

Manuel d'utilisation de PYSERSPEC

1 Introduction

PySerSpec est un logiciel permettant de contrôler un spectrophotomètre Shimadzu UV-Mini 1240. Il repose sur une implémentation des commandes décrites dans la documentation officielle du constructeur de l'appareil¹.

Le langage de programmation employé est Python, dans sa version 3.4². Des bibliothèques annexes sont employées : matplotlib³ (permet de tracer des graphiques à partir des données récupérées) et pyserial⁴ (permet de communiquer par port série avec le spectrophotomètre).

Ce programme est distribué sous licence libre (GNU/GPLv3), le code source est en libre-accès sur GitHub⁵. Ce programme est distribué gratuitement, sans aucune garantie. L'auteur de ce programme ne saurait être tenu pour responsable en cas de malfonctionnement, erreurs et autres problèmes pouvant être rencontrés.

2 Prérequis

Certains programmes doivent être installés pour que PySerSpec puisse fonctionner :

1. Python : version 3.4 ou supérieure.
2. Matplotlib.
3. PySerial.

Ces programmes sont disponibles sur leurs sites officiels (voir notes de bas de page pour les liens).

N.B : penser à aussi installer les dépendances de ces programmes : pytz, cyclical, six, python-dateutil, numpy, pyparsing.

3 Utilisation

3.1 Démarrage

Pour démarrer l'application, exécuter **PySerSpec.py**.

Par exemple, sous GNU/Linux :

```
python PySerSpec.py
```

1 https://extranet.fisher.co.uk/webfiles/fr/Pjointes/Mdemploi/SHI001_FR%20SPECTROPHOTOMETRE%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 Choix du port série

Le premier menu apparaissant permet de définir le port série auquel est relié le spectrophotomètre.

```
##### PORT SETTINGS #####  
Select the serial port connected to the spectrophotometer :  
  
1 : COM1  
2 : COM2  
3 : COM3  
4 : COM4  
5 : /dev/ttyS0 (GNU/Linux)  
6 : /dev/ttyUSB0 (GNU/Linux)  
7 : Other port (specify)  
8 : Exit
```

Les interfaces COM1 à COM4 sont spécifiques des systèmes Microsoft Windows®. Les interfaces/dev/*** sont spécifique des systèmes Unix (GNU/Linux, *BSD, MacOS).

Typiquement,/dev/ttyS* correspond à une interface série vraie, alors que/dev/ttyUSB* correspond à une interface série d'adaptateur USB. Sous GNU/Linux, le moyen le plus simple de connaître son interface est, après avoir branché le câble série, de regarder les renvois systèmes :

```
dmesg
```

Sous Microsoft Windows®, consulter le gestionnaire des périphériques.

Enfin, il est toujours possible de spécifier un port par l'option « 7 : other port (specify) ».

Si le port sélectionné est bon, il devrait apparaître le menu, précédé des messages suivants :

```
Selected interface : /dev/ttyUSB0  
Port open.  
Selected port seems to be OK !
```

3.3 Menu principal

Le menu principal permet l'accès à toutes les fonctions de l'appareil : réglage du mode (absorbance, transmittance, énergie), de la source de lumière (uniquement pour le mode énergie ; lampe Deuterium pour la zone UV-visible, Tungstène-Iode pour l'infrarouge), du gain (uniquement pour le mode énergie ; gain variable, de 1 à 6), temps d'accumulation des données.

```
##### MAIN MENU #####  
1 : Mode  
2 : Light source  
3 : Gain  
4 : Data accumulation time  
5 : Scan (single value)  
6 : Scan (spectrum)  
7 : Scan (time)  
8 : UNTESTED FUNCTIONS  
9 : Exit
```

Les options 5, 6, 7 correspondent aux différents modes de mesures. Ils seront abordés plus loin dans le document.

L'option 8 correspond aux fonctions relatives aux différents multicuves et sipper adaptables à la machine. Ces dernières n'ont pas été testées, faute d'équipement.

3.4 Mesure ponctuelle (measurement – single value)

Le menu se présente comme suit :

```
##### MEASUREMENT (SINGLE) #####
1 : Set blank
2 : Set wavelength (standalone)
3 : Read value
4 : Main menu
5 : Exit
```

« Set blank » permet de définir un blanc échantillon. Le blanc a été fait si la machine émet un son.

« Set wavelength » permet de définir une longueur d'onde, qui sera stockée dans la mémoire de l'appareil.

```
Enter wavelength (nm) [default : 550nm] :
779
```

« Read value » permet de lire une valeur d'absorbance/transmittance/énergie à une longueur d'onde donnée. Les résultats renvoyés sont de la forme :

```
Absorbance at 779.0 nm : 0.329
Transmittance at 779.0 nm : 46.9
Energy at 779.0 nm : 0.6
```

N.B : un fichier. csv est aussi généré dans le dossier/data du programme.

3.5 Mesure de spectre (measurement – spectrum scan)

Ce mode permet de mesurer les valeurs d'absorbance/transmittance/énergie sur une large plage de longueurs d'onde (190 à 1100 nm).

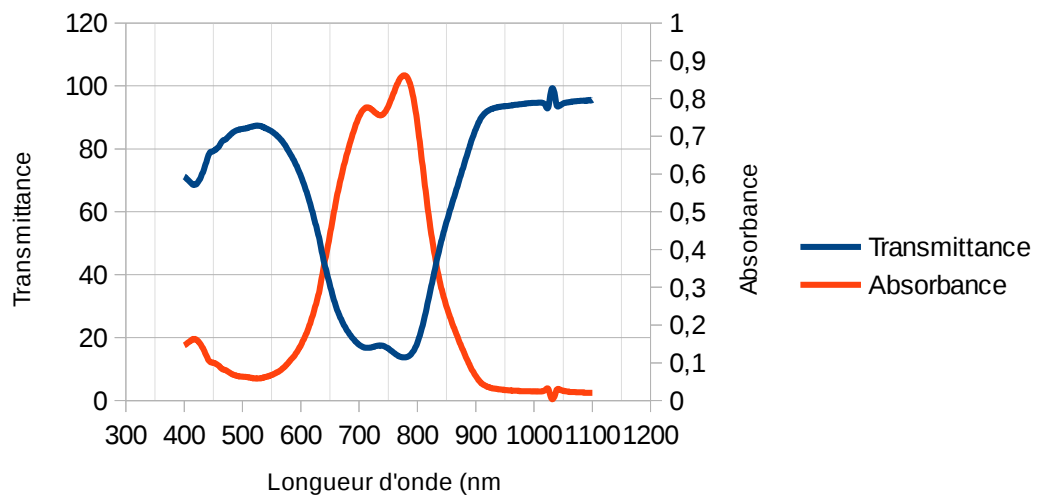
```
Enter the highest wavelength (nm) : 1100
Enter lowest wavelength (nm) : 400
```

Plusieurs éléments sont disponibles :

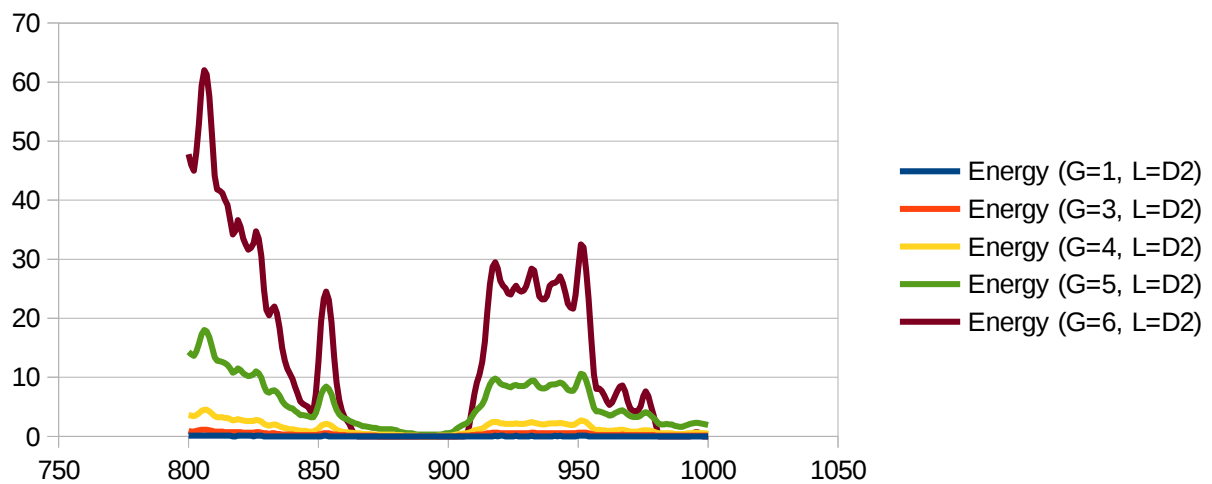
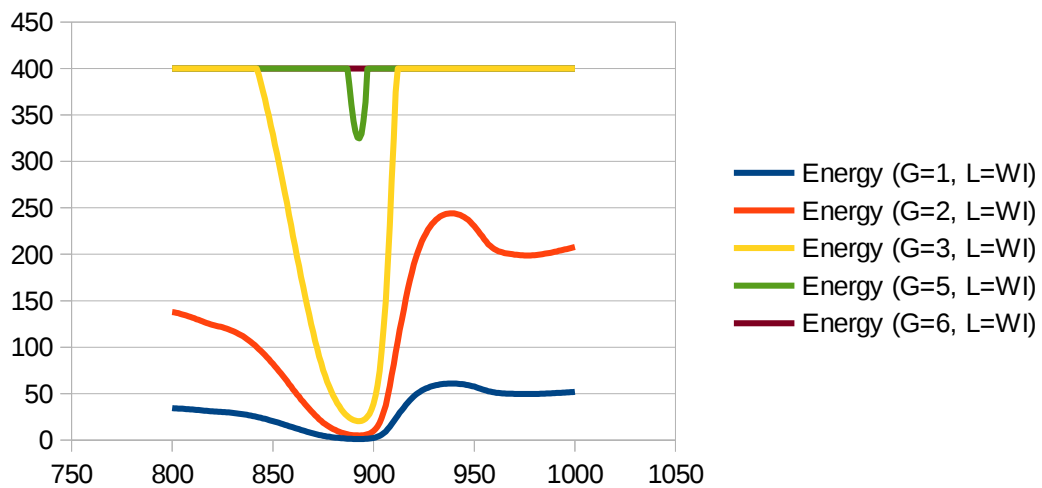
```
1 : Set blank (baseline correction)
2 : Set wavelength range (standalone)
3 : Read spectrum
4 : Main menu
5 : Exit
```

L'option « baseline correction » permet de mesurer un blanc sur une plage de longueur d'onde donnée, qui sera pris en compte par la suite par les mesures (option « read »).

N.B : l'exécution de la « baseline correction » prend au moins 10 minutes.



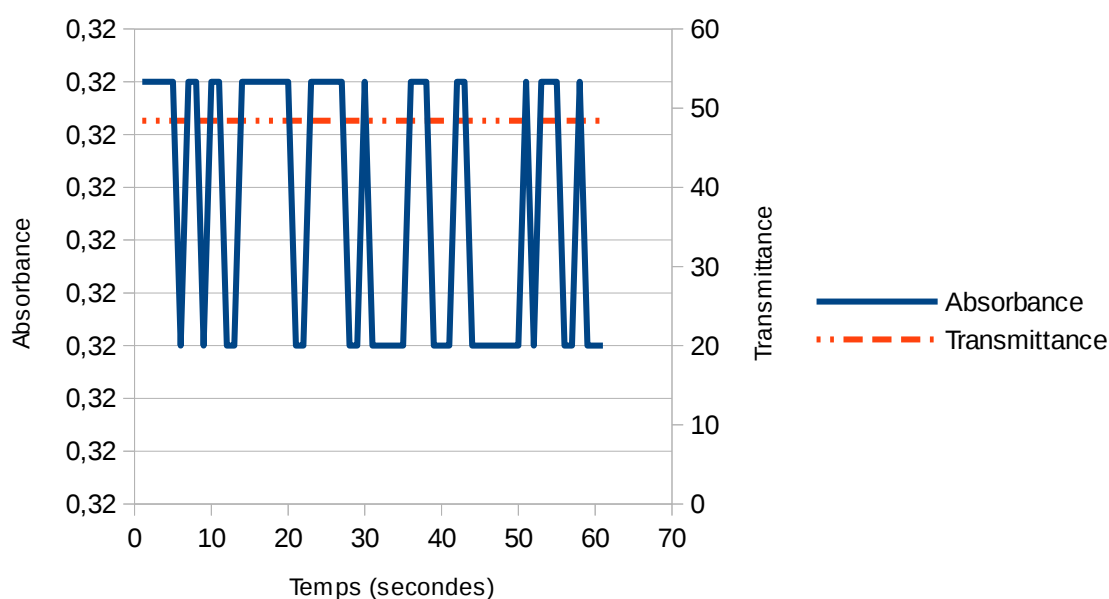
N.B : le réglage du gain et de la source de lumière n'a d'influence que sur le mode énergie.



3.6 Mesure temporelle (measurement – time scan)

Ce mode permet de mesurer dans le temps les valeurs d'absorbances/transmittance/énergie pour une longueur d'onde fixe. L'unité est la seconde (6500 maximum) ou la minute (108 maximum). Le nombre de points de mesure est dépendant de l'unité et de l'intervalle choisi :

1. Pour un choix en minutes, un point sera enregistré chaque minute.
2. Pour un choix en secondes :
 1. 1 à 10 secondes : un point toutes les 0,1 secondes.
 2. 10 à 100 secondes : un point par seconde.
 3. 100 à 500 secondes : 50 points.
 4. Plus de 500 secondes : 10 points.



N.B : le spectrophotomètre est plus sensible en absorbance qu'en transmittance, comme on peut le voir dans l'image précédente ou l'absorbance oscille entre deux valeurs quand la transmittance reste fixe.

4 Enregistrement des données

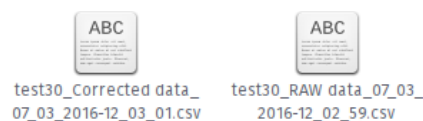
Chaque mesure est enregistrée. Le programme demandera systématiquement de définir un nom pour chacune. Les fichiers générés (au format csv) sont placés dans le dossier/data du programme.

```
Saving data...
Please type an identifier (first for raw data csv, then corrected data
csv) :
test_abs_ex
Please type an identifier (first for raw data csv, then corrected data
csv) :
test_abs_ex
Data saved.
```

Les données sont enregistrées en colonnes, et sont facilement importables avec un tableur classique (Microsoft Excel®, LibreOffice calc).

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		

Deux fichiers sont générés à chaque fois : un fichier « raw » avec les données brutes sorties de l'appareil, et un fichier « corrected », tenant compte du blanc (i.e : toutes les valeurs négatives renvoyées par l'appareil sont mises à zéro).

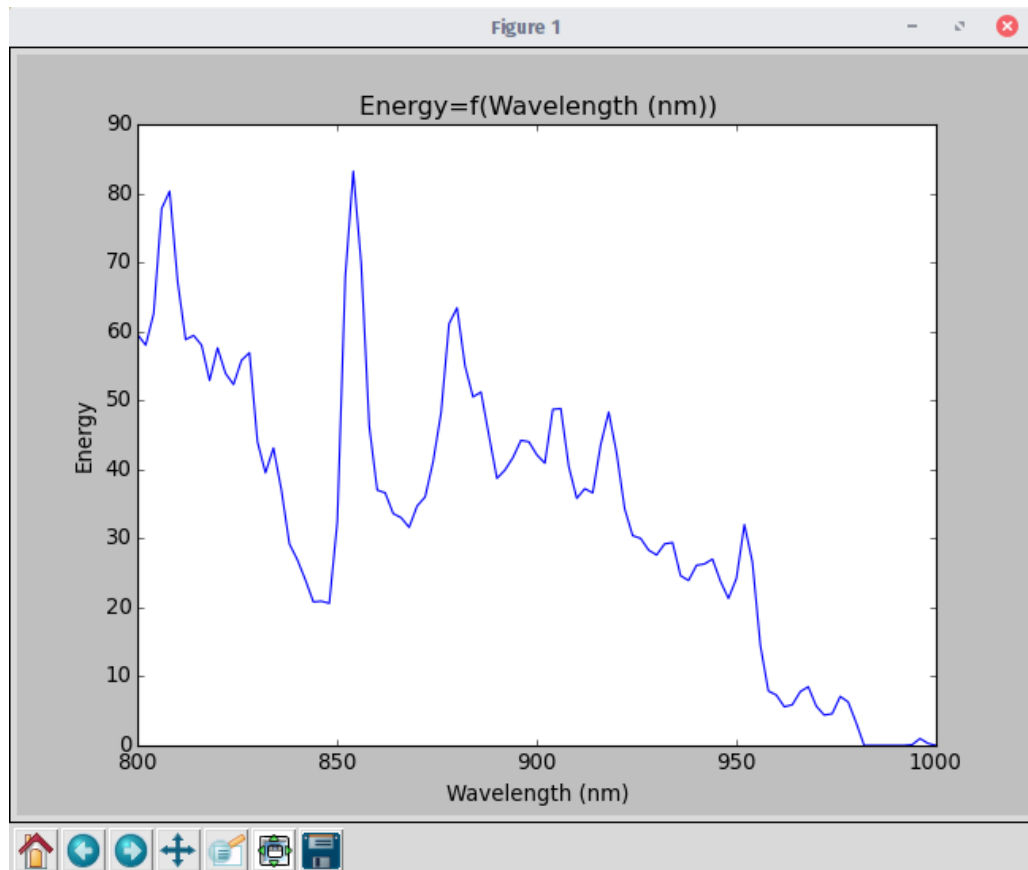


5 Génération de courbes

Après chaque mesure de spectre ou temporelle, le programme propose de tracer des courbes à partir des données brutes et corrigées.

Plot corrected data ? Y/N
Plot raw data ? Y/N

N.B : refuser ne bloque pas l'enregistrement des données. Les courbes peuvent être retracées par la suite à partir des données générées, en utilisant un tableur classique.



6 Bugs connus et limitations

Problème	Type	Solution
Le port série sélectionné est correct, mais le programme refuse son utilisation.	Bug	Réessayer de sélectionner le port (souvent, après un premier échec, sélectionner le bon port une première fois ne marche pas). Éteindre l'ordinateur, vérifier que le port série est branché, redémarrer et ressayer.
La programme reste bloqué sur ENQ ou ACK.	Bug	Quitter le mode F4 sur la machine et fermer le programme, puis réessayer. Si la machine ne peut pas sortir du mode F4, alors c'est que sa mémoire a saturé. Dans ce cas, l'éteindre, attendre au moins deux minutes et la rallumer.
Changer le gain ne modifie rien en absorbance ou transmittance.	Limitation de la machine	La définition du gain n'est prise en compte qu'en mode énergie.
Changer la source de lumière ne modifie rien en absorbance ou transmittance.	Limitation de la machine	La définition de la source de lumière n'est prise en compte qu'en mode énergie.
Mesurer en mode énergie fait saturer la machine.	Choix d'implémentation discutable	Il est nécessaire de définir le gain et la source de lumière avant toute mesure en mode énergie.
Quitter le programme et le relancer ne remet pas les options par défaut.	Choix d'implémentation discutable	Éteindre la machine remet les réglages par défaut (mode absorbance notamment). Sinon, régler chaque paramètres par le menu principal.
Une fonction touchant au multi-cuve et/ou au sipper, ne marche pas.	Implémentation non testée	/
Les données exportées en CSV ne permettent pas de tracer de graphes sous LibreOffice (version Française).	Choix d'implémentation discutable	Remplacer les « . » par des « , ».
L'option « data accumulation time » est inutile.	Choix d'implémentation discutable	La vitesse et le pas de mesure ont été codées et sont fixes. Le choix effectué à été de prendre la vitesse la plus grande possible pour un pas de mesure donné.
Impossible de définir précisément le pas de mesure ou la vitesse de fonctionnement.	Choix d'implémentation discutable	Le pas de mesure et la vitesse dépendent de l'intervalle de mesure. Il n'y a pas une grande liberté de choix avec des paramètres, il a donc été décidé de coder en fixe ces derniers en fonction de l'intervalle de longueur d'onde mesuré. Pour un pas de mesure sélectionné, la vitesse de fonctionnement est systématiquement la plus élevée possible pour ce dernier.
Mesurer l'absorbance en temporel donne une alternance entre deux valeurs.	Limitation de la machine	Le capteur du spectrophotomètre n'est pas très stable et oscille, à faible absorbance, entre deux valeurs proches (moins de 0,005 % d'écart).
Le programme se termine avec « ESC » ou « NAK ».	Bug machine	La machine refuse de traiter une commande. Raisons possibles : sature, est bloquée sur une commande précédemment entrée. Dans ce cas, réessayer de mesurer, et, au pire, redémarrer la machine.