

Treball de Fi de Grau

Grau en Enginyeria en Tecnologies Industrials

**Disseny i implementació d'un sistema
d'adquisició de dades químiques**

MEMÒRIA

Autor/a: Alexandre Pech Alòs
Director/a: Jordi Bou Serra
Convocatòria: Juny 2023



Escola Tècnica Superior
d'Enginyeria Industrial de Barcelona



Resum

NORI és un sistema d'adquisició i anàlisi de dades provinents de sensors analògics. Durant el desenvolupament d'aquest projecte, s'ha implementat tant el hardware com el software d'aquesta eina, enfocada en el tractament de senyals generats per un detector d'absorbància d'un sistema cromatogràfic. Gràcies a l'optimització dels diferents algorismes que la conformen, NORI és capaç d'obtenir masses moleculars de polímers i transmetre aquesta informació a un altre ordinador fix del laboratori.

Des d'un punt de vista electrònic, el nucli de NORI és un ordinador de placa única Raspberry Pi, que executa les accions juntament amb els seus perifèrics. Les dades entren al sistema i són transformades en bits mitjançant el xip MCP3008, un convertidor analògic-digital ubicat entre el sensor i la placa.

Els components del hardware de NORI operen a partir de les instruccions que obtenen dels diferents programes desenvolupats en Python. Aquests programes conformen una interfície gràfica anomenada CODIUM, que permet la comunicació entre el sistema i l'usuari. Gràcies a CODIUM, l'usuari és capaç de configurar els paràmetres de cada experiment i analitzar els resultats de manera automatitzada. A més, s'ha desenvolupat CODIUM File Transfer, una extensió de la interfície que permet enviar els resultats de manera segura, senzilla i eficient.

Aquests desenvolupaments s'han posat a prova en diferents entorns de treball amb múltiples sensors i condicions experimentals. D'aquesta manera, s'ha pogut demostrar que NORI permet adquirir dades provinents d'una gran varietat de sensors i que constitueix una solució viable per a equips de cromatografia.

Resumen

NORI es un sistema de adquisición y análisis de datos provenientes de sensores analógicos. Durante el desarrollo de este proyecto, se ha implementado tanto el hardware como el software de esta herramienta, enfocada en el tratamiento de señales generadas mediante un detector de absorbancia de un sistema cromatográfico. Mediante la optimización de los distintos algoritmos que la conforman, NORI es capaz de obtener masas moleculares de polímeros y transmitir esta información a otro ordenador fijo del laboratorio.

Des de un punto de vista electrónico, el núcleo de NORI es un ordenador de placa única Raspberry Pi, que ejecuta las acciones junto con sus periféricos. Los datos ingresan al sistema y son transformados en bits mediante el chip MCP3008, un convertidor analógico-digital ubicado entre el sensor y la placa.

Los componentes del hardware de NORI operan a partir de las instrucciones que obtienen de los distintos programas desarrollados en Python. Estos programas conforman una interfaz gráfica llamada CODIUM, que permite la comunicación entre el sistema y el usuario. Gracias a CODIUM, el usuario es capaz de configurar los parámetros de cada experimento y analizar los resultados de manera automatizada. Además, se ha desarrollado CODIUM File Transfer, una extensión de la interfaz que permite enviar los resultados de manera segura, sencilla y eficaz.

Estos desarrollos se han puesto a prueba en distintos entornos de trabajo con múltiples sensores y condiciones experimentales. De esta manera, se ha podido demostrar que NORI permite adquirir datos provenientes de una gran variedad de sensores y que constituye una solución viable para equipos de cromatografía.

Abstract

NORI is a data acquisition system capable of obtaining and analyzing information from analog sensors. During the course of this project, both the hardware and software of the tool have been implemented, with a focus on processing signals generated by an absorbance detector in a chromatographic system. By optimizing the various algorithms that comprise NORI, it can accurately determine the molecular mass of polymers and transmit this information to another computer within the laboratory.

From an electronic perspective, NORI's core is a Raspberry Pi single-board computer that executes actions together with its peripherals. Data enters the system and converts into bits using the MCP3008 chip, an analog-to-digital converter located between the sensor and the board.

NORI's hardware components operate based on instructions derived from various programs developed in Python. These programs collectively form a graphical interface called CODIUM, facilitating communication between the system and the user. Through CODIUM, users can configure experiment parameters and automate result analysis. Additionally, CODIUM File Transfer, an extension of the main interface, has been developed to transmit results securely, simply, and efficiently.

The implemented technology has been thoroughly tested in diverse environments, utilizing multiple sensors and experimental conditions. This testing has not only demonstrated NORI's capability to acquire data from a wide variety of sensors but also validated its suitability as a viable solution for chromatography equipment.

Contingut

RESUM	3
RESUMEN	4
ABSTRACT	5
CONTINGUT	7
GLOSSARI I NOMENCLATURA	10
LLISTAT DE FIGURES	12
LLISTAT DE TAULES	15
1. PREFACI	16
2. INTRODUCCIÓ	17
2.1. Motivació	17
2.2. Abast del treball	17
2.2.1. Abast segons les fases de la gestió de projectes	17
2.2.2. Limitacions del projecte	18
2.3. Objectius del treball	20
3. INTRODUCCIÓ TEÒRICA.	22
3.1. Tractament de senyals	22
3.1.1. Classificació dels senyals en funció de la seva naturalesa	22
3.1.2. Anàlisi de senyals analògics i digitals per computador	24
3.1.3. Procés de transformació de la naturalesa d'un senyal	26
3.2. Determinació dels pesos moleculars de polímers per cromatografia líquida.	27
3.2.1. Càlcul teòric del pes molecular dels polímers	27
3.2.2. Cromatografia líquida HPLC	29
3.2.3. Equips de cromatografia HPLC	31
3.3. Estat de la qüestió	32
4. EQUIPAMENT TÈCNIC I METODOLOGIA	34
4.1. Disseny i implementació del hardware de NORI	34
4.1.1. Equipament electrònic	34
4.1.1.1. La Raspberry Pi com a computador	34
4.1.1.2. Elements d'interacció de l'usuari amb el computador	39
4.1.1.3. El xip MCP3008 com a convertidor ADC	39
4.1.1.4. Connexions entre dispositius	41

4.1.2.	Hardware del sistema d'adquisició de dades	42
4.1.3.	Hardware del sistema de transferència de dades	43
4.1.3.1.	Transmissió mitjançant un Pen-Drive	43
4.1.3.2.	Transmissió mitjançant Google Drive	44
4.1.3.3.	Transmissió via SCP	44
4.2.	Disseny i implementació del software de NORI	47
4.2.1.	CODIUM	48
4.2.1.1.	Frontend de CODIUM	49
4.2.1.2.	Backend de CODIUM	50
4.2.2.	CODIUM FT	52
4.3.	Experimentació i verificació. Aplicació de NORI amb diversos sensors. .	53
4.3.1.	Primers sensors. Adquisició de dades.	53
4.3.1.1.	Potenciòmetre.	54
4.3.1.2.	Diversos sensors al mateix temps.	56
4.3.2.	Muntatge de NORI amb el detector en sec.	59
4.3.3.	Muntatge humit de NORI amb el detector 785A d'Applied Biosystems.	61
4.3.3.1.	Sense columna de separació	63
4.3.3.2.	Amb columna de separació	65
4.3.3.3.	Experimentació amb estàndards per trobar la corba de calibratge	68
4.3.3.4.	Experimentació final amb SMA	70
4.3.4.	Implementació del sistema de transferència de dades.	72
4.3.4.1.	Connexió a la mateixa xarxa local	72
4.3.4.2.	Transferència dels fitxers	72
5.	RESULTATS	73
5.1.	Especificacions tècniques de NORI	73
5.2.	Interfície CODIUM	75
5.3.	Interfície CODIUM FT	78
5.4.	NORI en l'entorn de treball	79
5.5.	Resultats de proves en entorn real	80
5.6.	Taula de falles	81
6.	PLANIFICACIÓ	83
7.	ESTUDI ECONÒMIC	85
8.	ESTUDI AMBIENTAL	87

9. ESTUDI SOCIAL I D'IGUALTAT DE GÈNERE	88
10. CONCLUSIONS	89
11. AGRAÏMENTS	91
12. BIBLIOGRAFIA	92
Referències bibliogràfiques	92
Bibliografia complementària	95
13. ANNEXOS	96
Annex I – Manual de NORI	96
Annex II – Codis informàtics de NORI.....	96

Glossari i Nomenclatura

El glossari de treball, presentat per ordre alfabètic, és el següent:

785A	Cromatògraf de la marca Applied Biosystems, model 785A. És el sensor respecte el qual s'enfoca la major part de l'experimentació d'aquest projecte.
ADC	Convertidor Analògic – Digital, de l'anglès Analog – Digital Converter.
BCM	De l'anglès Broadcom SOC Channel. Mode de numeració dels pins de la RPi segons la seva funcionalitat.
BOARD	Mode de numeració dels pins GPIO de la RPi segons el nombre imprès a la placa.
CH	Channel (Canal d'entrada de dades del convertidor ADC).
CO2eq	Diòxid de carboni equivalent.
CODIUM	És com s'anomena la interfície gràfica o el programa principal d'interacció amb l'usuari de NORI.
CODIUM FT	CODIUM File Transfer. Extensió de CODIUM destinada a la transferència de fitxers.
COMP	Sortida "Computer".
CPU	Unitat central de processament, de l'anglès Central Processing Unit. Component de Hardware que interpreta instruccions dels programes informàtics.
DAQ DAS	Sistema d'adquisició de dades, de l'anglès Data Acquisition System o Data AcQuisition.
DC	Corrent continua o directa, de l'anglès Direct Current.
ECTS	Sistema Europeu de Transferència de Crèdits.
EQ	Enginyeria Química.
ETSEIB	Escola Tècnica Superior d'Enginyeria Industrial de Barcelona.
GETI	Grau en Enginyeria en Tecnologies Industrials
GND	Massa, ground en anglès. Punt de 0V en un sistema electrònic.
GPC	Gel Permeation Chromatography.
GPIO	General Purpouse Input/Output.
GPU	En anglès, Graphics Processing Unit. És la targeta gràfica de la màquina.
HDMI	High Definition Multimedia Interface. Protocol de connexió que permet transmetre audio i vídeo sense comprimir entre dos dispositius utilitzant un únic cable.
HDPE	Polietilè d'alta densitat.
HPLC	High Precision Liquid Chromatography.
HW	Hardware.
IDE	Entorn de Desenvolupament Integrat.
IP	Internet Protocol. Adreça identificadora que permet enviar informació entre dispositius en una matixa xarxa.
IRLED	Díode emissor d'infrarojos.
IVA	En castellà, "Impuesto sobre el Valor Agregado".

LAN	Xarxa d'Àrea Local, de l'anglès Local Area Network. Es sol usar més el concepte WLAN que significa Wireless LAN, xarxa local sense fils.
MISO	Master Input Slave Output.
Mn	Massa molar mitja en número d'un polímer, en g/mol.
MOSI	Master Output Slave Input.
Mw	Massa molar mitja en pes d'un polímer, en g/mol.
NORI	És com s'anomena el sistema d'adquisició de dades desenvolupat durant el treball. Inclou tant el Software (SWNori) com el Hardware (HWNori).
OS	Sistema Operatiu, de l'anglès Operating System.
PC	En anglès, Personal Computer.
PD	Índex de Polidispersitat. És el quocient entre Mw i Mn, adimensional.
PET	Politereftalat d'etilè.
PMMA	Polimetilmetacrilat.
PoE	Alimentació a través d'Ethernet (Power over Ethernet). Permet que la alimentació elèctrica es subministri a un dispositiu de xarxa usant el mateix cable que per la connexió de xarxa.
PP	Polipropilè.
PS	Poliestirè.
PSD	Detector sensible a la posició.
PVC	Policlorur de vinil, una combinació de carboni, hidrogen i clor.
PWP	Microsoft Office Power Point.
RAM	En anglès, Random Acces Memory.
RPi	Ordinador monoplaca Raspberry Pi.
SBC	Ordinador monoplaca, de l'anglès Single Board Computer.
SCLK CLK	Serial Clock.
SCP	Secure Copy Protocol.
SEC	Size Exclusion Chromatography.
Serveis TIC	Serveis de Tecnologies de la informació de l'ETSEIB.
SMA	Copolímer estirè anhídrid maleic hidrolitzat en medi bàsic.
SPI	Serial Peripheral Interface.
SS CS/SHDN	Slave Select o Chip Select/Shutdown.
SSH	Secure Shell.
SW	Software.
TFG	Treball de Fi de Grau.
Tr	Temps de retenció. Temps en que es detecta la mostra de polímer, en s o min.
Ts	Període de mostratge. Temps transcorregut entre dues mostres, en s.
USB	Universal Serial Bus.
WL	Paràmetre del detector Wave Length, en nm.
wp	Freqüència o pulsació natural d'un senyal, en rad/s.
ws	Freqüència o pulsació de mostratge, en rad/s.

Llistat de figures

Figura 1. Font pròpia. Esquema Analògic-Digital	23
Figura 2. Font pròpia generada amb Matlab. Comparació entre el mateix senyal analògic continu i digital discret. Es pot observar que el senyal digital discret només canvia de valor quan passen T_s segons.	23
Figura 3. Font pròpia generada amb Matlab. Comparació del senyal amb diferents períodes de mostratges ($n=K \cdot T_s$).	25
Figura 4. Font pròpia. Evolució de la naturalesa del senyal un cop tractat pels elements electrònics corresponents.....	26
Figura 5. Font pròpia. El procés de separació per mida de les molècules gràcies a la tecnologia GPC. A l'esquerra de la figura es pot veure un zoom que il·lustra com les molècules més petites elueixen més lentament, ja que queden més atrapades al gel....	30
Figura 6. Font pròpia. Esquema de l'equip de cromatografia HPLC.....	31
Figura 7. Esquema dels GPIO de la Raspberry Pi. [15].....	38
Figura 8. Font pròpia generada amb OrCad. Plànol electrònic corresponent a l'esquemàtic del sistema d'adquisició de dades.	42
Figura 9. Font pròpia. Esquema il·lustratiu de les connexions entre la RPi i el xip ADC, que formen el DAS de NORI.	42
Figura 10. Font pròpia. Esquema del sistema d'obtenció dades global.....	46
Figura 11. Font pròpia. Esquema particular pel laboratori 25-39.....	46
Figura 12. Font pròpia. Icona del programa CODIUM. Disseny realitzat en Power Point.49	
Figura 13. Font pròpia. Disseny d'algunes de les Finestres de CODIUM.....	49
Figura 14. Font pròpia. Arquitectura de la secció "Record" de CODIUM.....	50
Figura 15. Font pròpia. Arquitectura de la secció "Analyse" de CODIUM.....	51
Figura 16. Font pròpia. Arquitectura de CODIUM FT.	52
Figura 17. Font pròpia. Icona del programa CODIUM FT. Disseny realitzat en PWP.....	52
Figura 18. Font pròpia. Esquemàtic del potenciòmetre.	54

Figura 19. Font pròpia. Esquemàtic amb OrCad Capture del muntatge que transforma V_{mesurada} del potenciòmetre en un senyal digital, a través de xip MCP3008, i que processa la Raspberry Pi.....	55
Figura 20. Font pròpia. V_{mesurada} a mesura que varia R_2	56
Figura 21. Font pròpia. Esquema de funcionament del sensor SHARP.....	57
Figura 22. Font pròpia. Esquemàtic en OrCad Capture del DAS amb els tres sensors simultàniament.....	58
Figura 23. Font pròpia. Esquema de l'equip de cromatografia.....	59
Figura 24. Font pròpia, extret de CODIUM. El pic de tensió es correspon a l'encesa del detector 785A, al segon 7 de l'experiment aproximadament.....	60
Figura 25. Font pròpia, extreta de CODIUM. NORI detecta una oscil·lació de tensió perquè el detector Waters 2410 es comporta de manera errònia al faltar-li un component.....	60
Figura 26. Font pròpia. Esquema del muntatge complet amb el cromatògraf 785A i NORI.....	61
Figura 27. Font pròpia. Esquema de les connexions RPi, ADC, 785A. La figura del 785A utilitzada en aquest esquema és propietat de: [24].....	62
Figura 28. Detecció de NORI al pas de la Coca-Cola pel detector. Extret del fitxer obtingut per CODIUM.....	63
Figura 29. Font pròpia. Fórmula química del SMA.....	64
Figura 30. Detecció de NORI al pas del polímer pel detector. Extret del fitxer obtingut per CODIUM.....	64
Figura 31. Font pròpia. Quàdruple comparativa entre diferents longituds d'ona (en nm). 65	
Figura 32. Resultat de la detecció amb columna (20 minuts) i $WL=190$ nm. Extret del fitxer obtingut per CODIUM.....	66
Figura 33. Resultat de la detecció amb columna (20 minuts), $WL=190$ nm i 0,2 ml de mostra. Extret del fitxer obtingut per CODIUM.....	66
Figura 34. Resultat de la detecció simultània de dos sensors. Extret del fitxer obtingut per CODIUM.....	67
Figura 35.....	68

Figura 36. Font pròpia. Triple comparativa dels estàndards.....	68
Figura 37. Font pròpia. Recta de calibratge del GPC.	69
Figura 38. Font pròpia. Resultats extrets de CODIUM. Cromatogrames de SMA.....	70
Figura 39. Font pròpia, extret de CODIUM. Al segon experiment amb l'SMA, apareix de nou la cadena de contaminant.	71
Figura 40. Font pròpia. Detall del pic de contaminant de la mostra d'SMA.....	71
Figura 41. Font Pròpia. Aspecte del prototip NORI. El cable taronja és la sortida del detector.	79
Figura 42. Font pròpia. Muntatge de NORI amb els elements de cromatografia. També es poden veure els elements auxiliars que s'hi connecten: monitor, ratolí i teclat.	79
Figura 43. Font pròpia. Comparativa de dades enregistrades vs recta ideal de correspondència.....	80
Figura 44. Font pròpia. Estudi preliminar.....	83
Figura 45. Font pròpia. Projecte preliminar.....	83
Figura 46. Font pròpia. Realització (I).....	83
Figura 47. Font pròpia. Etapa de realització (II).....	84
Figura 48. Font pròpia. Tasques generals del projecte. Primera part.	84
Figura 49. Font pròpia. Tasques generals del projecte. Segona part.	84
Figura 50. Font pròpia. Procés de desmuntatge de la bomba que ha causat retard.	84

Llistat de taules

Taula 1. Valors de Mn, Mw i PD per alguns polímers coneguts. [4].....	28
Taula 2. Variació de diverses propietats dels polímers respecte el pes molecular i el grau de polidispersitat. [4].....	28
Taula 3. Diferents alternatives actuals de DAS al mercat, amb les seves especificacions.	32
Taula 4. Comparativa general entre Arduino i RPi.	36
Taula 5. Comparació entre els dos tipus de Raspberry Pi utilitzats al projecte.....	38
Taula 6. Rànquing TIOBE (consultat el 10/06/2023)	47
Taula 7. Font pròpia. Proves per modelar el gràfic de CODIUM.	67
Taula 8. Font pròpia. Dades experimentals per trobar la corba de calibratge.....	69
Taula 9. Font pròpia. Alimentacions externes de NORI.....	73
Taula 10. Font pròpia. Connexions internes de NORI	73
Taula 11. Font pròpia. Connexions externes de NORI.	74
Taula 12. Font pròpia. Condicions de funcionament de NORI.....	74
Taula 13. Font pròpia. Interfície gràfica CODIUM.....	75
Taula 14. Font pròpia. Interfície gràfica de CODIUM FT.	78
Taula 15. Font pròpia. Taula de falles en l'ús de NORI.	81
Taula 16. Font pròpia. Extret d'Excel. Taula de costos del projecte NORI.	86
Taula 17. Font pròpia. Emissions degudes als desplaçaments.....	87

1. Prefaci

Aquest treball s'ha desenvolupat juntament amb l'estudiant Elena Magrinyà. Entre els dos, hem dissenyat i implementat el projecte que es mostra a continuació, realitzant el treball de laboratori amb la supervisió del professor Jordi Bou. La meva dedicació ha estat més enfocada en el desenvolupament del hardware i el disseny dels diferents mòduls.

2. Introducció

2.1. Motivació

El departament d'enginyeria química de la ETSEIB utilitza els cromatògrafs per analitzar els pesos moleculars dels polímers, un camp d'àmplia aplicació dins de l'enginyeria. Tot i això, gran part de l'equip de cromatografia de la universitat no s'utilitza degut a que no hi ha cap element capaç d'adquirir i analitzar els senyals que s'emeten de manera versàtil. Actualment, la majoria dels equips d'adquisició de dades cromatogràfiques són exclusius d'una casa en concret i queden obsolets al cap d'un cert temps. Aquest projecte pretén resoldre aquesta problemàtica implementant un dispositiu universal i econòmic adequat per obtenir i processar els senyals, millorant així l'equipament tècnic de la universitat. El resultat d'aquest projecte queda en codi obert disponible per futures aplicacions dins de l'ETSEIB.

2.2. Abast del treball

Aquest projecte abasta el disseny i la implementació d'un sistema d'adquisició i anàlisi de dades, anomenat NORI, des de les etapes inicials fins a l'obtenció d'un prototip funcional. El resultat final del projecte inclou tant el hardware com el software de NORI, ja que cap dels dos pot funcionar sense l'altre. Per aquest motiu, no té sentit presentar el sistema de manera parcial. No obstant això, aquest Treball de Fi de Grau es centra en l'explicació del hardware, posant especial èmfasi en els seus components i les connexions entre els elements. No s'hi proporciona, però, una explicació detallada del software, així com la majoria de justificacions relacionades amb aquest aspecte, que queden fora de l'abast.

2.2.1. Abast segons les fases de la gestió de projectes

L'escala a la que es desenvolupa NORI és de prototipus no comercialitzable ni explotable.

El projecte es centra en posar en manifest les fases més creatives del modelatge de la màquina, on inicialment es plantegen unes especificacions (a mode d'objectius) que el dispositiu va adquirint durant aquest procés. Cal remarcar que aquests requeriments poden variar lleugerament a mesura que es va avançant en el projecte. També és possible que n'apareguin de nous, en relació a noves funcionalitats que esdevinguin d'unes anteriors.

També s'engloba la fase de construcció, on es verifica que el producte estigui en funcionament i donant els resultats esperats. En aquesta etapa, les funcions de revisió, planificació, seguiment, control, i revaluació de les especificacions són crucials. És per aquest motiu que el desenvolupament del hardware i del software és realitza sota un constant procés de depuració. Aquest procés pretén donar abast a assegurar que el

producte pugui connectar-se i funcionar òptimament en diferents entorns, corregint possibles errors i problemes de funcionament.

Així doncs, el producte final ha de ser coherent amb els requisits que s'imposen inicialment o durant el procés d'implementació, el qual està recolzat per diverses proves de sistema on es comproven diferents paràmetres. Al ser un projecte en constant evolució, s'espera que les diferents fases no es realitzin en ordre, sinó de manera quasi simultània. No queda contemplada l'etapa d'explotació (producció a gran escala, distribució, consum, etc.) ni la comercialització.

2.2.2. Limitacions del projecte

De manera més específica, NORI està sotmesa a certes limitacions tècniques que condicionen alguns paràmetres del seu funcionament, i el seu canvi no es contempla dins d'aquest projecte.

Entorn de treball:

- El sistema es desenvolupa al Laboratori Químic 25-39 de l'ETSEIB, pel que no pot superar les limitacions físiques que aquest imposa, com per exemple la configuració de les rosetes, que són limitades i d'accés complicat.
- El laboratori disposa d'una sèrie d'ordinadors de torre dels quals el sistema operatiu més recent és Windows 7. No obstant això, els ordinadors portàtils que s'utilitzen tenen Windows 10 o 11. NORI ha de ser capaç de funcionar amb qualsevol d'aquests sistemes operatius.
- Es dona ús a tots els elements inclosos al laboratori abans de comprar-ne de nous. Això suposa que NORI ha de treballar amb dispositius antics i adaptar-se a alguns aspectes d'aquests, com ara la connexió a pantalla o a internet. Tot i això, considerem que aprofitar l'equip tècnic és una acció positiva pel medi ambient, en termes econòmics i funcional a l'hora de provar el prototip.

Escala temporal:

- Com s'ha mencionat anteriorment, NORI és un sistema versàtil que es pot aplicar en altres àmbits a part de la cromatografia, i seria interessant provar-lo. No obstant això, el temps disponible per a l'experimentació està limitat i finalitza a principis de juny de 2023.

Aspecte econòmic:

- NORI està finançada a través del grup de recerca dirigit pel professor de l'escola Jordi Bou. El resultat final ha de ser rentable per a la universitat en comparació amb altres opcions del mercat, així que el pressupost pel prototip està acotat.

Limitacions tècniques:

- Es realitza un sol prototip de NORI. Es a dir, els components electrònics que formen part de l'ordinador central RPi com el processador, targeta gràfica, memòria interna, etc. no es modifiquen durant el transcurs d'aquest projecte. Tampoc s'afegeixen o es canvien els diferents perifèrics del prototip un cop aquest està establert.
- Per realitzar el prototipatge es consideren unions electròniques amb cables mitjançant una placa "protoboard". No s'abasta qualsevol altre procés de fabricació per donar un acabat més compacte i comercialitzable al prototip.
- Un cop NORI està implementada, es treballa amb els senyals obtinguts directament dels diferents sensors. La seva configuració queda dins de l'abast del projecte, però no la transformació del hardware o del software d'aquests.
- Per separat, els diferents components electrònics de NORI són productes comercials que es poden obtenir sense massa complicació. Així doncs, la fabricació pròpia d'algun component de NORI no queda inclòs al projecte i aquest s'ajusta al mercat, que ja té una oferta molt àmplia.
- Pel que fa al software, aquest es desenvolupa en Python, ja que és un llenguatge adequat per generar interfícies gràfiques i programar les accions de la RPi. Tot i això, al ser un llenguatge interpretat, presenta algunes restriccions quant a la velocitat d'execució. Aquestes restriccions s'assumeixen com fixes en el projecte i no s'abasta un canvi en el llenguatge de programació.

2.3. Objectius del treball

L'objectiu general d'aquest projecte és desenvolupar NORI, un sistema d'adquisició i anàlisi de dades universal, de baix cost i de fàcil manipulació, que permeti processar diferents senyals analògics procedents de sensors electrònics. Posteriorment, fer-lo servir per analitzar els outputs dels detectors del laboratori d'EQ 25-39, a partir d'un algoritme propi en Python, que permetrà calcular de manera indirecta el pes molecular de polímers.

Els objectius específics que s'engloben en el disseny i implementació del sistema d'adquisició de dades NORI són:

- Disseny electrònic del sistema, tant la projecció inicial en un esquemàtic com la implementació física en un prototip.
- Per tal que l'usuari pugui interactuar amb la unitat central del sistema, dur a terme un entorn de treball format per diversos perifèrics (pantalla, teclat, ratolí, etc.) que ajudin a que l'ús de NORI sigui més senzill.
- Implementar en NORI la funcionalitat de poder transferir les dades obtingudes a altres ordinadors mitjançant un mètode ràpid i segur.
- Comprovació del funcionament del prototip de NORI amb altres sensors diferents als detectors cromatogràfics. Es vol caracteritzar el sistema de la manera més acurada possible.
- Sotmetre cada característica de NORI a un procés constant de verificació i validació a partir de diverses proves de sistema.

Els objectius particulars de la implementació del sistema juntament amb l'equip de cromatografia del laboratori són:

- Realitzar el disseny i el desenvolupament de NORI al laboratori d'EQ 25-39, ja que és una oportunitat per:
 - Familiaritzar-se amb l'entorn de treball d'un laboratori d'enginyeria química.
 - Aprendre de la mà del professor Jordi Bou a manipular els diferents paràmetres d'un detector.
 - Muntar i desmuntar els equips de cromatografia per ajustar el seu funcionament a totes les etapes de l'experimentació.
 - Manipular les mostres de polímer i injectar-les al circuit cromatogràfic.
 - En general, formar-se en aquesta branca de l'enginyeria.

- Aconseguir resultats coherents en forma de valors numèrics dels diferents pesos moleculars dels polímers problema.

En el conjunt dels dos treballs, també es proposa com a objectiu la programació d'un software capaç d'executar la recollida de dades i que doni suport visual a totes les funcionalitats del sistema, ajudant a l'usuari a executar l'anàlisi del senyal.

3. Introducció teòrica.

En aquest capítol es recullen els fonaments teòrics més significatius en els que es basa aquest projecte. En primer lloc, es tracta sobre la naturalesa dels senyals i com es capturen i es processen a partir de tècniques pròpies de l'enginyeria fins a arribar a un computador. Al segon bloc, es parla sobre la cromatografia i l'obtenció de pesos moleculars de polímers, ja que és l'aplicació directa del dispositiu que s'implementa.

3.1. Tractament de senyals.

Un senyal és una magnitud físico-química variable en el temps. L'anàlisi de senyals és una tecnologia present en molts àmbits de la ciència i les matemàtiques, que té com a objectiu mesurar, modificar i controlar aquests senyals mitjançant diversos dispositius i metodologies. En l'enginyeria, sovint s'estudien senyals que provenen de sistemes que emeten informació durant el seu funcionament. A través de l'anàlisi d'aquesta informació, és possible comprendre i controlar millor els processos que es realitzen.

De manera més general, la majoria dels senyals són intrínsecs a processos naturals i representen magnituds no artificials. En el camp de la medicina, per exemple, es poden mesurar senyals com les ones cerebrals, el ritme cardíac o l'activitat muscular.

Per a poder manipular els senyals naturals és imprescindible l'ús de transductors, que converteixen la variable a mesurar en electricitat o viceversa. Els transductors que permeten transformar un senyal natural a senyal elèctric s'anomenen sensors [1], i són una part clau en la majoria de sistemes de control i monitoratge. Dins dels sensors, n'hi ha de diferents tipus en funció de quin sigui el senyal que es vol captar. Per exemple, si es vol mesurar la quantitat de vapor d'aigua en l'aire, els sensors més comuns són els higròmetres.

3.1.1. Classificació dels senyals en funció de la seva naturalesa

Dins de la gran varietat de senyals que existeixen, se'n diferencien dos classes en funció del tipus d'informació que contenen: els senyals analògics i els senyals digitals.

- Un senyal és analògic quan, en un instant de temps qualsevol, es considera que la informació que presenta està associada al valor real del senyal. Així doncs, una petita variació d'aquest pot tenir un significat notable en l'anàlisi del seu comportament [1].
- Per altra banda, un senyal és digital quan, en un instant de temps qualsevol, es considera que la informació està associada a l'interval de valors en el que es troba el valor del senyal, d'entre un conjunt finit d'interval possibles [1].

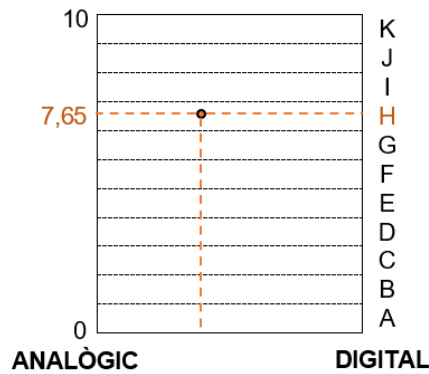


Figura 1. Font pròpia. Esquema Analògic-Digital

Per exemple, en la figura anterior, quan el senyal es considera analògic, aquest té valor 7,65, que és la magnitud real. En canvi, si s'està tractant en digital, li correspon un interval "H", que està entre 7 i 8. Aquest exemple evidencia que digitalitzant un senyal aquest perd resolució, que és idealment infinita en el tractament analògic.

Habitualment, els senyals analògics també són continus en el temps, és a dir, poden presentar variacions en el seu valor en qualsevol instant. Aquests tipus de senyals es poden representar mitjançant una funció matemàtica continua.

Contràriament als analògics, és habitual que els senyals digitals siguin discrets en el temps, el que significa que el valor es pren cada un determinat període de mostreig (T_s). Aquest valor mesurat s'acostuma a mantenir fins a la següent detecció, formant un esglaó (mantenedor d'ordre zero). Això permet reconstruir el senyal original parcialment.

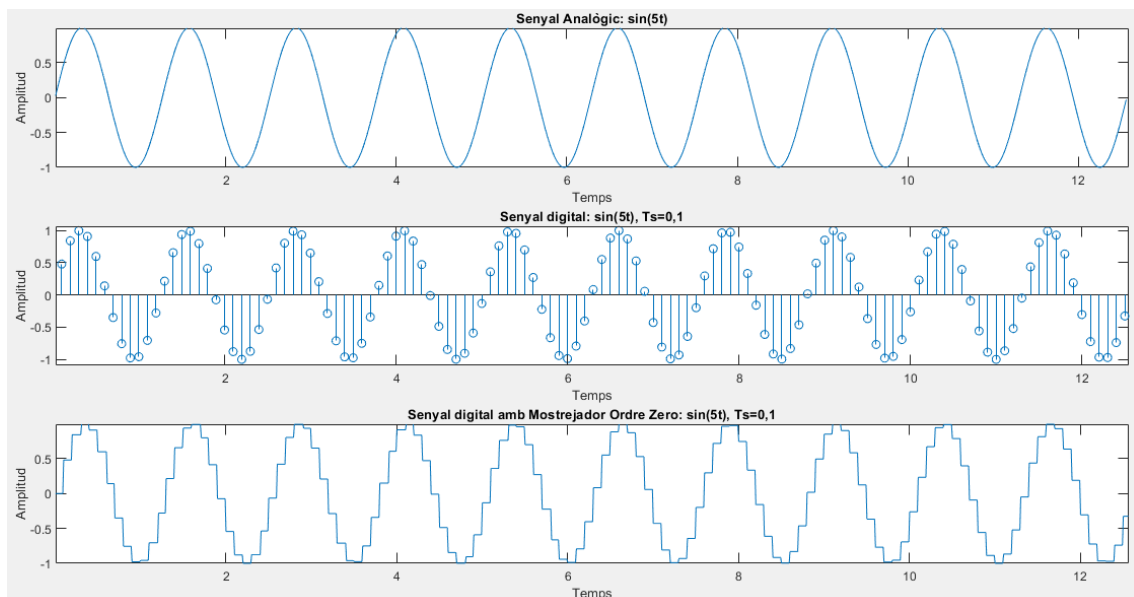


Figura 2. Font pròpia generada amb Matlab. Comparació entre el mateix senyal analògic continu i digital discret. Es pot observar que el senyal digital discret només canvia de valor quan passen T_s segons.

3.1.2. Anàlisi de senyals analògics i digitals per computador

Com s'ha comentat anteriorment, molts sistemes físics i químics són analògics, degut a que segueixen lleis naturals. Aquestes es poden descriure mitjançant equacions diferencials contínues que poden presentar qualsevol valor dins del seu rang de funcionament. [2] És per això que, anteriorment, l'estudi d'aquests sistemes s'efectuava amb components analògics, que permetien controlar els senyals. Tot i això, el processament analògic presenta una sèrie de problemes, alguns dels quals es descriuen a continuació:

- La precisió és baixa a causa de l'existència de soroll (per causes externes al sistema, com ara radiacions electromagnètiques que interfereixin).
- La implementació d'aquests sistemes és difícil i costosa.
- L'ús de components analògics per muntar circuits és poc versàtil i té una alta complexitat.

És per aquests motius que el processament i control dels sistemes ha anat migrant cap al conegut anàlisi per computador. Mitjançant un ordinador, és possible realitzar de manera similar les mateixes accions que es realitzaven amb la instrumentació analògica, ara de manera digital. El processament digital implica l'ús d'algorismes computacionals (codi informàtic) per manipular els senyals. Aquests senyals es digitalitzen, es processen en forma de bits i, a continuació, es realitzen les operacions necessàries per al control i la manipulació del sistema.

El processament digital presenta els següents avantatges respecte a l'analògic [1]:

- Ofereix una millor immunitat al soroll fins a un cert llindar, ja que les pertorbacions analògiques poden ser eliminades amb filtratge digital.
- Permet realitzar processaments molt complexos a un cost relativament baix, degut a que les operacions digitals es poden executar a través d'un codi informàtic.
- Proporciona una alta versatilitat dels muntatges, ja que es poden modificar les funcions i algorismes directament al software sense haver de canviar components físics (hardware).

Tot i això, no totes les característiques del processament digital són senzilles. Un aspecte clau d'aquest tipus de tractament és escollir un període de mostratge correcte, ja que sinó es pot arribar a mal interpretar la informació que s'està analitzant.

Teòricament, per saber si un senyal analògic està sent correctament mostrejat es considera el Teorema de Shannon o Teorema del mostreig. Aquest diu que:

- Es té un senyal modelat matemàticament dependent del temps, $y(t)$.
- Aquest senyal es discretitza prenent mostres amb un període de mostratge, T_s .
- Els mostratges que s'efectuen són a l'instant $K \cdot T_s$, amb K essent un nombre natural.
- La freqüència natural continguda pel senyal analitzat és w_p .

Aleshores, un cop mostrejat el senyal, es pot recuperar el senyal original $y(t)$ a partir de les seves mostres si es compleix que:

$$\omega_s = \frac{2\pi}{T_s} > 2\omega_p \quad (\text{Eq. 1})$$

Per exemple, es pren el senyal teòric descrit a la Figura 2: $y(t) = \sin(5t)$. Per trobar la freqüència continguda per aquest senyal s'ha de realitzar la transformada de Laplace, que és:

$$Y(s) = \frac{5}{s^2 + 5^2} \quad (\text{Eq. 2})$$

Els pols del quals (en s) són: $\pm 5j$ i, per tant, la seva pulsació és 5 rad/s. Així doncs, sabem que:

$$\omega_s = \frac{2\pi}{T_s} > 10 \frac{\text{rad}}{\text{s}}, \quad T_s < 0,628 \text{ s} \quad (\text{Eq. 3})$$

Aquest resultat indica que si s'utilitzen valors de mostratge més grans que 0,628 no es pot tornar al senyal original unívocament, ja que altres senyals comparteixen els mateixos punts. De fet, és fàcil notar que com més gran sigui el període de mostratge, més s'allunya del comportament analògic.

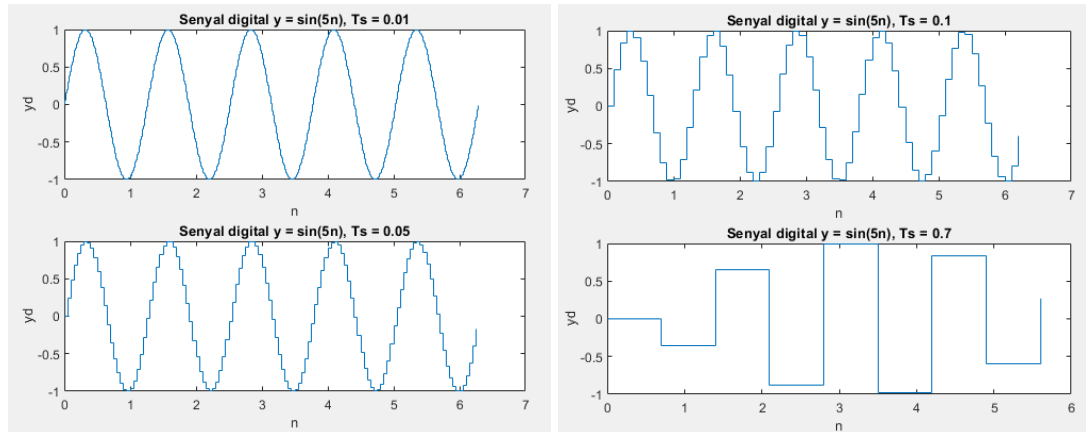


Figura 3. Pont pròpia generada amb Matlab. Comparació del senyal amb diferents períodes de mostratges ($n=K \cdot T_s$).

De cara a aquest projecte, interessa que el període de mostratge sigui el suficientment petit per a reproduir amb exactitud la corba analògica que s'estudia. Tot i això, com més petit sigui T_s , més retard es genera, degut a que el PC no és capaç de compilar el codi de manera tant ràpida. Aquestes limitacions es tenen en consideració a l'hora del disseny i l'anàlisi dels resultats.

3.1.3. Procés de transformació de la naturalesa d'un senyal

Un cop registrat el senyal natural que es vol mesurar a partir del sensor adequat, aquesta informació analògica no és directament compatible amb el món digital, és a dir, no pot ser tractada directament amb un computador. Es necessita un altre dispositiu electrònic que sigui capaç de transformar la naturalesa del senyal a digital, amb unes certes característiques (com el període de mostreig, T_s) pròpies d'aquest tipus de senyal. Aquest dispositiu és un convertidor analògic-digital (ADC), que realitza un procediment de mostreig i retenció.

Així doncs, es pot representar quin és el camí que s'ha de seguir per a poder tractar les dades dels sistemes analògics mitjançant un computador:



Figura 4. Font pròpia. Evolució de la naturalesa del senyal un cop tractat pels elements electrònics corresponents.

3.2. Determinació dels pesos moleculars de polímers per cromatografia líquida

3.2.1. Càlcul teòric del pes molecular dels polímers

Les macromolècules són molècules grans formades per la unió de diverses subunitats més petites. Els polímers, com a part de les macromolècules, estan compostos a partir de petites unitats anomenades monòmers, que s'uneixen i entrellacen entre sí. [3] Un dels aspectes més importants per la caracterització dels polímers és la seva massa molecular, ja que a partir d'aquesta es poden determinar un seguit de propietats úniques per a cada mostra.

En el càlcul de pesos moleculars de les macromolècules, es poden donar dues situacions diferenciades segons el tipus de substància que s'estigui analitzant. En primer lloc, si es tracta d'una substància pura monodispersa, aquesta té una massa molar única i definida, que es pot trobar com:

$$M = x \cdot M_o \quad (\text{Eq. 4})$$

Essent M el pes molecular total, calculat com el producte de x (número d'unitats repetides) per M_o (massa molecular de cada unitat repetida). Per altra banda, els polímers solen ser polidispersos. Degut a la naturalesa estadística de les reaccions de polimerització, una mostra sol estar formada per un conjunt de cadenes de diferent longitud i massa molar.

Per calcular la mida del polímer, s'utilitzen tècniques tals com la osmometria, sedimentacions i diàlisis, tot i que la metodologia més utilitzada actualment és la GPC (veure 3.2.2). Aquesta presenta una major rapidesa en l'anàlisi, així com una major claredat dels resultats obtinguts. També és una tècnica puntera en el sentit que es necessita molt poca quantitat de polímer per a executar un assaig. Tot i aquestes diferències, el que tenen en comú aquestes tècniques és que condueixen a diferents valors mitjos de massa molecular. El càlcul teòric d'aquests valors mitjos és:

$$\text{Massa molar mitja en número: } \overline{M}_n = \frac{1}{N} \sum_i^P N_i M_i \quad [g/mol] \quad (\text{Eq. 5})$$

$$\text{Massa molar mitja en pes: } \overline{M}_w = \frac{\sum_i^P N_i M_i^2}{\sum_i^P N_i M_i} \quad [g/mol] \quad (\text{Eq. 6})$$

Amb N sent el número total de molècules, N_i el número de molècules amb massa molecular M_i i P el número total de molècules diferents.

La tècnica de GPC permet obtenir directament les mesures de M_n i M_w , a més de la corba de distribució cromatogràfica, que permet observar altres característiques de la mostra.

Tot i que a priori pot semblar que aquests paràmetres han de tenir el mateix valor, això no és així pels polímers polidispersos. M_n aporta un valor que dona informació sobre quina és la massa que tenen la majoria de cadenes del polímer, mentre que M_w dona més importància a la presència de cadenes llargues. És per aquest motiu que M_w és major que M_n . Aquesta diferència de valors aporta informació addicional sobre les propietats del polímer que s'està estudiant, definint-se com índex d'heterogeneïtat o polidispersitat (PD):

$$PD = \frac{\overline{M_w}}{\overline{M_n}} > 1 \quad (\text{Eq. 7})$$

Els materials sintètics més comuns tenen un valor de PD rondant 4, tot i que aquest pot variar entre 2 i 10. Un PD pròxim a 1 significa que el polímer és pràcticament monodispers i, per tant, la corba cromatogràfica és molt estreta. De manera contrària, un PD elevat resulta en una corba de distribució més ampla i indica que el polímer és altament polidispers.

Alguns dels valors de pesos moleculars per polímers coneguts son:

Taula 1. Valors de M_n , M_w i PD per alguns polímers coneguts. [4]

Polímer	M_n (kg/mol)	M_w (kg/mol)	PD
HDPE (GP)	20	85	4,2
PP (fibra)	40	300	7,5
PS	100	250	2,5
PVC	50	150	3,0
PMMA colada	300	1500	5
PMMA injecció	35	80	2,2
PET	15	30	2,0
Policarbonat	15	35	2,3
Cautxú natural	100	800	8,0

La variació d'algunes propietats dels polímers respecte el seu pes molecular és la que es mostra a continuació:

Taula 2. Variació de diverses propietats dels polímers respecte el pes molecular i el grau de polidispersitat. [4]

Propietat	Augment pes molecular	Augment polidispersitat
Mòdul elàstic	Augmenta	Disminueix
Elongació	Augmenta	Augmenta
Duresa	Augmenta	Augmenta
Temperatura de reblaniment	Augmenta	Disminueix
Adhesió	Disminueix	Augmenta
Resistència química	Augmenta	Disminueix
Resistència a l'impacte	Augmenta	Augmenta
Viscositat del fos	Augmenta	Disminueix
Resistència elèctrica	Augmenta	Disminueix

3.2.2. Cromatografia líquida HPLC

La cromatografia és una tècnica analítica que permet separar diversos components d'una mescla, identificar-los i quantificar-los. És àmpliament utilitzada en diversos sectors, com ara el farmacèutic, el control de qualitat d'impureses o la investigació forense de substàncies il·legals en esportistes.

Aquesta tècnica comprèn processos en què els components d'una barreja, dissolts en una fase mòbil, es van desplaçant amb diferent velocitat a través d'una fase estacionària. La diferència entre les velocitats dels components entre les fases de la mescla permet la seva separació.

La cromatografia líquida HPLC és una tècnica cromatogràfica que té com a particularitat que:

- La fase mòbil és un líquid (analit dissolt en aigua).
- La fase estacionària és un conjunt de sòlids diversos i líquids absorbits en un suport sòlid (anomenada pols).

El mecanisme de separació de la cromatografia líquida HPLC correspon a les interaccions físiques o químiques que es donen entre la fase mòbil i la fase estacionària, que poden ser àcid-base, per afinitat de càrrega, hidrofòbiques, per mida de molecular, etc. Aquest procés es dona a mesura que la fase mòbil passa a través d'una columna cromatogràfica, que conté la fase estacionària.

La velocitat de l'analit es pot definir com la velocitat de l'aigua entre el factor de frenada (F). Al mateix temps, aquest és funció de les constants d'equilibri de les interaccions fisicoquímiques que existeixen entre l'analit i la fase estacionària.

$$v_A = \frac{v_{aigua}}{F}, F = f(K_d) \quad (Eq. 8)$$

Si existeixen més interaccions entre els dos components, el factor de frenada augmenta, ja que l'analit tendeix a quedar-se més enganxat a la fase estacionària. Al augmentar el factor de frenada, la seva velocitat és més reduïda. Així, diferents components que passen per la columna cromatogràfica trigaran més o menys temps a sortir-ne en funció de la seva velocitat. Aquest temps s'anomena temps de retenció.

Per poder determinar el pes molecular dels polímers, s'utilitza la cromatografia d'exclusió molecular (SEC), també coneguda com cromatografia de permeació de gel (GPC). Aquesta tècnica separa les substàncies segons la mida de les molècules al passar per la columna cromatogràfica plena de pols.

Les molècules més petites són capaces d'ocupar més porus en la pols de la columna i, per

tant, s'hi queden retingudes més temps. El seu factor de frenada és elevat, i la seva velocitat reduïda. En canvi, les molècules de major grandària només "s'enganxen" als porus més grans, fet que fa que s'elueixin abans (surten abans de la columna de separació, amb un temps de retenció menor). [4]

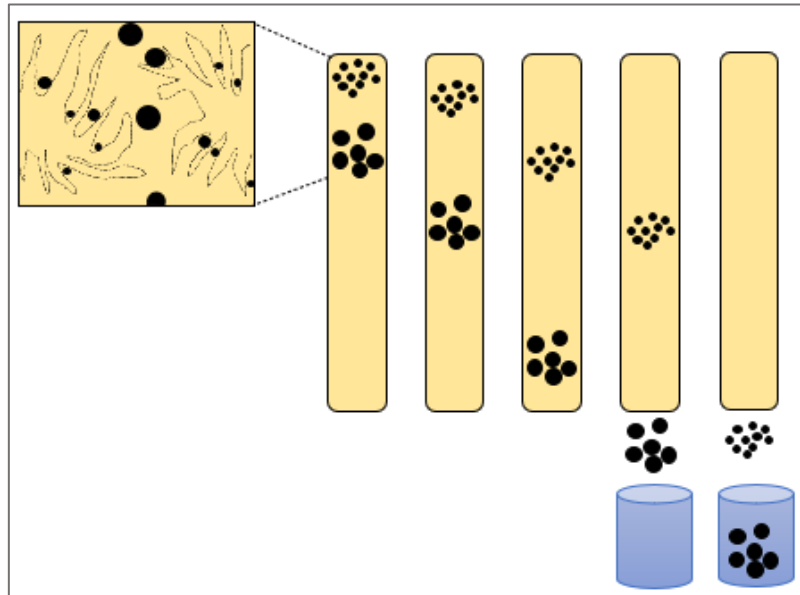


Figura 5. Font pròpia. El procés de separació per mida de les molècules gràcies a la tecnologia GPC. A l'esquerra de la figura es pot veure un zoom que il·lustra com les molècules més petites elueixen més lentament, ja que queden més atrapades al gel.

A mesura que l'analit va sortint per la columna ja separat, aquest passa per un detector que n'enregistra el temps de sortida i la magnitud. Així s'obté un gràfic temporal anomenat cromatograma, amb diferents pics corresponents a les diferents mides moleculars. Al llarg del temps poden aparèixer diversos pics corresponents cadascun a un component de l'analit. El temps de retenció permet saber de quin component es tracta, i la seva magnitud la concentració del component.

En el cas dels polímers, aquests estan formats per cadenes de monòmers de longituds grans i petites. Aleshores, s'obté un cromatograma amb una distribució de la llargada de les cadenes. Gràcies a aquesta distribució, es poden calcular els promitjos dels pesos moleculars dels polímers, fent un previ calibratge del pes molecular que correspon a cada temps de retenció. Aquesta regulació es fa fent l'experiment amb mostres d'un pes molecular conegut (generalment monodisperses). Això dona lloc a una equació de calibratge que permet saber a quin temps de retenció elueixen les molècules segons el seu pes molecular [4]:

$$\log_{10} [M_i] = A + B \cdot T_r + C \cdot T_r^2 + D \cdot T_r^3 \quad (\text{Eq. 9})$$

3.2.3. Equips de cromatografia HPLC

Els equips de cromatografia HPLC estan formats per diversos elements mecànics i electrònics que realitzen l'operació de fer circular la mostra per ser analitzada. L'eluent (aigua) prové d'un primer dipòsit que, a través d'una bomba de pistons, arrossega la mostra injectada passant pel detector i arribant finalment al dipòsit de residus.

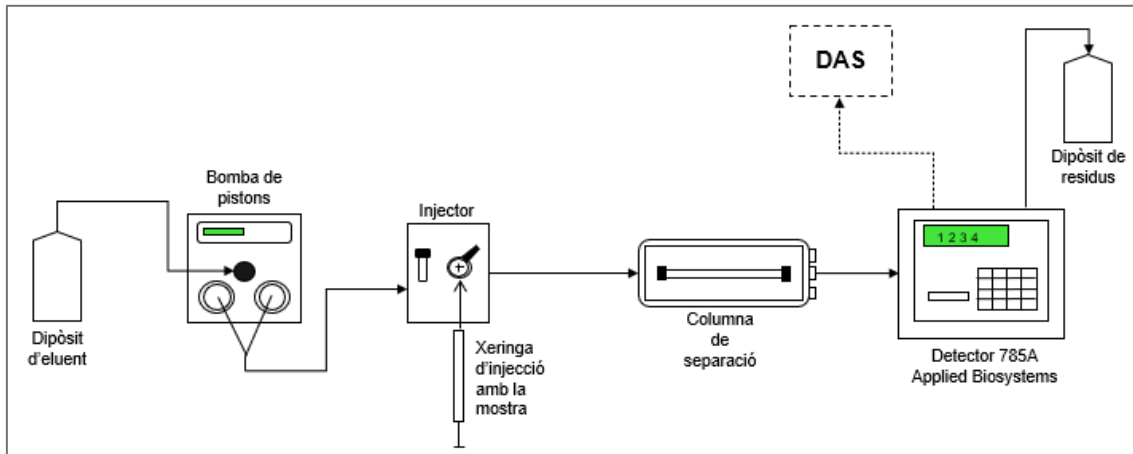


Figura 6. Font pròpia. Esquema de l'equip de cromatografia HPLC.

- La bomba de pistons és capaç d'operar a altes pressions i és l'encarregada de bombejar el polímer en dissolució a través del sistema.
- L'injector consisteix en un dispositiu capacitat per introduir la mostra de polímer que es vol analitzar al flux d'eluent prèviament establert gràcies a la bomba de pistons. La quantitat de mostra requerida és relativament petita (una de les avantatges de la tecnologia GPC) i és per això que conté un petit dipòsit addicional per emmagatzemar el sobrant rebut per la xeringa.
- La columna de separació és l'encarregada d'executar el procés de separació de les molècules del polímer per mida. Les molècules més grans elueixen més ràpidament, i passen abans al detector.
- El detector, que s'encarrega de detectar una propietat de la substància que surt de la columna. Existeixen de diversos tipus, com ara d'absorbància o de refractància, entre d'altres, i conté diversos paràmetres configurables per part de l'usuari. És comú que se'n connectin dos en cascada per detectar dues propietats diferents d'una mateixa mostra.
- Finalment, l'equip automàtic de processament de dades (DAS, és el que es desenvolupa en aquest treball) registra les dades obtingudes del detector transformant-les a digitals. Calcula automàticament els valors de M_n , M_w i PD, i mostra l'anàlisi gràfic cromatogràfic. Permet interactuar amb les dades adquirides.

3.3. Estat de la qüestió

Actualment existeixen productes que integren software i hardware capaços d'adquirir i tractar dades analògiques per computador (DAS). En concret en l'àmbit de la cromatografia, que és en el que es centra aquest projecte, es poden trobar al mercat diversos equips d'adquisició de senyals destinats a treballar amb la informació emesa pels detectors.

Aquests productes incorporen interfícies desenvolupades per un únic fi, que és el de donar suport a l'adquisició i tractament de les dades obtingudes pels detectors de la mateixa casa. Habitualment, les empreses que necessiten d'aquesta tecnologia adquireixen de cop tot l'equip cromatogràfic, inclòs el DAS, que s'instal·la a l'ordinador de l'usuari i s'opera des d'allà per obtenir els resultats. Això implica que cada software d'adquisició i tractament de dades és específic per cada un dels detectors, i generalment incompatibles entre ells, causant la necessitat d'adquirir un programa específic per cada dispositiu detector diferent del laboratori.

A més, l'alt nivell d'especificació i privacitat del codi informàtic de backend, no permet interactuar amb el software més enllà del que està previst a les funcions del producte. Al passar un determinat període de temps, aquests es queden obsolets per incompatibilitats amb els sistemes operatius dels ordinadors i requereixen d'una renovació (nova compra íntegra del DAS, o fins i tot del detector sencer). Per un equip d'investigació universitari que realitza projectes de durada indeterminada en els quals no s'està utilitzant l'equip de cromatografia a temps complet, una inversió recurrent d'aquest nivell suposa un problema.

Alguns exemples de productes en el camp de la cromatografia actualment al mercat són els que es mostren a la taula següent:

Taula 3. Diferents alternatives actuals de DAS al mercat, amb les seves especificacions.

Marca	Model	Preu	Especificacions destacades
Waters [5]	Empower personal GPC/SEC Option	3.675,00 €	<ul style="list-style-type: none"> Inclou el càlcul dels resultats típics del GPC: Mn, Mw, Mp, Mz, Mz+1. Crea la corba de calibratge i mostra gràfiques de distribució amb els resultats de fàcil interpretació.
ADC/Labs [6]	Spectrus Processor	1.890,00 € / 1 any 2.205,00 € / 2 anys 2.520,00 € / 3 anys	<ul style="list-style-type: none"> Efectua l'anàlisi de dades prèviament obtingudes. Detecta el pic més alt, redueix el soroll, aplanar la corba i calcula àrees. Permet visualitzar els cromatogrames.
BIO-RAD [7]	ChromLab Software	1.236,00 €	<ul style="list-style-type: none"> Visualització en temps real del cromatograma. Càlcul automàtic dels principals paràmetres per obtenir els pesos moleculars.

DataApex [8]	Clarity Chromatography Software	3.350,00 € (segona mà)	<ul style="list-style-type: none">• Control integrats dels instruments (bomba, detector, mostrejadors, etc.)• Permet fer tècniques de separació, anàlisi de GPC o espectrometria de massa.
---------------------	---------------------------------------	---------------------------	---

Com es pot observar a la taula anterior, algunes d'aquestes solucions només presenten un seguit de característiques de les moltes que es requereixen. Per exemple, l'ADC/Labs només realitza la part de l'anàlisi de les dades, no l'adquisició d'aquestes. Alguns altres, com el DataApex, inclouen funcionalitats extres que no són necessàries pel tipus d'experiments que es duen a terme a l'ETSEIB.

L'eina desenvolupada en aquest treball pretén resoldre aquesta problemàtica sent de codi obert, universal i econòmica; permetent al grup d'investigació del professor Jordi Bou incorporar el dispositiu amb els diferents detectors cromatogràfics funcionals que tenen al laboratori. Aquesta s'ha d'ajustar en la millor manera possible a les necessitats específiques del professor Bou.

4. Equipament tècnic i metodologia

En aquest capítol es tracta la fase de disseny dels diferents components de NORI, tant físics com computacionals. És fa incís sobre la part del hardware, que és la que abasta aquest treball.

Un cop el sistema està materialitzat i en funcionament, es realitzen diversos processos experimentals per estudiar el seu comportament i definir les seves limitacions funcionals, tals com proves exploratòries o d'interoperabilitat. Posteriorment, es realitza el muntatge i experimentació amb el detector i es tracten les dades dels polímers amb l'objectiu de determinar el seu pes molecular.

4.1. Disseny i implementació del hardware de NORI

El hardware del dispositiu d'adquisició de dades és el conjunt d'elements físics que permeten el seu funcionament. Inclou tots aquells elements tangibles manipulats i connectats de manera que el sistema compleixi les especificacions.

L'objectiu d'aquesta secció és determinar els components que conformen el hardware de NORI i realitzar les connexions electròniques i elèctriques entre ells per obtenir un conjunt funcional.

4.1.1. Equipament electrònic

Com s'ha vist a l'apartat 3.1.3, per poder agafar senyals analògics del món i analitzar-los mitjançant un ordinador es requereix de 3 elements principals: un sensor, un convertidor ADC i un computador. Aquests elements són components electrònics que poden variar en funció del senyal que es vol analitzar i conformen el hardware de la màquina que s'està implementant.

4.1.1.1. La Raspberry Pi com a computador

L'element més important de NORI és el propi computador, que s'encarrega d'executar les accions que se li demanen a partir d'un codi informàtic. Sobre el PC també recauen altres funcionalitats addicionals, tals com la connexió a internet i l'emmagatzematge de les dades que es processen.

Els requeriments que es demanen a aquest dispositiu per a la realització de NORI són els que es detallen a continuació:

- Habilitat per connectar-se a dispositius externs d'instrumentació electrònica, és a dir, connectar-se al sensor o detector elèctricament, així com als perifèrics.

- Compatibilitat del computador amb elements auxiliars de visualització i navegació tals com pantalla, teclat, ratolí, etc. per la interacció amb l'usuari.
- Capacitat d'emmagatzemar dades i de processar-les mitjançant l'execució de codi informàtic propi, preferiblement en Python, ja que és el llenguatge de programació més utilitzat al llarg del GETI. A més, és un llenguatge d'alt nivell amb molt bona llegibilitat, que inclou una gran quantitat de llibreries que permeten agilitzar la programació.
- El preu de l'ordinador ha de ser el més reduït possible, sempre intentant cobrir les altres especificacions.
- L'ordinador també ha de ser capaç d'establir una connexió a internet per interactuar amb altres dispositius.

Tenint en compte aquestes especificacions, es descarten els ordinadors de sobre taula o portàtils, ja que en la seva majoria no es poden connectar elèctricament al sensor ni al ADC. A més, aquests presenten un cost elevat en relació a l'aprofitament de funcions que se'n faria en aquest projecte.

Les dos alternatives que es poden trobar al mercat i que presenten unes característiques adequades pel desenvolupament del projecte són l'Arduino i l'ordinador de placa única (SBC, en anglès Single Board Computer) Raspberry Pi.

L'Arduino és una plataforma de hardware i de software que està dissenyada per la realització de petits projectes de robòtica així com màquines de complexitat baixa (com rellotges, sensors de moviments, etc.). En general, l'aplicació principal d'aquesta placa és la de poder-se connectar a diversos perifèrics i controlar-los, però enfocada en muntatges que requereixen de poc emmagatzematge i capacitat de processament de dades.

El nucli de l'Arduino és un microcontrolador que té la capacitat de connectar-se tant a perifèrics digitals com analògics. Presenta una entrada USB per poder-se connectar a un PC extern d'on rep els algorismes per funcionar. Les connexions estan optimitzades gràcies a Arduino IDE (Entorn de Desenvolupament Integrat), un entorn de programació compatible amb qualsevol plataforma (Windows, Linux i macOS), que a més presenta una interfície amb varies biblioteques que faciliten la programació. Tot i això, aquest entorn de desenvolupament està limitat a causa que l'Arduino presenta memòries de programa (flaix) que oscil·len entre 32 KB i 256 KB [9] i RAM (estàtiques) entre 2 KB i 32KB a la seva última versió [10]. Aquests valors són baixos per l'execució de programes que treballin amb grans quantitats de dades o per aplicacions complexes. A més, els algorismes amb els que treballa Arduino estan basats en C/C++, fet que complica la programació.

Per altra banda, la Raspberry Pi és un ordinador monoplaca que opera sense la necessitat d'estar connectada a un altre ordinador extern. Es tracta d'una placa de circuit imprès que conté tots els components d'un ordinador en una sola peça: el processador, la memòria, els connectors d'entrada/sortida, els controladors de dispositius, els ports d'expansió, etc. Aquesta opció té les connexions elèctriques adequades per funcionar com un sistema d'adquisició de dades.

En general, la RPi funciona com un petit ordinador, amb un sistema operatiu propi semblant a Linux, que li dona molta flexibilitat i versatilitat a l'hora del disseny d'aplicacions, desenvolupades habitualment en Python. La Raspberry Pi presenta una major capacitat de processament, així com més memòria RAM (en la majoria de models és 1 GB) i freqüència de rellotge (depenent del model). A més, les versions més comunes disposen de 4 ports USB, 1 port HDMI i connexió Ethernet, entre altres. Gràcies a la connexió a internet, la RPi és capaç d'accedir i transferir dades al núvol. Per últim, la RPi inclou un suport físic per incorporar una targeta microSD, fet que li permet augmentar la capacitat d'emmagatzematge. Aquesta s'utilitza per carregar el sistema operatiu i com a memòria flash.

Com a comparativa, es mostra una taula amb les característiques més importants dels dos dispositius, de forma general:

Taula 4. Comparativa general entre Arduino i RPi.

	Arduino (microcontrolador)	Raspberry Pi (ordinador monoplaca)
Sistema de funcionament general	Es connecta l'Arduino a un PC i als perifèrics que ha de controlar, a partir de la programació en IDE (C/C++). Serveix per petits projectes de robòtica o màquines electròniques simples.	És un petit ordinador, que presenta ports per connectar-hi una pantalla, ratolí, teclat, USB i els perifèrics. Es poden desenvolupar algorismes complexos en Python dins del seu sistema operatiu i treballar amb grans quantitats de dades.
Processador	Poc potent (8 bits, fins a 32 bits en alguns models ampliat)	Més potent (entre 32 i 64 bits els models més habituals)
Freqüència de rellotge	Baixa (16 HMz la més comuna)	Alta (entre 900 MHz i 1,8 GHz)
Memòria RAM	Baixa (2 KB, fins a 32 KB en alguns models ampliat)	Alta (1 GB, fins a 8 GB en alguns models ampliat)
Memòria Flash	Baixa (32 KB, fins a 256 KB en alguns models ampliat)	Targeta microSD
Connexions amb altres dispositius	Habitualment: 1 port USB i els pins pels perifèrics.	Habitualment: 4 ports USB, 1 port HDMI, 1 port Ethernet i els pins pels perifèrics

Connexió a internet	No directament (el PC al que està connectat sí). Alguns models ampliats poden incorporar-ne.	Sí (depenent del model també pot ser inalàmbrica).
Programació	IDE (C/C++) amb biblioteques ja desenvolupades. Limitacions a l'hora d'executar programes complexos o amb tractament de moltes dades	Més flexible. Habitualment en Python. Apte pel tractament i anàlisi de grans quantitats de dades o algorismes amb operacions complexes.
Preu de mercat	Preu models intermitjos recomanat pel fabricant: 24,00€ - 47,00€ ([11] data 07/06/2023)	Preu models intermitjos recomanat pel fabricant: 39,87€ - 52,51 € ([12] data 07/06/2023) El preu pot ser més car degut a la forta demanda i l'escassetat de components.

Per l'anàlisi i tractament de grans blocs de dades en el rang d'aquest projecte (que és el cas d'un sistema DAS), la Raspberry Pi presenta millors característiques, ja que aquesta incorpora un processador més potent, així com més memòria RAM i d'emmagatzematge microSD. En canvi, l'Arduino és més lent, presenta menys capacitat d'executar aplicacions i els algorismes s'han de desenvolupar en l'entorn limitat IDE. Això significa que pot presentar problemes a l'hora d'executar programes en temps real que suposin càlculs complexos o especificacions concretes, com ara crear un fitxer d'Excel automàtic amb el resultat de l'anàlisi de les dades. A més, l'Arduino està més limitat a l'hora de realitzar processos de depuració, el que dificulta el seguiment i correcció d'error al codi.

Per últim, la RPi presenta més escalabilitat, el que significa que és més fàcil expandir o modificar dràsticament algun dels mòduls dels software. En canvi, amb l'Arduino pot passar que apareguin limitacions tant de hardware com de software que no permetin realitzar aquests canvis de manera tant ràpida i efectiva.

Així doncs, el computador escollit és la Raspberry Pi (RPi), desenvolupat per la Raspberry Pi Foundation al Regne Unit. Les característiques específiques d'aquest computador depenen del model que s'estigui utilitzant, tot i que hi ha aspectes que no varien entre les versions més noves.

Per aquest projecte, s'ha utilitzat tant la Raspberry Pi 2B com la Raspberry Pi 3B+ per temes de disponibilitat. El primer model només es va utilitzar per a adquirir dades de senyals no gaire complexos i sense necessitat d'un gran rendiment, en els primers muntatges de NORI.

Les diferències entre aquests 2 dispositius es troben, principalment, en aspectes de connectivitat i processament. Es mostren a la taula següent:

Taula 5. Comparació entre els dos tipus de Raspberry Pi utilitzats al projecte.

		Raspberry Pi 2B [13]	Raspberry Pi 3B+ [14]
Processador		ARM Cortex A-7, de 32 bits i 900MHz	ARM Cortex A-53, de 64 bits i 1,4GHz
Memòria RAM		1GB	1GB
Connectivitat	Wi-Fi	No inalàmbric	Inalàmbric, amb bandes de freqüència de 2,4GHz i 5GHz
	Bluetooth	No	4.2
	Ethernet	Gigabit Ethernet (100Mbit/s)	Gigabit Ethernet (300Mbit/s)
Potència consumida mitja		1,8W (360mA a 5V)	3,5W (700mA a 5V)
Preu del fabricant		35\$	35\$
GPIO		40	40

Tal com s'indica a la Taula 5, aquests dos models de Raspberry Pi tenen els mateixos pins de connectivitat (GPIO). Els GPIO (General Purpose Input/Output) són pins genèrics situats al xip del computador, dels quals se'n pot programar el seu comportament (incloent si es tracta d'un pin d'entrada o sortida). La Raspberry Pi inclou 40 d'aquests pins digitals connectats a la CPU. Els seus nivells de voltatge són 0V (GND) pel bit 0 i 3,3V (3V3) pel bit 1 i tenen una freqüència màxima de 22MHz.

Els GPIO son de gran importància per aquest projecte, ja que a partir de la capacitat que tenen per ser programats, es poden utilitzar per rebre dades i enviar-les cap on es vulgui. També se'ls pot programar per a comunicar-se amb altres dispositius.

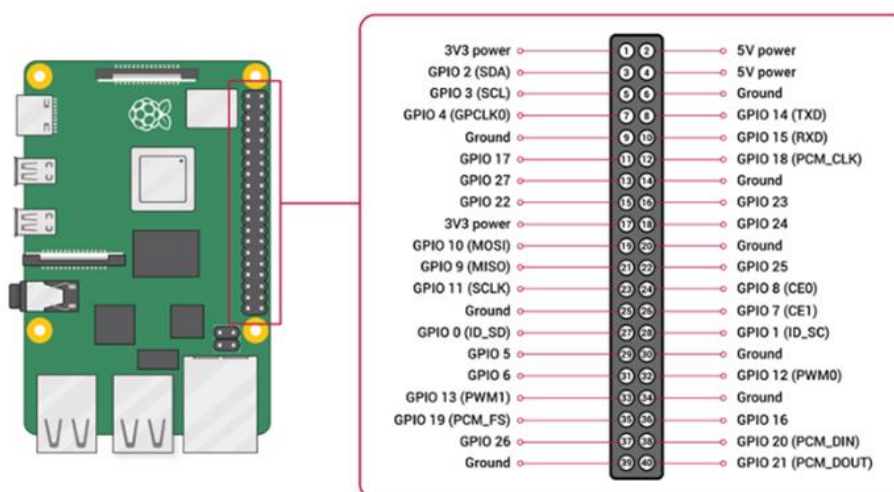


Figura 7. Esquema dels GPIO de la Raspberry Pi. [15]

4.1.1.2. Elements d'interacció de l'usuari amb el computador

Un cop situada la Raspberry Pi com el computador de NORI, es necessiten dispositius addicionals per a que l'usuari pugui interactuar amb aquest de manera més còmoda i eficient. Aquests són:

- Monitor: és l'element que s'encarrega de mostrar la informació que es processa a l'ordinador.
- Ratolí: permet als usuaris moure el cursor a la pantalla i fer clic en botons per seleccionar opcions i realitzar accions.
- Teclat: és l'element que permet introduir text i comandaments a l'ordinador.

Així doncs, es connecten el monitor, teclat i ratolí a la RPi mitjançant els ports de connectivitat que porta incorporat aquest petit ordinador. En concret, s'utilitzen dos dels quatre ports USB de la Raspberry Pi per a fer les connexions del teclat i el ratolí, mentre que la pantalla s'enllaça amb el port HDMI, que també inclou la RPi (tant el model RPi2B com el RPi3B+).

A part d'aquests elements d'interacció amb l'usuari, també s'utilitza una targeta externa microSD (de 8 GB). La targeta microSD permet instal·lar el sistema operatiu de la Raspberry Pi, que és Raspberry Pi OS, anteriorment anomenat Raspbian, un sistema operatiu d'ús gratuït basat en Debian, que està optimitzat per la placa. Pel model RPi3B+ no és explícitament necessari aquest element, però permet emmagatzemar tant els codis com els documents de dades que es generen.

Un cop implementats tots els accessoris al computador, resten desocupats dos dels quatre ports USB, independentment de la versió RPi que s'estigui fent servir. En el cas del model 2B, un d'aquests es fa servir per a connectar l'adaptador de xarxa inalàmbrica USB, que permet que l'ordinador tingui accés a internet sense fils.

4.1.1.3. El xip MCP3008 com a convertidor ADC

Com s'ha esmentat anteriorment, els GPIO de la Raspberry Pi són els pins pels que entra i surt la informació digital que processa el computador. Aquesta informació en cap dels casos pot ser analògica, ja que l'ordinador treballa en bits. És per això que es requereix d'un convertidor analògic-digital (ADC) que converteix el senyal adquirit analògic en un senyal digital. En el cas d'aquest muntatge s'ha escollit el xip MCP3008 de de Microixip Technology Inc. [16]

A continuació, es detallen algunes de les característiques principals del MCP3008 que han fet que s'hagi escollit per aquest projecte:

- Resolució: L'MCP3008 té una resolució de 10 bits, el que significa que pot llegir fins a 1024 valors diferents. Això ofereix una mesura més precisa dels senyals analògics en comparació a altres ADC de resolució més baixa. Si per exemple s'està mesurant un valor de 0 a 5 V, això vol dir que entre mesures hi haurà un pas de 0,0048828125 V.
- Interfície compatible: L'MCP3008 utilitza una interfície SPI (Serial Peripheral Interface) que és compatible amb la Raspberry Pi. Això fa que sigui fàcil de connectar i integrar en un projecte.
- Disponibilitat: El xip MCP3008 és una solució econòmica i de fàcil accés a funcionar com a ADC en aquest projecte, ja que es pot trobar fàcilment en línia i en botigues de components electrònics.
- Flexibilitat: L'MCP3008 disposa de 8 entrades que permeten connectar múltiples canals de senyal analògic per a la lectura simultània de diferents sensors o dispositius de mesura del senyal.

Es pot observar del datasheet del ADC MCP3008 [16] la configuració dels 16 pins que el conformen. El xip té 8 canals d'entrada per rebre la informació analògica (CH0 a CH7) que surt transformada en digital pel canal de sortida (pin 12, D_{OUT}). L'alimentació del xip es realitza al valor nominal de 5V (pin 16), mateix valor al que es connecta la referència (pin 15). El punt de massa (A_{GND}, D_{GND}) correspon als pin 14 i pin 9, respectivament. S'aprofiten els canals pertinents de la Raspberry Pi per realitzar aquestes alimentacions. Com s'ha esmentat a les característiques del xip, per poder enviar la senyal que surt del pin 12 (D_{OUT}) a la Raspberry Pi, s'utilitza un bus SPI (que permet fer arribar la informació digital del ADC a la PC). Els pins restants (pin 13, pin 11, pin 10 i, de fet, el propi pin 12) serveixen per dur a terme aquesta connexió:

- El pin 13 (CLK) es correspon al senyal de rellotge del SPI. Al ser un mètode síncron, la transmissió de cada una de les mostres es produeix a cada cop de rellotge. Aquest pin del ADC es connecta al GPIO11 de la Raspberry Pi, que està dissenyat per enviar una senyal de rellotge.
- Pel que fa el pin CS/SHDN (pin 10) del ADC, aquest serveix per connectar o desconnectar la comunicació entre el xip i la RPi. Correspon a la línia "SS/Select" del mètode SPI i va connectat al GPIO8, que és una de les dues sortides de la Raspberry Pi que permeten aquesta funcionalitat.
- Per últim, el pin 11 i pin 12 (DIN i DOUT) tenen com a objectiu rebre i enviar informació a la Raspberry Pi. Es connecten als pins GPIO10 i GPIO9 de la RPi respectivament, que estan dissenyats especialment per a aquest objectiu.

4.1.1.4. Connexions entre dispositius

Per realitzar les connexions elèctriques entre els dispositius electrònics del sistema de NORI s'utilitza una protoboard de 400 punts. Aquesta serveix per donar un suport físic a les connexions entre el xip i la RPi.

Els cables elèctrics són "jumpers" del tipus mascle-masclle o mascle-femella, ja que la Raspberry Pi té connexió femella i el xip mascle. El model que s'utilitza és MIKROE-516. [17] Els cables tipus jumpers son cables utilitzats en circuits electrònics que inclouen connectors a cada un dels seus extrems. Això permet que la connexió a la protoboard sigui senzilla i sense necessitat de soldadura. Així doncs, les connexions són fàcils de canviar, fent que aquest tipus de cable tingui un paper molt important en la confecció de prototips.

Com s'ha vist, la Raspberry Pi també permet altres connexions tals com HDMI, USB o la pròpia alimentació (micro-USB). Aquestes es realitzen amb el cablejat pertinent per aquests tipus de connexions. Per connectar-se a internet, es fa servir cable Ethernet.

4.1.2. Hardware del sistema d'adquisició de dades

Les connexions anteriorment descrites entre el xip ADC i la RPi no depenen del model del computador (entre 2B i 3B+), ja que els GPIO d'aquests no varien (tenen la mateixa configuració i connexions per les dues versions). Així doncs, l'esquemàtic del sistema d'adquisició de dades queda fixat i és el següent:

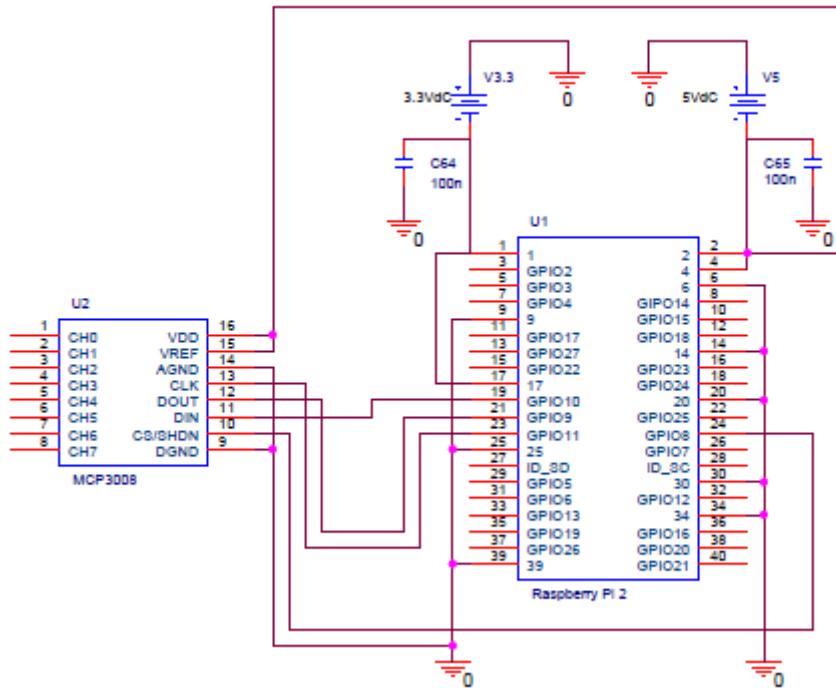


Figura 8. Font pròpia generada amb OrCad. Plànol electrònic corresponent a l'esquemàtic del sistema d'adquisició de dades.

Una manera més interpretativa de representar aquest esquemàtic és la que es mostra a continuació, on s'il·lustren les diferents connexions entre l'ADC i la RPi.

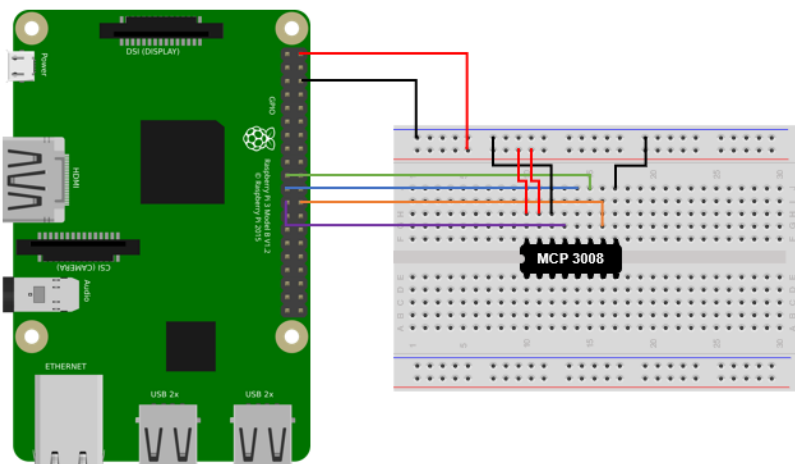


Figura 9. Font pròpia. Esquema il·lustratiu de les connexions entre la RPi i el xip ADC, que formen el DAS de NORI.

Com es veu a l'esquemàtic del sistema, els canals d'adquisició de dades son des del CH0 al CH7 del xip MCP3008 i queden disposats de tal manera que és senzill connectar-hi un o més sensors. Aquesta informació analògica es transforma a digital i passa pel pin 12 fins al GPIO9 de la RPi, que està programat per rebre el senyal ja digitalitzat.

A l'hora d'interpretar l'esquemàtic de la RPi, els pins es poden denominar amb mode Board o BCM. Seguint el primer, els pins s'enumeren seguint la seva disposició física a la placa (de l'1 al 40, en ordre de lectura). Amb el mode BCM, els pins s'anomenen segons la seva funcionalitat (amb les sigles GPIO seguides d'un número).

D'aquests 40 GPIO, n'hi ha que ja tenen una funcionalitat preestablerta, com son les fonts de tensió i les connexions a terra. És per això que els pins 6, 9, 14, 20, 25, 30, 34 i 39 presenten una connexió directa a terra, els pins 1 i 17 a una font de tensió de 3,3 V i els pins 2 i 4 a una de 5 V. La resta de pins (els que no tenen connexions preestablertes ni amb el xip MCP3008) s'ometen ja que no són necessaris per al sistema d'adquisició de dades de NORI.

És interessant notar que les fonts de voltatge estan connectades (internament a la RPi) a un condensador de 100nF. La funcionalitat d'aquest condensador és absorbir pics de tensió que altres elements poden ocasionar i perjudicar al PC. Això permet utilitzar la RPi com a font d'alimentació per als altres components electrònics que es connecten al sistema d'adquisició de dades, com ara els sensors o el MCP3008 (veure connexió a l'esquemàtic). Els GPIO restants queden lliures per a ser programats i realitzar la funció que se'ls assigni.

4.1.3. Hardware del sistema de transferència de dades

Un cop adquirides les dades mitjançant el sistema d'adquisició de dades, es desitja poder-les enviar a qualsevol altre computador. Això és deu a que, per exemple, és habitual que es necessiti fer un anàlisi dels resultats mitjançant aplicacions com Excel o Matlab, que no estan disponibles dins de la Raspberry Pi.

Un cop la RPi executa les instruccions que se li donen i enregistra un fitxer de dades (com ara .txt o .xlsx), aquest es pot enviar de diverses maneres a un altre dispositiu. De per si, la pròpia RPi ja presenta un seguit de característiques que permeten a NORI transmetre informació a altres ordinadors. Aquesta transmissió es pot fer de dues maneres: amb un Pen-Drive (USB) o via internet (Google Drive).

4.1.3.1. Transmissió mitjançant un Pen-Drive

El primer dels mètodes és connectar una memòria USB a la Raspberry Pi, copiar els documents desitjats i connectar aquest mateix pendrive al computador de destinació. Aquesta metodologia serveix tant per RPi 3B+ com 2B.

Els avantatges d'aquesta metodologia son:

- Capacitat per seleccionar tant fitxers com espai disponible tingui el Pen-Drive i traspasar-los tots de cop.
- La transmissió de les dades pot ser a qualsevol ordinador receptor (que tingui connexió USB).
- No requereix connexió a internet de cap tipus (ni per part de la RPi ni del PC receptor).

Per contra, els inconvenients de la transmissió amb memòria USB son:

- Desgast del port USB de la RPi així com de la memòria externa, que poden ocasionar danys als elements del sistema o a la informació de l'usuari.
- El temps total d'operació es considerablement alt si només es vol enviar algun fitxer.
- Requereix del propi Pen-Drive amb suficient memòria per realitzar l'operació.
- És necessari realitzar desplaçaments físics per connectar el hardware.

4.1.3.2. Transmissió mitjançant Google Drive

Ja que NORI té la possibilitat d'estar connectada a internet, també existeix la l'opció d'enviar fitxers via Google Drive. Aquest procés també és factible tant per RPI 3B+ com per 2B.

Els avantatges són els següents:

- Possibilitat d'enviar un o més fitxers a un o més ordinadors destí simultàniament.
- Al estar penjada al núvol, la informació està protegida contra possibles pèrdues.
- No es necessita cap muntatge físic per realitzar la transferència.

Per contra, els inconvenients són:

- Necessita tenir connexió a internet.
- És el mètode de transmissió de dades de NORI més lent.
- S'ha de tenir prèviament un compte de Google Drive.

4.1.3.3. Transmissió via SCP

Més enllà d'aquests dos mètodes tant comuns, existeix la possibilitat de realitzar la transferència de dades mitjançant protocols que permeten accedir a màquines remotament a través de la xarxa. El protocol que s'utilitza en aquest projecte és l'SCP (Protocol de còpia segura) [18]. Aquest protocol permet transferir dades entre hosts de manera remota, amb la condició que els hosts han d'estar connectats a la mateixa xarxa local.

Els avantatges d'aquest mètode són:

- Els fitxers es guarden automàticament al directori desitjat de l'ordinador receptor.
- És un procediment molt ràpid i segur ja que està protegit amb contrasenya.
- Un cop realitzat el muntatge, no es necessita cap suport físic per realitzar la transferència.

I els principals inconvenients:

- No permet enviar diversos fitxers alhora. Així doncs, si es necessita enviar-ne una gran quantitat pot suposar més temps que les altres alternatives.
- És necessària una connexió a la xarxa.
- S'ha de tenir configurada i posada la IP estàtica de l'ordinador.

Per aconseguir aquesta connexió es realitza el següent muntatge dels components:

1. És localitza un punt de xarxa actiu a la sala on es realitza el muntatge d'adquisició de dades.
2. Mitjançant un cable Ethernet, es connecta un router o switch a aquest punt de xarxa. El router es configura de manera que creï una xarxa local, que es pot extreure en forma de Wi-Fi o amb cable. Si s'utilitza un switch, com que aquest no genera connexió wireless, s'utilitza directament el cable Ethernet per connectar els dispositius directament a la xarxa local.
3. A partir del cable Ethernet o la connexió Wi-Fi aconseguida a l'apartat 2, es connecta a la xarxa local (al router o switch):
 - El computador al que es vol enviar els arxius de dades processats a la Raspberry Pi.
 - La pròpia Raspberry Pi.

Nota: Aquest muntatge es pot realitzar tant amb la Raspberry Pi 2B com amb la 3B+, però pel model 2B s'ha de realitzar obligatòriament la connexió a la xarxa local mitjançant el cable Ethernet. Tot i que això pot semblar un impediment, la connexió amb cable Ethernet es recomana per tots els models en comparació amb la connexió Wi-Fi, ja que és més ràpida.

L'esquema del sistema global és el següent:

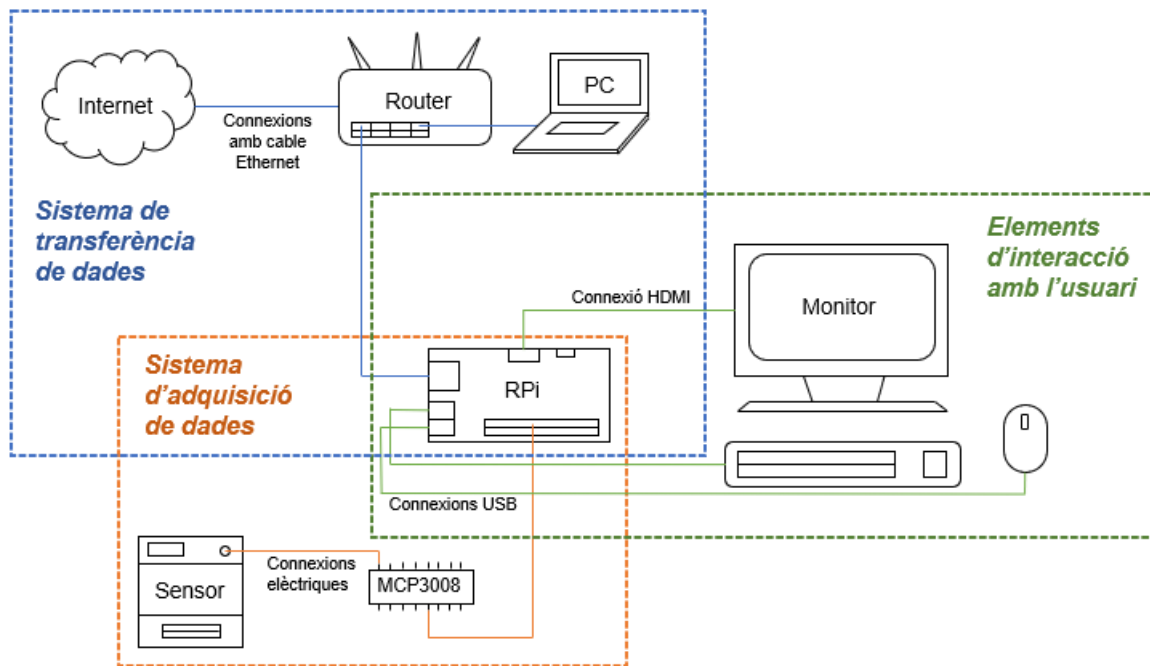


Figura 10. Font pròpia. Esquema del sistema d'obtenció de dades global.

Tot i això, a l'entorn de la ETSEIB no està permès crear xarxes Wi-Fi per temes de ciberseguretat. Per tant, els dispositius es connecten a la xarxa local ja existent del departament d'enginyeria química, que és la que està disponible al laboratori 25-39.

L'esquema en particular de la connexió és el que es mostra a continuació:

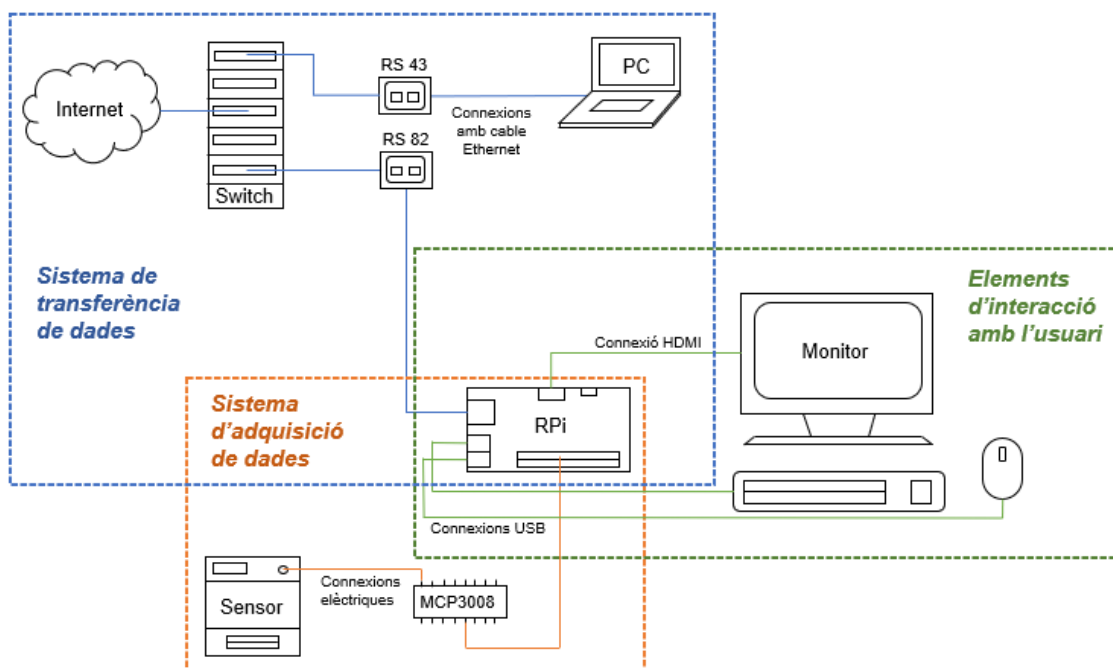


Figura 11. Font pròpia. Esquema particular pel laboratori 25-39.

4.2. Disseny i implementació del software de NORI

Paral·lelament al desenvolupament del prototip físic es desenvolupa el software propi de NORI, que són els algorismes logicomatemàtics que permeten la programació dels diferents components del sistema. Sense el software que els controli, els components del hardware no són capaços d'executar cap acció.

L'expressió d'aquests algorismes es fa mitjançant el llenguatge de programació Python, que és de codi obert, multiplataforma i de propòsit general. Aquest llenguatge de programació és el més utilitzat entre els desenvolupadors de sistemes amb RPi, gràcies a la seva simplicitat, flexibilitat i eficiència en el desenvolupament de diferents aplicacions.

A finals dels anys 80, Guido van Rossum va crear aquest llenguatge als Països Baixos. Des d'aleshores, Python ha evolucionat constantment i ha esdevingut una eina potent i versàtil per a desenvolupadors, utilitzada en diferents àmbits com la programació web, científica, d'aprenentatge automàtic i de processament de dades, entre altres.

Segons el rànquing TIOBE [19], Python ha sigut el millor llenguatge de programació els anys 2007, 2010, 2018, 2020, 2021 i està en camí de ser-ho el 2023:

Taula 6. Rànquing TIOBE (consultat el 10/06/2023)

Posició juny 2023	Llenguatge	Qualificació	Canvi respecte juny 2022
1	Python	12,46 %	+0,26 %
2	C	12,37 %	+0,46 %
3	C++	11,36 %	+1,73 %
4	Java	11,28 %	+0,81 %
5	C#	6,71 %	+0,59 %

Ja que aquest projecte es basa en l'obtenció de dades, Python és ideal. Gràcies a les nombroses llibreries i mòduls que incorpora, la programació dels GPIO de la RPi és senzilla i eficient. Aquest es tracta d'un llenguatge de programació d'alt nivell, és a dir, expressa els algorismes de manera adequada per a la capacitat cognitiva humana, enlloc d'interactuar directament amb el processador de l'ordinador. A part, Python és un llenguatge interpretat. Això significa que el programa es compila línia per línia i s'executa al mateix temps que s'escriu. Aquest fet el converteix en un llenguatge molt flexible i amb una estructura dinàmica, tot i que la seva velocitat d'execució és típicament més lenta comparada amb llenguatges compilats, com C o C++.

És per tots aquests motius que Python ja ve instal·lat directament amb el sistema operatiu de la Raspberry Pi (tant al model 2B com al 3B+) i apareix com a llenguatge de programació predeterminat del computador.

4.2.1. CODIUM

El desenvolupament del software de NORI va evolucionant a mesura que es va experimentant amb els diversos sensors o s'afegeixen especificacions que no estaven inicialment previstes. Finalment, per l'experimentació amb els detectors cromatogràfics, es reorganitza tot el codi existent i s'agrupa de tal manera que el seu ús sigui senzill i intuïtiu per l'usuari. Això es fa maquetant el codi amb una interfície gràfica pròpia, CODIUM, que permet connectar el software amb el hardware.

CODIUM és una eina que generalitza el software, el en el sentit que permet a l'usuari configurar paràmetres mitjançant la introducció de dades o selecció d'opcions que abans eren fixes dins del codi. A més, inclou totes les funcionalitats del processament de dades cromatogràfiques i la programació de la RPi per a que adquireixi les dades del detector. En concret, té com a funcionalitats:

- Adquirir les dades del detector.
- Analitzar-les obtenint com a resultat el cromatograma i els pesos moleculars de la mostra injectada.
- Crear un full de càlcul d'Excel amb les dades adquirides, tractades i els resultats.

Durant el desenvolupament de CODIUM es tracten casuístiques tant en la banda del servidor (backend) com en la de l'usuari (frontend).

Els desenvolupaments de software per part del backend inclouen els algorismes amb els que a priori l'usuari no interactua, com ara l'arquitectura d'adquisició de les dades, creació de funcions auxiliars o la metodologia de càlcul dels pesos moleculars. Tot i això, al ser un programa de codi obert, l'usuari té sempre la capacitat per modificar aquests elements del sistema.

Per altra banda, al ser una interfície gràfica, CODIUM inclou elements que faciliten la interacció del programa amb l'usuari. Aquests formen part del frontend. Alguns dels desenvolupaments que s'han fet en relació amb el frontend son el disseny de la icona, aspecte dels botons digitals, color de fons, tipografia, etc. Totes aquestes implementacions permeten un ambient de treball més agradable i senzill.

4.2.1.1. Frontend de CODIUM

Els desenvolupaments de cara a l'usuari que es duen a terme en aquest projecte són els que es descriuen a continuació. Principalment, consisteixen en implementacions cosmètiques, és a dir, dissenys gràfics dels diferents elements que formen part de la interfície de CODIUM.

- Disseny de la icona del programa CODIUM: Per poder executar el programa directament des de l'escriptori de la Raspberry Pi a través d'un arxiu .desktop sense la necessitat d'obrir el terminal o el Shell de Python era necessari el disseny d'una icona. Aquesta havia de:
 - Mostrar de manera completa o parcial el nom de CODIUM.
 - Ser agradable a la vista, amb un disseny senzill.
 - Incorporar colors plans i complementaris entre si.

Finalment el disseny és el que es mostra a continuació:



Figura 12. Font pròpia. Icona del programa CODIUM. Disseny realitzat en Power Point.

- Disseny de la interfície gràfica CODIUM: Pel disseny de la interfície gràfica es van utilitzar els següents estils:
 - Font de text: "Aparajita".
 - Color de fons de les finestres i els botons: "HEX #F2F2F2".
 - Mida de la lletra: Variable depenent de la finestra (entre 9 i 24).
 - Estil de botons: Plans i rectangulars.
 - Marges dels "widgets": Normalment 5 píxels en padx i pady.

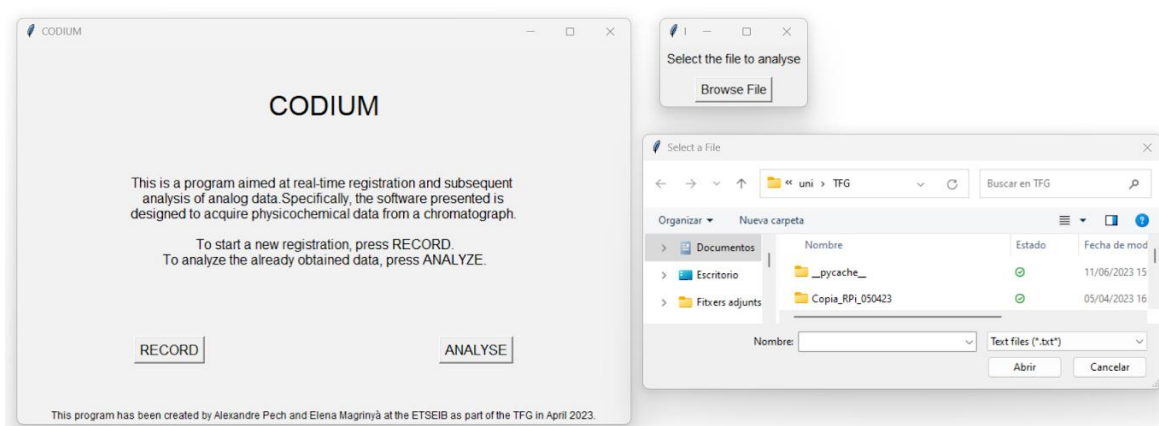


Figura 13. Font pròpia. Disseny d'algunes de les Finestres de CODIUM.

4.2.1.2. Backend de CODIUM

Pel que fa l'arquitectura del software desenvolupat a la part del servidor (a partir de les dades que l'usuari introdueix en el frontend de CODIUM) és la que es mostra a continuació:

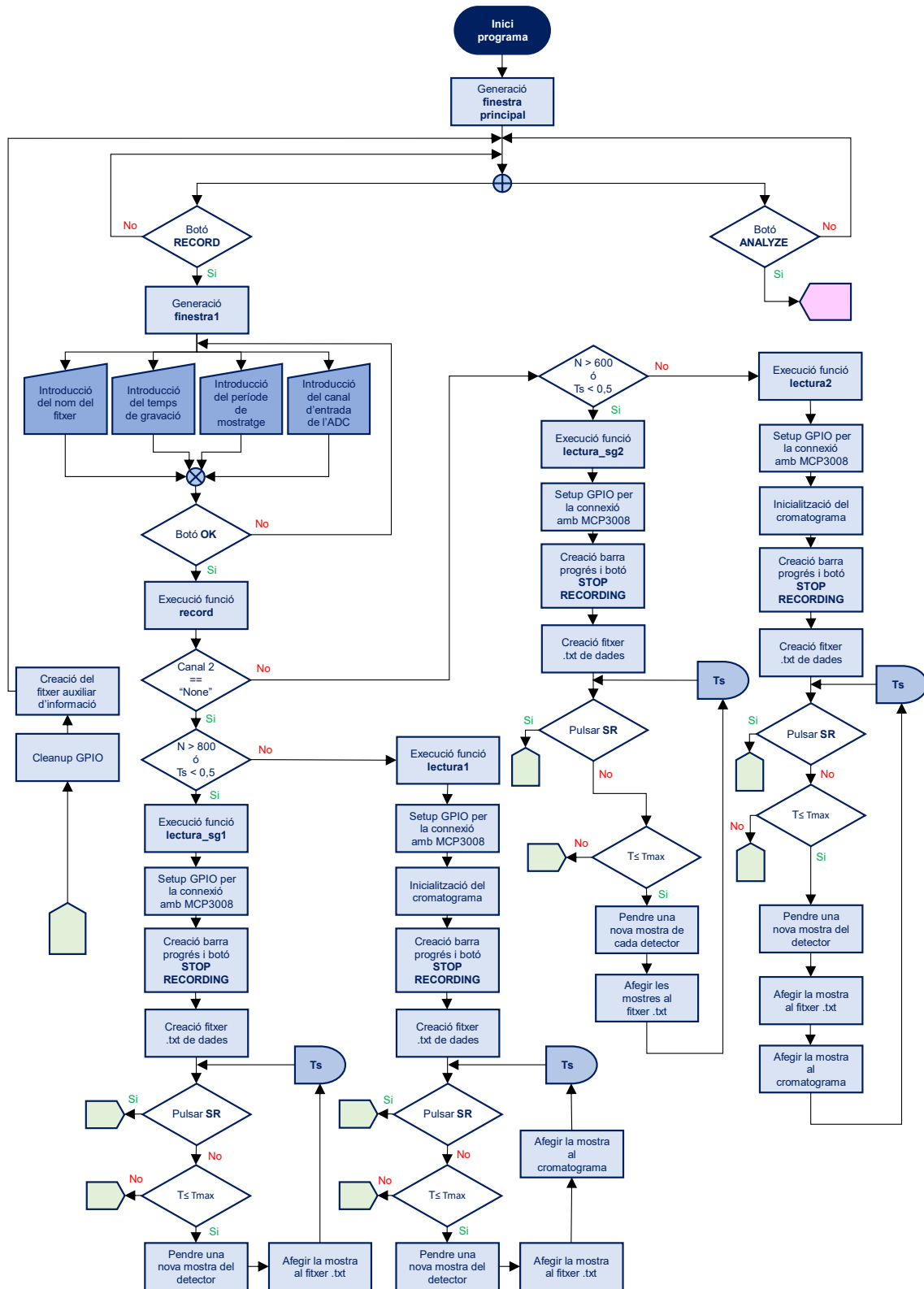


Figura 14. Font pròpia. Arquitectura de la secció "Record" de CODIUM.

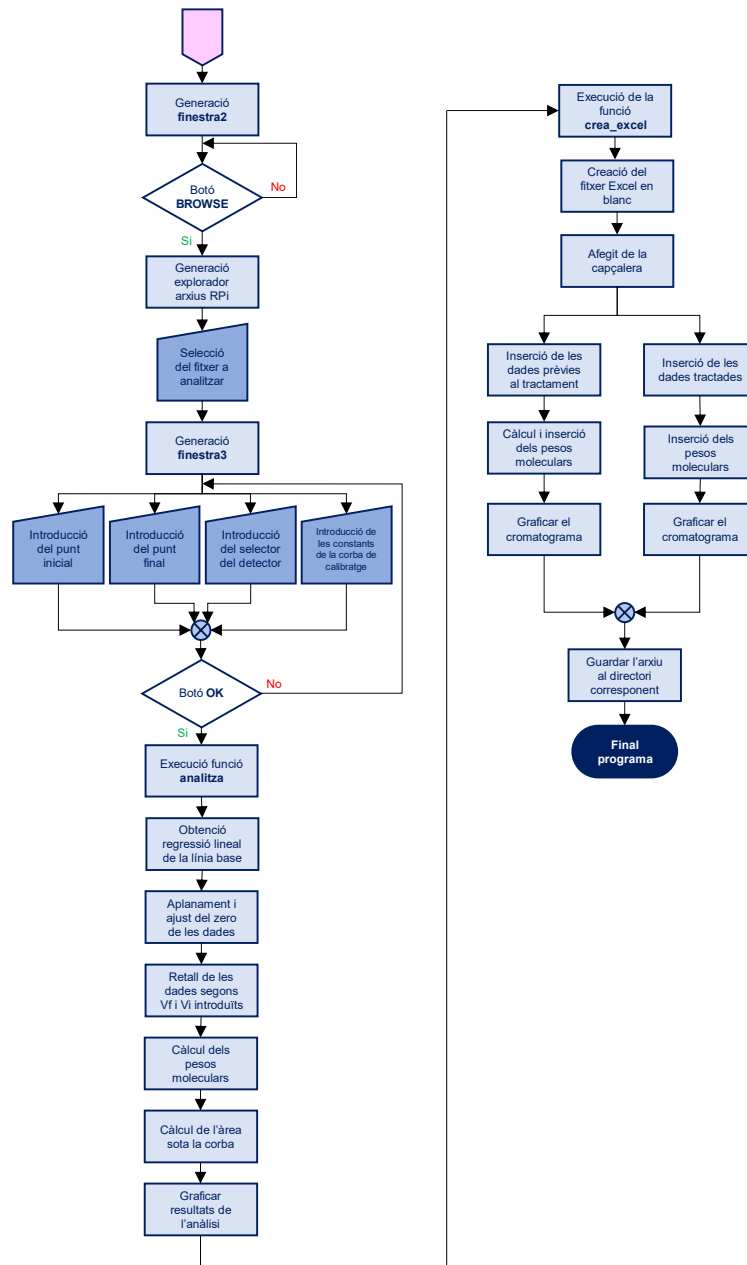


Figura 15. Font pròpia. Arquitectura de la secció "Analyse" de CODIUM.

Com es pot veure de manera general a l'esquema de blocs, CODIUM està dividit en 2 seccions funcionals diferents:

- Bloc "Record": Permet a l'usuari realitzar l'adquisició de dades d'un experiment de fins a dos sensors alhora. Automàticament, el programa detecta si hi haurà un volum gran o petit de dades. En el primer cas mostra una barra de progrés i en el segon el gràfic en temps real dels valors detectats.
- Bloc "Analyse": A partir de les dades introduïdes per l'usuari, calcula automàticament els pesos moleculars d'un experiment realitzat amb anterioritat i genera el fitxer Excel amb els resultats.

4.2.2. CODIUM FT

CODIUM FT (“CODIUM File Transfer”) és el software que dona recolzament al sistema de transferència de dades dissenyat en detall a la secció 4.1.3 d’aquest treball. Aquest es basa en el protocol de còpia segura SCP (SSH), que permet a la RPi enviar arxius a l’ordinador fix del laboratori 25-39 d’EQ de manera efectiva i protegida per contrasenya. L’arquitectura és la següent:

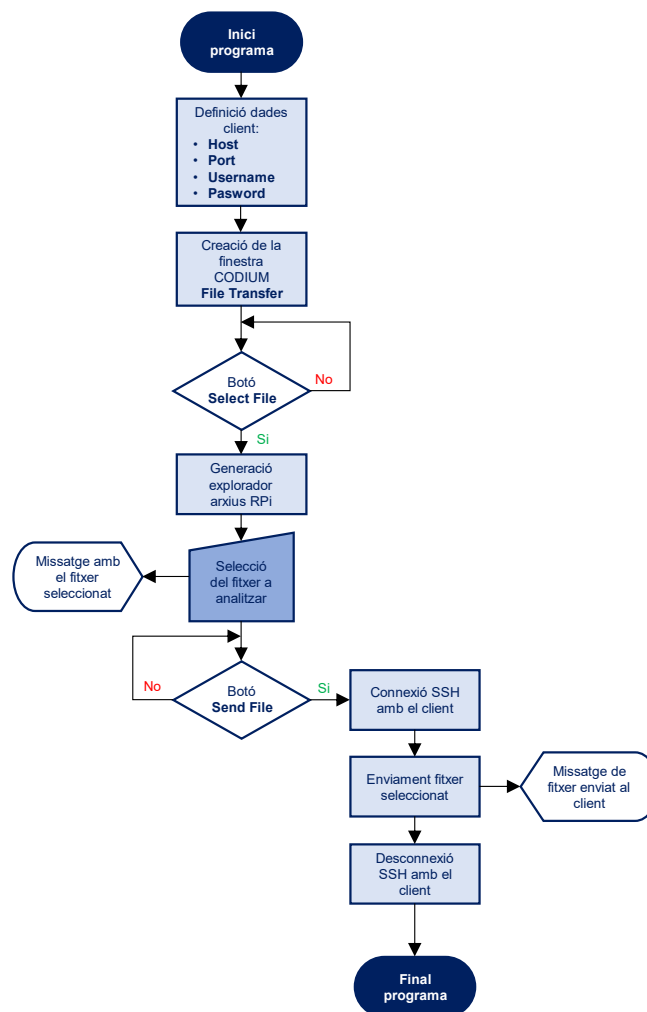


Figura 16. Font pròpia. Arquitectura de CODIUM FT.

L’aspecte de les diverses finestres del programa són iguals que per CODIUM. Tot i això, per aquest programa auxiliar es dissenya una nova icona, que és:



Figura 17. Font pròpia. Icona del programa CODIUM FT. Disseny realitzat en PWP.

4.3. Experimentació i verificació. Aplicació de NORI amb diversos sensors.

Simultàniament al disseny i a la implementació de la gran majoria del software de NORI es realitzen proves de verificació, que busquen millorar el sistema i exposar els defectes que existeixen. Aquesta depuració es realitza, en gran part, provant les diverses funcionalitats del sistema amb un seguit de sensors analògics, de diferents tipus. També es comprova el funcionament del sistema de transferència de dades a través de tests d'interoperabilitat per veure que tot el producte funciona segons les especificacions. Tot aquest procés té com a objectiu que NORI sigui capaç de rebre i processar els senyals de qualsevol detector que se li pugui connectar. Així doncs, finalment es realitza l'anàlisi experimental amb els equips cromatogràfics. En concret, el detector amb el que s'experimenta és el model 785A d'Applied Biosystems.

4.3.1. Primers sensors. Adquisició de dades.

La primera funcionalitat que es verifica és la capacitat de NORI per adquirir les dades analògiques que pot rebre de diferents tipus de sensors. Aquesta experimentació es va dur a terme simultàniament al desenvolupament del primer software del DAS. Així doncs, l'objectiu d'aquests experiments és enregistrar les dades (inicialment analògiques) i guardar-les a la memòria de la Raspberry Pi en format de fitxers .xlsx i .txt, ja convertides a digital. En concret, es realitzen diverses proves funcionals que pretenen estudiar el comportament del sistema i són:

1. Realització de casos de prova amb diferents entrades analògiques per verificar que tant el hardware com el software inicials son funcionals i no presenten errors en la seva execució.
2. Anàlisi exhaustiu del codi informàtic que permet l'adquisició de dades. Correccions dels defectes que apareixen a l'executar-lo, com errors tipogràfics o conceptuals.
3. Prova experimental per captar algunes primeres limitacions en l'adquisició de dades de NORI: limitacions en el temps de mostratge, entrades múltiples simultànies, retards en l'arribada del senyal, etc.
4. Finalment, un cop revisades les especificacions bàsiques, es realitza una prova exploratòria que té com a objectiu observar com els usuaris reals podrien utilitzar el sistema. Això serveix per identificar problemes que no han estat definits en altres proves més específiques i millorar la qualitat del software.

4.3.1.1. Potenciòmetre

La primera experimentació que s'ha realitzat ha sigut a partir d'un potenciòmetre. En aquest cas s'ha utilitzat el model PT10V103 [20]. El potenciòmetre és un dispositiu electrònic que es caracteritza per presentar una resistència variable, que per el model utilitzat va des de 0Ω a 10.000Ω , idealment. Aquesta es pot regular girant la pestanya rotativa del centre del potenciòmetre (cursor), que abasta 235° .

$$R = f(\theta) , \quad \theta \in (0^\circ, 235^\circ) \quad (\text{Eq. 10})$$

En circuits elèctrics, els potenciòmetres es fan servir habitualment per controlar la caiguda de tensió (connectant-los en sèrie) o la intensitat de corrent, fent-ho en paral·lel. En el cas d'aquest experiment, però, l'únic que es busca és veure com varia la caiguda de tensió a mesura que varia l'angle del cursor, i comprovar que el muntatge és funcional. El senyal analògic que es captura és justament el potencial elèctric que genera el dispositiu.

Mecànicament, el potenciòmetre presenta 3 potes o terminals, que serveixen per fer les connexions d'alimentació, punt de massa i mesura del senyal. Al connectar el potenciòmetre a la protoboard, ja es disposa de manera que les dues potes d'alimentació i posada a terra quedin connectades als seus respectius punts (amb l'ajuda de cables). El terminal restant, que és a partir del qual es mesura el senyal, es connecta al CH7 del ADC per convertir-lo en digital i processar-lo amb el computador.

La tensió que es mesura és una fracció de la total que pot suportar el potenciòmetre. Al fer l'alimentació entre 5 V i 0 V , idealment les mesures que s'han de registrar són, precisament, un rang de valors de tensió compresos entre 0 i 5 V .

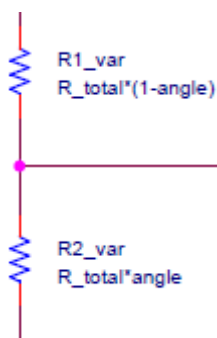


Figura 18. Font pròpia. Esquemàtic del potenciòmetre.

El potenciòmetre es pot modelar com dues resistències variables, el valor de les quals canvia al girar el cursor. El valor de la suma d'aquestes és sempre igual a la resistència total (que en aquest cas és de 10.000Ω). Quan una de les resistències augmenta de valor, l'altra disminueix per a seguir sumant R_{total} . Les equacions són:

$$R_1 = R_{total} \cdot \left(1 - \frac{\theta}{235}\right) \quad (\text{Eq. 11})$$

$$R_2 = R_{total} \cdot \frac{\theta}{235} \quad (\text{Eq. 12})$$

$$R_{total} = R_1 + R_2 \quad (\text{Eq. 13})$$

El potenciòmetre es comporta realment com un divisor de tensió. Essent R_1 connectada a V_{CC} (5 V) i R_2 connectada a terra (0 V), l'equació que regeix el potencial de la tercera pota (cable central entre les dues resistències) és:

$$V_{mesura} = \frac{V_{CC} \cdot R_2}{R_1 + R_2} = \frac{V_{CC} \cdot R_2}{R_{total}} \quad (\text{Eq. 14})$$

Així doncs, el DAS ha de ser capaç d'enregistrar les dades V_{mesura} mentre va variant R_2 .

A continuació es mostra l'esquemàtic del muntatge. Aquest correspon al sistema d'adquisició de dades de NORI (hardware) al qual s'ha connectat el potenciòmetre. Els terminals del potenciòmetre estan connectats a 5 V i a massa, i el senyal a mesurar al CH7 del ADC.

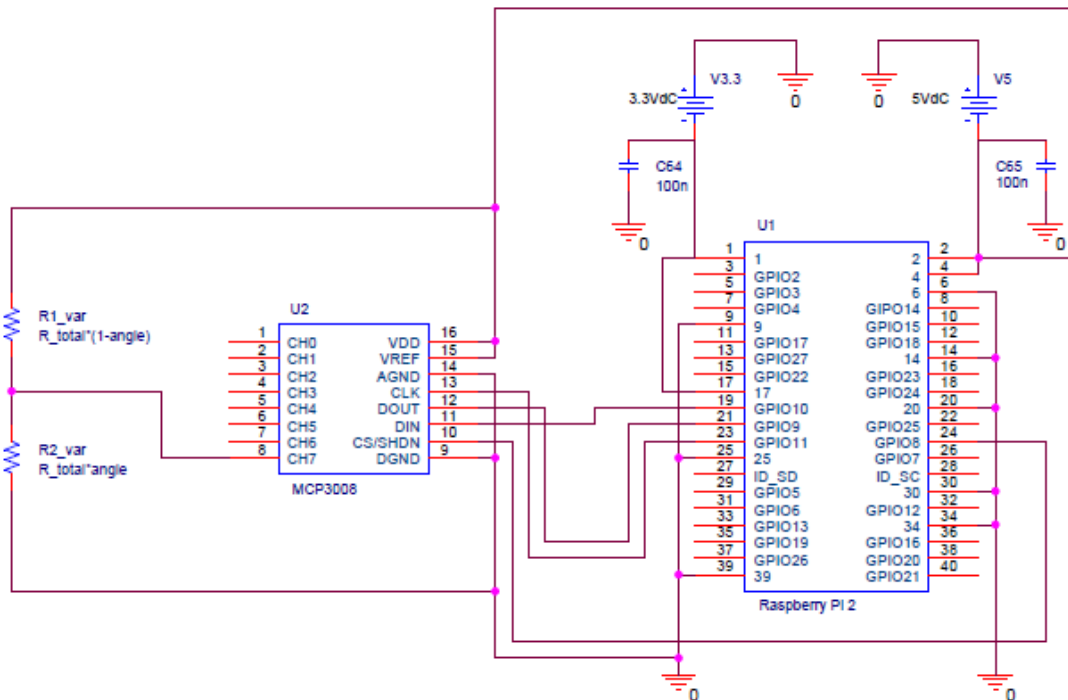


Figura 19. Font pròpia. Esquemàtic amb OrCad Capture del muntatge que transforma $V_{mesurada}$ del potenciòmetre en un senyal digital, a través de xip MCP3008, i que processa la Raspberry Pi.

Després d'executar l'algorisme, el que s'obté és, com era d'esperar, dos fitxers de dades numèriques digitals. Un primer en format Excel i un altre de text. A partir del fitxer .xlsx, es poden manipular les dades i fer-ne un gràfic per a analitzar-ne l'evolució temporal (a mesura que es modifica el cursor).

El gràfic que s'obté és:

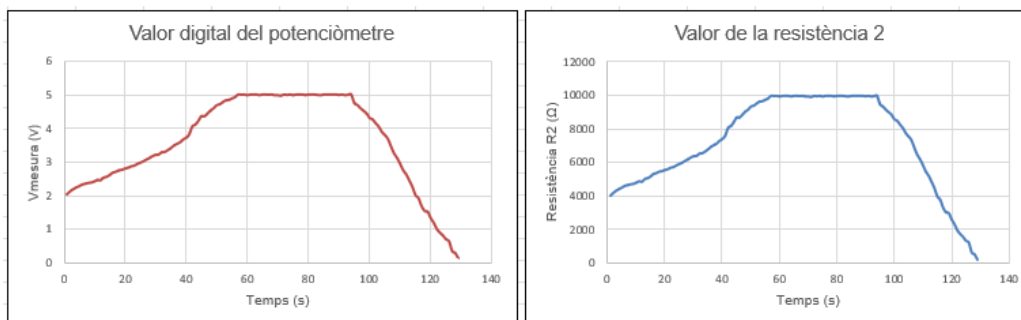


Figura 20. Font pròpia. $V_{mesurada}$ a mesura que varia R_2 .

D'aquest experiment es conclou que:

- El sistema d'adquisició de dades de NORI (hardware i software) és funcional a un nivell bàsic.
- Les dades es prenen i es transformen a digitals a temps real sense un retard aparent.
- Els valors obtinguts en cada mesura són múltiples de 0,0048828125, que té sentit al estar mesurant en una escala de 0 V a 5 V i el xip MCP3008 té una resolució de 10 bits ($5 / 2^{10}$).
- El comportament del potenciòmetre és també el que s'esperava.

El següent pas de l'experimentació consisteix en comprovar si aquesta detecció també es pot fer amb més d'un sensor alhora. Això és una funcionalitat important de cara a treballar amb els detectors cromatogràfics, ja que moltes vegades es requereix una doble detecció.

4.3.1.2. Diversos sensors al mateix temps

Un cop verificat que el sistema d'adquisició de dades de NORI és funcional es comproven un seguit de característiques secundàries per poder caracteritzar de manera més acurada el sistema. Això es fa partint d'una prova exploratòria consistent en connectar simultàniament al DAS tres sensors diferents, i anar variant els senyals naturals captats per aquests per veure com evoluciona el sistema davant dels canvis. En concret:

- Comprovar que el DAS de NORI és capaç de registrar, al mateix temps, més d'un senyal analògic captat per diferents sensors.
- Estudiar quin és el comportament quan un d'aquests senyals es modifica al canviar la variable natural que està sent mesurada: si el retard és significatiu ara que hi ha diversos sensors, si hi ha interferències entre senyals, etc.
- Validar el muntatge del sistema a l'hora de connectar més d'un sensor al xip ADC. Disseny del hardware per poder realitzar la prova tenint en consideració les especificacions dels datasheet dels sensors.

Els sensors que s'hi connecten son:

- Sensor SHARP GP2Y0A21YKOF [21]: Sensor de distància, format per una combinació integrada de PSD (detector sensible a la posició), IRLED (díode emissor d'infrarojos) i circuit de processament de senyal. Teòricament, es capaç de mesurar la distància a objectes que es troben de 10 a 80 cm del sensor. El mode de funcionament consisteix en que el IRLED emet llum infraroja, que si rebota en un objecte (amb més o menys intensitat depenent la distància), aquesta va a parar al PSD, fa variar la intensitat captada i emet un senyal ajustat respecte la distància a l'objecte.

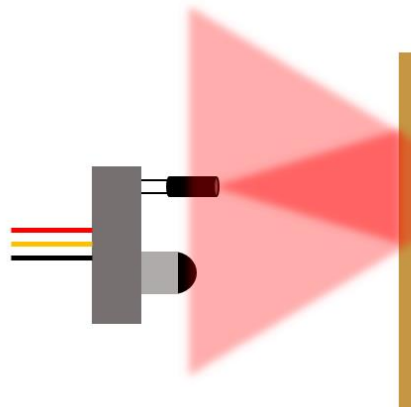


Figura 21. Font pròpia. Esquema de funcionament del sensor SHARP.

- Sensor WHADDA WPM407 [22]: Sensor d'intensitat lumínica basat en un fototransistor, que converteix l'energia de la llum en un potencial elèctric proporcional. La llum és una ona electromagnètica que transporta energia en paquets anomenats fotons. Quan un d'aquests fotons de llum incideix sobre el semiconductor (del qual està format el transistor), la seva energia pot transferir-se a un electró que passa a un estat energètic més alt. A més, el dispositiu incorpora, al seu interior, una resistència de pull-down de 10.000 Ω . La funció d'aquesta resistència és la de mantenir el valor de la caiguda de tensió a 0 V quan no està rebent llum.
- Sensor LM335 [23]: és un sensor de temperatura que opera com un díode Zener. Segons el datasheet del component, aquest es pot connectar de diverses maneres per aconseguir una major precisió en la mesura de la temperatura, així com realitzar diverses calibracions per ajustar el seu comportament. Tot i això, per aquesta experimentació només es vol per comprovar que el DAS de NORI funciona segons les especificacions, pel que es munta seguint l'esquema recomanat pel fabricant "Basic temperature sensor".

L'esquemàtic que representa aquest muntatge electrònicament és el que es mostra a continuació:

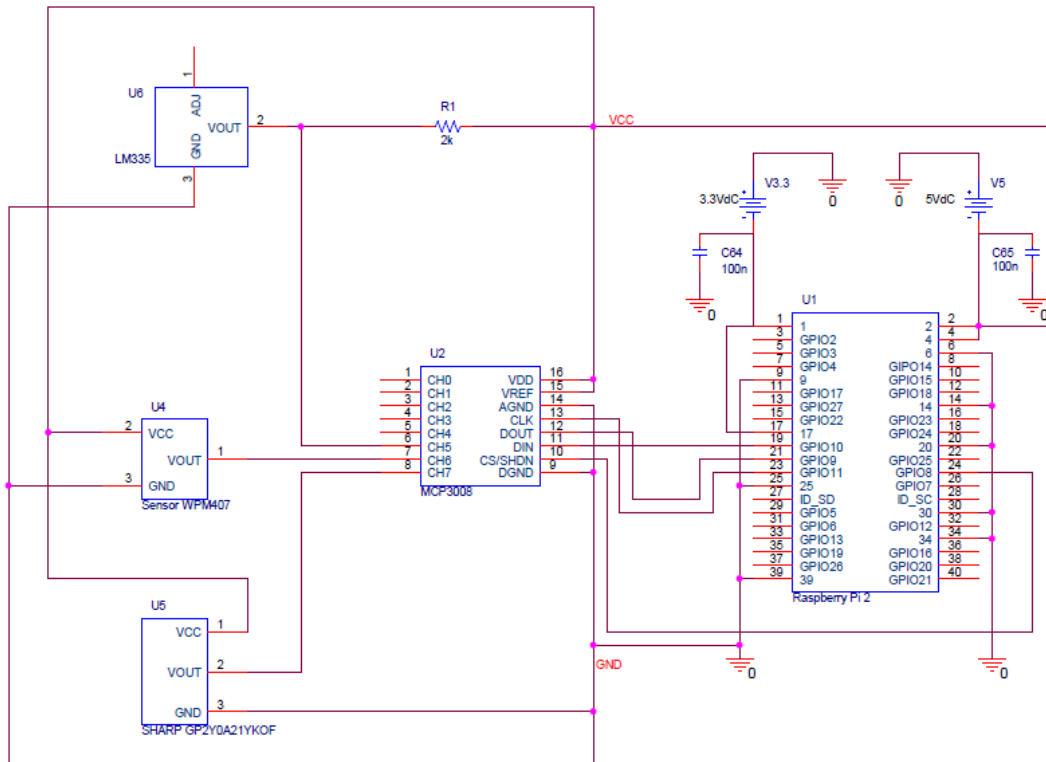


Figura 22. Font pròpia. Esquemàtic en OrCad Capture del DAS amb els tres sensors simultàniament.

Les conclusions que s'obtenen d'aquesta experimentació son:

- NORI és capaç de detectar més d'un senyal a la vegada.
- Els valors de les deteccions es mostren en temps real sense retard aparent.
- No hi ha interferències significatives entre els diferents sensors.
- Els sensors utilitzats es comporten de la manera esperada.
- Tot i que no hi ha interferències entre senyals, al augmentar el nombre de sensors el circuit es complica, fent que sigui més complicat detectar-hi errors en el muntatge.

Pel que fa la prova exploratòria, es van identificar diversos elements a incorporar un cop acabada aquesta experimentació:

- Una interfície gràfica per tal que l'usuari pugui fer anar el programa sense haver d'alterar el fitxer amb els algorismes cada vegada que s'executa.
- Un nou algoritme que serveixi per analitzar automàticament les dades un cop enregistrades amb el DAS.
- Un mètode alternatiu a utilitzar un Pen-Drive per poder transferir els fitxers de NORI a un altre ordinador.
- Una manera de poder visualitzar el progrés de l'experiment a mesura que es van prenent les dades.

4.3.2. Muntatge de NORI amb el detector en sec

Un cop determinat el comportament del sistema d'adquisició de dades de NORI per sensors de baixa complexitat, es realitza el primer muntatge amb el detector d'absorbància objectiu, que és el model 785A d'Applied Biosystems. El muntatge en sec significa que pel cromatògraf no s'hi fa circular ni aigua ni cap mostra. Això serveix per fer les comprovacions desitjades, però també per assegurar una zona de treball sense perill. És important de cara a la seguretat que en un muntatge elèctric on es manipulen els cables no hi intervingui l'aigua, ja que el risc d'electrocució augmenta.

Aquesta experimentació es realitza amb l'objectiu de comprovar que el sistema funcional pels sensors bàsics provats anteriorment també és vàlid per aquest equip cromatogràfic del laboratori de la ETSEIB.

L'esquema del cromatògraf és el que es presenta a continuació:

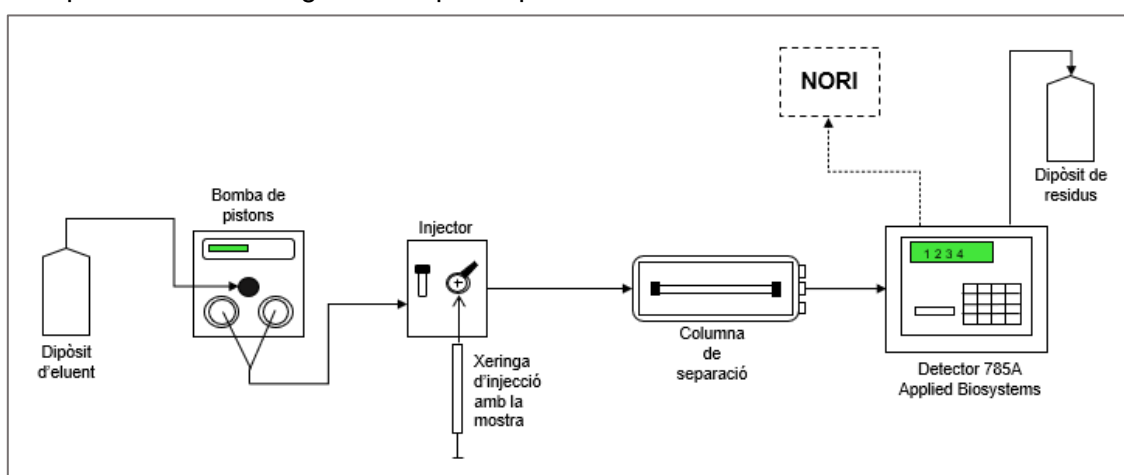


Figura 23. Font pròpia. Esquema de l'equip de cromatografia.

Per connectar el detector 785A a NORI es localitza la sortida analògica que es troba a la part posterior del sensor, indicada amb "COMP". A aquest sortida se li connecta un cable elèctric dual, el qual es connecta a massa a la protoboard i al canal d'enregistrament del xip MCP3008.

Cal remarcar que per a realitzar aquest muntatge en sec ja es disposava de la Raspberry Pi 3B+, pel que prèviament es va tornar a fer el muntatge del DAS de NORI amb aquesta i el xip MCP3008, obtenint les següents conclusions de l'experimentació en sec:

- Les connexions entre GPIO i xip MCP3008 són efectivament idèntiques per la RPI 2B que per la RPI 3B+.
- La velocitat d'execució del software és més alta amb el model 3B+.
- Quan s'ajusta el detector a "Auto Zero" els valors que llegeix NORI són zeros.
- Quan s'engega el detector es detecta un pic de tensió.

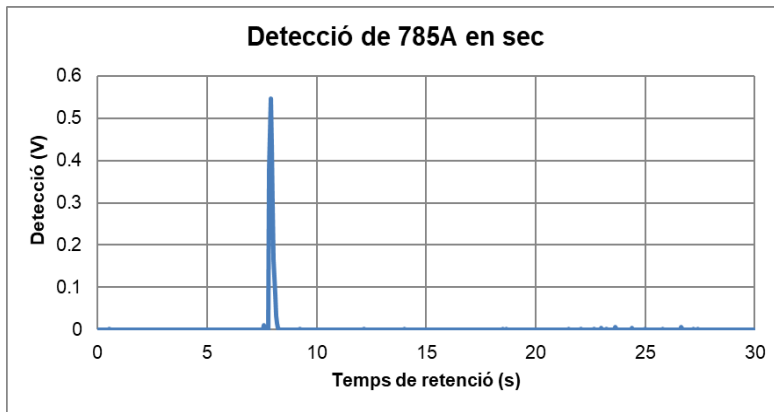


Figura 24. Font pròpia, extret de CODIUM. El pic de tensió es correspon a l'encesa del detector 785A, al segon 7 de l'experiment aproximadament.

Finalment es connecta un altre detector a NORI en sec (Waters 2410) que, a diferència del 785A, aquest treballa a partir de la detecció de l'índex de refracció de les mostres que el travessen. El detector Waters 2410 forma part del material del laboratori 25-39, però li falta un component intern. Aquesta experimentació permet comprovar el comportament del sistema en un entorn diferent als que s'havia sotmès fins aleshores. Com s'observa a la Figura 25, NORI detecta una oscil·lació de la tensió.

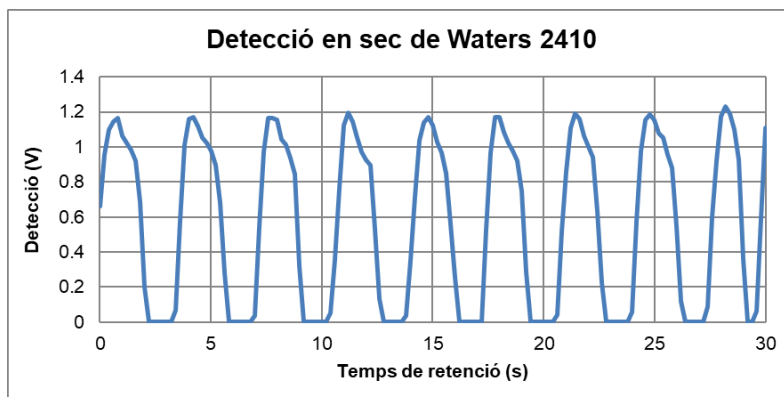


Figura 25. Font pròpia, extreta de CODIUM. NORI detecta una oscil·lació de tensió perquè el detector Waters 2410 es comporta de manera errònia al faltar-li un component.

4.3.3. Muntatge humit de NORI amb el detector 785A d'Applied Biosystems

Finalment, i un cop verificats tots els components de NORI (tant el hardware com el software) i comprovat el muntatge en sec amb el 785A, es passa a l'última part de l'experimentació, que consisteix en provar el cromatògraf en humit. Això significa amb el cicle d'aigua actiu i injectant-li una mostra real.

També és important notar que a l'hora d'aquesta experimentació el software de NORI ja incorpora CODIUM, és a dir, la interfície d'execució dissenyada especialment per treballar amb equips cromatogràfics (veure 4.2.1).

L'esquema del muntatge és el que es mostra a continuació:

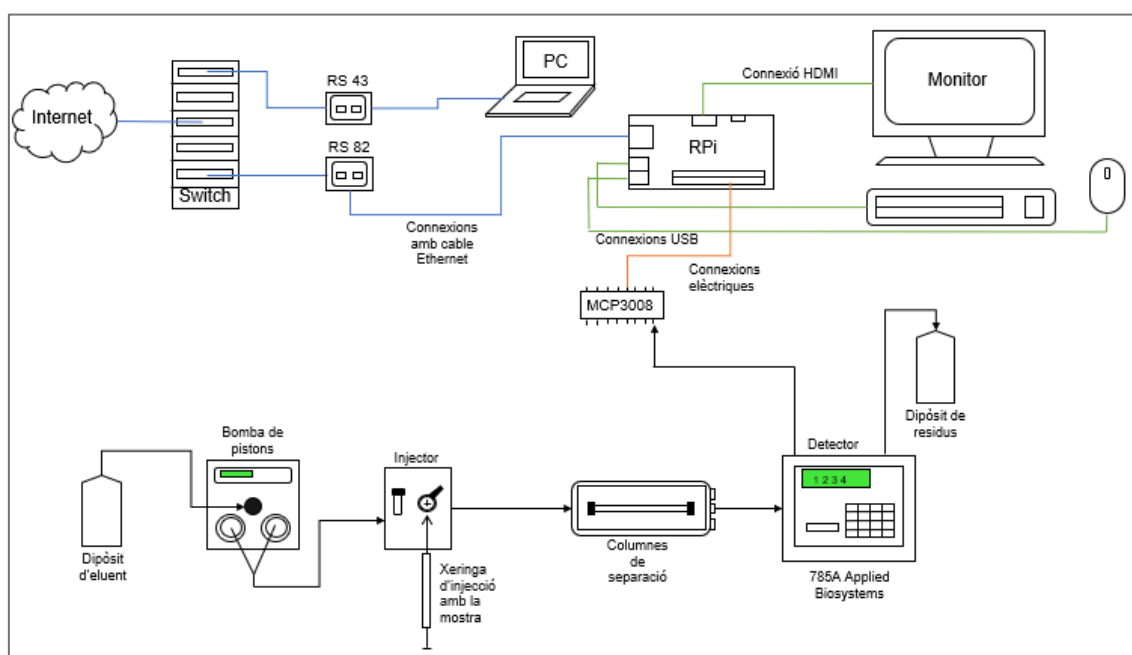


Figura 26. Font pròpia. Esquema del muntatge complet amb el cromatògraf 785A i NORI.

Es pot comprovar que l'esquema anterior es la unió entre els diferents sistemes de NORI (adquisició de dades, transmissió de dades i elements de suport a l'usuari) que s'han vist durant la implementació del projecte. L'entrada analògica es correspon a la detecció del cromatògraf, que a diferència del muntatge en sec ara sí és funcional. Així doncs, les connexions elèctriques entre els components del hardware no canvien respecte l'esquema del DAS (veure apartat 4.1.2) menys pel fet que se li afegeix l'entrada del 785A. Es mostren de manera il·lustrativa les connexions entre sensor, computador i convertidor ADC:

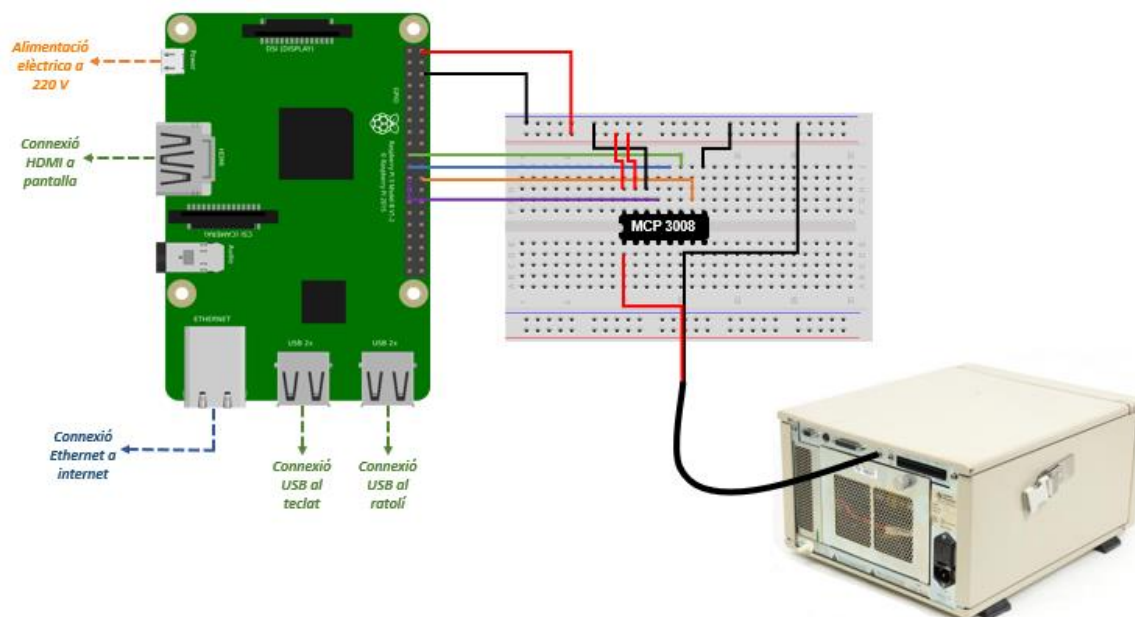


Figura 27. Font pròpia. Esquema de les connexions RPi, ADC, 785A. La figura del 785A utilitzada en aquest esquema és propietat de: [24].

El procés experimental que es realitza és el que es descriu a continuació:

1. Posar en marxa de totes les màquines: NORI, detector 785A i bomba de pistons.
2. Esperar un temps prudencial a que s'estabilitzin els paràmetres del detector 785A. Un cop estables, pulsar "Auto Zero" per definir aquelles condicions com una detecció de valor zero.
 - Si el sistema no s'estabilitza, es pot fer córrer aigua per netejar possibles impureses.
3. Anar augmentant el cabal de la bomba gradualment fins a 1 ml/min, fins que aquesta assoleixi una pressió entre 20 bar i 40 bar, idealment constant.
4. Preparar la mostra del polímer amb la concentració adient per cada experiment.
5. Introduir a CODIUM les dades de l'experiment.
6. Abans d'injectar la mostra, configurar els paràmetres importants del detector. En el cas del 785A:
 - **Range** (factor d'escala): 0,1.
 - **Wave Length** (longitud d'ona, en nm): 250 idealment, però com més baixa sigui obtenim una detecció més forta i amb més soroll.
7. Posar l'injector en mode "LOAD" i injectar la mostra amb la xeringa (habitualment entre 0,05 ml i 0,2 ml).
8. Posar l'injector en mode "INJECT" alhora que es prem "OK" al CODIUM per començar l'experimentació.
9. Al cap de 10 segons, tornar a posar en mode "LOAD" l'injector i treure la xeringa.
10. Esperar a que es completi l'experimentació.

4.3.3.1. Sense columna de separació

Per començar a experimentar amb el detector en funcionament i veure el comportament de NORI en aquestes condicions, es comença per fer unes proves ràpides sense la columna de separació. Això serveix per poder realitzar un gran volum de proves en el menor temps possible, ja que sense la columna l'analit triga menys d'un minut en recórrer tot el sistema. Aquestes proves permeten verificar si quan passa la mostra pel detector, aquest l'enregistra i envia el senyal a NORI. El que s'espera són uns pics de voltatge en menys de 30 segons referents a quan l'analit travessa el detector a altes velocitats.

Prova amb Coca-Cola

La Coca-Cola és un líquid fosc fàcilment detectable sense haver de baixar el paràmetre Wave Length, pel que no s'espera que aparegui soroll durant l'enregistrament. Aquesta experimentació no té valor químic, però serveix per validar el funcionament del 785A amb la funció "Record" de CODIUM.

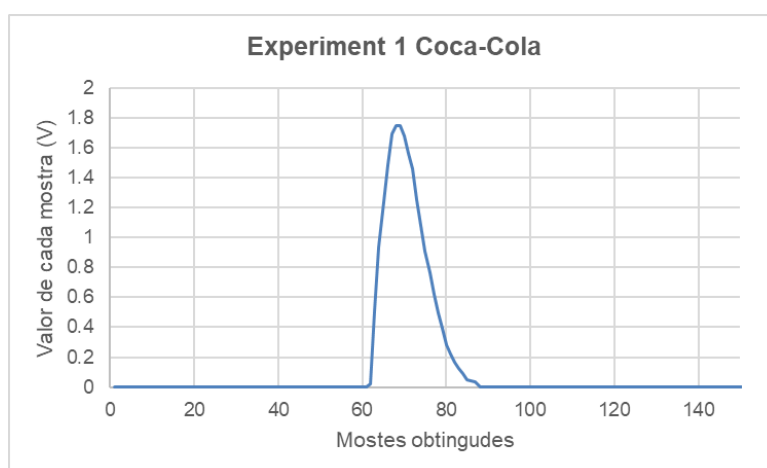


Figura 28. Detecció de NORI al pas de la Coca-Cola pel detector. Extret del fitxer obtingut per CODIUM.

Com es pot observar, el comportament de la mostra és l'esperat. Fins i tot la forma de la corba que apareix és semblat a la que s'obté idealment pels polímers quan es realitza el GPC. D'aquest experiment es conclou que:

- Quan l'analit passa pel 785A aquest el detecta i envia una resposta a NORI coherent amb els resultats que es volen obtenir. NORI la processa adequadament.
- Al ser un experiment molt curt (de 15 segons), el T_s és 0,1 s per aconseguir un número alt de dades:
 - La corba no està esglaonada (s'aproxima a una funció analògica).

Prova amb polímer

Un cop vist que el detector és capaç de captar la mostra i enviar la informació a NORI, es realitza el mateix experiment, però ara essent l'anàlit el polímer "Copolímer estirè anhidríd maleic, hidrolitzat en medi bàsic (SMA)".

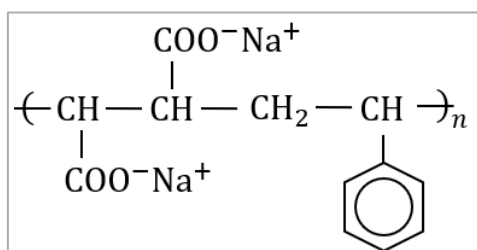


Figura 29. Font pròpia. Fórmula química del SMA.

Això serveix per comprovar si es dona la detecció amb un compost d'interès al circuit. Al ser el polímer menys fosc que la Coca-Cola, és més difícil de detectar i, en conseqüència, s'ha de baixar la longitud d'ona. Per aquest experiment es puja el període de mostratge a 0,5 segons, per posar a prova si aquest paràmetre és significatiu.

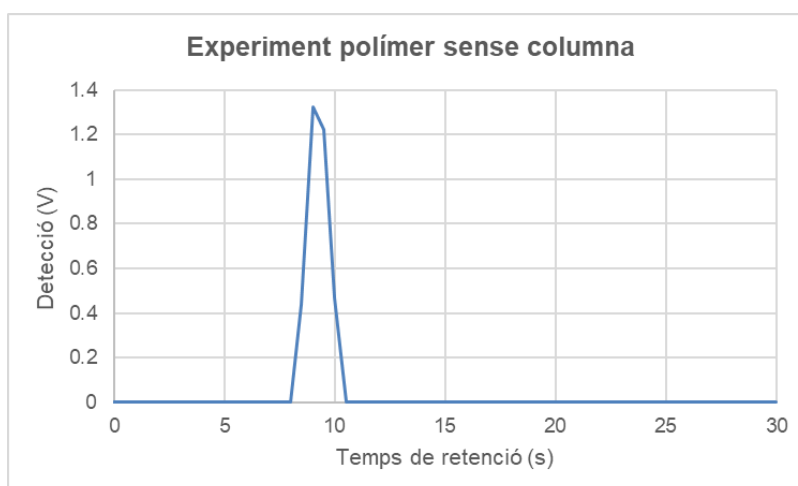


Figura 30. Detecció de NORI al pas del polímer pel detector. Extret del fitxer obtingut per CODIUM.

D'aquest experiment podem concloure que:

- Baixant la longitud d'ona, el detector és capaç de percebre el polímer. Com que l'experiment consta de poques dades, no es nota el soroll.
- L'experiment consta de massa poques deteccions. En 30 segons amb un T_s de 0,5s, només s'han obtingut 4 valors diferents de zero. Això és degut a que s'ha triat un període de mostratge massa gran, i s'ha perdut part del senyal al digitalitzar-lo.

Per determinar com es comporta el sistema segons la longitud d'ona es realitzen quatre experiments on només es varia aquest paràmetre:

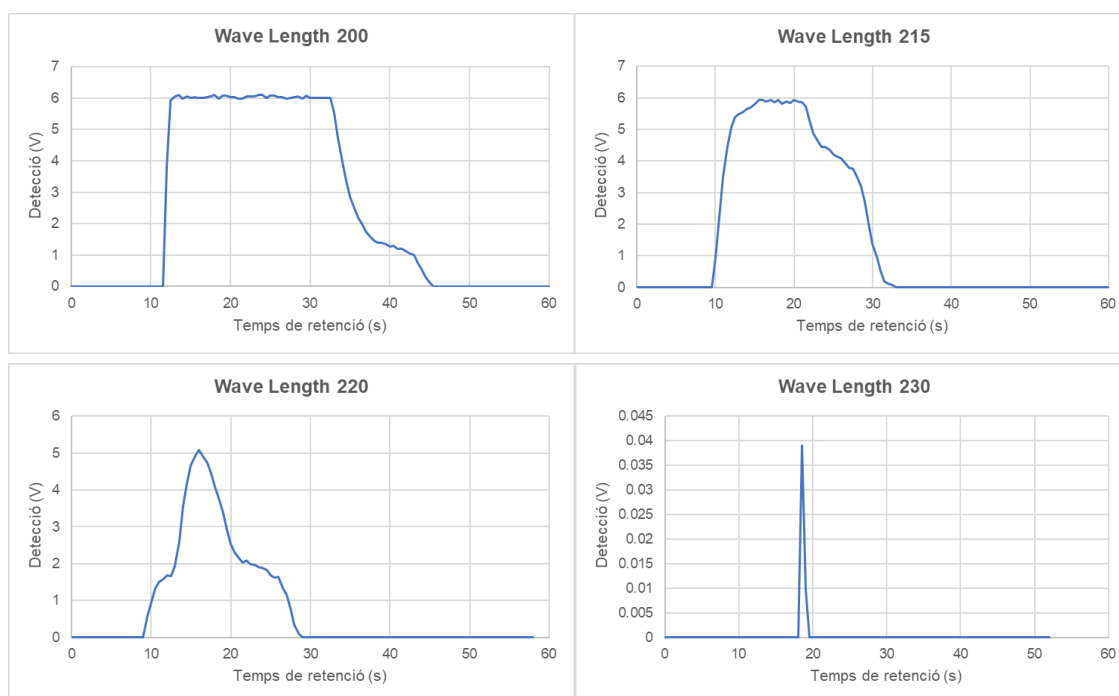


Figura 31. Font pròpia. Quàdruple comparativa entre diferents longituds d'ona (en nm).

Com es pot veure en aquesta comparativa, al augmentar la longitud d'ona la detecció es fa més dèbil, mentre que apareix menys soroll. Aquest s'observa clarament en forma de cresta a la corba amb una WL de 200 nm i, de manera més subtil, a les de 215 nm i 220 nm. Un altre aspecte a tenir en consideració és que si la longitud d'ona és massa petita, el detector es satura (ja no detecta valors més grans) i la corba queda tallada per dalt. Contràriament, si s'escull una WL massa elevada, les deteccions són molt suaus i es perd informació.

4.3.3.2. Amb columna de separació

Algunes de les restriccions observades amb les proves sense la columna són fàcilment solucionables en experimentacions reals. Això es deu a que, habitualment, un anàlisi GPC dura uns 20 minuts, amb un temps de mostratge d'un o dos segons. Aquestes característiques donen un bon balanç entre temps de mostratge i nombre de deteccions diferents a zero.

Els primers experiments sota aquestes condicions van resultar en una detecció continua de zeros, sense que aparegués el polímer. Això es deu a que la concentració d'aquest era massa petita. Per solucionar aquesta problemàtica es baixa la longitud d'ona a 190. El resultat d'aquest experiment és el que es mostra a continuació:

- Al ser un volum de dades grans (+800), CODIUM no és capaç d'executar el gràfic en temps real de l'experiment. Aquest problema es té en compte al Backend.

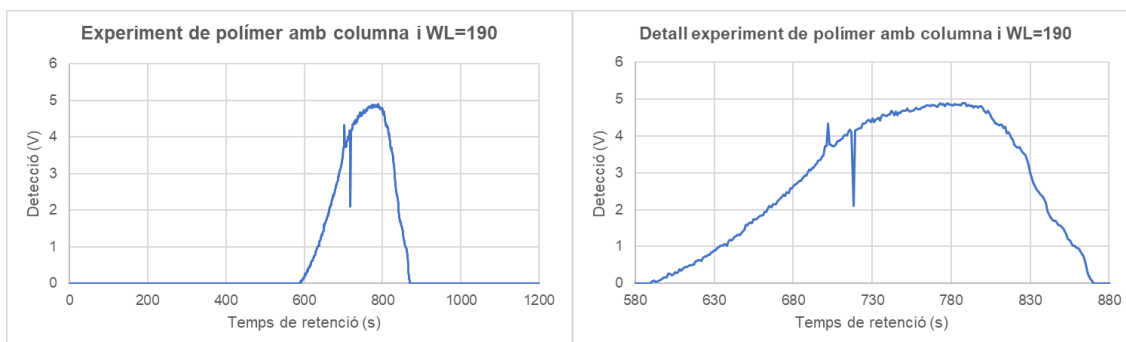


Figura 32. Resultat de la detecció amb columna (20 minuts) i WL=190 nm. Extret del fitxer obtingut per CODIUM.

Com es pot observar del detall de la corba, aquesta presenta força soroll al tenir un paràmetre de WL tant reduït. Per solucionar aquesta casuística sense baixar tant la longitud d'ona es canvia el conducte d'injecció del cromatògraf per un que permet un cabal major d'anàlit. Això ajuda a que passi pel detector més quantitat de polímer i es detecti amb més facilitat. No obstant, a l'hora de fer aquest canvi la columna cromatogràfica va quedar obstruïda, pel que vam haver de parar l'experimentació i esperar a que la neteja fes efecte.

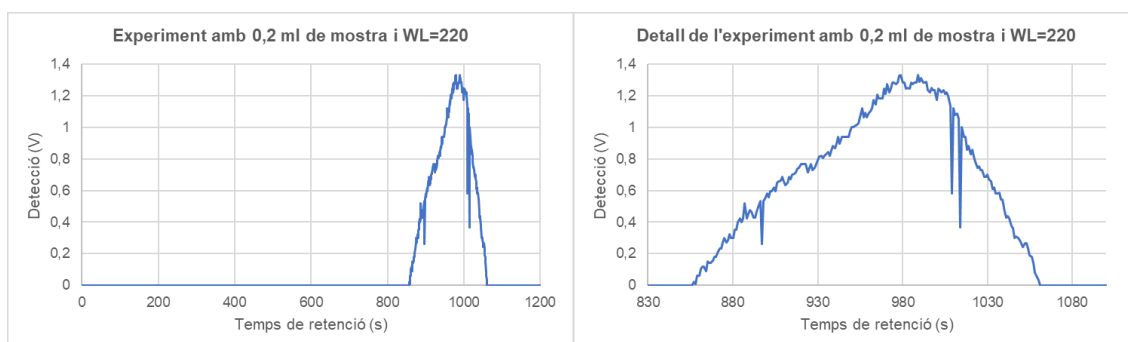


Figura 33. Resultat de la detecció amb columna (20 minuts), WL=190 nm i 0,2 ml de mostra. Extret del fitxer obtingut per CODIUM.

Com es pot veure a la Figura 33, amb una longitud d'ona de 220 nm apareix més cresta que per l'experiment previ (amb WL de 190 nm). Si a més ens fixem amb el temps on es comença a detectar la mostra, és clarament visible com aquest és major a l'anterior. Per últim, la pressió que dona la bomba de pistons augmenta, al dificultar-se el pas per la columna. Aquests tres factors indiquen que la columna cromatogràfica està obstruïda.

El procés de neteja de la columna pot trigar diversos dies si aquesta està força obturada. Mentre no es podia avançar en l'experimentació amb els polímers reals es van realitzar un seguit de proves per comprovar el comportament de NORI davant de dues deteccions simultànies. Aquestes consisteixen en veure si NORI enregistra les dades d'un potenciòmetre alhora que els del detector (que dona un seguit de zeros, ja que no està funcional).

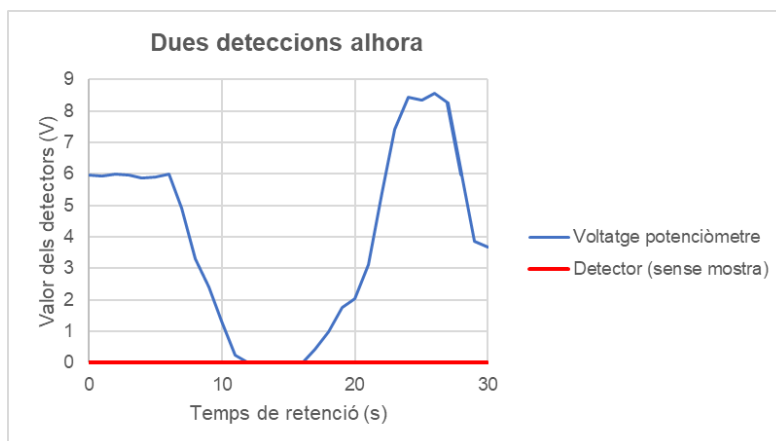


Figura 34. Resultat de la detecció simultània de dos sensors. Extret del fitxer obtingut per CODIUM.

D'aquests experiment es deriven les següents conclusions:

- El nou software de NORI és funcional a l'hora de fer l'adquisició simultània de dos sensors:
 - L'usuari pot indicar a CODIUM de quins canals del xip MCP3008 vol que s'enregistrin les dades (un o dos sensors).
 - A l'hora de fer l'anàlisi dels resultats, l'usuari indica a CODIUM quina detecció és la que ha de tractar.
- Tot i això, quan es realitza una doble adquisició amb un volum gran de dades (+600), CODIUM no és capaç de realitzar el gràfic en temps real del cromatograma. Aquestes limitacions es tenen en compte al backend de CODIUM.

Com s'ha vist, una limitació de NORI és realitzar el gràfic en temps real quan aquest està format per un gran bloc de dades. Quan la informació rebuda supera un cert nombre (800 dades per 1 detector, 600 per 2 detectors), CODIUM genera una barra de progrés enllloc del gràfic en línia. Per tenir aquest paràmetre sota control es realitzen una sèrie de proves de verificació. També es verifica el botó que permet parar l'experiment integrat en CODIUM (Stop Recording).

Taula 7. Font pròpia. Proves per modelar el gràfic de CODIUM.

Nombre detectors	Ts (s)	Tmax (min)	Mostres	Gràfic	Stop. Rec.	Progressbar
1	1,00	13,00	780,00	Passed	Passed	Not apply
1	1,50	20,00	800,00	Passed	Passed	Not apply
2	2,50	20,00	480,00	Passed	Passed	Not apply
2	1,00	20,00	1.200,00	Not apply	Passed	Passed
1	0,50	10,00	1.200,00	Not apply	Passed	Passed

4.3.3.3. Experimentació amb estàndards per trobar la corba de calibratge

La corba de calibratge del sistema de cromatografia és una funció matemàtica que relaciona els pesos moleculars dels polímers amb el temps en que surten de la columna i són detectats pel detector. Per a que NORI sigui capaç de determinar el pes molecular de les mostres que se li poden injectar a posteriori, és necessari saber els valors que ajusten aquesta corba. L'expressió matemàtica és la següent:

$$\log_{10} [M_i] = A + B \cdot T_r + C \cdot T_r^2 + D \cdot T_r^3 \quad (\text{Eq. 15})$$

On M_i és el pes molecular de la cadena "i" i T_r és el temps de retenció (en el que s'ha detectat la cadena "i").

Per trobar els valors de les constants A, B, C, D és necessiten diverses mostres d'un polímer estàndard, on cada mostra conté una llargada de cadena idealment única (monodispers) i que és coneguda. Tot seguit, es passen aquestes mostres pel cromatògraf 785A per trobar-ne el seu temps de retenció.

En aquest cas, es disposa de tres mostres del polímer Poliestiresulfonat, sal sòdica (Figura 35), amb un pes molecular de 150 kg/mol, 17 kg/mol i 4,3 kg/mol, respectivament. Aquests es dilueixen amb aigua al 0,5% en volum (5 mg/ml) per fer l'experimentació. Com més gran és la massa molecular de la mostra que s'injecta al detector, menor ha de ser el seu temps de retenció, ja que s'elueix abans.

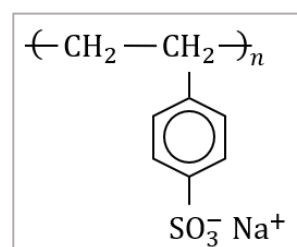


Figura 35.

Gràcies a CODIUM, s'obtenen els resultats dels tres experiments en tres fitxers d'Excel fàcils de manipular. Mitjançant CODIUM FT, s'envien a l'ordinador fix del laboratori per poder-los superposar i veure el resultat de l'experimentació globalment. El resultat és el que es mostra a continuació:

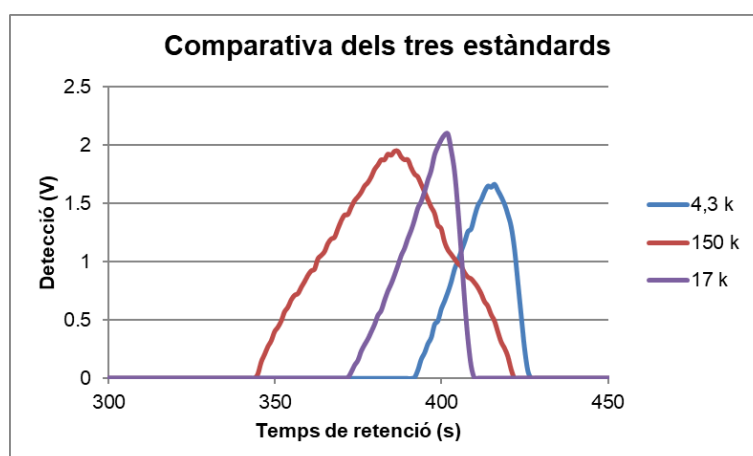


Figura 36. Font pròpia. Triple comparativa dels estàndards.

D'aquesta triple comparativa se'n pot concloure que:

- Les mostres es separen segons el seu pes molecular, verificant que les de major mida tenen un temps de retenció menor (387 s) que les més petites (415 s).
- Tot i això, la mostra de 150 kg/mol és força polidispersa, ja que l'amplitud de la corba és pròxima a 80 segons, que és aproximadament el doble que la de les altres dues mostres. Això és degut a que les condicions cromatogràfiques no són ideals i que aquest estàndard és defectuós.
- La concentració amb la que s'ha introduït els estàndards és pràcticament la mateixa, ja que el valor màxim dels tres ronda els 2 V.
- Al haver-hi poc temps entre la sortida de les mostres, augmenta la sensibilitat del sistema de mesura.

Assumint un possible error acumulat al no comportar-se els estàndards idealment, es calculen els coeficients A, B, C i D amb aquests resultats, tenint en consideració les masses moleculars de les tres mostres i el temps de retenció corresponent al pic més alt del cromatograma.

Taula 8. Font pròpia. Dades experimentals per trobar la corba de calibratge.

Massa molar (g/mol)	Temps retenció (min)	Temps retenció (s)	Log ₁₀ (M _i)
150000	6,450	387	5,176
17000	6,700	402	4,230
4300	6,917	415	3,633

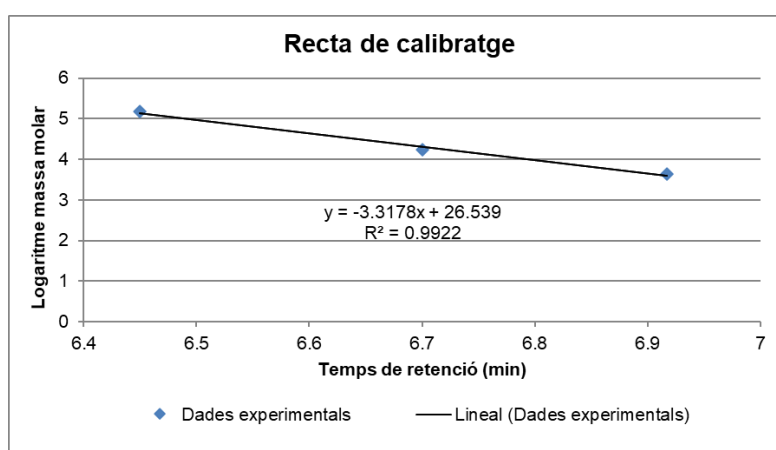


Figura 37. Font pròpia. Recta de calibratge del GPC.

Com es pot veure de la Figura 37, l'expressió matemàtica que regeix la relació entre la massa del polímer i el temps de retenció és quasi lineal (R^2 de 0,9922). Així doncs, s'escullen els següents valors per la corba de calibratge:

$$\log_{10} [M_i] = 26,539 - 3,3178 \cdot T_r \quad (\text{Eq. 16})$$

Al eliminar els termes de C i de D, els càlculs s'agilitzen de manera general. Com que el comportament és pràcticament lineal, aquesta aproximació es pot agafar com a vàlida. A

més, cal tenir en consideració que l'objectiu d'aquesta experimentació no és calcular de manera exacta els pesos moleculars dels polímers, sinó comprovar el funcionament de NORI.

4.3.3.4. Experimentació final amb SMA

Un cop determinada la corba de calibratge, es passa pel cromatògraf el polímer SMA una altra vegada, ja que per poder determinar la massa molar que té amb CODIUM, l'únic que es necessita és trobar el seu temps de retenció. L'experiment es realitza amb la mateixa concentració amb que s'han introduït prèviament els estàndards (5 mg/ml) i WL de 215 nm.

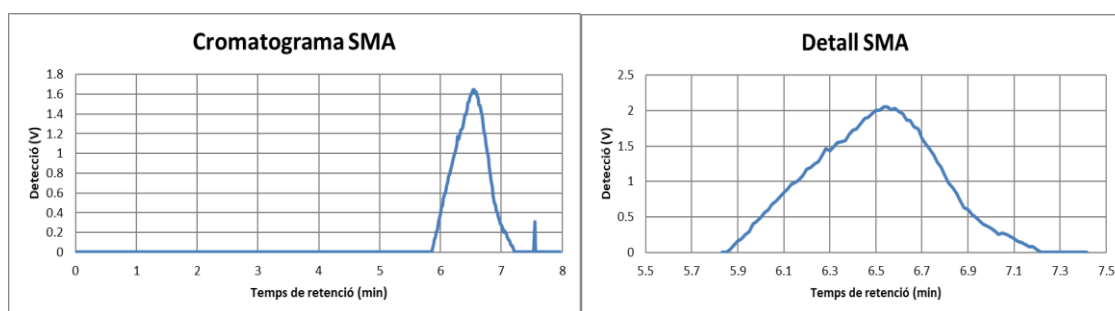


Figura 38. Font pròpia. Resultats extrets de CODIUM. Cromatogrames de SMA.

El cromatograma mostra la sortida de l'SMA (de 5,933 minuts a 7,20 minuts, amb un màxim en 6,533 minuts). Això correspon a una amplada de la corba cromatogràfica de 101,36 segons, que és més gran que la dels estàndards, ja que aquesta mostra és més polidispersa (conté cadenes de varies mides).

CODIUM també proporciona els valors de M_n i M_w , que són de 16.084 g/mol i 540.797 g/mol respectivament, amb un valor de polidispersitat de 33,6. Utilitzant la corba de calibratge i el temps de retenció del pic més alt, podem trobar la massa de la cadena de SMA amb més presència a la mostra, que és de **73 kg/mol**. Segons la informació proporcionada pel professor Jordi Bou, aquesta hauria de ser, aproximadament, d'uns 88 kg/mol. Així doncs, en relació a aquest experiment:

- La mostra de SMA pot no ser exacta i està parcialment contaminada, ja que després del polímer es detecta un pic, que segurament pertany a una petita molècula no desitjada.
- Les condicions cromatogràfiques no són ideals, com ara una alta temperatura del laboratori, que genera petites bombolles de vapor dins de la bomba de pistons.
- La corba de calibratge és molt sensible. Com que l'estàndard defectuós té el pic de sortida a 6,45 minuts i la mostra de SMA comença a sortir a 5,933 minuts, el valor de M_w és força elevat (detecta cadenes molt llargues, de masses molars molt superiors a 150 kg/mol).

- Malgrat els punts anteriors, el resultat és de l'ordre esperat. El cromatograma també presenta la forma teòrica. Això evidencia el bon funcionament de NORI i CODIUM en aquest tipus d'aplicacions.

Finalment, es realitza una altra experimentació per estudiar si NORI detecta novament la mostra de contaminant que presenta el SMA. En aquest cas el que s'obté és:

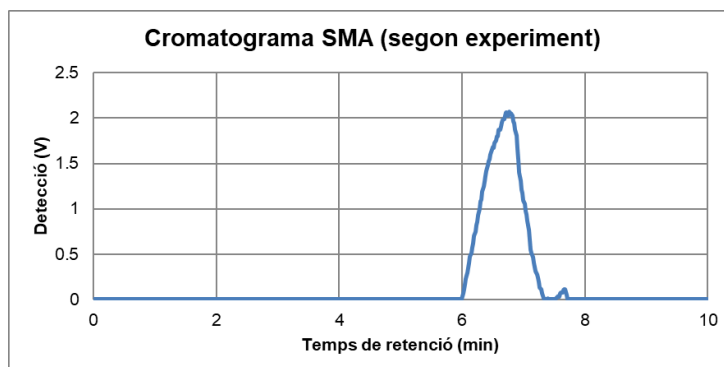


Figura 39. Font pròpia, extret de CODIUM. Al segon experiment amb l'SMA, apareix de nou la cadena de contaminant.

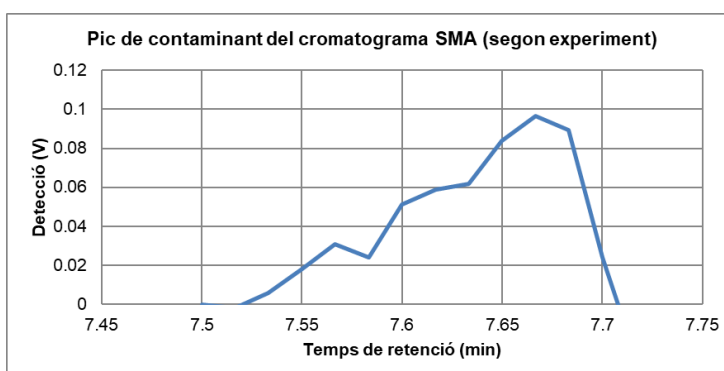


Figura 40. Font pròpia. Detall del pic de contaminant de la mostra d'SMA.

El segon pic, corresponent a la presència d'algun contaminant, també es pot analitzar amb CODIUM, obtenint un resultat de $M_n=27,01$ g/mol i $M_w=28,81$ g/mol, amb una polidispersitat de 1,07. El pic més alt d'aquesta mostra és a 0,1 V, pel que es pot determinar que la concentració és menor que el de la mostra principal de SMA, que sobrepassa els 2 V.

Aquests resultats són coherents amb el temps de retenció del contaminant (màxim a 7,66 minuts). Finalment, d'aquesta última prova se'n pot concloure que:

- El contaminant correspon a una molècula petita de baixes concentracions.
- Tot i que la corba de contaminant presenta poques dades (degut a que el període de mostratge és massa gran), NORI també es capaç de captar molècules petites de contaminants a les mostres.

4.3.4. Implementació del sistema de transferència de dades.

Paral·lelament a l'experimentació del sistema d'adquisició de dades, es realitza el muntatge de transferència de dades descrit a la secció 4.1.3 i es desenvolupa la interfície gràfica CODIUM FT (veure secció 4.2.2).

4.3.4.1. Connexió a la mateixa xarxa local

Per poder enviar els fitxers entre la RPi i l'ordinador fix del laboratori amb el protocol de copia segura SCP, cal que els dos estiguin connectats a la mateixa xarxa local. Les primeres proves que es realitzen tenen per objectiu aconseguir aquesta connexió.

1. Xarxa Eduroam: La opció més senzilla a primera vista és que la xarxa sigui Eduroam, pública pels estudiants (cal usuari i contrasenya). Ara bé, Eduroam està protegida per una seguretat no compatible amb la RPi. També presenta problemes per la connexió SCP.
2. Xarxa Wi-Fi al laboratori: Una altra opció és crear una xarxa local a partir d'un router antic del professor Bou, a partir dels punts d'internet del laboratori (rosetes). Els motius que no van permetre aquesta via són els següents:
 - Està prohibida la creació d'una xarxa Wi-Fi local multiusuari a la ETSEIB.
 - Els punts d'internet del laboratori no estaven operatius.

Gràcies a l'ajuda dels Serveis TIC de l'escola, s'arreglen i s'habiliten les rosetes per poder realitzar una tercera prova:

3. Connexió a la xarxa local del departament d'EQ: Es connecta l'ordinador fix i la RPi directament via cable Ethernet al switch del departament d'EQ. A més, a cada dispositiu se li atorga una IP estàtica (20.5.22.92 i 20.5.22.91, respectivament) que facilita la transferència de fitxers per SCP. El muntatge es pot trobar a la Figura 11.

4.3.4.2. Transferència dels fitxers

Abans d'implementar el punt 3, es comprova que la transferència és viable en una xarxa local a la qual es pot accedir fàcilment. Per això, es porta la RPi a casa i es verifica aquesta acció en un entorn de treball amb Windows 11. Malgrat això, la versió del sistema operatiu del laboratori és Windows 7, fet que obliga a instal·lar un client de SCP per efectuar la comanda. Això permet enviar fitxers des de la RPi a l'ordinador, escrivint la comanda al ordinador.

En canvi, no es pot realitzar a l'inrevés ja que hi ha problemes amb els permisos dels usuaris de l'ordinador. Gràcies als serveis TIC novament es soluciona aquesta problemàtica. Això permet desenvolupar CODIUM FT actuant des de la RPi, com una extensió de CODIUM.

5. Resultats

NORI és un dispositiu d'adquisició, transmissió i anàlisi de dades que permet treballar amb senyals analògics procedents de diversos sensors a partir d'un ordinador de placa única Raspberry Pi i els seus perifèrics. El prototip en la seva presentació global respon a un patró clàssic integrat de màquina de control (PC) juntament a màquina de procés (instrument), especialitzat en el tractament de dades cromatogràfiques. Els components de hardware del sistema operen a partir de les instruccions que obtenen dels diferents algorismes que es programen en Python. A més, NORI presenta CODIUM, una interfície intuïtiva, còmoda i eficient destinada a operar amb equips de cromatografia per l'anàlisi de pesos moleculars de polímers. Els resultats poden ser enviats a un altre ordinador del laboratori gràcies a CODIUM FT, una extensió del programa que permet la transmissió d'arxius. El manual de NORI es pot trobar a l'Annex I d'aquest treball.

5.1. Especificacions tècniques de NORI

Les taules que es presenten a continuació fan referència a les especificacions tècniques del hardware de NORI com a conjunt operatiu. Algunes d'aquestes característiques estan condicionades pels diversos components electrònics que la conformen (el microcomputador RPi 3B+ i el xip MCP3008). Les especificacions d'aquests dispositius estan disponibles a [14] i [16]. Els esquemes i descripcions dels muntatges del hardware es poden trobar a la secció 4.1 d'aquest treball.

Taula 9. Font pròpia. Alimentacions externes de NORI

Alimentacions externes			
Paràmetre	Valor	Unitat	Comentaris
Tensió d'alimentació microcomputador RPi	5,0	VdC	Mitjançant convertidor de 220 V (50 Hz) a 5 V/2,5 A.
Intensitat d'alimentació microcomputador RPi	2,5	A	
Monitor	220	V	El model del monitor depèn de l'usuari, sempre que es pugui connectar a la RPi per HDMI.

Taula 10. Font pròpia. Connexions internes de NORI

Connexions internes NORI				
Xip MCP3008				
Pin	Paràmetre	Valor	Unitat	Comentaris
16	Alimentació xip MCP3008 (V_{DD})	5,0	VdC	Connexió elèctrica al pin 2 de RPi (5 VdC).
15	Voltatge de referència xip MCP3008 (V_{REF})	5,0	VdC	
14	Massa analògica (AGND)	0	VdC	Connexió elèctrica al pin 6 de RPi (0 VdC).
13	Senyal de rellotge (CLK)	3,6 (màx.)	MHz	La RPi actua de màster.
12	Sortida del senyal binari (D_{OUT})	-	bit	10 bits enviats bit a bit al pin 21 de la RPi (GPIO9).
11	Entrada de configuració (D_{IN})	-	bit	5 bits enviats bit a bit al pin 19 (GPIO10).

10	Selecció del xip (CS/SHDN)	-	bit	Quan el bit és 0, s'estableix la comunicació entre RPi i MCP3008 (pin 24, GPIO8)
9	Massa digital (DGND)	0	VdC	Connexió elèctrica al pin 6 de RPi (0 VdC).
8-1	Canals d'entrades analògiques (CH7-CH0)	[0,6;V _{REF}]	VdC	Sortides dels sensors.
Perifèrics				
Port	Dispositiu	Comentaris		
USB	Ratolí	Si el ratolí és inalàmbric, cal alimentar-lo com indica el fabricant.		
	Teclat	Si el teclat és inalàmbric, cal alimentar-lo com indica el fabricant.		
	-	S'hi pot connectar un Pen-Drive.		
	-	S'hi pot connectar un Pen-Drive.		
HDMI	Monitor	-		
Altres				
La RPi porta incorporada una targeta microSD de 8 GB.				

Taula 11. Font pròpia. Connexions externes de NORI.

Connexions externes NORI		
Connexió	Dispositiu	Comentaris
Ethernet	Ordinador laboratori HP	Connexió al switch amb xarxa local EQ. <ul style="list-style-type: none"> Ethernet RPi roseta 82. IP RPi: 20.5.22.91 Ethernet HP roseta 43. IP ordinador laboratori: 20.5.22.92
CH0-CH7 MCP3008	Sensors	Connexió elèctrica a la protoboard. Alimentar el sensor com indica el fabricant.

Taula 12. Font pròpia. Condicions de funcionament de NORI.


Condicions de funcionament per NORI				
Paràmetre	Valor nominal	Valor màxim	Unitat	Comentaris
Temperatura CPU	[35,50]	85	°C	L'augment de temperatura es suavitza amb el temps de funcionament.
Taxa de mostratge	[1,2]	100	sps	Per aplicacions cromatogràfiques
	-	200	ksps	Per altres aplicacions
Període de mostratge	[0,5;1]	0,01	s	Per aplicacions cromatogràfiques
	-	5	µs	Per altres aplicacions
Retard en resposta	<0,01		s	No comprovat per freqüències més altes.
Rang d'entrada	[0,6;V _{REF}]		VdC	NORI no detecta valors fora d'aquest rang de sortida del sensor.
Resolució	10		bits	-
Pas	0,0048828125		VdC	Amb la connexió a V _{REF} =5 V
Memòria microSD	8		GB	L'usuari pot canviar-la per una amb més memòria, sempre que tingui instal·lat el programari.
Potència consumida	3,5	6	W	El corrent consumit no supera 1,2 A. No s'inclou el monitor ni altres PC.

5.2. Interfície CODIUM

CODIUM és la interfície de NORI dissenyada explícitament per a treballar amb detectors de cromatografia com a sensors. Aquesta integra tot el desenvolupament de backend respecte a l'adquisició i l'anàlisi de dades en un entorn de treball automatitzat per a que l'usuari configuri els paràmetres de cada un dels experiments. Les pantalles que conformen aquesta eina són les que es mostren a continuació:

Taula 13. Font pròpia. Interfície gràfica CODIUM.

Interfície gràfica CODIUM



Bloc "Record"

Introducció de les dades de l'experiment

En aquesta secció l'usuari introdueix les dades de:

- Nom del fitxer corresponent a l'experiment.
- Duració total de l'experiment (en minuts).
- Temps entre l'adquisició de dues mostres consecutives (en segons).
- Canal del xip MCP3008 on es connecta el primer detector (del 0 al 7).
- Canal del xip MCP3008 on es connecta el primer detector (del 0 al 7, és opcional).
- Espai per afegir comentaris, que es guardaran juntament amb la resta d'informació.

NOTA: El màxim de detectors dels que es poden enregistrar simultàniament les dades experimentals són 2. Tot i això, poden haver-hi fins a 8 connectats, ja que és la capacitat màxima de NORI.

Recording inputs

Filename

Recording duration [min]

Sampling period [s]

Input channel I

Input channel II

Insert comment

Press OK to start recording

If the number of samples exceeds 800 (1 detector) or 600 (2 detectors), the real time chromatogram will not be shown.

Recording inputs

Filename

Recording duration [min]

Sampling period [s]

Input channel I

Input channel II

Insert comment

Press OK to start recording

If the number of samples exceeds 800 (1 detector) or 600 (2 detectors), the real time chromatogram will not be shown.

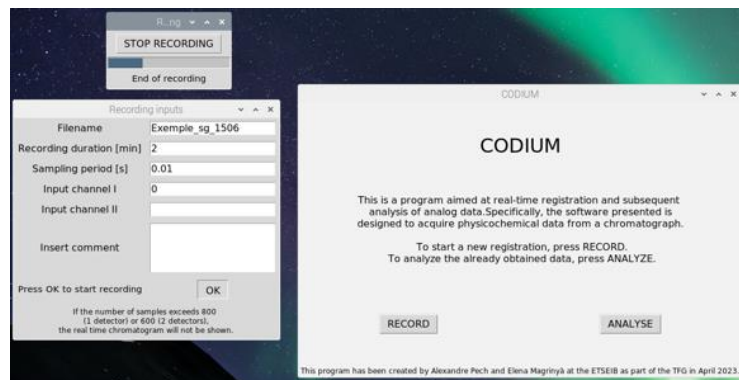
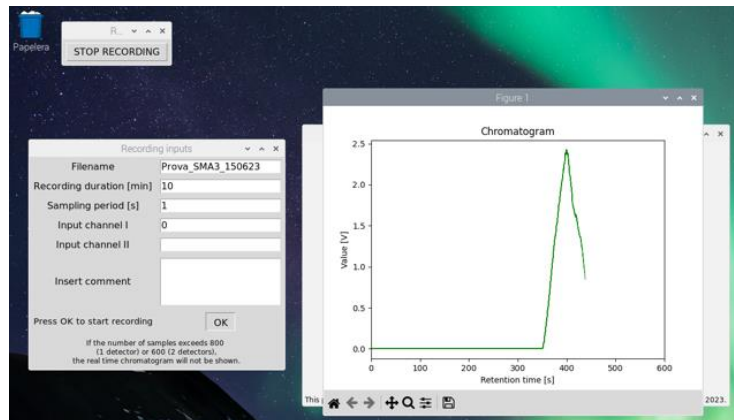
Enregistrament de les dades

Depenent de la quantitat de dades i de si s'adquireixen d'un o dos detectors, es mostra el cromatograma en temps real o una barra de progrés. La generació del gràfic és quan:

- Amb un detector, s'adquireixen menys de 800 dades i $T_s > 0,5$ segons.
- Amb dos detectors, s'adquireixen menys de 600 dades i $T_s > 0,5$ segons.

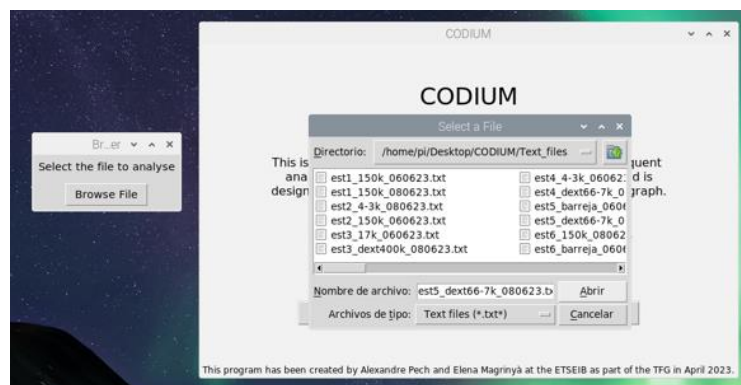
A part, apareix el boto "Stop Recording", que quan es pulsa s'acaba l'enregistrament. Un cop acabat l'experiment, es generen els següents fitxers:

- **"Filename.txt"**: Conté una columna de dades de temps d'adquisició amb el valor de cada detector corresponent a aquell instant separats per un espai.
- **"info_Filename.txt"**: Conté les dades de l'experiment.



Bloc "Analyse"

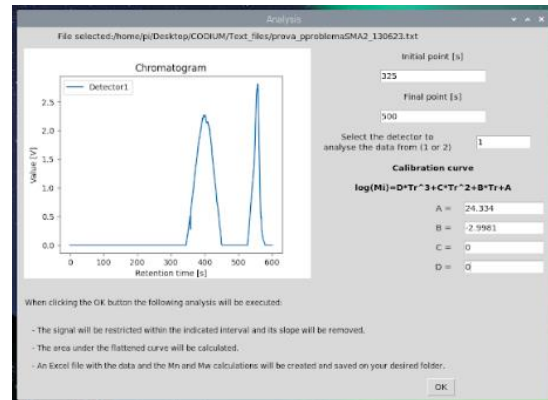
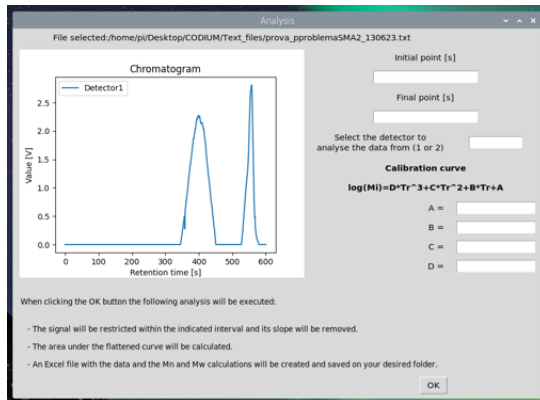
Selecció del fitxer de text (obtingut en una operació de "Record") a analitzar



Introducció de les dades pel processament

Un cop seleccionat el fitxer que es vol analitzar, CODIUM demana a l'usuari els següents paràmetres:

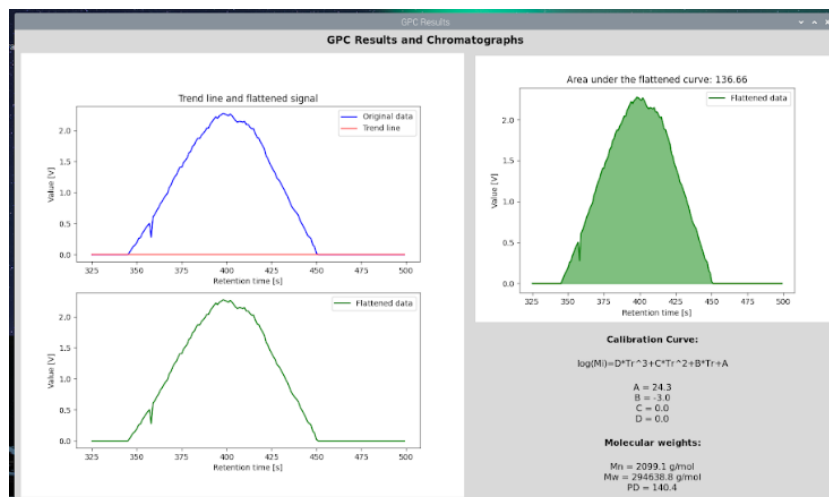
- Valor inicial i valor final de temps (en segons) del conjunt de dades que es vol analitzar.
- Número del detector del qual es vol fer l'anàlisi:
 - Si s'ha fet una doble detecció, el fitxer "Filename.txt" conté la detecció dels dos sensors alhora. S'ha d'indicar respecte quin es vol fer l'anàlisi. Un 1 correspon a "Input Channel I" i un 2 a "Input Channel II".
- Valors de A, B, C, D obtinguts de la recta de regressió amb els estàndards.



Mostreig de les dades processades i Excel amb els resultats

Un cop seleccionats els paràmetres, CODIUM:

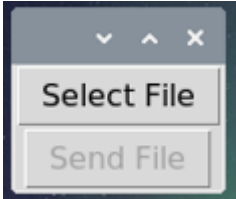
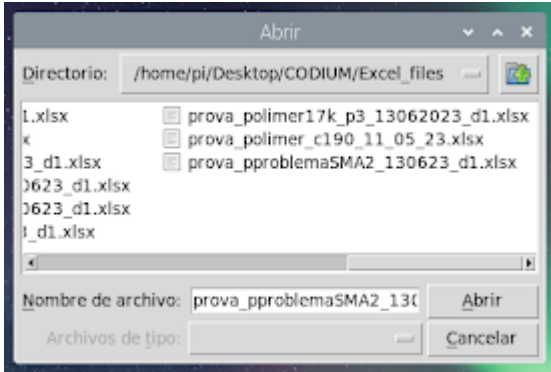
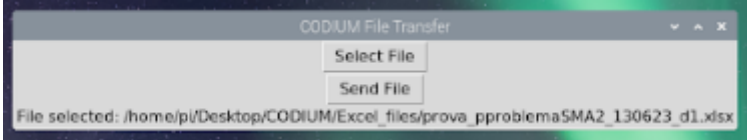
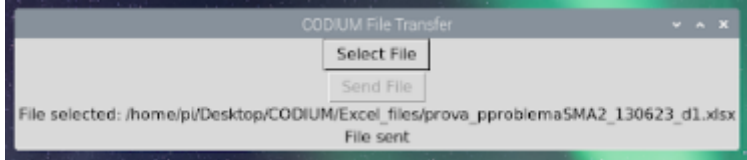
- Executa l'anàlisi:
 - Retalla les dades escollides, calcula si hi ha una línia de tendència i la corregeix.
 - Calcula l'àrea sota la corba.
 - Calcula els valors de Mn, Mw i PD a partir de A, B, C i D.
- Genera un fitxer Excel anomenat "Filename_d1.xlsx" o "Filename_d2.xlsx" amb les dades adquirides i els resultats de l'anàlisi.



5.3. Interfície CODIUM FT

Un cop obtinguts els resultats de l'adquisició i l'anàlisi de les dades, es pot utilitzar CODIUM FT per enviar-los a l'ordinador fix del laboratori, des d'on l'usuari pot editar els fitxers. CODIUM FT permet enviar de manera segura (utilitzant el protocol SCP) tota mena de fitxers de dades, tant els documents de text com ens Excel generats per CODIUM, sempre i quan la transmissió sigui d'un en un. La següent taula mostra les diverses finestres que el componen:

Taula 14. Font pròpia. Interfície gràfica de CODIUM FT.

Interfície CODIUM FT	
Seleccionar el fitxer que es vol enviar al PC del laboratori amb "Select File"	
	
Missatge de confirmació del fitxer seleccionat	
	
<u>Enviar el fitxer amb el botó "Send File"</u>	
<p>Un cop enviat el fitxer, CODIUM FT ho notifica amb "File sent" i resta preparat per si es vol enviar un altre document, seguint el mateix procediment. Aquests arxius es guarden al directori "Nori Directori", del PC del laboratori.</p>	
	

Tant els codis informàtics de CODIUM com de CODIUM FT es poden trobar a l'Annex II – Codis informàtics de NORI d'aquest treball.

5.4. NORI en l'entorn de treball

En aquesta secció es mostra el prototip de NORI connectat amb el detector 785A dins del laboratori d'EQ 25-39, que és on s'ha desenvolupat l'experimentació del projecte.

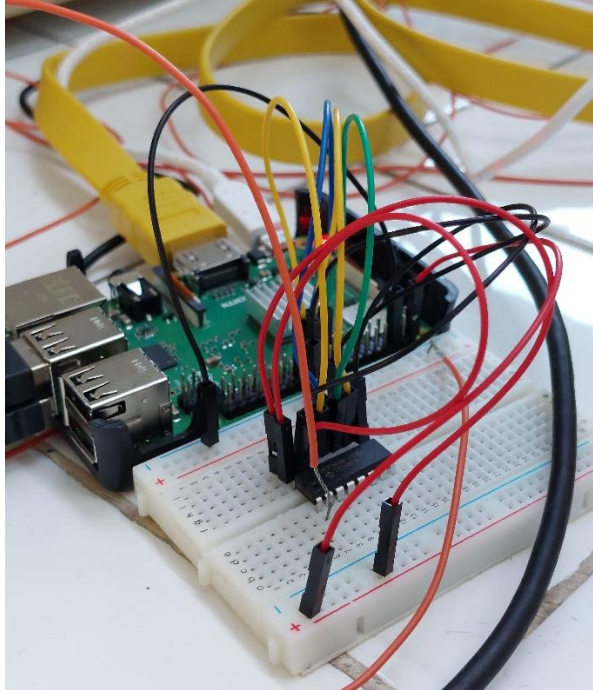


Figura 41. Font Pròpia. Aspecte del prototip NORI. El cable taronja és la sortida del detector.

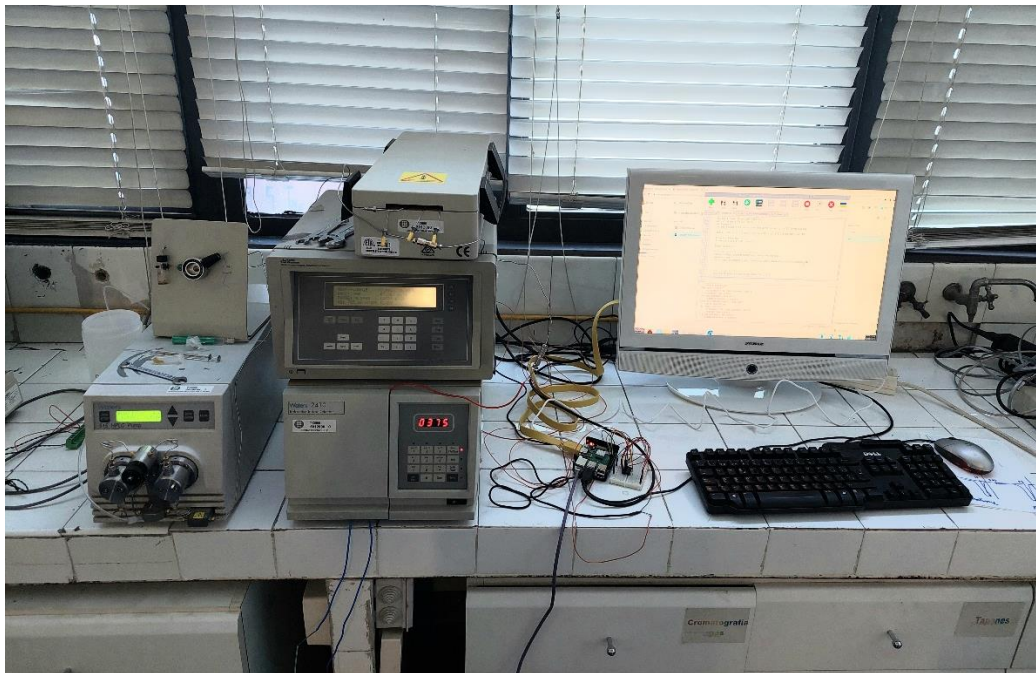


Figura 42. Font pròpia. Muntatge de NORI amb els elements de cromatografia. També es poden veure els elements auxiliars que s'hi connecten: monitor, ratolí i teclat.

5.5. Resultats de proves en entorn real

Com s'ha vist durant el capítol 4.3 d'aquesta memòria, el comportament de NORI s'ha posat a prova en múltiples escenaris a mode de DAS. També s'ha avaluat la seva capacitat per analitzar les dades cromatogràfiques enregistrades a partir de CODIUM i enviar-les mitjançant CODIUM FT a l'ordinador del laboratori. Les experimentacions amb els polímers han estat positives en el sentit que s'han obtingut els resultats de l'ordre que s'esperaven, així com que NORI ha sigut capaç d'identificar contaminants de les mostres.

Essent més exigents, es realitza una comparativa entre els valors mostrats pel detector 785A i els enregistrats per NORI al mateix instant. Els valors de la detecció del 785A es mouen en un rang entre 0 i 3,325 V. Aquesta tensió es transmet al xip MCP3008, que permet rebre valors de tensió entre 0,6 i 5 V [16]. Al xip, aquest valor es transforma a binari de 10 bits de resolució, és a dir, un nombre entre 0 i 1023, que finalment es processa a la RPi per escalar-lo en un interval [0,10] V. Aquest resultat és proporcional a la primera detecció, pel que és vàlid per l'anàlisi cromatogràfic.

Així doncs, a cada valor detectat durant la GPC li correspon un valor enregistrat per CODIUM, seguint una relació lineal ideal (recta groga de la Figura 43). Els punts blaus permeten veure, per diferents entrades, els valors reals que s'ha enregistrat.

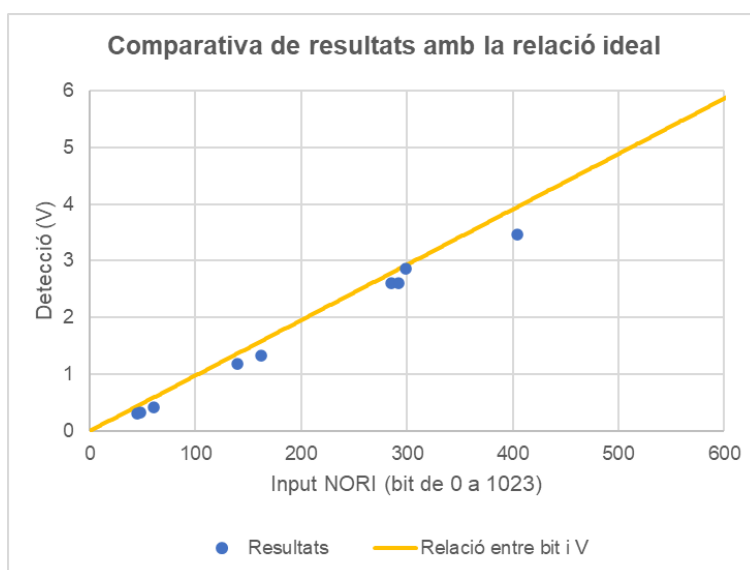


Figura 43. Font pròpia. Comparativa de dades enregistrades vs recta ideal de correspondència.

Com es pot observar, els valors adquirits s'acosten al comportament ideal del sistema, tot i que tots es troben lleugerament per sota de la recta ideal. Això pot ser degut a una pèrdua de tensió en algun punt del muntatge, que probablement sigui a la sortida del detector. Tot i així, aquestes diferències són poc significatives i és pot afirmar que NORI s'ha comportat dintre de l'esperat en les proves en un entorn de treball real.

5.6. Taula de falles

A continuació es recullen les principals falles que poden sorgir de l'ús de NORI en format de taula:

Taula 15. Font pròpia. Taula de falles en l'ús de NORI.

Categoria	Títol	Probabilitat	Impacte	Descripció	Mitigació
SOFTWARE CODIUM	No generació d'una finestra	4	3	L'algorisme que ha de generar una finestra de CODIUM presenta un error.	Revisar els inputs de les diferents entrades de dades. Si el problema persisteix, revisar el codi.
SOFTWARE CODIUM	Generació incorrecta d'una finestra	6	2	L'algorisme que ha de generar una finestra de CODIUM presenta un error.	Revisar els inputs de les diferents entrades de dades. Si el problema persisteix, revisar el codi.
SOFTWARE CODIUM	Lentitud del gràfic en temps real	3	4	El gràfic en temps real de la detecció s'alenteix quan el nombre de dades a detectar augmenta.	Canviar els valors límits de dades per mostrar el gràfic als programes de lectura.
SOFTWARE CODIUM	Valors sense sentit químic dels pesos moleculars a la pantalla de resultats	7	2	Degut a que les unitats dels paràmetres (A, B, C, D) de la corba de calibratge no coincideixen amb les unitats dels càlculs	Comprovar que les unitats amb les que s'ha calculat A, B, C, D són minuts. Si l'error persisteix, repetir l'experiment.
SOFTWARE CODIUM	La fulla de càlcul de Excel no es genera.	6	3	Al calcular els pesos moleculars donen valors infinits o incorrectes degut a que els paràmetres A, B, C, D no són correctes. Aleshores l'Excel no es crea.	Canviar els valors de A, B, C, D. Si l'error persisteix, revisar el codi.
SOFTWARE CODIUM FT	El fitxer a transmetre no es rep a l'ordinador destí.	3	6	Quan es selecciona un fitxer per enviar a l'ordinador destí aquest no es rep després de fer clic a "Send File"	Comprovar la connexió a la xarxa dels dos dispositius. Comprovar que el fitxer s'ha seleccionat correctament. Comprovar que el nom d'usuari, contrasenya i direcció IP estan ben introduïts al codi.
HARDWARE NORI	RPI danyada.	1	10	La RPI es pot trencar per un cop, caiguda o per algun defecte de fabricació que no es tenia en consideració.	NORI deixaria de funcionar automàticament i és possible que es perdés part de la informació que conté. És per això que es recomana anar fent còpies de seguretat.
HARDWARE NORI	Xip MCP3008 danyat.	1	8	El xip MCP3008 es pot trencar per un cop, caiguda o per algun defecte de fabricació que no es tenia en consideració	NORI deixaria de funcionar automàticament i s'hauria de canviar el xip. Tot i això, no es perdria la informació continguda a la RPI.
HARDWARE NORI	Les alimentacions no són correctes.	2	1	El monitor, teclat, ratolí o RPI no s'encenen, degut a que no estan degudament endollats.	Comprovar les alimentacions i realitzar aquelles que no estiguin correctament fetes.
HARDWARE	Errada en la	3	8	El senyal es perd en alguna	Comprovar les connexions entre

NORI	detecció del senyal.			part del sistema de NORI.	els diferents components i que no hi hagi cap element fet malbé.
HARDWARE NORI	NORI es sobreescalfa.	3	6	La RPi es sobreescalfa degut a un ús massa continuat de NORI.	Parar l'experimentació i deixar que NORI es refredi. Si cal, desendollar l'aparell.
HARDWARE NORI	Bloqueig del monitor	8	1	El monitor es posa de color negre i apareix el missatge "Sin señal"	Moure el ratolí fins que torni a l'estat inicial.
HARDWARE NORI	Alentiment del monitor	5	4	El monitor s'alenteix ja que la RPi té massa processos executant-se paral·lelament	Tancar finestres, sobretot si hi ha alguna d'internet (com Google Drive, Duck Duck Go, etc).
EXTERN	Pressió de la bomba massa elevada (> 50 bar)	2	9	A causa de partícules retingudes massa temps a la columna, aquesta s'obstrueix. Això provoca que la pressió de la bomba de pistons augmenti. NORI no detecta el polímer.	Netejar la columna de separació. Per això s'ha de desmuntar i sotmetre al procés recomanat pel fabricant. Aquest procediment pot trigar diversos dies.
EXTERN	Degoteig pel circuit del cromatògraf	3	6	A causa d'un petit forat a un conducte o una mala junta dels components del circuit hi ha una fuga de líquid. NORI no detecta el polímer.	Revisar els conductes i les juntes. Si el problema és d'un conducte, canviar-lo. Si és d'una junta, collar-la més o canviar-la si el problema persisteix.
EXTERN	Pèrdua de pressió.	5	5	Durant l'experiment, la pressió baixa de cop. Això és degut a la que la bomba no és capaç de donar el flux escollit. NORI detecta la mostra distorsionada.	Ajustar manualment els paràmetres de flux de la bomba. Si l'error persisteix, desmuntar la bomba i tornar-la a muntar.
EXTERN	Oscil·lació de pressió.	6	5	La bomba de pistons dona una pressió considerablement variable en el temps. Això és degut a que hi ha aire al circuit de la bomba. NORI detecta la mostra distorsionada.	Purgar la bomba per treure l'aire existent. Baixar la temperatura del laboratori. Passar el dipòsit per la màquina d'ultrasons per treure les bombolles. Si el problema continua, desmuntar la bomba i tornar-la a muntar.
EXTERN	Detecció de zeros per mala configuració del detector.	7	3	NORI detecta un seguit de zeros durant l'experimentació ja que el detector no està ben configurat.	Baixar el paràmetre "Wave length" perquè la detecció sigui més intensa. Això fa pujar les oscil·lacions en la detecció. Comprovar també que el paràmetre "Range" estigui a 0,1.
EXTERN	Detecció amb valor massa elevat.	5	3	NORI detecta una corba la qual està retallada per dalt. Això és degut a que el detector està mal configurat o que s'ha introduït una mostra massa gran o massa concentrada de polímer.	Refer l'experimentació amb el paràmetre "Wave length" més baix. Refer l'experimentació amb menys concentració de polímer. Refer l'experimentació amb una mostra més petita.
EXTERN	Aigua a la RPi	1	9	Li cau aigua del cromatògraf a la RPi.	Amb un paper, intentar assecar-la el més ràpid possible. Si es filtra pot danyar la placa i s'hauria de canviar.

7. Estudi econòmic

L'estudi econòmic d'aquest projecte consta de quatre subapartats, que són:

- Cost del personal: És el cost de les hores que s'han dedicat al projecte. Aquest és un valor aproximat i teòric, doncs aquest és un projecte universitari. La dedicació ha estat de 300 hores/persona, corresponents a 12 crèdits ETCS. El preu per hora s'ha escollit el recomanat per l'escola, que és de 15€.
- Escandall de NORI: Correspon al cost dels elements que conformen el prototip de NORI a data de la seva compra per aquest projecte.
- Cost experimental: Cost atribuït a l'etapa experimental:
 - Cost dels materials que no es recuperen destinats a les experimentacions de cromatografia, com ara la Coca-Cola o els polímers estàndards (material fungible).
 - Cost dels sensors que es van utilitzar durant les proves de verificació del hardware i software de NORI, però que no formen part de la solució final.
- Cost operatiu: Correspon al cost del subministrament, com ara l'electricitat o l'aigua. També inclou les despeses en viatges.

La resta d'equipament utilitzat durant les experimentacions (cromatògrafs, ordinadors, monitors, etc...) tenen la suficient antiguitat per considerar-los amortitzats, pel que no computen al pressupost d'aquest projecte. Tampoc s'ha considerat les llicències dels programes utilitzats per documentar el projecte: Office (23 € per 4 mesos [25]), Matlab (87,3 € per 4 mesos [26]) i OrCad (766,7 € per 4 mesos [27]), ja que estan proporcionades per la universitat de manera gratuïta.

Segons es pot veure desglossat a la Taula 16:

- Pel que fa l'escandall de NORI, aquest dona una suma de 118,63 € (143,54 € amb IVA). Aquest resultat és molt favorable pel projecte, ja que com s'ha vist en l'apartat 3.3, els dispositius actuals que existeixen al mercat amb característiques semblants ronden els 2.500 €.
- Tot i que els polímers experimentals no són econòmics, al haver-ne requerit molt poca quantitat per comprovar el comportament de NORI, el cost de l'experimentació no és gaire elevat (0,36% del total del projecte).
- El polímer SMA no està comptabilitzat ja que està prèviament desenvolupat per uns alumnes en pràctiques de l'escola, per tant, no s'ha hagut de comprar.

Taula 16. Font pròpia. Extret d'Excel. Taula de costos del projecte NORI.

COSTOS DEL PROJECTE NORI					
Component	Preu unitari sense IVA	Unitats	Preu total sense IVA	IVA	Preu total amb IVA
Cost de personal					
Cost per hora (€/h)					
Estudi preeliminar	15,00 €	75	1.125,00 €	21%	1.361,25 €
Projecte preeliminar	15,00 €	100	1.500,00 €	21%	1.815,00 €
Realització (I)	15,00 €	150	2.250,00 €	21%	2.722,50 €
Realització(II)	15,00 €	170	2.550,00 €	21%	3.085,50 €
Tasques generals del projecte	15,00 €	105	1.575,00 €	21%	1.905,75 €
SUBTOTAL			9.000,00 €		10.890,00 €
Escandall de NORI					
Cost unitari (€/unitat)					
Raspberry Pi model 3B+	84,71 €	1	84,71 €	21%	102,50 €
Microxip MCP3008	9,17 €	1	9,17 €	21%	11,10 €
Placa Protoboard 400 punts	3,69 €	1	3,69 €	21%	4,46 €
Cables Jumper	2,72 €	3	8,16 €	21%	9,87 €
Font d'alimentació 2,5A	12,90 €	1	12,90 €	21%	15,61 €
SUBTOTAL			118,63 €		143,54 €
Costos dels experiments					
Cost unitari (€/unitat)					
Potenciòmetre 10k PT10V103	0,36 €	1	0,36 €	21%	0,44 €
Sensor de Temperatura LM335Z	1,17 €	1	1,17 €	21%	1,42 €
Sensor de Distància SHARP	11,31 €	1	11,31 €	21%	13,69 €
Sensor Fotosensible WPM407	7,75 €	1	7,75 €	21%	9,38 €
Material fungible					
Cost per mg (€/mg)					
CocaCola	0,001 €	1,2	0,001 €	21%	0,002 €
Polímers Poly(styrenesulfonic acid sodium salt) 150k	0,36 €	5	1,80 €	21%	2,18 €
Polímers Poly(styrenesulfonic acid sodium salt) 17k	0,36 €	5	1,80 €	21%	2,18 €
Polímers Poly(styrenesulfonic acid sodium salt) 4,3k	0,36 €	5	1,80 €	21%	2,18 €
Polímers Dextran 120K	1,36 €	5	6,80 €	21%	8,23 €
SUBTOTAL			32,79 €		39,67 €
Costos d'energia i transport					
Energia					
Cost per kWh (€/kWh)					
Consum llum del laboratori	0,18 €	10,80	1,91 €	21%	2,31 €
Consum del detector 785A	0,18 €	1,08	0,20 €	21%	0,24 €
Consum de la bomba 515	0,18 €	1,83	0,33 €	21%	0,40 €
Consum Rpi 2B	0,18 €	0,08	0,01 €	21%	0,02 €
Consum Rpi 3B+	0,18 €	0,34	0,06 €	21%	0,07 €
Consum monitor SUNSTECH TLX1953	0,18 €	8,46	1,52 €	21%	1,84 €
Consum monitor 916Swa	0,18 €	0,38	0,07 €	21%	0,08 €
Consum ordinador sobretaula HP	0,18 €	3,00	0,54 €	21%	0,65 €
Consum ordinador portàtil OMEN 15-dc0009ns	0,18 €	9,50	1,71 €	21%	2,07 €
Consum ordinador portàtil LENOVO YOGA 510	0,18 €	2,97	0,53 €	21%	0,65 €
Aigua					
Cost per litre (€/l)					
Aigua desionitzada	0,53 €	0,50	0,27 €	21%	0,32 €
Aigua neteja	0,003 €	15,00	0,04 €	21%	0,05 €
Desplaçaments					
Cost per viatge (€/viatge)					
Desplaçaments T-Casual	1,01 €	50	50,50 €	21%	61,11 €
Desplaçaments Tjove	0,15 €	50	7,48 €	21%	9,05 €
SUBTOTAL			65,17 €		78,86 €
TOTAL			9.216,59 €		11.152,07 €

Nota: El preu del kWh s'ha obtingut de [28]. Els altes costos ens els ha proporcionat el professor Jordi Bou a partir dels tiquets de compra.

El cost total és de 9.216,59 €, que tenint en consideració l'IVA del 21% resulta en un total de **11.152,07 €**. En aquest total es comptabilitza tant el treball de l'Elena com el meu, que representen el 98% del cost del projecte.

8. Estudi ambiental

Pel que fa l'estudi ambiental es tenen en consideració els següents factors:

- kg de gasos d'efecte hivernacle emesos (kg CO₂eq) a causa de la despesa energètica elèctrica:

El consum elèctric que s'ha obtingut en aquest projecte és de 38,44 kWh (Taula 16). El mix de la xarxa elèctrica espanyola publicat per la CNMC a l'Acord sobre l'etiquetatge de l'electricitat relatiu a l'energia produïda l'any 2022 en data 3 de maig de 2023 és 273 g CO₂eq/kWh. [29] Per tant, s'han emès **10,5 kg** de CO₂eq.

- kg de gasos d'efecte hivernacle emesos (kg CO₂eq) a causa de la mobilitat:

En total, s'han realitzat 100 viatges, 50 en tramvia i 50 en metro:

Taula 17. Font pròpia. Emissions degudes als desplaçaments.

	Viatges en Tramvia [30]	Viatges en Metro [31]
Distància recorreguda	1,6 km/viatge	1,4 km/viatge
Emissions associades	1,2 gCO ₂ /viatger·km	23,7 gCO ₂ /viatger·km
Emissions totals	1,6·50·1,2 = 96 gCO ₂	1,4·50·23,7 = 1.659 gCO ₂

Així doncs, a causa de la mobilitat s'emeten un total de **1,75 kg** de CO₂eq.

- Tractament dels residus dels polímers experimentals:

La concentració de polímer utilitzat per l'etapa experimental és molt petita (de l'orde de mg/ml), que és semblant a la de contaminants que presenta l'aigua corrent. Un cop utilitzats pel GPC, els polímers es troben dissolts en aigua i es van emmagatzemant en un dipòsit. Quan el dipòsit està ple, es pot llençar el seu contingut a la pica del laboratori, ja que els residus no són nocius.

- Despesa d'aigua:

Durant el projecte es destaquen dues despeses d'aigua diferents (**15,5 litres** totals):

- Per netejar els equips del laboratori s'utilitza aigua corrent (15 litres).
- Per obtenir la fase mòbil dels experiments de cromatografia, es fa servir aigua desionitzada (0,5 litres).

Aquests valors són força reduïts per un projecte d'enginyeria i fàcilment mitigables, ja que un arbre és capaç d'absorbir entre 20 i 30 kg de CO₂eq mentre creix. Així doncs, es pot afirmar que aquest projecte no genera un impacte negatiu que sigui significatiu pel medi ambient. Per últim, als diversos dispositius electrònics que s'han adquirit per a la realització del projecte se'ls dona un segon ús en futurs projectes personals. Així doncs, es poden considerar reutilitzables.

9. Estudi social i d'igualtat de gènere

Aquest projecte ha estat desenvolupat amb l'estudiant Elena Magrinyà, potenciant la creació d'equips equilibrats en gènere en projectes d'enginyeria.

El fet que el software de NORI és de codi obert, facilita l'accés a qualsevol estudiant de l'escola independentment de les seves capacitats econòmiques i situació social. A més, gràcies a que el codi és manipulable, ajuda a la seva implementació en lectors adaptats a usuaris amb disminucions sensorials que en requereixi el seu ús.

NORI és universal, funcional per la majoria de sensors i significativament més econòmica que les opcions que hi ha actualment al mercat. Aquestes tres característiques la transformen una opció viable per a persones que necessitin enregistrar les dades d'un o varis detectors alhora. NORI no està subjecte a cap marca comercial, pel que és compatible amb equips de diferents cases.

Pel que fa al llenguatge utilitzat per expressar aquest projecte, s'ha pres una abordatge tècnic que evita assumir el gènere dels lectors o les lectores en cap moment. A més, es manté una neutralitat política en tot moment. Això assegura la inclusió i l'equitat en la comunicació de les idees i els principis fonamentals del projecte.

10. CONCLUSIONS

Comparant els resultats obtinguts amb els objectius plantejats a l'inici del projecte, se'n pot concloure que el sistema d'adquisició i anàlisi de dades (NORI) ha estat dissenyat i implementat segons les especificacions de manera satisfactòria. En concret:

- S'ha realitzat l'arquitectura del sistema i posterior muntatge del prototip, utilitzant els diversos components electrònics i els perifèrics que faciliten la interacció de NORI amb l'usuari.
- S'ha comprovat experimentalment la funcionalitat de NORI com a DAS, combinant l'adquisició de diversos sensors analògics alhora i verificant l'enregistrament simultani de les dades. NORI disposa de vuit canals per entrades analògiques.

Pel que fa en relació a la implementació de NORI amb els detectors cromatogràfics:

- S'ha estudiat teòricament el mètode HPLC i com aquest és útil en la detecció de diverses substàncies, inclòs el càlcul de la massa molecular de polímers.
- Pel funcionament del hardware enfocat en aplicacions cromatogràfiques, s'ha dissenyat i programat en Python la interfície CODIUM. Aquesta eina permet:
 - Executar l'enregistrament de fins a dos detectors al mateix temps, permetent a l'usuari escollir els paràmetres de l'experiment.
 - Executar l'anàlisi d'un enregistrament anterior, automatitzant els càlculs. Els resultats es mostren a CODIUM i a un fitxer d'Excel generat automàticament.
- S'ha millorat el mètode de transmissió dels resultats a un ordinador fix del laboratori gràcies al muntatge i programació de CODIUM FT.
- S'han executat diferents experiments GPC amb el detector 785A d'Applied Biosystems, obtenint resultats coherents amb la teoria i experiència del professor Jordi Bou.

A més, el professor Jordi Bou ens ha brindat l'oportunitat d'estudiar els cromatògrafs de manera pràctica, manipulant la majoria dels seus components físics per executar les diverses proves amb NORI:

- Aprendre a com fer servir una bomba de pistons, ajustant el flux de fase mòbil en funció de la pressió obtinguda, que ha de ser constant.
- Aprendre a muntar i desmuntar una bomba de pistons i purgar-la, per així evitar la formació de petites bombolles de vapor al seu interior.
- Aprendre a configurar un detector de cromatografia (paràmetres com "Wave Length" o "Range").
- Aprendre el procediment d'injecció de la mostra de polímer, amb la capacitat de decidir quin és el volum adient per a cada experimentació.

Pel que fa a NORI en comparació a altres opcions de mercat actuals:

- Tot i que NORI és un prototip no comercialitzable, comparat amb solucions actuals és significativament més econòmica (entre 10 i 30 vegades).
- NORI és de codi obert i universal, pel que no està lligada a cap marca com passa en la majoria d'equips DAS de cromatografia. Això permet utilitzar a NORI amb detectors de diferents cases, sense restriccions.

Vistos aquests punts, es pot concloure que **NORI és una solució vàlida** a la problemàtica que es trobava al laboratori 25-39 de l'escola. Tot i això, NORI és un primer prototip, el qual es podria seguir millorant en una segona fase, si el projecte es continués. Algunes especificacions que seria interessant investigar i desenvolupar son:

- Reservar un canal dels vuit del xip MCP3008 per connectar-hi el trigger del detector 785A. Amb la corresponent programació, això permetria executar CODIUM automàticament al injectar la mostra.
- Amb el xip MCP3008 es poden detectar valors de 0,6 V a 5 V. Seria millor augmentar el rang de tensió d'entrada analògica per detectar valors entre 0 V i 5 V o, idealment, de -5 V a 5 V.
- Si NORI s'aplica en un futur en casos reals, és aconsellable que CODIUM emmagatzemi la recta de calibratge introduïda per facilitar-ne l'ús.
- Capacitar a CODIUM FT per a que pugui enviar més d'un fitxer simultàniament.
- Optimitzar mitjançant CODIUM la generació del gràfic en línia actual, per a que sigui capaç de reproduir-lo en experimentacions més exigents.

11. Agraïments

Primer de tot, vull expressar el meu sincer agraïment a la meva parella i companya d'estudis, l'Elena. El seu suport constant, els seus coneixements i la seva col·laboració han estat inestimables per aconseguir els nostres objectius.

Com no podria ser d'altra manera, agrair al professor Jordi Bou la seva dedicació i suport durant tot el desenvolupament del projecte, que amb la orientació que ens ha donat en els moments complicats, hem pogut sortejar-los. Gràcies per acceptar-nos quan buscàvem TFG i donar-nos l'oportunitat de treballar junts sota la teva tutela.

També vull expressar la meva gratitud a l'ETSEIB per la seva generositat en proporcionar-nos l'espai i els materials necessaris per dur a terme el projecte. En concret, agrair de manera especial als membres dels serveis TIC Jesús Galceran, Joan Climent i Oriol Martí i al professor del departament d'electrònica Juan Manuel Moreno Eguilaz per deixar-nos la seva Raspberry Pi.

Agrair finalment a la meva família l'ajut incondicional que em brinden, la paciència, comprensió, amabilitat i consells que em donen tant en els mals com en els bons moments.

12. Bibliografia

Referències bibliogràfiques

- [1] E. Lupon i S. Busquets, *Definició, classificació i característiques dels sistemes electrònics*, Barcelona, 2022.
- [2] R. Costa i E. Fossas, *Sistemes de control en temps discret*, Barcelona: Universitat Politècnica de Catalunya, 2014.
- [3] P. Atkins, *Química Física*, Sisena ed., Barcelona: Ediciones Omega S.A., 1998.
- [4] J. Bou, *Determinación de pesos moleculares de polímeros por GPC*, 2001.
- [5] Waters, «Empower Personal GPC/SEC Option-Waters,» [En línia]. Available: <https://www.waters.com/nextgen/es/es/shop/software/667003977-empower-personal-gpc-sec-option.html>. [Últim accés: 21 juny 2023].
- [6] ADC/Labs, «Spectrus Processor,» [En línia]. Available: <https://www.acdlabs.com/products/spectrus-platform/spectrus-processor/>. [Últim accés: 21 juny 2023].
- [7] BIO-RAD, «ChromLab Software,» [En línia]. Available: <https://www.bio-rad.com/es-es/product/chromlab-software?ID=MFCVPXIVK>. [Últim accés: 21 juny 2023].
- [8] GALILEO10, «galileoequipos,» [En línia]. Available: <https://www.galileoequipos.com/en/clarity-chromatography-software.html>. [Últim accés: 21 juny 2023].
- [9] Aprendiendo Arduino, «Aprendiendo Arduino - Memoria Flash,» [En línia]. Available: <https://aprendiendoarduino.wordpress.com/tag/memoria-flash/>. [Últim accés: 21 juny 2023].
- [10] Gobierno de Canarias, «Arduino,» [En línia]. Available: <https://www3.gobiernodecanarias.org/medusa/ecoblog/rsuagued/arduino/>. [Últim accés: 5 maig 2023].
- [11] BricoGreek, «tienda.bricogreek,» [En línia]. Available: https://tienda.bricogeek.com/5-arduino?gad=1&gclid=CjwKCAjwv8qkBhAnEiwAkY-ahncSb8NU3AGYkAiLeCCsB5U5a_TZG07QCkduInAiNqLKWnQ2pwcHqhoC7hQQAvD_BwE. [Últim accés: 21 juny 2023].
- [12] Raspipc, «Raspipc,» [En línia]. Available: <https://www.raspipc.es/index.php?ver=tienda&accion=verArticulo&idProducto=1421&src=raspberrypi>. [Últim accés: 21 juny 2023].

- [13] Raspberry Pi Foundation, «Raspberry Pi,» [En línia]. Available: <https://www.raspberrypi.com/products/raspberry-pi-2-model-b/>. [Últim accés: 10 abril 2023].
- [14] Raspberry Pi Foundation, «Raspberry Pi 3 Model B+ product brief,» [En línia]. Available: <https://datasheets.raspberrypi.com/rpi3/raspberry-pi-3-b-plus-product-brief.pdf>. [Últim accés: 10 abril 2023].
- [15] Raspberry Pi Foundation, «Raspberry Pi Documentation - Raspberry Pi OS,» [En línia]. Available: <https://www.raspberrypi.com/documentation/computers/os.html#gpio-and-the-40-pin-header>. [Últim accés: 10 abril 2023].
- [16] Microchip Technology Inc., «MCP3004/MCP3008 Datasheet,» [En línia]. Available: <https://cdn-shop.adafruit.com/datasheets/MCP3008.pdf>. [Últim accés: 23 juny 2023].
- [17] RS, «RS. Kit de Cable Conector para Placas de Prueba MikroElektronika MIKROE-513,» [En línia]. Available: https://es.rs-online.com/web/p/cables-de-puente-para-placas-de-pruebas/7916463?cm_mmc=ES-PLA-DS3A-_-google-_-CSS_ES_ES_Proteccion_ESD_%26_Sala_Blanca_y_Prototipado_PCB_Whoop-_-
(ES:Whoop!)+Cables+de+Puente+para+Placas+de+Pruebas-_-7916463&matchtype=&pla-47. [Últim accés: 29 abril 2023].
- [18] SSH, «scp-secure file copy,» [En línia]. Available: <https://www.ssh.com/>. [Últim accés: 21 juny 2023].
- [19] TIOBE, «TIOBE Index,» [En línia]. Available: <https://www.tiobe.com/tiobe-index/>. [Últim accés: 2 juny 2023].
- [20] Piher sensing systems, «10 mm carbon potentiometer,» [En línia]. Available: <https://www.mouser.com/datasheet/2/18/12-PT10v03-1499366.pdf>. [Últim accés: 23 juny 2023].
- [21] SHARP Corp., «GP2Y0A21YK0F: Distance Measuring Sensor Unit,» 2006. [En línia]. Available: https://global.sharp/products/device/lineup/data/pdf/datasheet/gp2y0a21yk_e.pdf. [Últim accés: 23 juny 2023].
- [22] Velleman Group. WHADDA Exiting Electronics., «WPM407 User Manual,» [En línia]. Available: <https://www.velleman.eu/downloads/25/wpm407a4v01.pdf>. [Últim accés: 23 juny 2023].
- [23] STMicroelectronics, «LM135-LM235-LM335, Precision temperature sensors,» 2008. [En línia]. Available: <https://www.st.com/resource/en/datasheet/lm135.pdf>. [Últim accés: 23 juny 2023].
- [24] ARTISAN Technology Group, «ARTISAN TG,» [En línia]. Available: <https://www.artisantg.com/Scientific/51517-7/Thermo-Applied-Biosystems-785A-Programmable-Variable-Wavelength-Detector>. [Últim accés: 3 maig 2023].
- [25] Microsoft, «Microsoft 365,» [En línia]. Available: <https://www.microsoft.com/es-es/microsoft->

- 365/buy/compare-all-microsoft-365-products-b. [Últim accés: 21 juny 2023].
- [26] MathWorks, «Pricing and Licensing,» [En línia]. Available: https://es.mathworks.com/pricing-licensing.html?intendeduse=edu&s_tid=htb_learn_gtwy_cta2. [Últim accés: 21 juny 2023].
- [27] Cirexx International, «Allegro vs OrCad,» [En línia]. Available: <https://www.cirexx.com/orcad-vs-allegro/#:~:text=The%20cost%20of%20a%20new,free%20trial%20is%20also%20available..> [Últim accés: 21 juny 2023].
- [28] Selectra, «tarifaluzhora,» 11 juny 2023. [En línia]. Available: <https://tarifaluzhora.es/>. [Últim accés: 11 juny 2023].
- [29] Gencat, «Canvi climàtic,» 4 maig 2023. [En línia]. Available: https://canviclimatic.gencat.cat/ca/actua/factors_demissio_associats_a_lenergia/index.html. [Últim accés: 19 juny 2023].
- [30] TRAM, «La ecocaludadora del TRAM,» [En línia]. Available: <https://www.tram.cat/es/ecocalculadora>. [Últim accés: 19 juny 2023].
- [31] TMB, «Movilidad sostenible,» [En línia]. Available: <https://www.tmb.cat/es/sobre-tmb/calidad-medio-ambiente/movilidad-sostenible>. [Últim accés: 2023 juny 2023].

Bibliografia complementària

Raspberry Pi Foundation, «Teach, learn and make with the Raspberry Pi Foundation,» [En línia]. Available: <https://www.raspberrypi.org/>. [Últim accés: 21 juny 2023].

Dpt. d'Enginyeria de Projectes i de la Construcció, ETSEIB-UPC, *Tema 1. EL PROYECTO Y SUS FASES*. Barcelona, 2022.

F. Leens, «An introduction to I2C and SPI protocols,» *IEEE Instrumentation & Measurement Magazine*, vol. 12, núm. 1, pp. 8-13, 2009. [Últim accés: 21 juny 2023].

Python Software Foundation, «Python,» [En línia]. Available: <https://www.python.org/>. [Últim accés: 21 juny 2023].

Python Software Foundation, « Python Software Foundation Launched,» 6 Març 2001 [En línia]. Available: <https://www.python.org/psf/press-release/pr200103/>. [Últim accés: 21 Juny 2023]

Arduino, «Arduino Documentation,» [En línia]. Available: <https://docs.arduino.cc/>. [Últim accés: 21 juny 2023].

M. A. Sgariglia, J. R. Soberon, D. A. Sampietro i M. A. Vattuone, «Cromatografía: conceptos y aplicaciones,» *Arakuku*, Maig 2010.

Chromlab Instruments, «¿Qué es HPLC (High Performance Liquid Chromatography)?,» [En línia]. Available: <https://chromlab-instruments.es/hplc-2/>. [Últim accés: 21 Juny 2023]

Waters, «Waters 515 HPLC Pump Datasheet,» [En línia]. Available: <https://www.waters.com/webassets/cms/library/docs/720000336en.pdf>. [Últim accés: 21 Juny 2023].

Waters, «Waters 515 HPLC Pump, Operator's Guide» [En línia]. Available: <https://photos.labwrench.com/equipmentManuals/4091-1209.pdf>. [Últim accés: 21 Juny 2023].

Waters, « Waters 2410 Differential Refractometer Operator's Guide» [En línia]. Available: <https://www.manualslib.com/manual/1286594/Waters-2410.html#manual>. [Últim accés: 21 Juny 2023].

Panalytical, Malvern, «Gel Permeation Chromatography (GPC) | Systems & Detectors,» [En línia]. Available: <https://www.malvernpanalytical.com/en/products/technology/liquid-chromatography/gel-permeation-chromatography>. [Últim accés: 10 abril 2023].

13. Annexos

Annex I – Manual de NORI

L'Annex I correspon al manual d'usuari de NORI.

Annex II – Codis informàtics de NORI

Aquest annex inclou cada un dels programes que formen el software de NORI, tant els del mòdul CODIUM com l'extensió CODIUM FT.