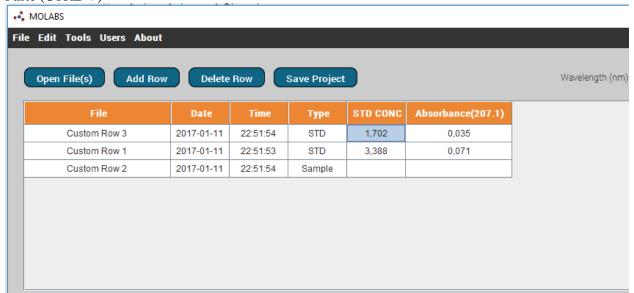
3.12 Copy/Paste

Por medio de la selección de las celdas de la tabla, es posible realizar un copy o paste de diferentes valores dentro de la misma tabla o hacia un archivo de excel. De esta manera si se tienen valores ya calculados en un excel se pueden copiar y pegar con el simple comando de ctrl-c y ctrl.v.

Copy (CTRL-C)

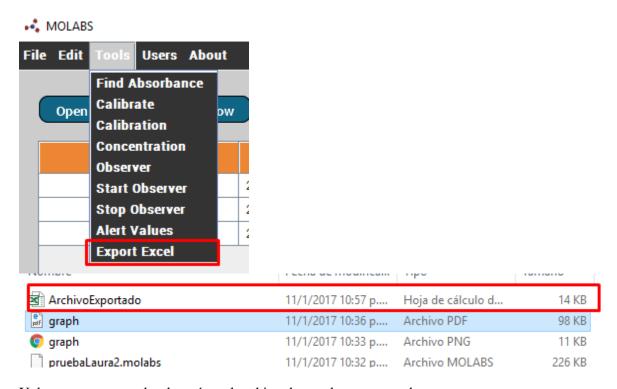


Paste (CTRL-V)



3.13 Exportación a excel

Para poder exportar sus datos de la tabla principal, puede realizar un copy paste desde la tabla a un documento de excel o puede utilizar el menú de tools y acceder a la opción *Export Excel*. De esta manera podrá seleccionar la ubicación y el nombre de su nuevo archivo.

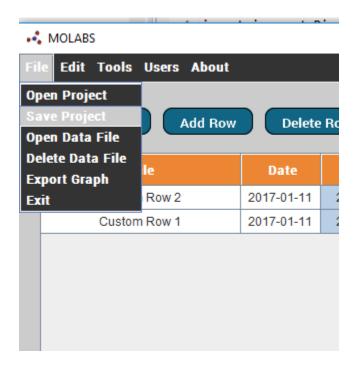


Y de esta manera se desplegará en el archivo de excel sus nuevos datos:

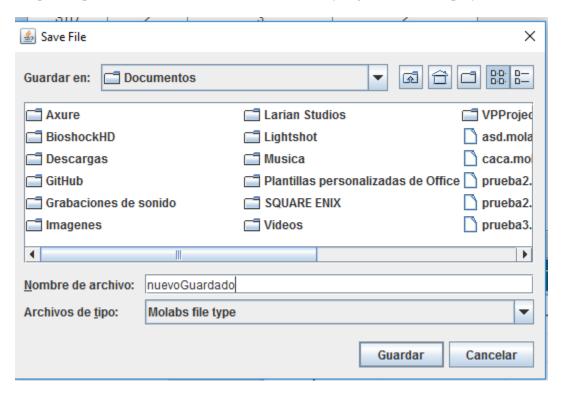
/ \	U	•		_	
<u>File</u>	<u>Date</u>	<u>Time</u>	Type	STD CONC	Absorbance(207.1)
Custom Row 3	Wed Jan 11 22:51:54 CST 2017	Wed Jan 11 22:51:54 CST 2017	STD	1,702	0,035
Custom Row 1	Wed Jan 11 22:51:53 CST 2017	Wed Jan 11 22:51:53 CST 2017	STD	3,388	0,071
Custom Row 2	Wed Jan 11 22:51:54 CST 2017	Wed Jan 11 22:51:54 CST 2017	Sampl		

3.14 Guardar Proyecto

Para guardar el proyecto debe elegir la opción File y save project del menu y submenu:

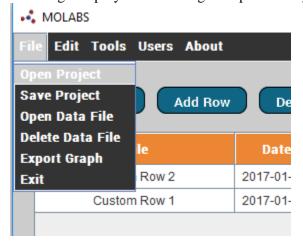


Después le permite seleccionar el nombre del archivo y seguir editando el proyecto:



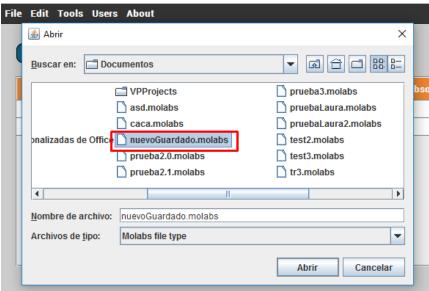
3.15 Cargar Proyecto

Para cargar el proyecto debe elegir la opción File y Open project del menu y submenu:



Tras esto debe seleccionar un archivo de tipo .molabs con el proyecto que desee volver a cargar y el sistema recuperará los datos.



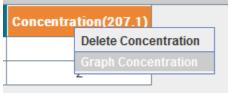


3.16 Graficación Manual

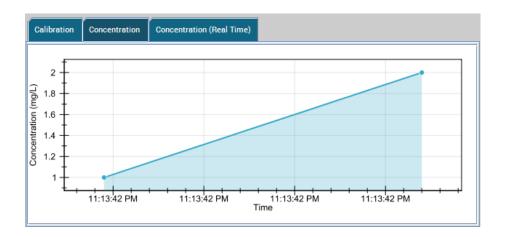
La segunda pestaña de los gráficos es para graficar de manera manual, para esto se deben seleccionar los archivos que se quieren graficar:

File	Date	Time	Туре	STD CONC
Custom Row 1	2017-01-11	23:13:42	STD	1
Custom Row 2	2017-01-11	23:13:42	STD	2

Después click derecho sobre la columna de concentración que se desee gráfica y seleccionamos la opción Graph Concentration:

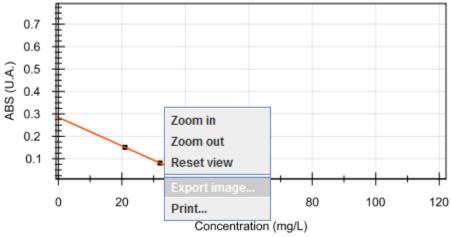


Finalmente, su gráfico aparecerá en la segunda pestaña, solo se puede graficar un gráfico y se cambia haciendo el mismo proceso:

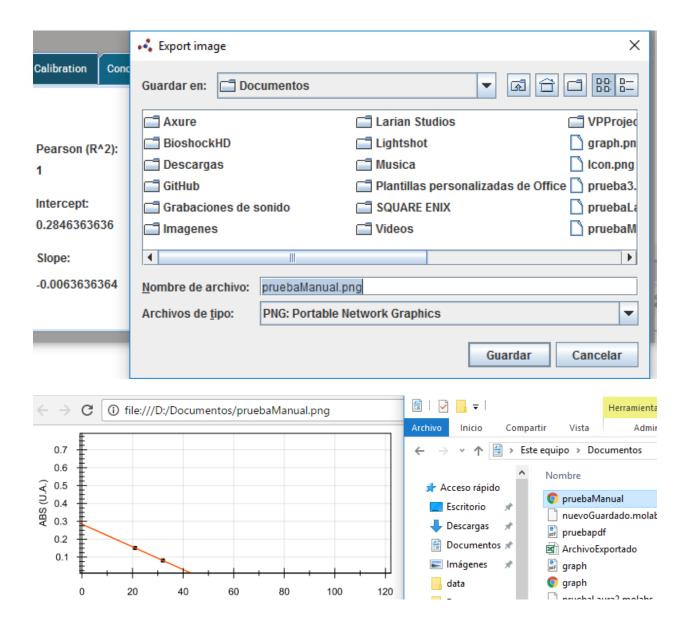


3.16 Exportación de gráficos

Cualquiera de las tres gráficas se puede exportar al realizar un click derecho sobre ellos:

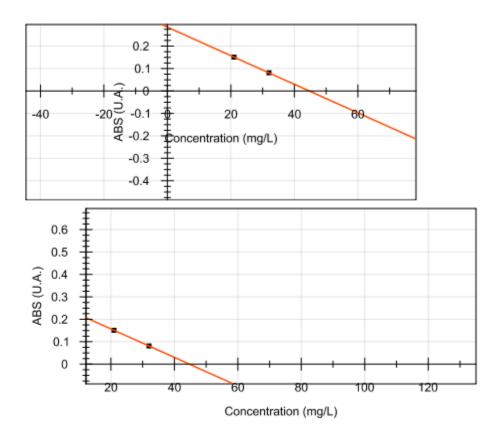


El menú anterior tiene diferentes opciones, incluyendo al de exportar. Al presionarla se debe indicar el nombre del archivo y su ubicación, después de esto el archivo queda guardado en la localización establecida.



3.17 Manipulación de gráficos

Todos los gráficos tienen control con el mouse, se puede incrementar su tamaño o moverse por los diferentes ejes para cambiar las vistas que se tienen.



4.0 Estándares

4.0 ESTÁNDARES

4.1 Archivo de texto con absorbancias

Estos archivos incluyen toda la información de las absorbancias tomadas de una muestra de agua, ordenadas por longitud de onda. Para que el archivo sea aceptado debe tener tres componentes:

El primero es el título con el nombre de la máquina, después un separador del header y al fecha de su creación con el formato observado anteriormente. Posteriormente siguen datos que no son importantes, pero al seguir un estándar de la máquina, pueden llegar a utilizarse en el futuro. Estos son:

User: lahernandez

Dark Spectrum Present: Yes Reference Spectrum Present: Yes

Number of Sampled Component Spectra: 1

Spectrometers: MAYP112250

Integration Time (usec): 100000 (MAYP112250)

Spectra Averaged: 30 (MAYP112250) Boxcar Smoothing: 0 (MAYP112250)

Correct for Electrical Dark: No (MAYP112250) Strobe/Lamp Enabled: No (MAYP112250)

Correct for Detector Non-linearity: Yes (MAYP112250)

Correct for Stray Light: No (MAYP112250) Number of Pixels in Processed Spectrum: 2068

Estos datos no son necesarios, por lo tanto, no se necesitan para aceptar el archivo. Después de estos datos deben aparecer las longitudes de onda seguidas de sus absorbancias respectivas, donde las separa un espacio en blanco de la siguiente manera:

189.52 -0.034

189.64 -0.020

189.76 -0.044

189.87 -0.031

189.99 0.101

190.11 0.402

190.23 0.708

190.34 0.774

190.46 0.790

190.58 0.794

190.70 0.799 190.81 0.806

4.1 Ingreso de absorbancias

El formato establecido para ingresar las diferentes absorbancias es el siguiente: ###.# De no ser así, no podrá ingresar datos de absorbancia.

Apéndice A: Glosario

Término	Definición	
Absorbancia	Es un concepto físico que corresponde a la medida en que refleja cuánto se atenúa la radiación al pasar por un objeto.	
Desviación Estándar	Es una medida estadística que estima que tanto se desvía un parámetro a partir del promedio de una población o muestra	
Nitratos	Es un compuesto químico que es comúnmente encontrado como contaminante en aguas.	
Pearson	Es un índice matemático que está entre [-1 y 1] que indica qué tan relacionadas están dos variables dadas.	
Sample	Su traducción directa es muestra. En este caso trata de representar una muestra de agua a la cual se le puede predecir la concentración de nitratos a partir de una calibración.	
STD	Es una abreviación para desviación estándar.	
Tiempo Real	Característica que ofrece la visualización de resultados de forma instantánea y en el momento en que ocurren.	
Wavelength	Es longitud de onda, y es la distancia entre las ondas de una ola dada.	