

Manual de Usuario

MOLABS

Preparado por:
Josué Arrieta Salas
Adrián López Quesada
Seth Stalley

Enero 6, 2017

Hoja de Revisión

Versión	Fecha	Descripción de la revisión
Versión 1.0	06/01/17	Creación del manual de usuarios

Contenido

1.	Información General	5
1.1	Resumen del Sistema	5
2.	Resumen del sistema.....	7
2.1	Configuración del sistema.....	7
2.2	Niveles de acceso de los usuarios	7
3.	Uso del sistema	9
3.1	Inicio de sesión	9
3.2	Agregar Archivos.....	10
3.2	Observar Carpeta	12
3.2.1	Iniciar el Observador.....	13
3.2.1	Detener el Observador	15
3.3	Obtener Observancias	16
3.5	Ingresar concentración manual	17
3.6	Generar una calibración	17
3.7	Calcular una concentración.....	19
3.8	Eliminar un Sample.....	20
3.9	Agregar un Sample	22
3.10	Eliminar Calibración.....	22
3.11	Eliminar Columna de concentración o absorbancia.....	23
3.11	Salir del programa.....	24
4.	Apéndice A: Glosario.....	25

1. Información General

1. 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.

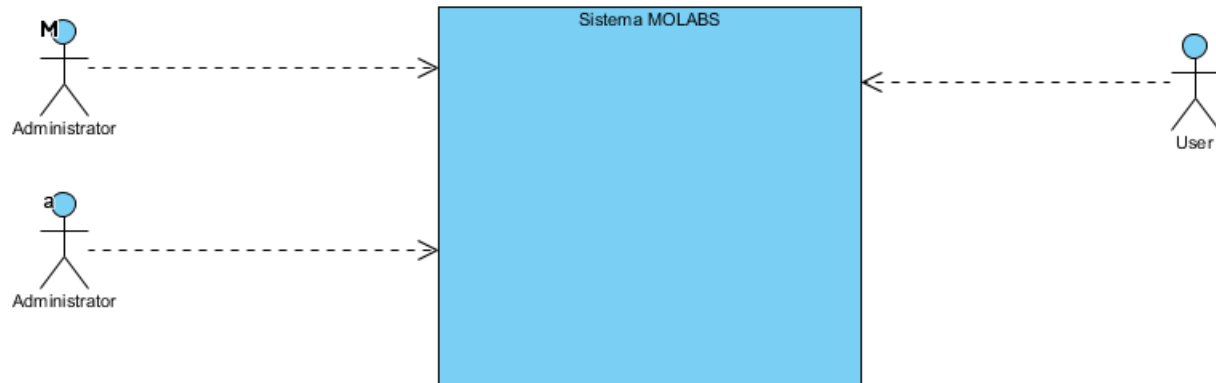
El sistema cuenta con un observador el cual se encarga de analizar los nuevos datos en tiempo real, estos se proyectan de forma visual en los gráficos y en las tablas de información. Para el sistema existen tres tipos de usuarios, los cuales tienen diferentes funcionalidades y privilegios según cada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

2 Resumen del sistema

2. RESUMEN DEL SISTEMA

2.1 Configuración del sistema

Cada empleado utiliza una computadora única con el sistema operativo Windows y el ejecutable con la version 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

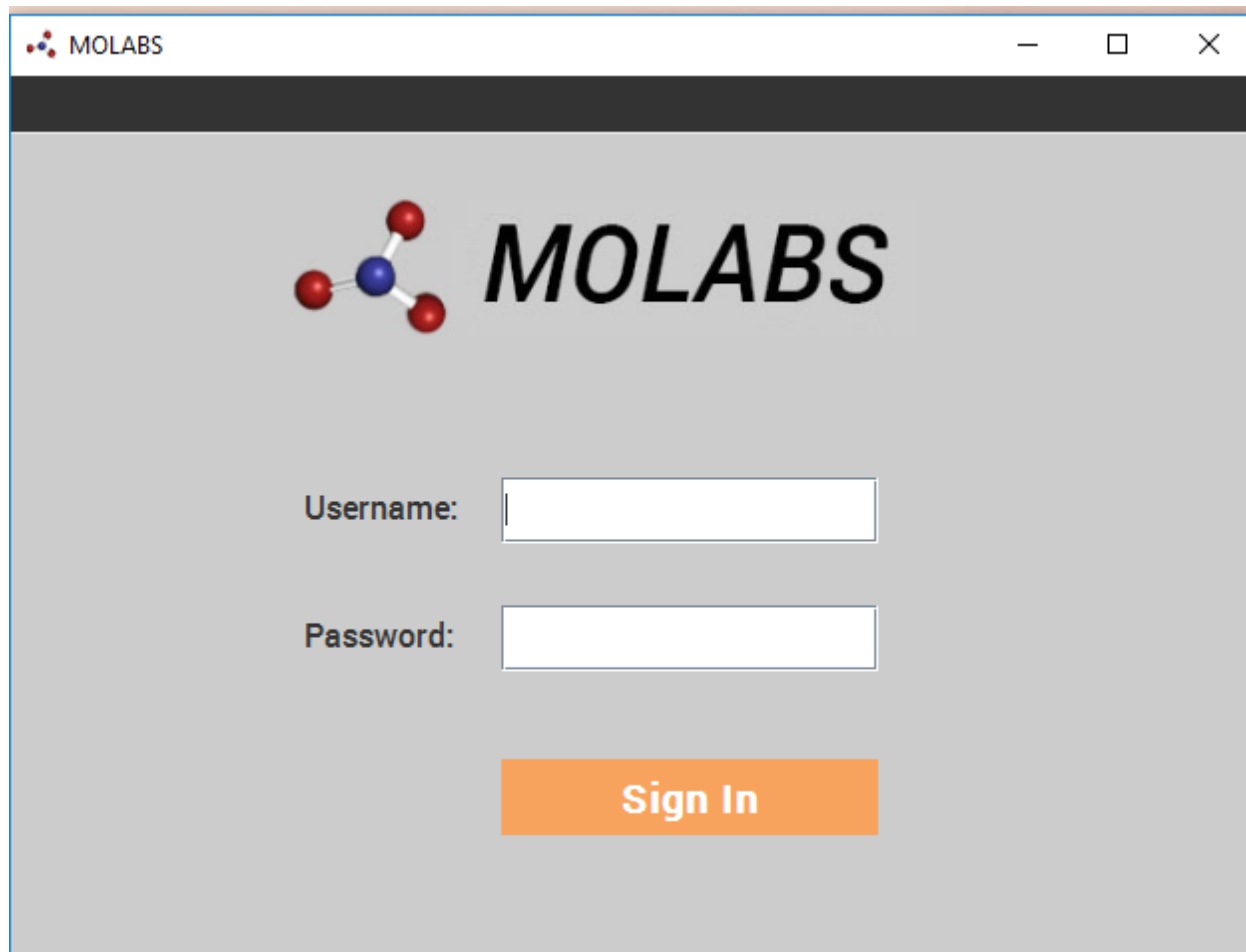
Existen tres tipos de niveles de usuarios, se describen a continuación en orden de mayor privilegios a menor:

- 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. USO DEL SISTEMA

3.1 Inicio de sesión

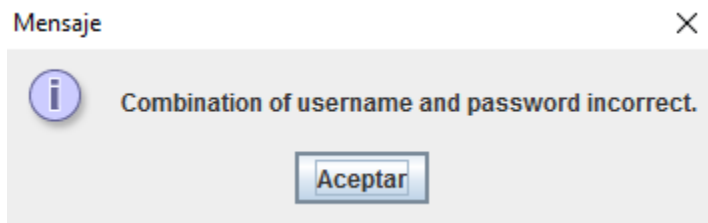


The screenshot shows a web browser window titled "MOLABS". The main content area has a light gray background. On the left, there is a molecular structure logo consisting of three red spheres and one blue sphere. To the right of the logo, the word "MOLABS" is displayed in a large, bold, black, sans-serif font. Below the logo and text, there are two input fields. The first is labeled "Username:" and the second is labeled "Password:". Both fields are empty and have a thin gray border. At the bottom center, there is an orange rectangular button with the text "Sign In" in white, bold, sans-serif font.

Al iniciar el programa esta sera la primera vista que se tendra. 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 correctos

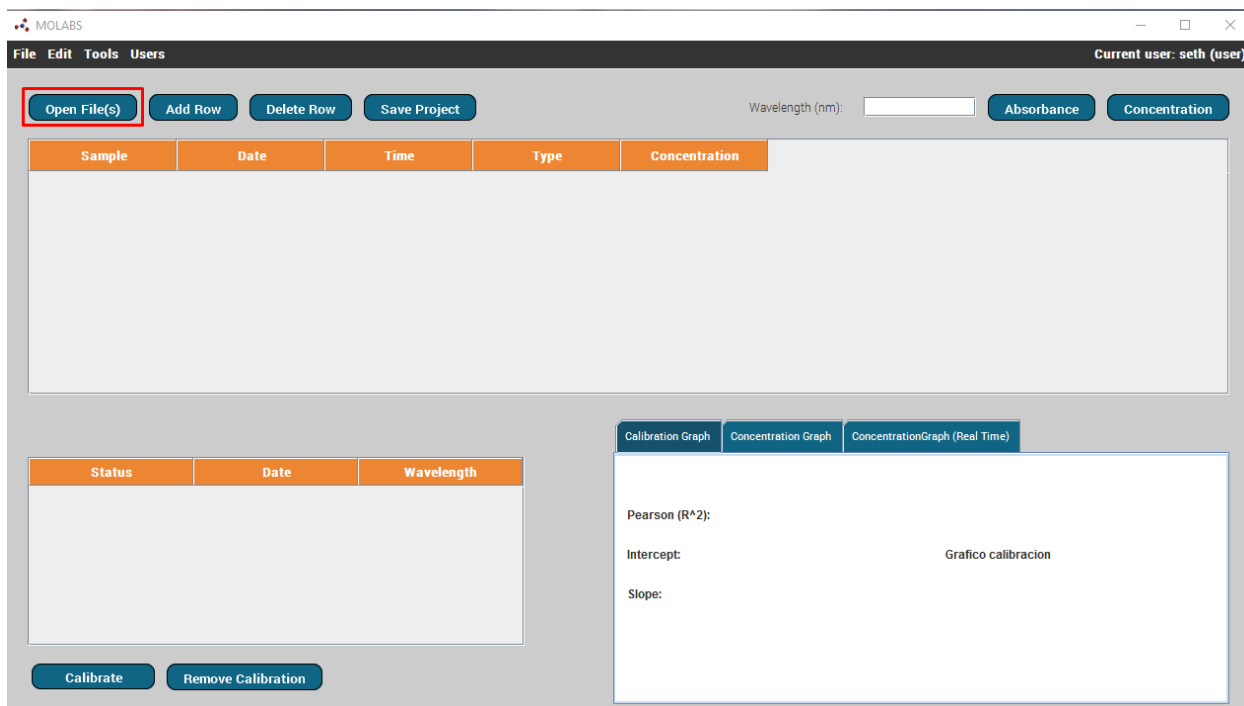
(TIP: se puede presionar la tecla ENTER del teclado en lugar de hacerle click)

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

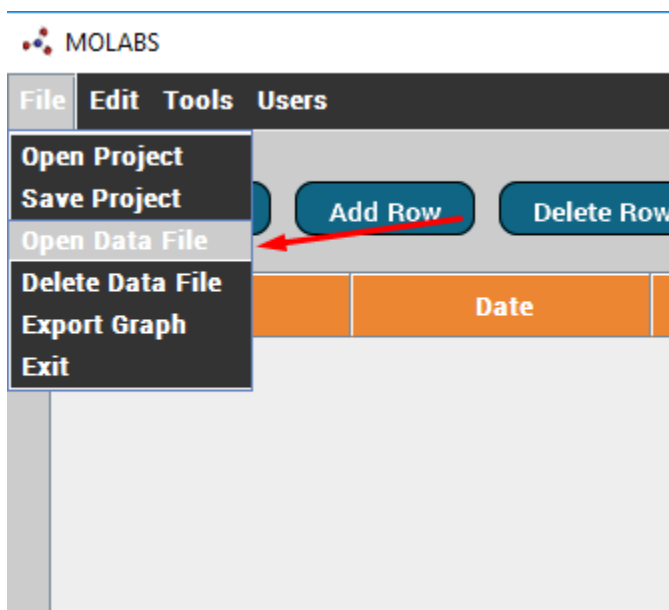


3.2 Agregar Archivos

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

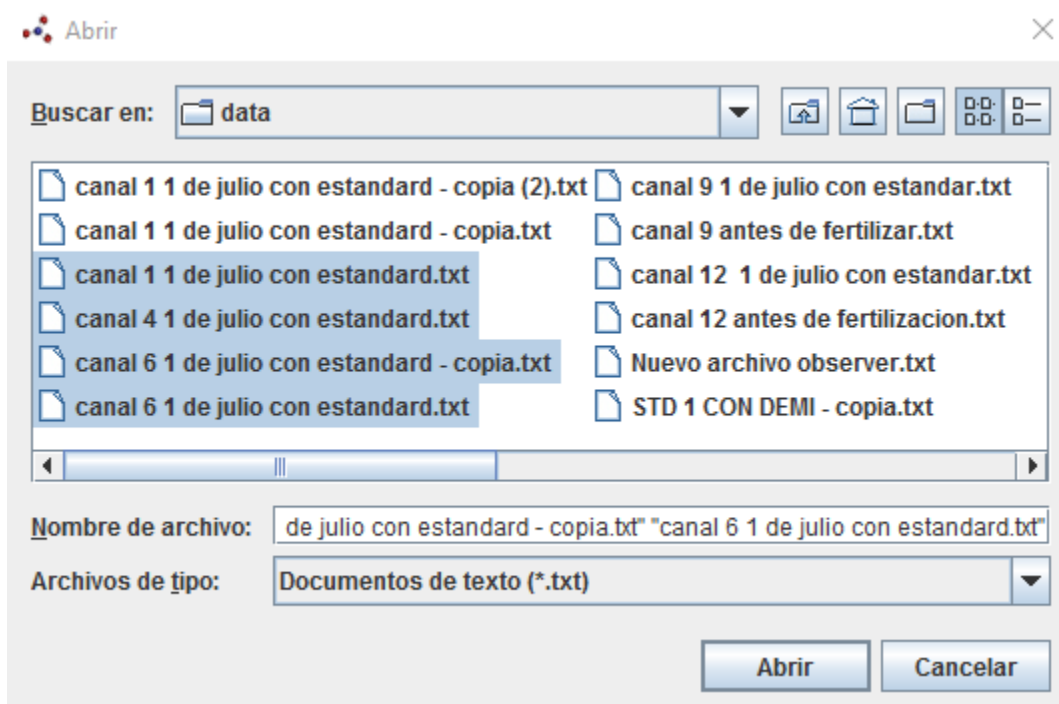


o por medio del toolbar acceder a esta opción:



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.

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

(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:

The screenshot shows the MOLABS software interface. The 'Tools' menu is open, highlighting the 'Observer' option. The main window displays a table with sample data and a 'Calibration Graph' section.

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

The 'Calibration Graph' section shows the following data:

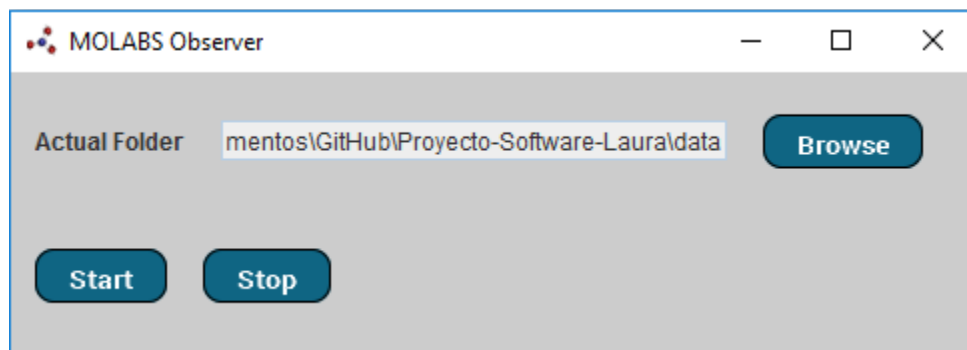
Status	Date	Wavelength

The 'Calibration Graph' section also displays the following statistics:

- Pearson (R^2):
- Intercept:
- Slope:

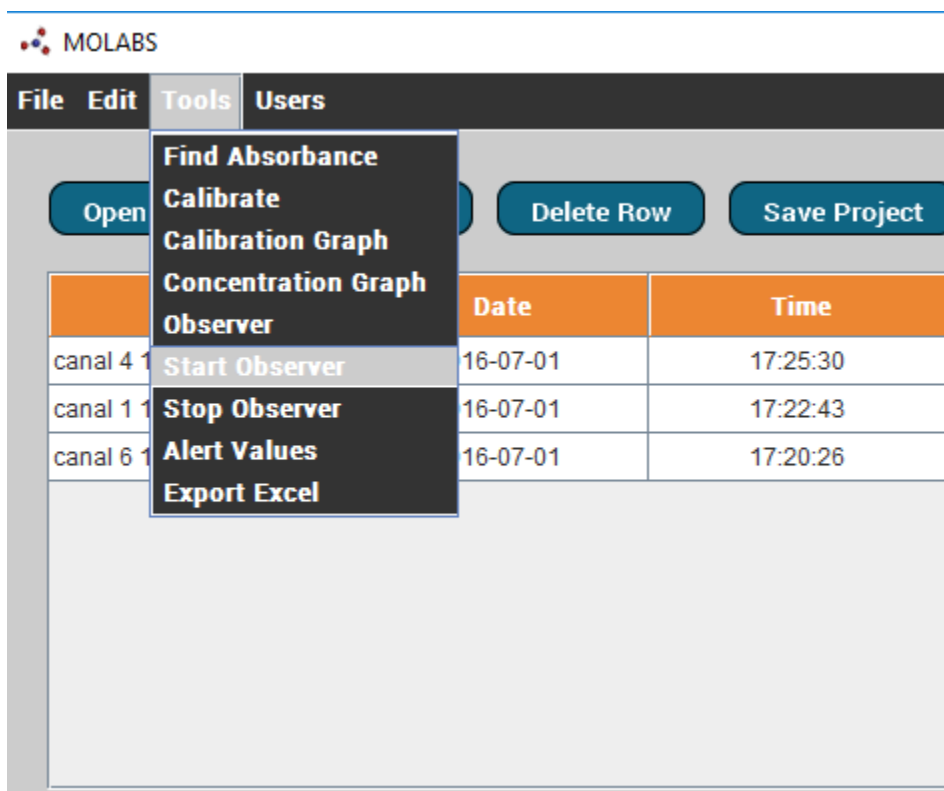
The 'Calibration Graph' section is titled 'Grafico calibracion'.

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 mostrara lo siguiente:

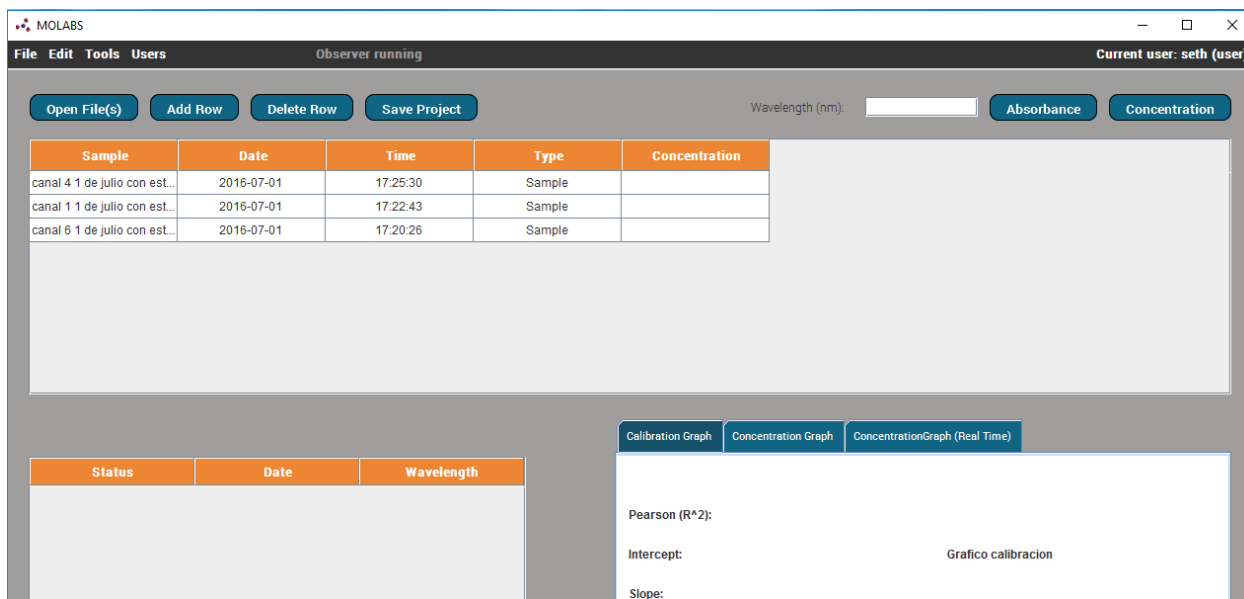


3.2.1 Iniciar el Observador

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:

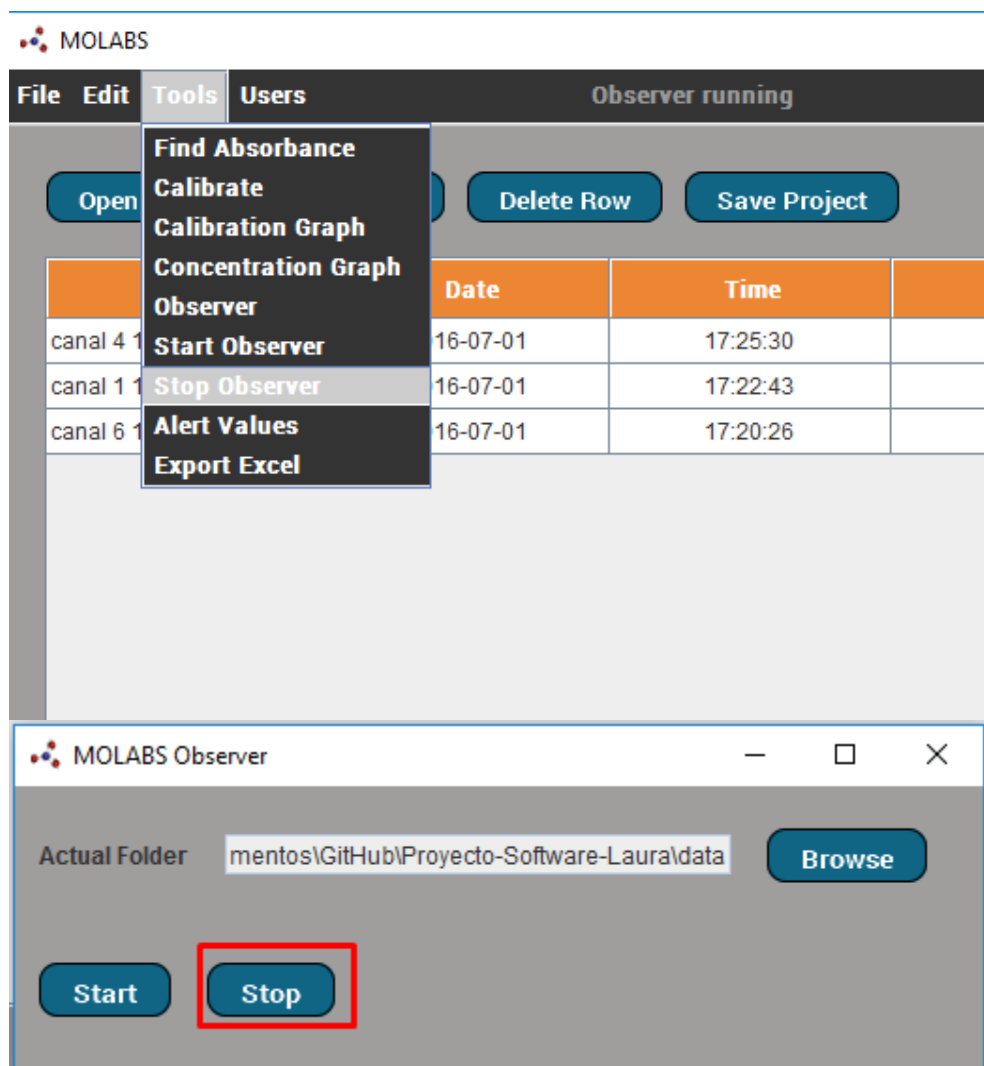


Cabe destacar que la apariencia cambia de color y un tag aparece en la parte superior de la pantalla para reflejar que el observador está corriendo.

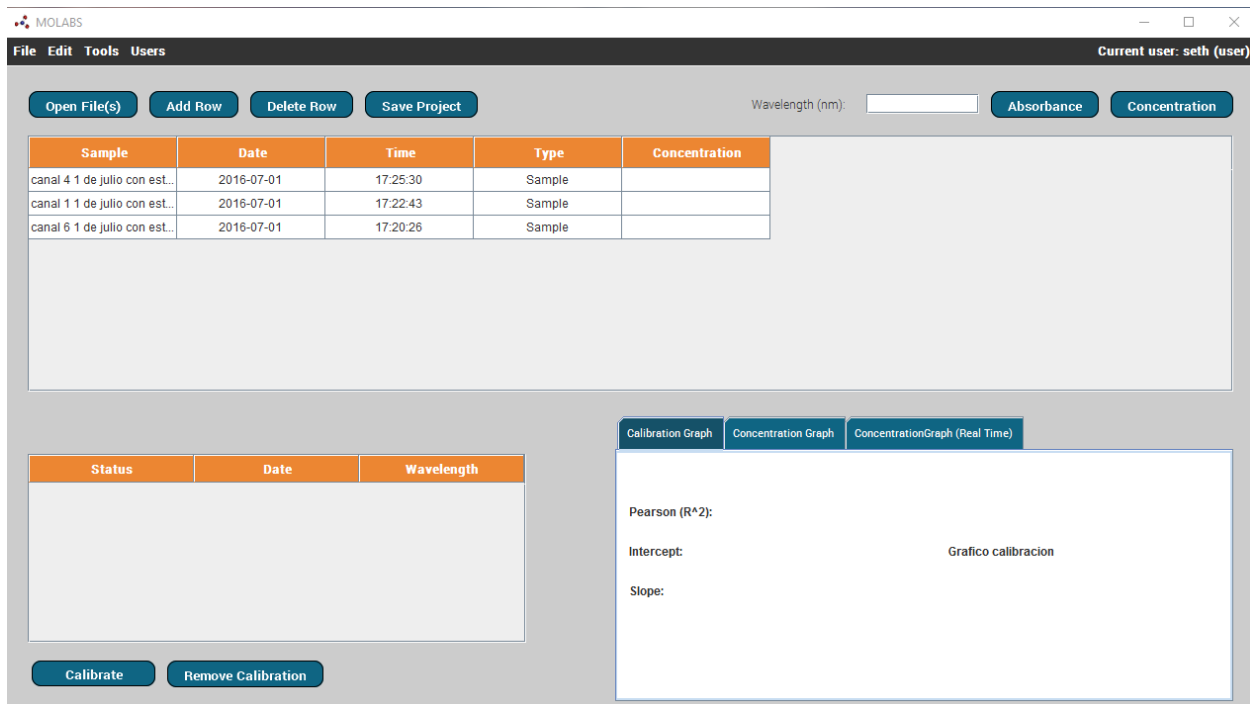


3.2.1 Detener el Observador

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

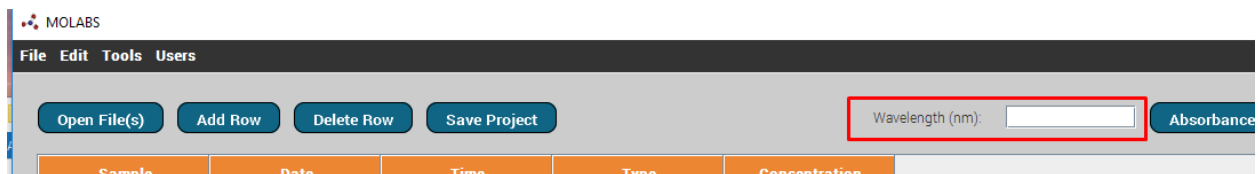


El sistema deberá volver a su color normal cuando se detenga el observador

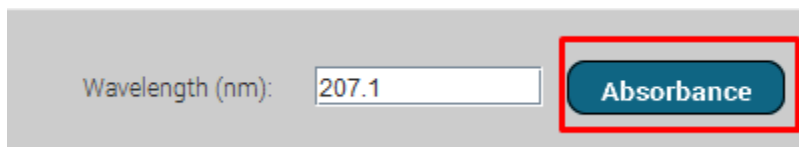


3.3 Obtener Observancias

Cuando se quiera obtener una observancia 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	Type	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	Type	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	Type	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	Type	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	Type	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.

MOLABS

File Edit Tools Users Current user: seth (user)

Open File(s) Add Row Delete Row Save Project Wavelength (nm): 207.1 Absorbance Concentration

Sample	Date	Time	Type	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

Status	Date	Wavelength
<input type="radio"/>	vie, 6 ene 2017 13:19:22	207.1

Calibrate Remove Calibration

Calibration Graph Concentration Graph ConcentrationGraph (Real Time)

Pearson (R^2):

Intercept:

Slope:

Grafico calibracion

(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).

MOLABS

File Edit Tools Users Current user: seth (user)

Open File(s) Add Row Delete Row Save Project Wavelength (nm): 208.1 Absorbance Concentration

Sample	Date	Time	Type	Concentration	Absorbance(207.1)	Absorbance(208.1)
canal 12 antes de fertiliz...	2016-07-01	17:50:45	Sample		0.848	0.828
canal 4 1 de julio con est...	2016-07-01	17:25:30	STD	20	0.663	0.655
canal 1 1 de julio con est...	2016-07-01	17:22:43	STD	30	0.863	0.850
canal 6 1 de julio con est...	2016-07-01	17:20:26	STD	40	0.718	0.705

Status	Date	Wavelength
<input type="radio"/>	vie, 6 ene 2017 13:19:22	207.1

Calibrate Remove Calibration

Calibration Graph Concentration Graph ConcentrationGraph (Real Time)

Pearson (R^2):
0.07084309133489447

Intercept:
0.6655000000000001

Slope:
0.002749999999999997

Grafico calibracion

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

Status	Date	Wavelength
<input checked="" type="radio"/>	vie, 6 ene 2017 13:19:22	207.1
<input type="radio"/>	vie, 6 ene 2017 13:22:43	208.1

Calibrate Remove Calibration

Calibration Graph Concentration Graph

Pearson (R^2):
0.07084309133489447

Intercept:
0.6655000000000001

Slope:
0.002749999999999997

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
<input checked="" type="radio"/>	vie, 6 ene 2017 13:19:22	207.1
<input type="radio"/>	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.

Wavelength (nm):	<input type="text" value="208.1"/>	<input type="button" value="Absorbance"/>	<input type="button" value="Concentration"/>
Absorbance(207.1)	Concentration(207.1)	Absorbance(208.1)	
0.848	66.363636	0.828	
0.663	-0.909091	0.655	
0.863	71.818182	0.850	
0.718	19.090909	0.705	

3.8 Eliminar un Sample

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

MOLABS

File Edit Tools Users

Open File(s) Add Row **Delete Row** Save Project

Sample	Date	Time	Type	Concentration
canal 12 antes de fertiliz...	2016-07-01	17:50:45	Sample	
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

Posteriormente el sample deberá quitarse de la tabla.

Open File(s) Add Row Delete Row Save Project

Sample	Date	Time	Type	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

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

MOLABS

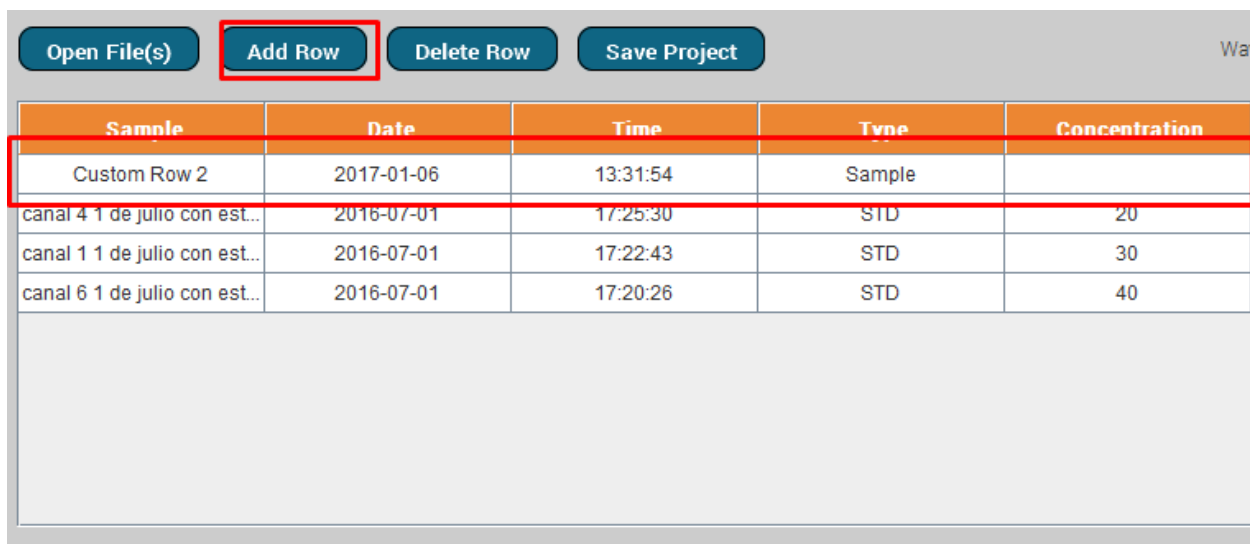
File Edit Tools Users

Add Row
Copy
Paste
Delete Row

Sample
canal 4 1 de julio con est...
canal 1 1 de julio con est...

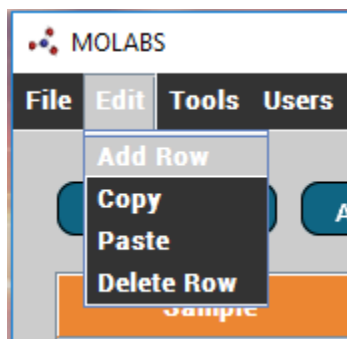
3.9 Agregar un Sample

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



Open File(s)	Add Row	Delete Row	Save Project	Wav
Sample	Date	Time	Type	Concentration
Custom Row 2	2017-01-06	13:31:54	Sample	
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

(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
<input checked="" type="radio"/>	vie, 6 ene 2017 13:19:22	207.1
<input type="radio"/>	vie, 6 ene 2017 13:22:43	208.1
<input type="radio"/>	vie, 6 ene 2017 13:38:38	208.1

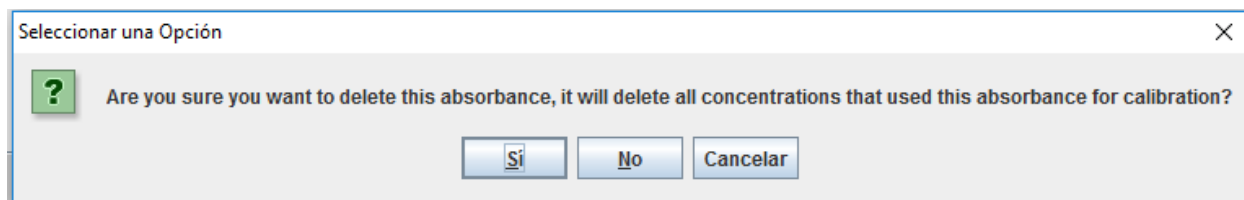
Status	Date	Wavelength
<input checked="" type="radio"/>	vie, 6 ene 2017 13:19:22	207.1
<input type="radio"/>	vie, 6 ene 2017 13:22:43	208.1

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 (207.1)
20	0.663	-0.909091
30	0.863	71.818182
40	0.718	19.090909

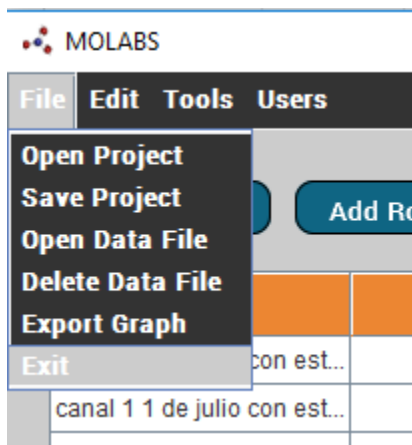
Una opción de eliminar aparecerá y si se selecciona aparecerá la siguiente pantalla para confirmar su elección, esto debido a que son datos de alta relevancia, en caso de un error.



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

3.11 Salir del programa

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



4. 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.