

# ユーザー用取扱説明書

## Raman data library 2.1



## 目次

<b>1 一般的注意事項</b> .....	<b>3</b>
1.1 本書の目的.....	3
1.2 安全シンボル.....	3
<b>2 安全性</b> .....	<b>4</b>
2.1 IT 安全性 .....	4
2.2 FDA 21 CFR Part 11 の遵守 .....	4
<b>3 製品ライフサイクルの各段階</b> .....	<b>9</b>
3.1 用語集 .....	9
3.2 関連資料.....	10
3.3 登録商標.....	10
3.4 診断およびトラブルシューティング .....	11
<b>4 機能とシステム構成</b> .....	<b>12</b>
4.1 製品説明 .....	12
4.2 ソフトウェア操作 .....	17
4.3 Raman data library へのデータの追加 .....	21
4.4 データセットの解析 .....	29
4.5 Raman Rxn アナライザの管理.....	51
<b>5 サポート</b> .....	<b>58</b>
5.1 About (製品情報) .....	58
5.2 ご連絡先の情報.....	58
<b>6 著作権情報</b> .....	<b>59</b>
6.1 エンドユーザーライセンス契約書.....	59

# 1 一般的注意事項

## 1.1 本書の目的

本説明書には、Raman data library における一般的なユーザーの作業に関する説明（ナビゲーション、フィールドの説明、データ操作など）が記載されています。インストールやデータベース/ユーザー管理など、管理者向けの説明については、*Raman data library 管理者用取扱説明書 (BA02564C)* を参照してください。

## 1.2 安全シンボル

資料構成	意味
<b>▲ 危険</b> <b>原因（/結果）</b> 違反した場合の結果（該当する場合） ▶ 是正措置	危険な状況を警告するシンボルです。この状況を回避できなかった場合、重傷または致命傷を負う可能性があります。
<b>▲ 警告</b> <b>原因（/結果）</b> 違反した場合の結果（該当する場合） ▶ 是正措置	危険な状況を警告するシンボルです。この状況を回避できなかった場合、軽傷またはそれ以上の傷害を負う可能性があります。
<b>注意</b> <b>原因/状況</b> 違反した場合の結果（該当する場合） ▶ アクション/注記	器物を破損する可能性がある状況を警告するシンボルです。

## 2 安全性

Raman Rxn アナライザと Raman RunTime ソフトウェアの安全な操作については、*Raman RunTime v6.5 取扱説明書* (BA02180C) を参照してください。Raman data library を使用する前に、*Raman RunTime v6.4* (またはそれ以後) の取扱説明書のすべてに目を通しておくことをお勧めします。

### 2.1 IT 安全性

ユーザーが定める IT セキュリティ規格に従って、機器および関連するデータ伝送の保護を強化するために策定される IT セキュリティ対策については、ユーザー側が実施する必要があります。

### 2.2 FDA 21 CFR Part 11 の遵守

Raman data library の cGxP バージョンは、FDA 21 CFR part 11 を遵守するための追加機能を備えています。これらの機能により、21 CFR part 11 の要件を一元管理して実装し、プロセス設定の規制に対応できます。Raman data library の cGxP バージョンは、以下のような機能をサポートしています。

- ユーザー管理
- 電子記録と電子署名
- システム設定の管理
- 監査証跡 (変更管理機能)
- イベントログ (ユーザーアクションのトレーサビリティやスペクトルデータのトレーサビリティなど)

Raman data library の 21 CFR Part 11 実装をサポートするために、cGxP バージョンには以下の資料が用意されています。

- 「Raman data library CFR Part 11 ER/ES Assessment」 (部品番号 4005770)
- 「Raman data library User Requirements Specification」 (部品番号 4005769)
- 「Enhancing Raman data integrity and compliance based on ALCOA+ principles」 (部品番号および発行の準備中)

#### 2.2.1 ユーザー管理

21 CFR Part 11 では、ユーザー管理は、電子記録と電子署名への安全かつ規制されたアクセスを確保するための一連の管理と手順に関連します。Raman data library のコアバージョンと cGxP バージョンの主な違いの 1 つは、ユーザー管理機能です。Raman data library cGxP バージョンはユーザー管理機能を搭載しており、資格情報の認証は、本ソフトウェア自体、ローカルの Windows ワークステーションのログイン、または Active Directory ドメインへの接続により、実質的にローカルで実行できます。

ローカル認証モードを使用する場合、パスワードを強制的に複雑化する機能や、ログイン失敗回数の設定と自動タイムアウトによるロックアウト機能がサポートされます。ドメインベースの資格情報認証を使用する場合、ソフトウェアタイムアウト以外のこれらの機能は、代わりにドメイン側で管理されます。

一意のユーザー ID とアクセス制御機能がネイティブに実装されます。ユーザーの役割を設定して管理することで、ユーザーアクセス権限を設定できます。アカウントを無効化する機能や、次回ログイン時にパスワード変更を強制する機能も利用できます。ユーザー固有の監査証跡がイベントログの形式で記録されます。

Raman data library に実装されるユーザー管理機能により、電子記録の安全性を確保し、アクセスを制御して、すべてのユーザーアクションのトレーサビリティを確保できるため、規制対象となる産業においてデータの信頼性と整合性が保証されます。

ユーザー管理の詳細については、[ユーザー管理 \(cGxP バージョンのみ\) →](#) を参照してください。

## 2.2.2 電子記録と電子署名

電子記録と電子署名は、21 CFR Part 11 の基本的な構成要素であり、21 CFR Part 11 では、電子記録と電子署名が信頼できるものであり、紙による記録および手書き署名と同等であるとみなされる場合の基準を確立しています。Raman data library 内の電子署名は、個々のユーザーとその資格情報に関連付けられているため、法的拘束力があり、否認できません。

Raman data library を使用する現場において、特に電子記録と電子署名に関する 21 CFR Part 11 の遵守を支援するために、Endress+Hauser では、本ソフトウェアの cGxP バージョンに付属する専用資料として「Raman data library 21 CFR Part 11 ER/ES Assessment」（部品番号 4005770）を提供しています。

## 2.2.3 システム設定の管理

Raman data library 内のシステム設定は、21 CFR Part 11 の遵守において重要な役割を果たすセキュリティ面に関連しています。システム設定は、Security (セキュリティ) ウィンドウで管理します。セキュリティ設定管理の詳細については、セキュリティ設定 (cGxP バージョンのみ) →  を参照してください。

## 2.2.4 変更管理機能による監査証跡

監査証跡は、21 CFR Part 11 の遵守における重要な構成要素であり、電子記録、システム、またはプロセスへの変更が適切に管理および文書化されていることを保証します。

Raman data library の cGxP バージョンでは、ユーザー管理の関連機能として、変更管理機能が実装されています。これにより、変更の理由、日時、変更の責任者と承認責任者など、すべての変更が文書化されます。変更の監査証跡は、使用可能な各種イベントログ内で追跡され、文書化されます。さらに、変更管理機能により、適切な権限を持つユーザーのみが更新や変更を行うことができます。

データセットの削除や承認取消し、データフィールドの追加/編集/削除、プロジェクトやスペクトルソースの削除など、特定のアクションを実行する場合、事前にそのユーザーの署名が必要となります。必要に応じて、ユーザーは資格情報を使用して署名を行い、関連するコメント用のスペースを使用して変更の理由を選択する必要があります。

変更管理に使用できる初期設定の理由は以下のとおりです。

- Collection Error (収集エラー)
- Deactivate (無効化)
- Entry Error (入力エラー)
- Initial Setup (初期設定)
- Other (その他)

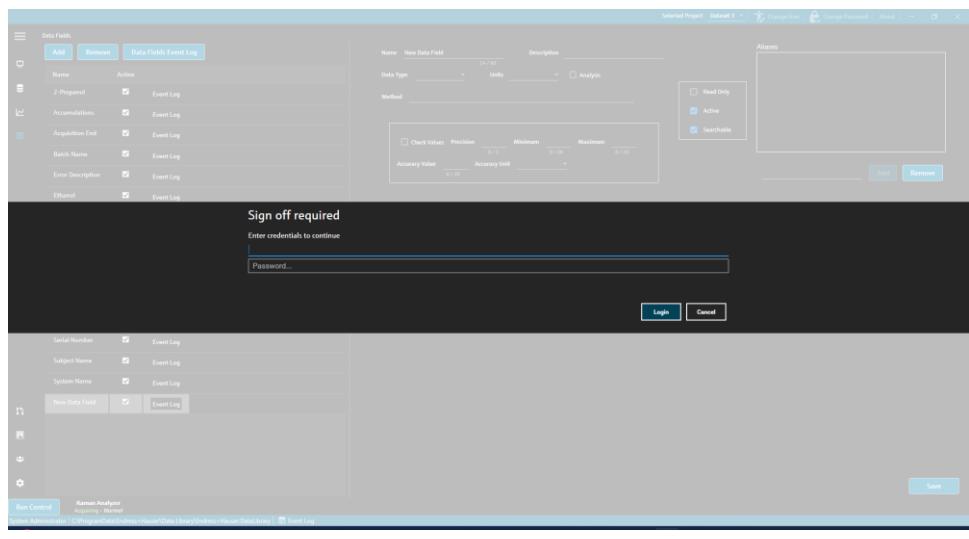


図 1. 変更管理-ユーザーの署名が必要

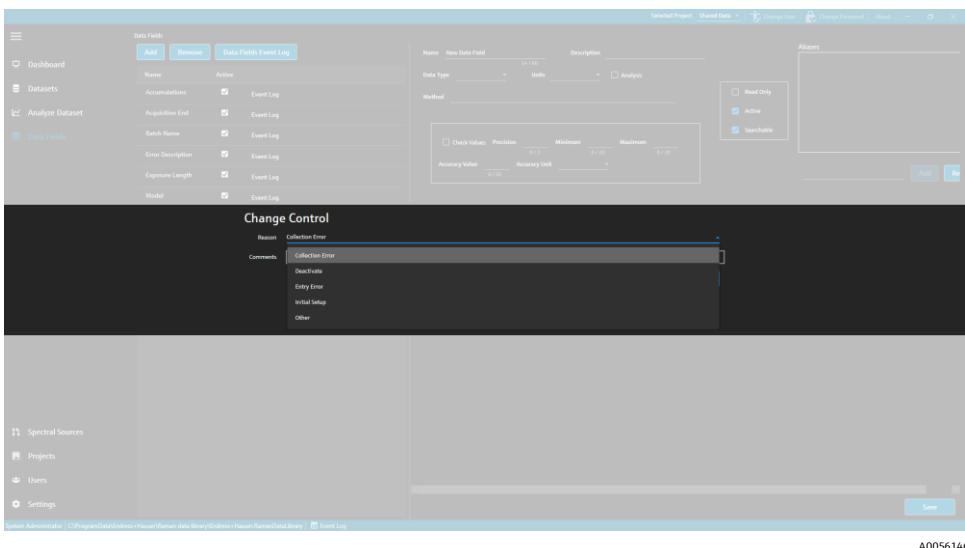


図 2. 変更管理—変更の説明と理由を入力

このような変更管理策は、電子記録とシステムの整合性、信頼性、コンプライアンスの確保、ならびに品質管理チームによる承認/監査プロセスに役立ちます。

## 2.2.5 イベントログの使用

cGxP 環境内のすべてのイベントのトレーサビリティとログ記録を保証するために、Raman data library には基本的な監査証跡を含むイベントログ機能が搭載されています。これは、グローバル（すべてのアクション）イベントログからユーザー/機能固有のイベントログまで多岐にわたります。イベントログと監査証跡は、21 CFR Part 11 の遵守に不可欠な構成要素であり、電子記録の完全性とトレーサビリティを確保できます。

Raman data library では、ユーザーは以下に示すさまざまなイベントログによりイベントを確認できます。

- グローバルイベントログ**：このイベントログは、Raman data library のすべての画面からアクセスでき、アプリケーションウィンドウの下部のタスクバーに配置されています。
- ユーザーイベントログ**：すべてのユーザーまたは特定のユーザーのイベントを表示します。これは Users (ユーザー) 画面からアクセスします。
- プロジェクト/データセットイベントログ**：すべてのプロジェクトまたは特定のプロジェクトのイベントを表示し、データセットに関連するイベントを一覧表示します。このログには、Projects (プロジェクト) 画面とデータセットの概要画面からアクセスします。
- スペクトルソースイベントログ**：特定のスペクトルソースまたはすべてのスペクトルソースのイベントログを表示します。
- データフィールドイベントログ**：特定のデータフィールドまたはすべてのデータフィールドのイベントログを表示します。

イベントログは、見やすい独自のドキュメント形式で表示および印刷でき、変更することはできません。ログ内のテキストを検索することができます。別のイベントログを開くには、現在開いているイベントログを閉じる必要があります。イベントログは、表示のみの目的で \*.pdf, \*.xlsx, \*.docx ファイルとして保存できます。

### 2.2.5.1 グローバルイベントログ

グローバルイベントログには、Raman data library の実装に関するすべてのイベントが表示されます。ログに記録される情報が広範囲に及ぶため、グローバルイベントログの読み込みに時間がかかる場合があります。

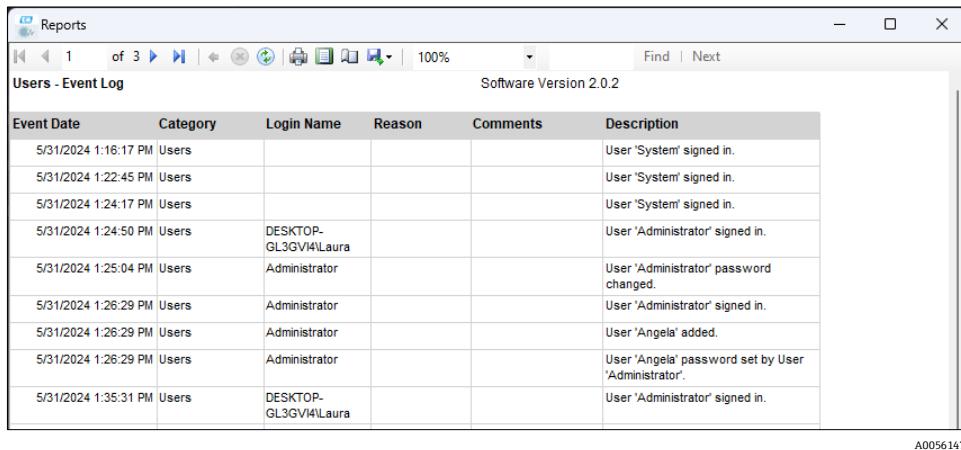


図 3. グローバルイベントログ

### 2.2.5.2 ユーザーイベントログ

Users (ユーザー) ウィンドウでは、特定のユーザーまたはすべてのユーザーに関連するイベントが記録されたイベントログを表示できます。このログには、ユーザーの追加/削除、ユーザーの役割の追加/削除、ユーザーログイン、失敗したログインなど、ユーザーに対するすべての変更が収集されます。Users (ユーザー) ウィンドウでは、以下のイベントログを選択できます。

- **Users Event Log (ユーザーイベントログ)** : すべてのユーザーのイベントログを表示します。
- **Event Log (イベントログ)** : 指定したユーザーのイベントログを表示します。



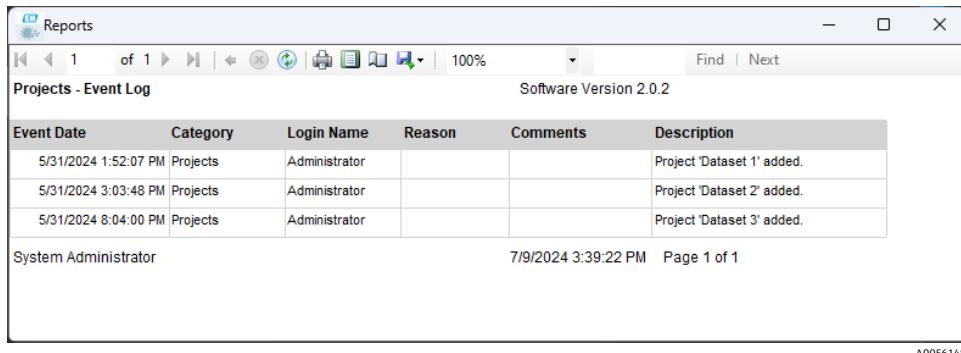
Event Date	Category	Login Name	Reason	Comments	Description
5/31/2024 1:16:17 PM	Users				User 'System' signed in.
5/31/2024 1:22:45 PM	Users				User 'System' signed in.
5/31/2024 1:24:17 PM	Users				User 'System' signed in.
5/31/2024 1:24:50 PM	Users	DESKTOP-GL3GV4\Laura			User 'Administrator' signed in.
5/31/2024 1:25:04 PM	Users	Administrator			User 'Administrator' password changed.
5/31/2024 1:26:29 PM	Users	Administrator			User 'Administrator' signed in.
5/31/2024 1:26:29 PM	Users	Administrator			User 'Angela' added.
5/31/2024 1:26:29 PM	Users	Administrator			User 'Angela' password set by User 'Administrator'.
5/31/2024 1:35:31 PM	Users	DESKTOP-GL3GV4\Laura			User 'Administrator' signed in.

図 4. ユーザーイベントログ

### 2.2.5.3 プロジェクト/データセットイベントログ

Projects (プロジェクト) ウィンドウでは、データセットの追加や削除など、プロジェクトに関連するイベントが記録されたイベントログを表示できます。Projects (プロジェクト) ウィンドウでは、以下を選択できます。

- **Projects Event Log (プロジェクトイベントログ)** : すべてのプロジェクトのイベントログを表示します。
- **Event Log (イベントログ)** : 特定のプロジェクトのイベントログを表示します。



Event Date	Category	Login Name	Reason	Comments	Description
5/31/2024 1:52:07 PM	Projects	Administrator			Project 'Dataset 1' added.
5/31/2024 3:03:48 PM	Projects	Administrator			Project 'Dataset 2' added.
5/31/2024 8:04:00 PM	Projects	Administrator			Project 'Dataset 3' added.

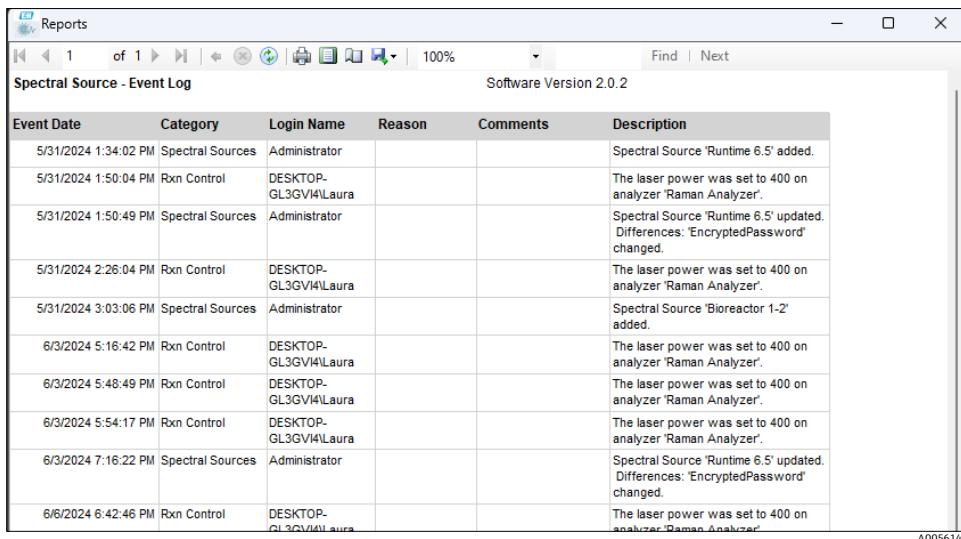
System Administrator 7/9/2024 3:39:22 PM Page 1 of 1

図 5. プロジェクトイベントログ

### 2.2.5.4 スペクトルソースイベントログ

Spectral Sources (スペクトルソース) ウィンドウでは、特定のスペクトルソースまたはすべてのスペクトルソースに関連するイベントが記録されたイベントログを表示できます。このログには、新しいスペクトルソースの追加、Raman Rxn アナライザでの取得の開始/停止、ラマン分光計ウィンドウでのバッチ収集設定の変更など、スペクトルソースに対するすべての変更が記録されます。Spectral Sources (スペクトルソース) ウィンドウでは、以下を選択できます。

- **Spectral sources Event Log (スペクトルソースイベントログ)** : すべてのスペクトルソースのイベントログを表示します。
- **Event Log (イベントログ)** : 特定のスペクトルソースのイベントログを表示します。



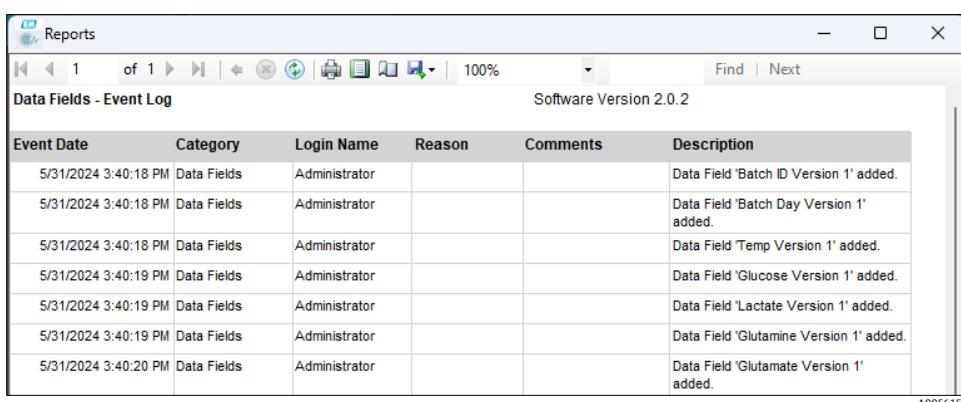
Event Date	Category	Login Name	Reason	Comments	Description
5/31/2024 1:34:02 PM	Spectral Sources	Administrator			Spectral Source 'Runtime 6.5' added.
5/31/2024 1:50:04 PM	Rxn Control	DESKTOP-GL3GV14\Laura			The laser power was set to 400 on analyzer 'Raman Analyzer'.
5/31/2024 1:50:49 PM	Spectral Sources	Administrator			Spectral Source 'Runtime 6.5' updated. Differences: 'EncryptedPassword' changed.
5/31/2024 2:26:04 PM	Rxn Control	DESKTOP-GL3GV14\Laura			The laser power was set to 400 on analyzer 'Raman Analyzer'.
5/31/2024 3:03:06 PM	Spectral Sources	Administrator			Spectral Source 'Bioreactor 1-2' added.
6/3/2024 5:16:42 PM	Rxn Control	DESKTOP-GL3GV14\Laura			The laser power was set to 400 on analyzer 'Raman Analyzer'.
6/3/2024 5:48:49 PM	Rxn Control	DESKTOP-GL3GV14\Laura			The laser power was set to 400 on analyzer 'Raman Analyzer'.
6/3/2024 5:54:17 PM	Rxn Control	DESKTOP-GL3GV14\Laura			The laser power was set to 400 on analyzer 'Raman Analyzer'.
6/3/2024 7:16:22 PM	Spectral Sources	Administrator			Spectral Source 'Runtime 6.5' updated. Differences: 'EncryptedPassword' changed.
6/6/2024 6:42:46 PM	Rxn Control	DESKTOP-GL3GV14\Laura			The laser power was set to 400 on analyzer 'Raman Analyzer'.

図 6. スペクトルソースイベントログ

### 2.2.5.5 データフィールドイベントログ

Data Fields (データフィールド) ウィンドウでは、特定のデータフィールドまたはすべてのデータフィールドに関連するアクションが記録されたイベントログを表示できます。このログは、新しいフィールドの追加、フィールドの削除、別名の追加など、データフィールドに対するすべての変更を収集します。Data Fields (データフィールド) ウィンドウでは、以下を選択できます。

- **Data Fields Event Log (データフィールドイベントログ)** : すべてのデータフィールドのイベントログを表示します。
- **Event Log (イベントログ)** : 特定のデータフィールドのイベントログを表示します。



Event Date	Category	Login Name	Reason	Comments	Description
5/31/2024 3:40:18 PM	Data Fields	Administrator			Data Field 'Batch ID Version 1' added.
5/31/2024 3:40:18 PM	Data Fields	Administrator			Data Field 'Batch Day Version 1' added.
5/31/2024 3:40:18 PM	Data Fields	Administrator			Data Field 'Temp Version 1' added.
5/31/2024 3:40:19 PM	Data Fields	Administrator			Data Field 'Glucose Version 1' added.
5/31/2024 3:40:19 PM	Data Fields	Administrator			Data Field 'Lactate Version 1' added.
5/31/2024 3:40:19 PM	Data Fields	Administrator			Data Field 'Glutamine Version 1' added.
5/31/2024 3:40:20 PM	Data Fields	Administrator			Data Field 'Glutamate Version 1' added.

図 7. データフィールドイベントログ

## 3 製品ライフサイクルの各段階

### 3.1 用語集

用語	説明
Audit Trail (監査証跡)	コンピュータで自動的に生成される、電子記録データの独立した変更記録であり、時間、オペレータ、アクション、内容、理由(必要に応じて)などを示します。
認定ユーザー	必要なトレーニングを受け、当該アプリケーションへのアクセス権を付与されたエンドユーザー
BCA	バックグラウンド補正精度 (Background Correction Accuracy)
°C	摂氏温度
Cfm	立方フィート/分
CFL	1997年9月4日付の「Galactic Industries Corp. Universal Data Format Specification」で定義された新しいCFLファイル形式
CFR	連邦規則集 (Code of Federal Regulation)
cGMP	current Good Manufacturing Practice
cGxP	current Good clinical, laboratory, and/or manufacturing Practice
CMMS	設備保全管理システム (Computerized Maintenance Management System) :メンテナンスに関する作業指示書などのあらゆる情報を収め、作業のスケジュール管理に利用されるコンピュータベースのデータベース
COTS	市販の既製品
CTQ	重要品質特性 (Critical To Quality)
重要要件	満たされなかった場合、規制当局の要求事項やデータインテグリティ/セキュリティに悪影響を及ぼす要件
データ解析	分光計から提供される生データから有用な情報を取得することを目的としたあらゆる作業プロセス
電子記録データ	コンピュータシステムによって作成、変更、維持、アーカイブ、取得、配布され、cGxPで規制される活動に使用される、デジタル形式で表現される記録の任意の組合せ。
電子署名	個人によるデジタル証明書形式での電子記録データの承認。法的拘束力があり、個人の手書き署名に相当します。
最終レポート	検証の実行により得られたすべての結果をまとめた資料
GAML	一般化分析マークアップ言語 (Generalized Analytical Markup Language)
GDP	適正文書化基準 (Good Documentation Practice)
GCC	グローバル変更管理 (Global Change Control)
GHz	ギガヘルツ
グラフィカルデータ	グラフ形式で表現できる重要なデータ、情報、属性
Hz	ヘルツ
IAPP	情報資産保護に関する方針 (Information Asset Protection Policy)
In Situ	元の場所で
IQ	据付時適格性確認 (Installation Qualification)
LAN	ローカルエリアネットワーク (Local area network)
nm	ナノメートル
非重要要件	満たされなかった場合でも、規制当局の要求事項やデータインテグリティ/セキュリティに悪影響を及ぼさない要件
OQ	運転時適格性確認 (Operational Qualification)
OS	オペレーティングシステム

用語	説明
パスワード	識別のためにユーザーが入力する一意の暗証コード
PAT	プロセス分析技術 (Process analytical technology)
PC	パーソナルコンピュータ (Personal Computer)
ppb	10 億分の 1
ppm	100 万分の 1
psig	ポンド/平方インチ (ゲージ圧)
Savitzky-Golay フィルタ	データの平滑化、つまり信号の傾向を歪めることなくデータの精度を向上させる目的で、一連のデジタルデータポイントに適用できるデジタルフィルタ
SPC	開発者によって定義されたファイル形式
スペクトル	SPC (GRAMS) 形式に処理した後のラマン分光計からの生データ
QC	品質管理
Raman Rxn4 アナライザ	サンプル分析のために光ファイバープローブを組み合わせて使用できるように設計された統合分光システム
RAM	ランダムアクセスメモリ (Random Access Memory)
UPS	無停電電源装置 (Uninterruptable Power Supply)
URS	ユーザー要求仕様書

### 3.2 関連資料

すべての関連資料は、以下から入手できます。

- 機器に同梱されているメディアデバイスから (一部の機器バージョンには同梱されていません)
- Endress+Hauser モバイルアプリから : [www.endress.com/supporting-tools](http://www.endress.com/supporting-tools)
- Endress+Hauser ウェブサイトの「ダウンロード」エリアから : [www.endress.com/downloads](http://www.endress.com/downloads)

本資料は、以下の資料パッケージの必須資料です。

資料番号	資料の種類	説明
BA02564C	Raman data library 管理者用取扱説明書	セキュリティおよび Raman data library データベースの管理に関する運用・操作手順などを網羅した概要書です。
KA01717C	Raman data library 簡易取扱説明書	インストール後に Raman data library を実行するためのクイックスタートガイドです。
TI01869C	Raman data library 技術仕様書	データ解析システムのプランニングを支援する資料です。 この資料には、ソフトウェアに関するすべての技術データが記載されています。

### 3.3 登録商標

#### SIMCA®

Sartorius Stedim Biotech の登録商標です。

#### GRAMS IQ™

Thermo Fisher Scientific の登録商標です。

## 3.4 診断およびトラブルシューティング

### 3.4.1 アナライザの再起動またはオフ

アナライザを再起動またはオフにする手順：

1. ラマン分光計ウィンドウで **Options (オプション)** をクリックします。  
Analyzer Options (アナライザオプション) ダイアログが表示されます。



図 8. アナライザオプション

2. 以下のいずれかを選択します。
  - アナライザを再起動する場合は、**Restart (再起動)** をクリックします。
  - アナライザをシャットダウンする場合は、**Shut Down (シャットダウン)** をクリックします。
3. 確認ダイアログで **OK** をクリックします。

Raman RunTime アナライザをオフまたはリセットした後、Windows サービスを再起動して Raman data library を RunTime に接続します。Windows サービスを再起動するには、Tray Service Manager を使用して **Endress+Hauser Raman data library** サービスを停止してから開始するか、または Raman data library を搭載したコンピュータを再起動します。

### 3.4.2 スペクトルが収集されない

ラマン分光計ウィンドウを使用してスペクトルは取得されているが、スペクトルがデータセットに追加されない場合は、Windows サービスによって Raman RunTime アナライザの接続が解除されており、接続を再確立する必要があることを示しています。

Windows サービスでは、以下のようなさまざまな理由により Raman RunTime アナライザの接続を解除する場合があります。

- 長期間にわたるアナライザのシャットダウン
- Raman RunTime ソフトウェアでのネットワーク設定の変更
- Raman data library を実行しているコンピュータのネットワーク設定の変更

Windows サービスを再接続するには、Tray Service Manager を使用して **Endress+Hauser Raman data library** サービスを停止してから開始するか、または Raman data library を搭載したコンピュータを再起動します。

## 4 機能とシステム構成

### 4.1 製品説明

Endress+Hauser の Raman data library は、Raman Rxn スペクトルデータの整理、視覚化、解析、レポート作成のために設計されたソフトウェアプログラムです。Raman data library は、Endress+Hauser Raman Rxn 用 Raman RunTime 組込みソフトウェアを補完するものであり、スペクトルの保存、整理、解析、マルチアナライザのデータ収集機能を提供し、ラボから cGxP への移行を支援します。

Raman data library は、ラマンスペクトルを視覚化し、それをリファレンスデータに関連付けて单变量ピークモデルを作成する必要があるユーザー向けに作成されました。このソフトウェアを使用して、準備されたデータを外部の多変量モデリング用にエクスポートすることができます。

Raman data library の機能：

- データ整理**：スペクトルとリファレンス値のマッチング、ケモメトリクスモデリング前のデータ準備、検索可能なデータストレージの提供、データインテグリティの確保
- データ解析**：スペクトルの高度な視覚化と、ピークトレンドや单变量モデリングなどの簡易分析
- cGxP オプション**：スペクトルデータのトレーサビリティ、保存、アーカイブ保存に関する業界標準に適合

Raman data library では、スペクトルデータを安全な組込み SQLite データベースに保存して、スペクトルデータに関する計算を実行し、スペクトルデータとそれに関連するメタデータをレポートや画面上に表示することができます。この機能により、ラマンスペクトルが定量的ラマンメソッド開発用のリファレンスデータとして機能し、バリデートされた分析ソリューションの一部として、FDA 21 CFR part 11 のニーズに対応できます。

Raman data library は、cGxP セットアップインストーラを使用してインストールし、Endress+Hauser による IQ/OQ およびユーザーによる PQ を通して適格性評価を行うことで、21 CFR part 11 に準拠させることができます。cGxP モードでインストールすると、本プログラムによりラマンスペクトルの収集、保存、整理を簡素化でき、スペクトルは以下のように機能します。

- バリデートされた分析ソリューションの一部として、定量的ラマンモデル開発用の校正セットデータとして機能します。あるいは、
- プロセスまたはサンプルの特性予測に使用されるバリデートされたモデルへの入力データとして機能します。

#### 4.1.1 組立て

##### 4.1.1.1 インストール

Raman data library は、機器単体で使用するワークステーションにインストールするように設計されています。

Raman data library は、アプリケーションの各インスタンスからデータをエクスポートし、そのデータを集中管理拠点にインポートする機能を備えます。インストールの手順や方法については、*Raman data library 管理者用取扱説明書 (BA02349C)* を参照してください。

##### 4.1.1.2 セキュリティ設定 (cGxP バージョンのみ)

cGxP 環境では、Raman data library はユーザー認証を利用して、すべてのイベントのトレーサビリティとログ記録を保証します。Raman data library のコアバージョンの環境では、ユーザー管理/認証機能は使用されません。

Settings (設定) ウィンドウから、システムセキュリティの設定を変更できます。システムセキュリティの設定を変更するには、System Settings Manager (システム設定管理者) の役割でログインする必要があります。

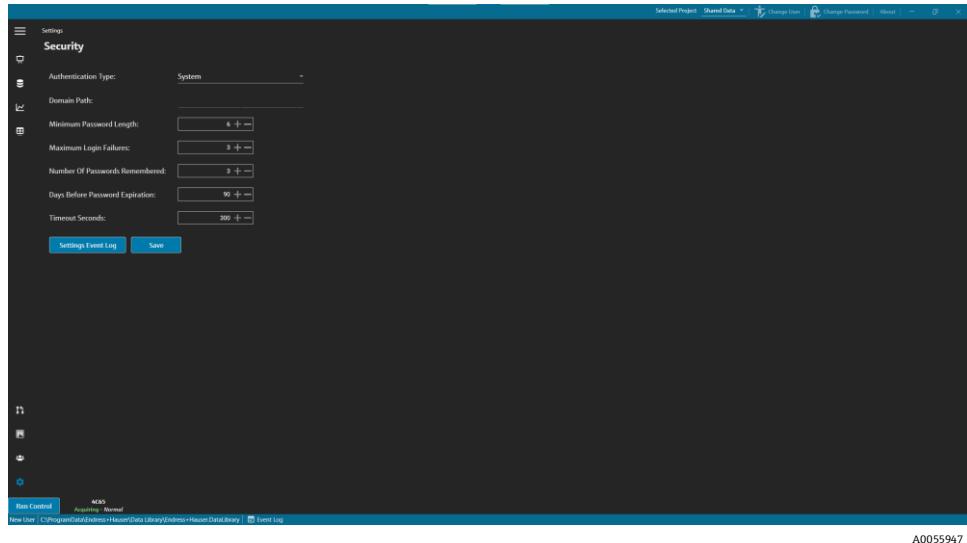


図 9. Security (セキュリティ) ウィンドウ

Settings (設定) ウィンドウでは、以下を選択できます。

- **Authentication type (認証タイプ)** : アプリケーションの認証タイプ。ユーザーは、認証モードを System (システム) 、 Domain (ドメイン) 、 Local (ローカル) の中から選択できます。
- **Domain path (ドメインパス)** : (ドメイン認証の場合のみ) ドメインパス
- **Minimum password length (パスワードの最小長)** : ユーザーパスワードの最小文字数。許容される最小文字数は 6 です。
- **Maximum login failures (ログイン失敗の最大回数)** : ログインを失敗できる最大回数。これ以上ログインを失敗すると、ユーザー アカウントがロックアウトされます。
- **Number of passwords remembered (記憶されるパスワードの数)** : ユーザー アカウントに関連付けられる一意の新規パスワードの数。この数を超えた場合は古いパスワードを再利用できます。
- **Days before password expiration (パスワードの有効日数)** : パスワードを利用できる期間 (日数) 。この期間が経過すると、ユーザーはシステムからパスワードの変更を求められます。所定の日数の経過後にパスワードが期限切れになるように設定できます。また、日数を 0 に設定して、パスワードの有効期限が切れないように指定することもできます。
- **Timeout Seconds (タイムアウト秒数)** : システムタイムアウトが発生するまでに許容される無操作状態の時間 (秒数) 。システムタイムアウトが発生した場合、ユーザーはアプリケーションを続行または終了するために資格情報を再入力する必要があります。Timeout Seconds (タイムアウト秒数) を 0 に設定した場合、システムタイムアウトは無効になります。設定可能な最大タイムアウト値は 3600 秒 (60 分) です。

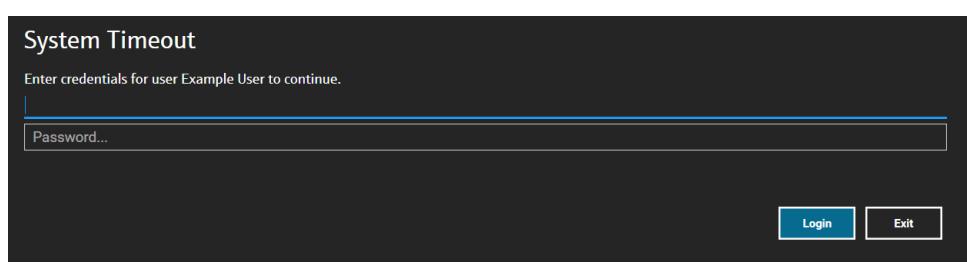


図 10. システムタイムアウト

- **Save (保存)** : システムセキュリティの設定を保存します。
- **Settings event log (設定イベントログ)** : 設定に関するイベントログを表示します。

#### 4.1.1.3 ユーザー管理 (cGxPバージョンのみ)

cGxP 環境では、Raman data library はユーザーを認証して、すべてのイベントのトレーサビリティとログ記録を保証します。コアバージョンの Raman data library は、ユーザー管理/認証機能を搭載していません。

管理者は、Users (ユーザー) ウィンドウを使用して、ユーザー アカウントを追加/更新/削除できます。また、管理者は、指定したユーザーのイベントの表示や、全ユーザーのすべてのイベントの表示を行うこともできます。

ユーザーを管理するには、Users Manager (ユーザー管理者) の役割を持つアカウントにログインする必要があります。

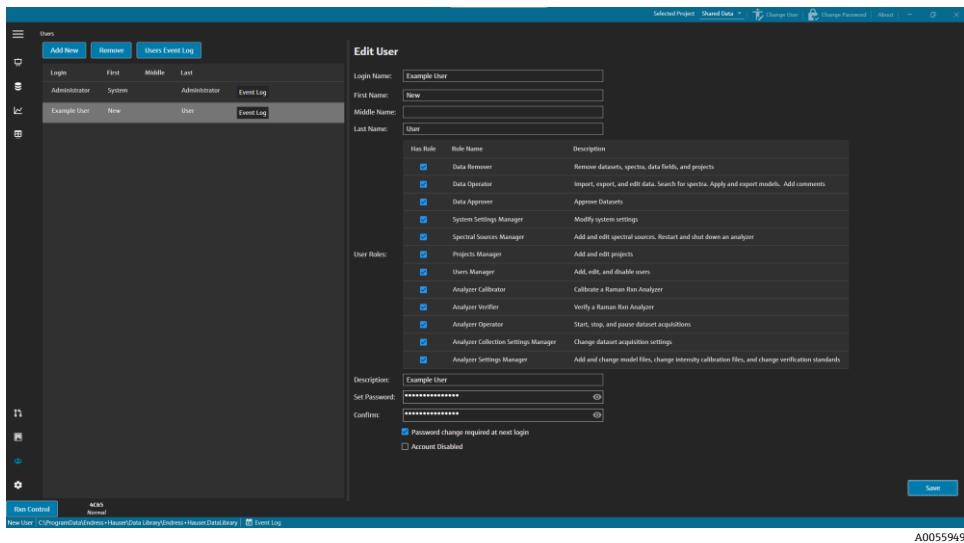


図 11. Users (ユーザー) ウィンドウ

Users (ユーザー) ウィンドウでは、以下を選択できます。

- **Add New (新規追加)** : 新規ユーザーを作成します。
- **Remove (削除)** : 選択したユーザーを削除します。ユーザーを削除するには、Data Remover (データ削除者) の権限が必要です。
- **Users Event Log (ユーザーイベントログ)** : すべてのユーザーのイベントログを表示します。
- **Event Log (イベントログ)** : 指定したユーザーのイベントログを表示します。

##### 4.1.1.3.1 ユーザーの役割

ユーザーの役割機能では、ユーザー管理者は、お客様が決定した組織構造に準拠した権限を持つユーザーを作成できます。そのため、固定ユーザーグループは存在しません。代わりに、ユーザーの役割の組合せを割り当てることにより、さまざまな方法で権限を構造化できます。

ユーザーの役割を使用して、ユーザーの機能を制限できます。任意のユーザーに対して、役割の任意の組合せ（すべての役割から役割なしまで）を割り当てることができます。

役割	許容されるアクション
Data Remover (データ削除者)	<ul style="list-style-type: none"> <li>■ データセットの削除</li> <li>■ スペクトルの削除</li> <li>■ データフィールドの削除</li> <li>■ プロジェクトの削除</li> </ul>
Data Operator (データオペレータ)	<ul style="list-style-type: none"> <li>■ データのインポート、エクスポート、編集</li> <li>■ スペクトルの検索</li> <li>■ モデルの適用とエクスポート</li> <li>■ コメントの追加</li> </ul>
Data Approver (データ承認者)	データセットの承認

役割	許容されるアクション
System Settings Manager (システム設定管理者)	システム設定の変更
Spectral Sources Manager (スペクトルソース管理者)	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ スペクトルソースの追加と編集</li> <li>▪ アナライザの再起動とシャットダウン</li> </ul>
Projects Manager (プロジェクト管理者)	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ プロジェクトの追加</li> <li>▪ プロジェクトの編集</li> </ul>
Users Manager (ユーザー管理者)	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ ユーザーの追加</li> <li>▪ ユーザーの編集</li> <li>▪ ユーザーの無効化</li> </ul>
Analyzer Calibrator (アナライザ校正者)	Raman Rxn アナライザの校正
Analyzer Verifier (アナライザ検証者)	Raman Rxn アナライザの検証
Analyzer Operator (アナライザオペレータ)	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ データセット収集の開始</li> <li>▪ データセット収集の停止</li> <li>▪ データセット収集の中止</li> </ul>
Analyzer Collection Settings Manager (アナライザ収集設定管理者)	データセット収集設定の変更
Analyzer Settings Manager (アナライザ設定管理者)	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ モデルファイルの追加と変更</li> <li>▪ 強度校正ファイルの変更</li> <li>▪ 検証基準の変更</li> </ul>

ユーザーの役割は、1つの権限セットに制限することも、機能的役割の責任に関連する複数の権限セットを組み合わせることもできます。下表は、ユーザー、監督者、管理者に割り当てることができる役割セットの例を示します。

ユーザー レベル	適用される役割
ユーザー	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Data Operator (データオペレータ)</li> <li>▪ Spectral Sources Manager (スペクトルソース管理者)</li> <li>▪ Analyzer Calibrator (アナライザ校正者)</li> <li>▪ Analyzer Verifier (アナライザ検証者)</li> <li>▪ Analyzer Operator (アナライザオペレータ)</li> <li>▪ Analyzer Collection Settings Manager (アナライザ収集設定管理者)</li> <li>▪ Analyzer Settings Manager (アナライザ設定管理者)</li> </ul>
監督者	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Data Remover (データ削除者)</li> <li>▪ Data Approver (データ承認者)</li> <li>▪ System Settings Manager (システム設定管理者)</li> <li>▪ Projects Manager (プロジェクト管理者)</li> </ul>
管理者	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Users Manager (ユーザー管理者)</li> </ul>

#### 4.1.1.3.2 新規ユーザーの作成

##### 新規ユーザーの作成手順

4. Users (ユーザー) ウィンドウで、**Add New (新規追加)** をクリックします。

すべての新規システムユーザーに対して、Raman data library の新規ユーザー アカウントを作成します。Raman data library ではユーザーの名前を変更できますが、この機能は名前の変更に伴ってユーザーの名前をアップグレードする場合にのみ使用してください。ユーザー アカウントの名前を変更して、そのアカウントを新しいユーザーに再割当てしないでください。

Edit User (ユーザーの編集) ペインが新たに表示されます。

図 12. Edit User (ユーザーの編集) ペイン

#### 5. 以下のユーザープロパティを入力します。

- **Login Name (ログイン名)** : システムへのログインに使用する名前。各ログイン名は一意で、長さは 1~100 文字である必要があります。
- **First Name (ファーストネーム)** : ユーザーのファーストネーム。長さは 0~100 文字です。
- **Middle Name (ミドルネーム)** : ユーザーのミドルネーム。長さは 0~100 文字です。
- **Last Name (ラストネーム)** : ユーザーのラストネーム。長さは 0~100 文字です。
- **User Roles (ユーザーの役割)** : Raman data library でユーザーに付与される役割。ユーザーの役割を追加または削除するには、各役割の **Include (含める)** チェックボックスをオンまたはオフにします。ユーザーの役割 → を参照してください。
- **Description (説明)** : ユーザーの説明。

#### 6. Set Password (パスワードの設定) および Confirm Password (パスワードの確認) ボックスに有効なパスワードを入力します。

パスワードは、以下のパスワード最低要件を満たしている必要があります。

- 少なくとも 1 つの特殊文字が含まれていること
- 大文字と小文字が組み合わせて使用されていること
- Settings (設定) ウィンドウで設定されているパスワードの最小長を満たしていること

#### 7. (任意) 新規ユーザーを追加する場合は、Password change required at next login (次回ログイン時にパスワードの変更が必要) をオンにします。

#### 8. Save (保存) をクリックします。

##### 4.1.1.3.3 ユーザーの無効化

Raman data library で使用されていないユーザー アカウントは無効化できますが、履歴および監査証跡のために Raman data library に常に保持しておく必要があります。無効化されたユーザーはログインできません。

##### ユーザーの無効化手順

1. Users (ユーザー) ウィンドウで、無効化するユーザー アカウントを選択します。
2. Account Disabled (アカウントの無効化) をオンにします。
3. Save (保存) をクリックします。

##### 4.1.1.3.4 ユーザーの変更

上部のリボンツールバーにある Change User (ユーザーの変更) をクリックすると、別のユーザーに切り替えることができます。別のユーザーに切り替えるには、ユーザー認証情報を正しく入力する必要があります。

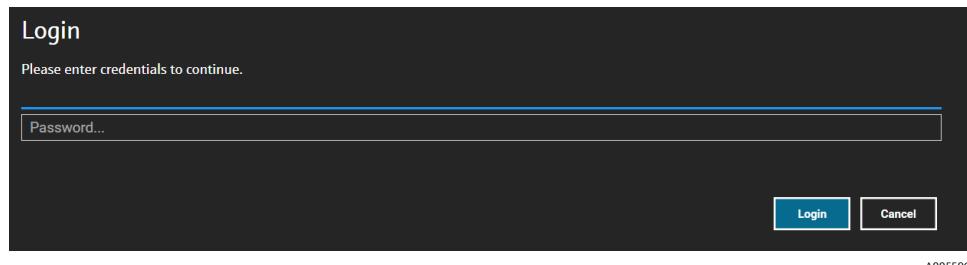


図 13. ユーザーログイン

A0055965

#### 4.1.1.3.5 パスワードの変更

上部のリボンツールバーにある **Change Password (パスワードの変更)** をクリックすると、現在のユーザーのパスワードを変更できます。ユーザーは古いパスワードと新しいパスワードを入力し、確認用に新しいパスワードをもう一度入力する必要があります。

パスワードは、パスワード最低要件を満たしている必要があります。パスワードは少なくとも 1 つの特殊文字および大文字と小文字の組合せを含んでおり、さらに **Settings (設定)** ウィンドウで設定されているパスワードの最小長を満たしている必要があります。



図 14. Change Password (パスワード変更) ダイアログ

A0055966

このメニュー項目は、認証モードがローカル Windows 認証またはドメイン認証に設定されている場合には使用できません。これらの認証モードでは、パスワードの変更は選択された認証サーバーで行います。

## 4.2 ソフトウェア操作

Raman data library は、スペクトルデータ解析用のワークフロー構築に役立つ機能を備えています。推奨ワークフローを以下に示します。データのインポートや前処理の適用など、ワークフローの一部を完了すると、ソフトウェアはデータ処理の次のステップを開始します。



本書では、このワークフローに従って、Raman data library へのデータ追加からプロジェクトの作成、前処理の使用、データ解析の順に説明していきます。

Raman data library のインストールが完了したら、ソフトウェアのインターフェースを十分に理解してから、ニーズに適したデータ解析ワークフローを作成してください。クイックスタートガイドが必要な場合は、*Raman data library 簡易取扱説明書 (KA01717C)* を参照してください。

### 4.2.1 ログイン (cGxP バージョンのみ)

Raman data library の cGxP バージョンでは、Raman data library を開くためにログインする必要があります。

ログイン名とパスワードは、いずれも必須フィールドです。ログイン名の大文字と小文字は区別されません。たとえば、「Jane」と「jane」は同じログイン名になります。

セキュリティ関連の予防措置として、ユーザーは規定回数（設定可能）連続してログイン試行に失敗すると、自動的にロックアウトされます。ロックアウトされたユーザーを再び有効にするには、管理者に連絡する必要があります。

### 4.2.2 オンラインモードとオフラインモード

Raman data library は、以下の 2 種類のモードで利用できます。

- **オンライン**：ラマン分光計のライブデータがモデリングソフトウェアに流れ、リアルタイムの組成分析を実行できます。
- **オフライン**：データセットがインポートされ、リアルタイムプロセスに依存せずに、解析を行うことができます。オフラインモードでは、既知の測定対象物からテンプレートを作成して、リアルタイムデータと比較するためのモデルとデータセットテンプレートを作成することもできます。

これらの 2 つのモードを使用すると、リアルタイムのプロセス環境で収集されたラマンスペクトルを把握し、それに基づいて作業することができます。

### 4.2.3 ユーザーインターフェース

Raman data library の初回起動時には、空白のダッシュボードと左側にメニューアイコンが表示されます。左側のメニューは展開することができます。データセットが読み込まれてビューが設定されるまで、Raman data library の起動時には空白のダッシュボードが表示されます。

Raman data library の UI 機能を適切に利用できるように、Windows のディスプレイのスケーリングを 100 % に設定してください。

#### 4.2.3.1 メニュー

##### メインメニュー

Raman data library の左側にあるメインメニューは、ソフトウェア機能間のナビゲーションに使用します。

メニュー項目	ナビゲーション
 A0055967	<b>Expand/collapse (展開/折りたたみ)</b> : メニュー項目の表示/非表示を切り替えます。
 A0055968	<b>Dashboard (ダッシュボード)</b> : ユーザーダッシュボードを作成および管理します。
 A0055969	<b>Datasets (データセット)</b> : データセットを作成および管理します。
 A0055970	<b>Analyze Dataset (データセットの解析)</b> : アクティブなデータセットを解析します。アクティブなデータセットがある場合にのみ有効になります。この項目には、以下の 5 つのサブタブが含まれます。 <ul style="list-style-type: none"> <li>■ <b>Data (データ)</b></li> <li>■ <b>Pretreat (前処理)</b></li> <li>■ <b>Peaks/Regions (ピーク/領域)</b></li> <li>■ <b>Views (ビュー)</b></li> <li>■ <b>Summary (サマリー)</b></li> </ul>
 A0055971	<b>Data Fields (データフィールド)</b> : データフィールドを作成および管理します。
 A0055972	<b>Spectral sources (スペクトルソース)</b> : スペクトルソース (OPC/SPC) を作成および管理します。
 A0055973	<b>Projects (プロジェクト)</b> : プロジェクトを作成および管理します。
 A0055974	<b>Users (ユーザー)</b> : ユーザーを作成および管理します。この機能は、Raman data library の cGxP バージョンでのみ使用できます。



A0055975

**Settings (設定)** : システム設定を管理します。この機能は、Raman data library の cGxP バージョンでのみ使用できます。

## リボンツールバー

Raman data library の上部には、リボンツールバーがあります。リボンツールバーから以下を実行できます。

- **Selected Project (プロジェクトの選択)** : 上部のメニューバーにある「Selected Project (プロジェクトの選択)」リストを使用すると、プロジェクトを切り替えることができます。プロジェクトの詳細については、プロジェクト  $\rightarrow$  [参照] を参照してください。
- **Change User (ユーザーの変更) (cGxP バージョンのみ)** : このツールをクリックすると、プログラムを実行したまま別のユーザーに切り替えることができます。ユーザーとパスワードの変更については、ユーザー管理 (cGxP バージョンのみ) を参照してください。
- **Change Password (パスワードの変更) (cGxP バージョンのみ)** : このツールをクリックすると、パスワードを変更できます。
- **About (製品情報)** : このツールをクリックすると、ソフトウェアのバージョン、バージョン番号、インストール ID、および著作権情報が表示されます。



図 15. リボンツールバー

### 4.2.3.2 データライブラリダッシュボード

このダッシュボードはルーチン分析用のメイン画面です。ダッシュボードにはタブが表示され、タブを設定して保存したデータセットのプロットを表示できます。ダッシュボードタブには、複数のデータセットのビューを含めることができます。ダッシュボードにビューを表示するには、1つまたは複数のデータセットを定義する必要があります。

ダッシュボードを使用するには、まずこの章の初めに概要が示された初期設定 (Raman data library へのデータの追加  $\rightarrow$  [参照] およびデータセットの解析  $\rightarrow$  [参照]) を行う必要があります。クイックスタートガイドとして Raman data library 簡易取扱説明書 (KA01717C) も参照してください。

Raman data library を起動すると、前回のセッションのダッシュボードタブが読み込まれます。ソフトウェアの初回使用時など、前回のダッシュボードが定義されていない場合は、ダッシュボードは空白になります。Analyze Dataset (データセットの解析) ウィンドウの Summary (サマリー) タブから **Launch Dashboard (ダッシュボードの起動)** をクリックすると、前回保存されたダッシュボードタブを再度読み込むことができます。ダッシュボードタブは、Raman data library を終了するときに自動的に保存されます。

新しいデータセット用にダッシュボードを設定して起動した場合、2つの初期設定ビューとして、スペクトルグリッドとスペクトルプロットが表示されます。データセット用の追加ビューは、Analyze Dataset (データセットの解析) 内の **Views (ビュー)** タブで定義します。ビューの詳細な定義方法については、ダッシュボードビューの作成: グリッド、トレンド、スペクトル、3D プロット  $\rightarrow$  [参照] を参照してください。

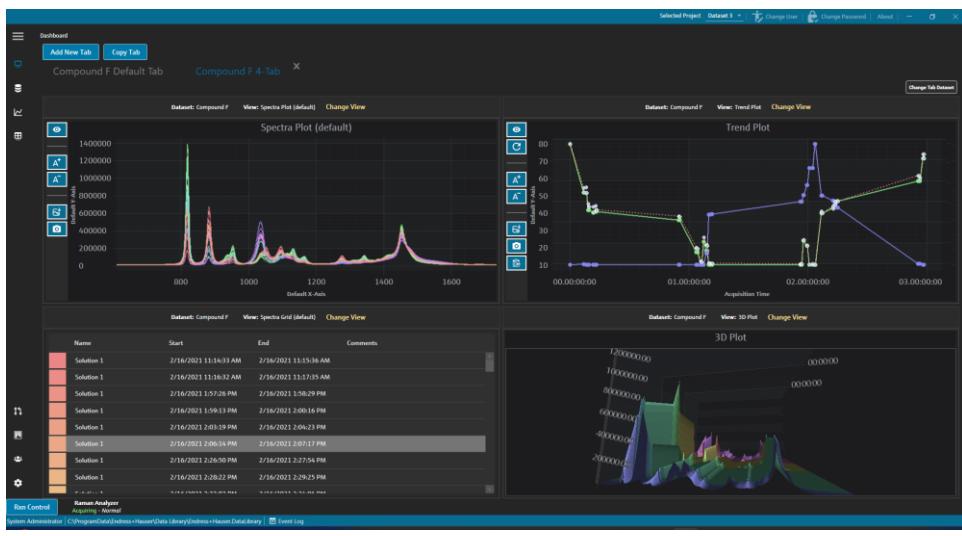


図 16. 4 つのビューで構成されるダッシュボードタブ

ダッシュボードでは、以下の操作を実行できます。

- **Add New Tab (タブの新規追加)** : 新しいダッシュボードを追加します。新しいダッシュボードタブを追加すると、ビューの数 (1~4) を選択するプロンプトが表示されます。ダッシュボードタブには、複数のデータセットのビューを含めることができます。
- **Copy Tab (タブのコピー)** : 現在のダッシュボードタブのコピーを新規作成します。
- **Change View (ビューの変更)** : ユーザーは別のプロット/グリッドを選択して、データセットのビューを変更できます。
- **Change Tab Dataset (タブデータセットの変更)** : データセットを選択し、ダッシュボードタブからすべてのビューを削除します。選択したデータセットが読み込まれるため、そのデータセットプロットのビューをダッシュボードタブにすばやく追加できます。
- **X** ; ダッシュボードタブを閉じます。

### 新規ダッシュボードの作成手順

この手順を行うには、スペクトルソースを追加し、そのソースからデータセットを作成して、Analyze Dataset (データセットの解析) ウィンドウから初期データセットを起動している必要があります。手順や方法については、*Raman data library*へのデータの追加→図 およびデータセットの解析→図 を参照してください。

1. ダッシュボードから **Add New Tab (タブの新規追加)** をクリックします。  
Add New Tab (タブの新規追加) リストに、新規ダッシュボードのビューの数の選択画面が表示されます。
2. **Add New Tab (タブの新規追加)** リストで、新規ダッシュボードに表示するビューの数 (1~4) を選択します。  
新規ダッシュボードが作成されますが、プロット/グリッドのビューは表示されません。

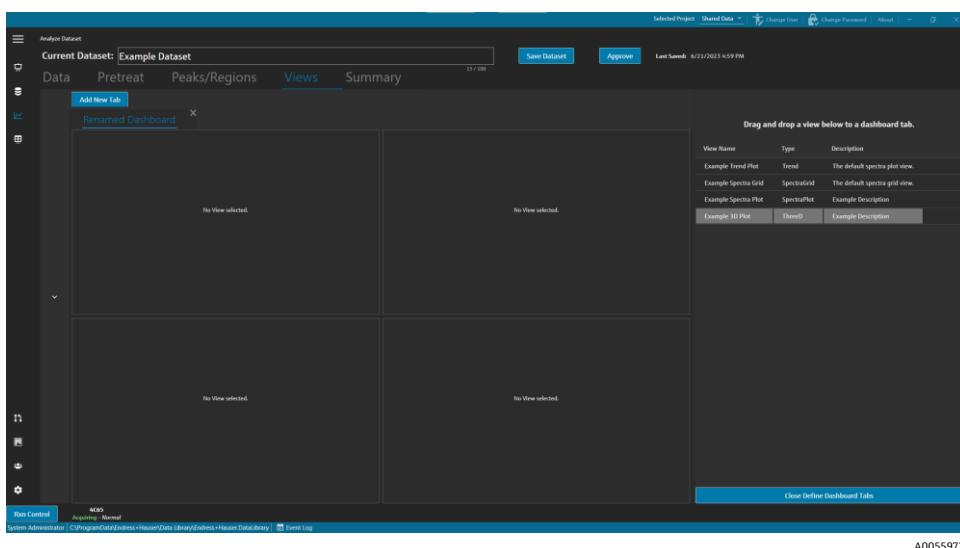


図 17. 空のダッシュボードタブ

スペクトルプロットとスペクトルグリッドの複数の初期ビューが表示されるようにビューを作成するには、Analyze Dataset (データセットの解析) ウィンドウでビューを追加する必要があります。

3. ダッシュボードビューの作成: グリッド、トレンド、スペクトル、3D プロット→図 の説明に従って、ビューを定義します。ダッシュボードに戻ります。
4. 新規ダッシュボードタブで **Change View (ビューの変更)** をクリックします。  
Change View (ビューの変更) ダイアログが表示されます。
5. データセットソースを選択してからビューを選択します。**Change View (ビューの変更)** をクリックします。

新しいビューがダッシュボードに表示されます。ダッシュボードの名称を変更する場合は、ダッシュボードタブの名称をダブルクリックします。

ダッシュボードを保存するには、Views (ビュー) タブでダッシュボードを定義して保存する必要があります。詳細については、ダッシュボードビューの作成: グリッド、トレンド、スペクトル、3D プロット→図 を参照してください。

## 4.3 Raman data library へのデータの追加

この章では、データストリーム/スペクトルソースの作成およびデータセットへの SPC ファイルのインポートについて説明します。Raman data library へのデータの追加は、自動または手動で行うことができます。データの自動取得は、Spectral Sources (スペクトルソース) ウィンドウで設定します。SPC ファイルの手動インポートは、Datasets (データセット) ウィンドウで行います。

ラマンスペクトルを Raman data library に取り込むには、以下の 3 つの方法があります。

- SPC ファイルを格納するフォルダを手動インポート
- ウォッチフォルダから SPC ファイルを自動インポート
- OPC 接続から Raman RunTime への自動インポート

### 4.3.1 プロジェクト

プロジェクトには、データが整理されて格納されます。Raman data library にデータをインポートするには、まずデータのプロジェクトコンテナを作成する必要があります。Projects (プロジェクト) ウィンドウでは、以下の操作を実行できます。

- **Add New (新規追加)** : 新規プロジェクトを追加します。
- **Projects Event Log (プロジェクトイベントログ)** : (cGxP バージョンのみ) すべてのプロジェクトのイベントログを表示します。
- **Event Log (イベントログ)** : (cGxP バージョンのみ) 特定のプロジェクトのイベントログを表示します。
- **Remove (削除)** : 選択したプロジェクトを削除します。Raman data library の cGxP バージョンでは、プロジェクトを削除するには、Data Remover (データ削除者) の権限が必要です。
- **Save (保存)** : 選択したプロジェクトを保存します。

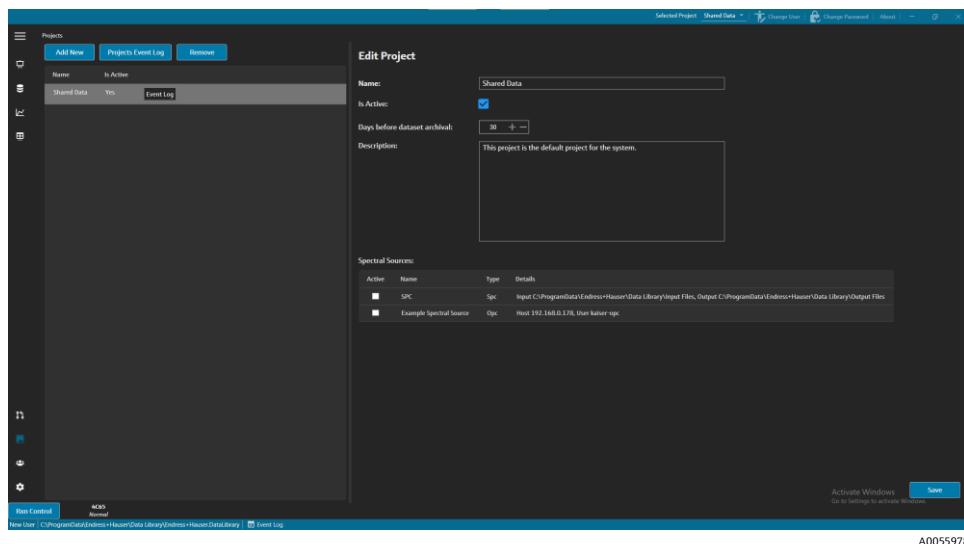


図 18. Projects (プロジェクト) ウィンドウ

#### 4.3.1.1 新規プロジェクトの追加

##### プロジェクトを追加する手順

1. Projects (プロジェクト) ウィンドウで、 **Add New (新規追加)** をクリックします。

Edit Project (プロジェクトの編集) ペインが表示されます。

2. 以下の情報を入力します。

- **Name (名称)** : プロジェクト名。
- **Is Active (アクティブ)** : プロジェクトがアクティブかどうか。Is Active (アクティブ) チェックボックスがオフの場合、プロジェクトはメニューバーの Selected Project (プロジェクトの選択) リストに表示されません。
- **Days before dataset archival (データセットがアーカイブされるまでの日数)** : データセットが自動的にアーカイブされ、Datasets (データセット) ウィンドウで非表示になるまでの日数。アーカイブされたデータセットを表示するには、Datasets (データセット) ウィンドウで Show Archived Datasets (アーカイブされたデータセットを表示) チェックボックスをオンにします。

- **Description (説明)** : プロジェクトの説明。
- **Spectral sources (スペクトルソース)** : 選択したプロジェクトでアクティブにするスペクトルソースを指定します。  
プロジェクトで作成されたスペクトル、データフィールド、データセットは、別のプロジェクトでは表示できません。ただし、共有データプロジェクトでは、1つのプロジェクト内に格納されたデータを他のプロジェクトと共有できます。これは、基準スペクトルや共通データフィールドを保存して、複数のプロジェクトで共有する場合に便利です。共有データプロジェクトを作成するには、プロジェクトに適用するすべてのデータソースをリストから選択します。

3. **Save (保存)** をクリックします。

### 4.3.2 スペクトルソース

スペクトルソースはスペクトルデータのソースです。スペクトルソースとして、分光ファイル (.spc) を含む監視対象の入力フォルダ、または Raman Rxn アナライザとの OPC 接続を介してリアルタイムで転送されるスペクトルを使用できます。Raman data library の cGxP バージョンでは、スペクトルソースの追加または変更を行うには、Spectral Sources Manager (スペクトルソース管理者) の権限が必要です。

Spectral Sources (スペクトルソース) ウィンドウでは、以下を選択できます。

- **Add New (新規追加)** : 新規スペクトルソースを作成します。
- **Spectral sources Event Log (スペクトルソースイベントログ)** : すべてのスペクトルソースのイベントログを表示します。
- **Event Log (イベントログ)** : 特定のスペクトルソースのイベントログを表示します。
- **Remove (削除)** : 選択したスペクトルソースを削除します。Raman data library の cGxP バージョンでは、スペクトルソースを削除するには、Data Remover (データ削除者) の権限が必要です。
- **Name (名称)** : スペクトルソースの表示名。
- **Type (タイプ)** : スペクトルソースのタイプ (OPC または SPC) 。

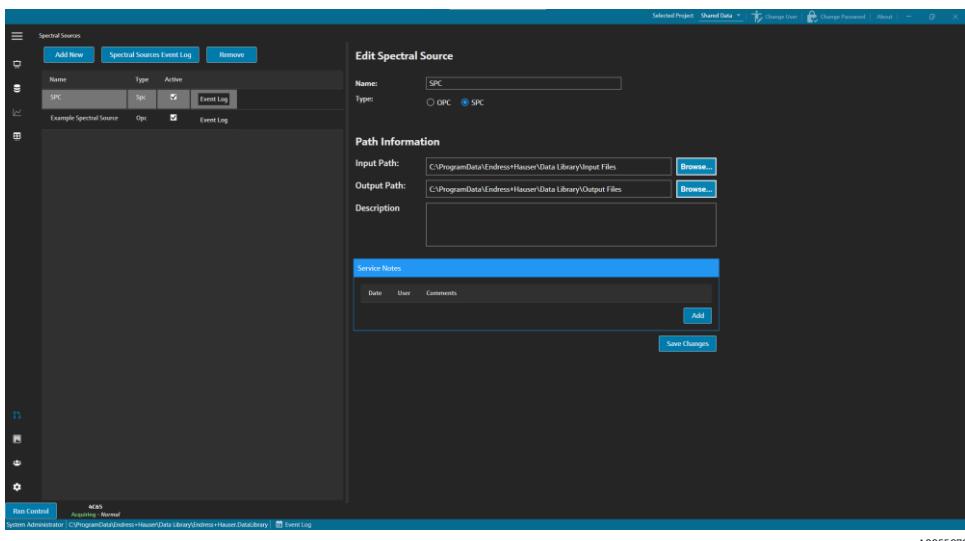


図 19. スペクトルソースウィンドウ

#### 4.3.2.1 OPC スペクトルソースの追加

OPC スペクトルソースを作成すると、Raman data library で OPC UA (Unified Automation) クライアントを Raman RunTime OPC サーバーに接続できるようになります。ユーザーは OPC 接続を利用して、Endress+Hauser Raman Rxn アナライザシステムからスペクトルを表示、制御、収集することができます。Raman data library には、複数のラマン分光計 (最大 4 台) を接続できます。

Raman data library と Raman RunTime 間の OPC 接続には、Raman RunTime v6.4 以上が必要です。Raman Rxn アナライザで v6.4 より前のバージョンの Raman RunTime が実行されている場合は、SPC スペクトルソースを使用できます (SPC スペクトルソースの追加 → を参照)。

OPC スペクトルソースを使用する場合は、Windows の設定で機器のスリープ機能を無効にしてください。

## OPC スペクトルソースを追加する手順

- スペクトルソースウィンドウで、**Add New (新規追加)** をクリックします。  
Edit Spectral Source (スペクトルソースの編集) ペインが表示されます。

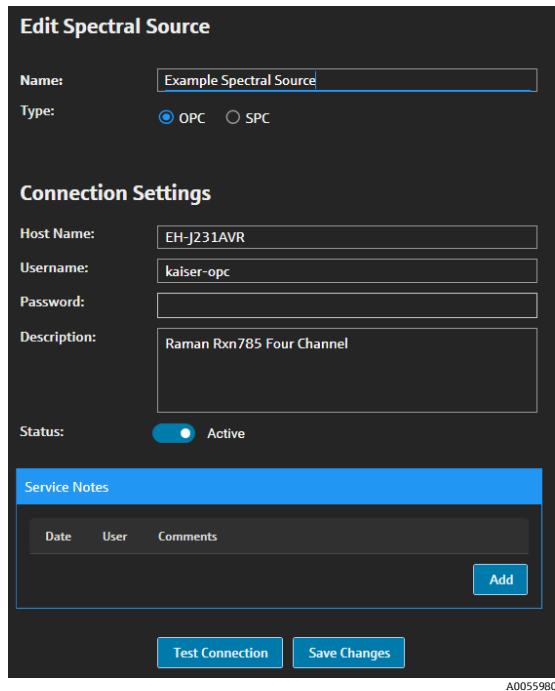


図 20. OPC スペクトルソースの編集

- スペクトルソースの名称を入力します。
- OPC** を選択します。
- 以下の接続設定情報を入力します。

- Host Name (ホスト名)** : Raman RunTime OPC サーバーのホスト名。
- Username (ユーザー名)** : Raman RunTime OPC サーバーとの OPC 接続の構築に使用されるユーザー名。初期設定のユーザー名は **kaiser-opc** です。
- Password (パスワード)** : Raman RunTime OPC サーバーとの OPC 接続の構築に使用されるパスワード。初期設定のパスワードは **opc** です。
- Description (説明)** : OPC スペクトルソースの説明 (任意)
- Status (ステータス)** : OPC スペクトルソースのステータス。Active (アクティブ) または Inactive (非アクティブ)
- Service Notes (サービスノート)** : サービス担当者またはユーザーによる OPC スペクトルソースに関するコメント。新しいサービスノートを追加する場合は、**Add (追加)** をクリックします。

- Test Connection (テスト接続)** をクリックして、Raman RunTime OPC サーバーとの接続を確認します。  
接続を確実に成功させるために、以下を実行してください。
  - OPC スペクトルソースを保存する前に、テスト接続を実行してください。
  - テスト接続が成功しない場合は、ラマン分光計の電源がオンであり、使用可能な状態でネットワークに接続されていること、および必要に応じて *Raman RunTime 取扱説明書 (BA02180C)* の *Raman Rxn 2* および *Raman Rxn 4* のネットワーク設定で定義されているネットワークポートが設定されていることを確認してください。
  - 単にホスト名の解決がローカルの IT/OT ネットワークで正しく設定されていないことが接続失敗の原因である可能性があります。ローカルの IT 管理者にお問い合わせください。
  - また、初期設定の OPC 資格情報の代わりに、Raman RunTime アナライザで設定されているユーザーアカウントの資格情報を使用しても、アナライザの OPC 接続を認証できます。
- Save Changes (変更を保存)** をクリックします。

接続が成功すると、メッセージが表示され、Rxn Control (Rxn の管理) ツールバーが下部のリボンに表示され、割り当てられたスペクトルソース名とそのステータスが表示されます。

#### 4.3.2.2 SPC スペクトルソースの追加

SPC スペクトルソース機能により、v6.4 より前のバージョンの Raman RunTime が実行されている Raman Rxn アナライザからスペクトルを自動的にインポートできます。これにより、Raman data library と Endress+Hauser のレガシーラマンソフトウェアソリューションを併用することもできます。SPC スペクトルソースを追加すると、Raman data library では .spc ファイルを自動的に読み取り、Raman data library データベースに保存して、データセットに利用できるようになります。

SPC スペクトルソースには、Raman data library が新しいファイルを監視し、それをインポートする入力パスと、インポート後に Raman data library が SPC ファイルを移動する出力パスが必要です。

Raman RunTime から .spc ファイルをエクスポートする方法については、*Raman RunTime 取扱説明書 (BA02180C)* の SPC ファイルネットワークエクスポートを参照してください。

#### SPC スペクトルソースを追加する手順

1. Raman data library を搭載したコンピュータで、.spc ファイル用のフォルダを作成します。
  - Raman RunTime が v6.4 より前のバージョンの場合は、**Output spectra** という名前のフォルダを 1 つ作成します。
  - レガシーソフトウェアソリューションの場合は、2 つのフォルダを作成し、1 つには **Input spectra**、もう 1 つには **Output spectra** という名前を付けます。レガシーラマンソフトウェアソリューションからの SPC ファイルは、**Input spectra** フォルダに転送する必要があります。
2. **Spectral sources (スペクトルソース)**  をクリックしてから **Add New (新規追加)** をクリックします。

Edit Spectral Source (スペクトルソースの編集) ペインが表示されます。

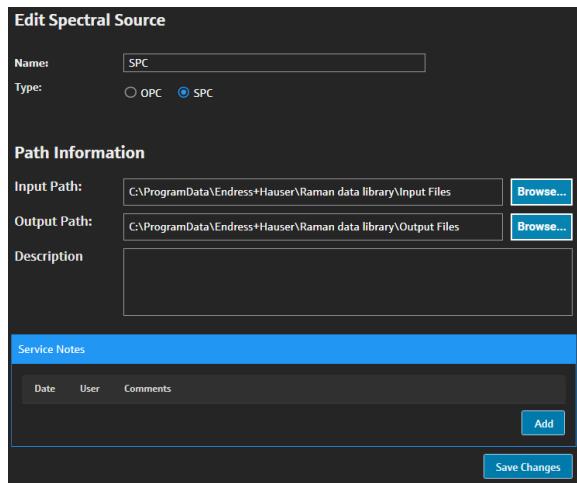


図 21. SPC スペクトルソースの編集

A0055981

3. スペクトルソースの名称を入力します。
4. SPC を選択します。
5. **Input Path (入力パス)** で、以下を実行します。
  - Raman RunTime のバージョンが v6.4 より前の場合は、パス \\コンピュータ名または IP アドレス \\DataLibraryBatchExport にある「DataLibraryBatchExport」というネットワーク共有フォルダを参照します。
  - レガシーソフトウェアソリューションの場合は、**Input Path (入力パス)** にレガシーソフトウェアの出力ディレクトリを指定します。
6. **Output Path (出力パス)** では、Step 1 で作成した Output spectra フォルダを参照します。これは、.spc ファイルがシステムに読み込まれた後にその出力先として使用されるディレクトリパスです。
7. (任意) 以下の情報を入力します。
  - **Description (説明)** : SPC スペクトルソースの説明
  - **Service Notes (サービスノート)** : SPC スペクトルソースに関するユーザーのコメント。新しいサービスノートを追加する場合は、**Add (追加)** ボタンをクリックします。
8. **Save Changes (変更を保存)** をクリックし、プロンプトに対して OK をクリックします。

v6.4 より前のバージョンの Raman RunTime では、ネットワーク共有フォルダ「DataLibraryBatchExport」には、サブフォルダとラマン分光計で収集された .spc ファイルが含まれます。.spc ファイルが読み取られ、Raman data library に追加されると、ファイルはこのネットワークディレクトリから前述の手順で作成した Output spectra フォルダに移動されます。ラマン分光計では、すべての .spc ファイルが保持されます。ファイルは「DataLibraryBatchExport」フォルダからのみ移動されます。

### 4.3.3 データセット

Datasets (データセット) ウィンドウでは、データセットの作成、表示、インポート、エクスポート、削除を行うことができます。既存のデータセットの概要情報を表示できます。

Raman data library では、データセットには少なくとも 1 つのスペクトルが含まれています。データセットを組み合わせてソフトウェア内で解析やモデリングを行うことや、データセットを外部のプログラムにエクスポートすることができます。データセットを使用してスペクトルを解析する場合は、少なくとも 1 つのスペクトルを選択します。

Datasets (データセット) ウィンドウでは、以下を選択できます。

- **Create New Dataset (新規データセットを作成)** : Create Dataset (データセットの作成) ペインが表示されます。Raman data library の cGxP バージョンでは、新規データセットを作成するには、Data Operator (データオペレータ) の権限が必要です。
- **Analyze (解析)** : Analyze (解析) ウィンドウで、選択したデータセットを開いて表示します。
- **Import Data Library (データライブラリのインポート)** : 既存のデータセットファイル (.dlexport) をインポートします。
- **Export (エクスポート)** : Export (エクスポート) ペインが表示されます。
- **Remove (削除)** : 選択したデータセットを削除します。データセットを削除するには、Data Remover (データ削除者) の役割でログインする必要があります。
- **Show Inactive Datasets (無効データセットの表示)** : 無効化されているデータセットを表示します。
- **Show Archived Datasets (アーカイブされたデータセットの表示)** : アーカイブされているデータセットを表示します。データセットは、設定された日数が経過すると自動的にアーカイブされます。Projects (プロジェクト) ウィンドウで「Days before dataset archival (データセットがアーカイブされるまでの日数)」を変更できます。

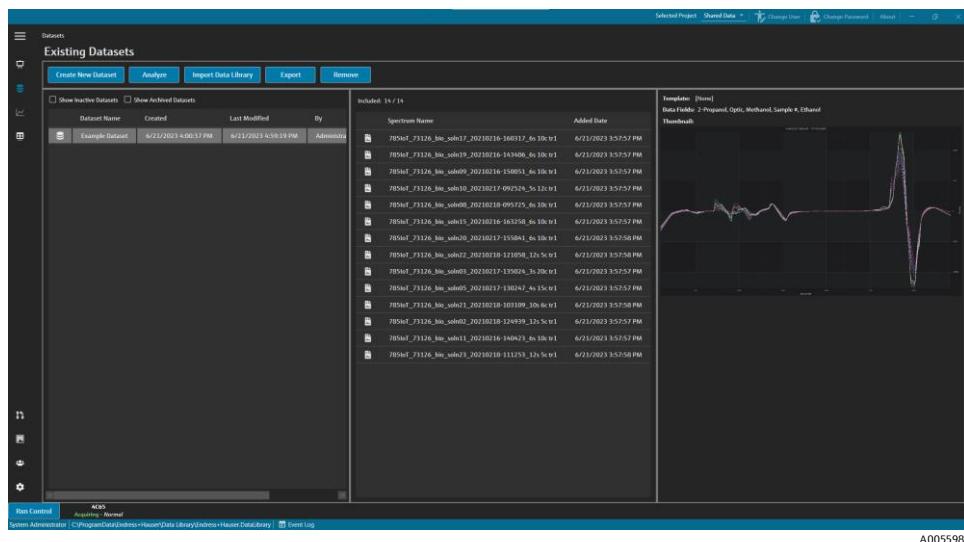


図 22. 既存のデータセット

#### 4.3.3.1 データセットの作成

さまざまなソースからデータを選択して、データセットに含めるスペクトルを選択できます。データは以下から取得できます。

- **Imported Spectra (インポートされたスペクトル)** : これを選択すると、Raman data library にインポートされた使用可能なフォルダとスペクトルがすべて表示されます。
- **Reference Spectra (基準スペクトル)** : これを選択すると、基準スペクトルとしてマークされているすべてのスペクトルが表示されます。
- **Search (検索)** : これを選択すると、指定された条件を満たすスペクトルを検索できます。検索条件は個別に追加/削除できます。スペクトルの検索条件には、名称、開始日、終了日のフィールドや、検索可能と定義されているデータフィールドの設定済みのデータ値を使用できます。
- **Existing Datasets (既存のデータセット)** : これを選択すると、別のデータセットに存在するスペクトルを検索できます。選択したデータセットの概要ビューが表示されます。Include (含める) ▶ をオンにすると、選択したデータセットのすべてのスペクトルが含まれます。
- **Folders (フォルダ)** : これを選択すると、Raman RunTime との OPC 接続により収集されたスペクトルが表示されます。このスペクトルは Raman data library を搭載したコンピュータ上のフォルダに格納されています。

使用可能なスペクトルを選択したら、**Include (含める) ▶**を使用して、選択したスペクトルを新しいデータセットに含めます。新しいデータセットからスペクトルを削除するには、含まれているスペクトルを選択し、◀ **Remove (削除)** をクリックします。

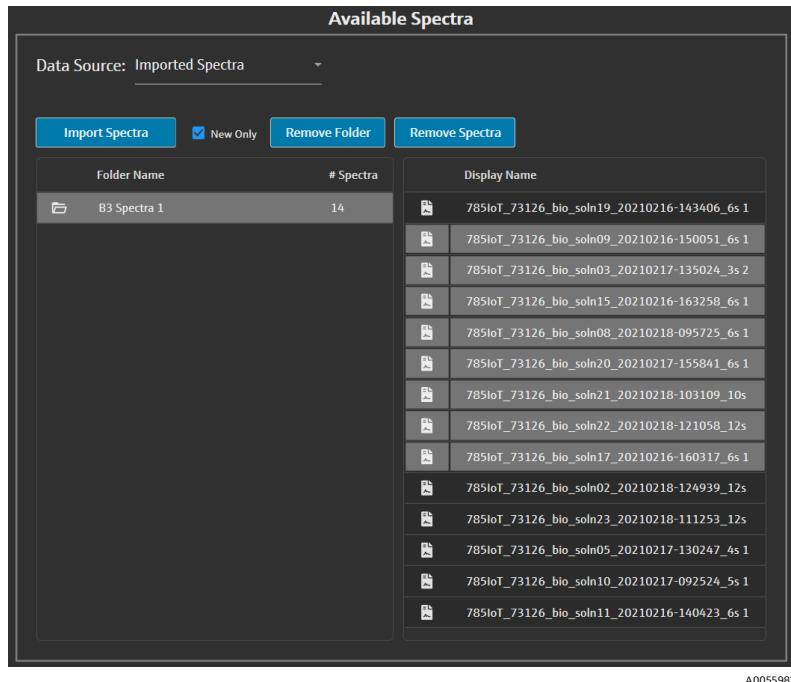


図 23. Data Source: Imported Spectra (データソース: インポートされたスペクトル) ペイン

## データセットの作成手順

1. メインメニューで **Datasets (データセット)**  をクリックします。
2. **Create New Dataset (新規データセットを作成)** をクリックします。  
Create Dataset (データセットの作成) ウィンドウが表示されます。

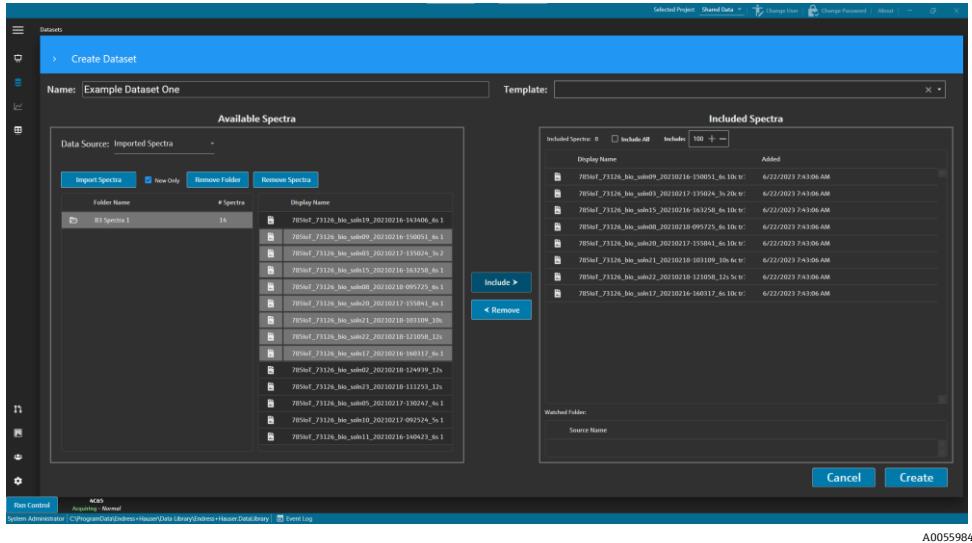


図 24. Create Dataset (データセットの作成) ウィンドウ

3. Create Dataset (データセットの作成) ウィンドウで、以下の情報を入力します。
  - **Name (名称)** : 新規データセットの名称。データセット名は一意で、長さは 1~100 文字である必要があります。
  - **Template (テンプレート)** : データセットの作成時に使用するテンプレート。テンプレートを使用すると、事前に選択したデータフィールド、前処理、ピーク、領域、ビュー、およびダッシュボードタブを新しいデータセットに自動的に適用できます。

4. Data Source (データソース) リストでは、以下を選択します。
  - **Import Spectra (スペクトルのインポート)** : スペクトルファイル (.spc) を格納するフォルダを選択します。
  - **Reference Spectra (基準スペクトル)** : 基準スペクトルとしてマークされているスペクトルを選択します。
  - **Search (検索)** : 指定された条件を満たすスペクトルを検索します。スペクトルの検索条件には、名称、開始日、終了日のフィールドやその他のデータ値を使用できます。
  - **Existing Datasets (既存のデータセット)** : 別のデータセットに存在するスペクトルを検索します。 **Include (含める) ▶** をオンにすると、選択したデータセットのすべてのスペクトルが含まれます。
  - **Folders (フォルダ)** : Raman RunTime との OPC 接続により収集されたスペクトルを選択します。このスペクトルは Raman data library を搭載したコンピュータ上のフォルダに格納されています。スペクトルファイル名は、フォルダブラウザには表示されません。
5. **Available Spectra (使用可能なスペクトル)** ウィンドウから **含めるスペクトル**を選択するか、または **Included Spectra (含まれるスペクトル)** ウィンドウで **Include All (すべて含める)** をオンにして、フォルダ内のすべてのスペクトルをインポートします。
 

新しいデータセットに含まれるスペクトルは、**Included Spectra (含まれるスペクトル)** の下に表示されます。
6. **Included Spectra (含まれるスペクトル)** ウィンドウから **削除するスペクトル**を選択します。
  - **Include All (すべて含める)** をオンにして、Step 5 で選択したすべてのスペクトルを含めるか、または、選択したスペクトルからソフトウェアが 2 つまたは 3 つおきに選択したスペクトルのサブセットのみを含めます。
  - **Remove Folder (フォルダの削除)** をクリックして、選択したフォルダとそのフォルダ内のすべてのスペクトルを削除します。Raman data library の cGxP バージョンでは、フォルダを削除するには、Data Remover (データ削除者) の権限が必要です。
  - **Remove Spectra (スペクトルの削除)** をクリックして、選択したスペクトルをデータセットから削除します。Raman data library の cGxP バージョンでは、スペクトルを削除するには、Data Remover (データ削除者) の権限が必要です。
7. **Create (作成)** をクリックします。
 

Raman data library は新しいデータセットを作成し、ワークフローに従って Analyze (解析) ウィンドウに移ります。
8. **Save Dataset (データセットを保存)** をクリックします。

#### 4.3.3.2 データセットの保存

データセットは、Raman data library 内でデータセットの収集が開始された場合を除き、Raman data library に自動的に保存されません。データセットを定期的に保存するようにしてください。

データセットは、Analyze Dataset (データセットの解析) ウィンドウで保存できます。データセットを保存する前に Raman data library を終了すると、すべての変更が失われます。

#### データセットを保存する手順

1. メインメニューで **Analyze Datasets (データセットの解析)**  をクリックします。
2. **Save Dataset (データセットを保存)** をクリックします。

データセットを初めて保存する場合は、処理に数分かかる場合があります。以降の保存処理には、それほど時間はかかりません。データセットを保存すると、最後に保存された日時を示す **Last Saved (最終保存日)** フィールドが更新されます。

#### 4.3.3.3 データセットの承認

承認されたデータセットは読み取り専用となり、変更できません。Analyze Datasets (データセットの解析) ウィンドウでは、データセットの承認または承認の取消しを行うことができます。

#### データセットの承認または承認の取消しを行う手順

- **Analyze Datasets (データセットの解析)** ウィンドウで、**Approve (承認)** をクリックしてデータセットを承認済みとしてマークします。
- **Unapprove (承認の取消し)** をクリックして、データセットの承認を取り消します。

#### 4.3.4 データフィールド

データフィールドは、スペクトルにタグ付けされた定性的/定量的情報です。定量分析の場合、ユーザーは精度、単位、主要なメソッドの詳細や、スペクトルに関連するその他の情報を指定できます。

Raman data library は、SPC ログまたは OPC データソースからプリセットデータフィールド情報を収集します。データフィールドリストに表示される単位とデータ値は、スペクトルの取得方法に応じて異なる場合があります。Raman RunTime v6.4+ から OPC 経由でデータをインポートすると、大部分の初期設定データフィールドが自動的に入力されます。データフィールドに別名を追加すると、インポート時のユーザー エラーを低減できます。

Data Fields (データフィールド) ウィンドウでは、データフィールドを追加、更新、削除できます。Raman data library の cGxP バージョンでは、データフィールドを変更するには、Data Fields Manager (データフィールド管理者) の役割でログインする必要があります。

Data Fields (データフィールド) ウィンドウでは、以下を選択できます。

- **Add (追加)** : 新規データフィールドを作成します。
- **Remove (削除)** : 選択したデータフィールドを削除します。Raman data library の cGxP バージョンでは、データフィールドを削除するには、Data Remover (データ削除者) の権限が必要です。
- **Data Fields Event Log (データフィールドイベントログ)** : (cGxP バージョンのみ) すべてのデータフィールドのイベントログを表示します。
- **Event Log (イベントログ)** : (cGxP バージョンのみ) 特定のデータフィールドのイベントログを表示します。
- **Save (保存)** : 選択したデータフィールドを保存します。

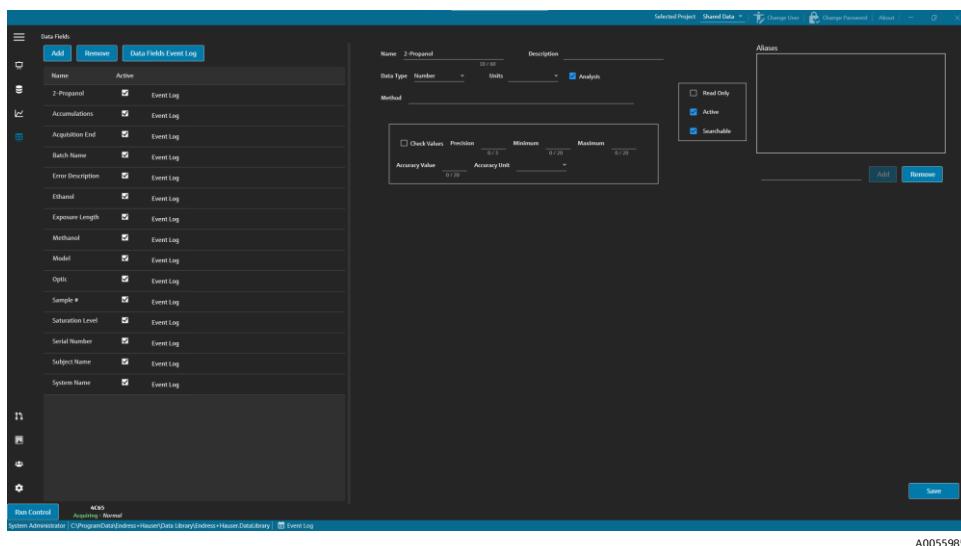


図 25. Data Fields (データフィールド) ウィンドウ

#### データフィールドのプロパティ

プロパティ	意味
Name (名称)	データフィールドの名称
Description (説明)	データフィールドの説明
Aliases (別名)	スペルやラベルの一般的なばらつきに対応した別名を追加すると、ユーザー エラーを低減できます。たとえば、 <i>Concentration</i> 、 <i>concentration</i> 、 <i>Conc</i> が、同じデータフィールド名として扱われるようになります。別名を追加すると、データインポートでよく発生する収集エラーを防止し、ワークフロー全体でタグ付けを自動化できます。別名は、データインポート時に Excel の列ヘッダーと一致させるために使用されます。別名はここで追加/削除できます。
Data Type (データ型)	データフィールドに入力できるデータ値の型： <ul style="list-style-type: none"> <li>■ Boolean (ブール)</li> <li>■ Number (数値)</li> <li>■ Date (日付)</li> <li>■ Text (テキスト)</li> </ul>
Units (単位)	データ型に使用される単位
Analysis (解析)	「Analysis (解析)」とマークされたデータフィールドは、解析処理に使用できます。

プロパティ	意味
Method (メソッド)	収集メソッドを示すための説明フィールド
Read Only (読み取り専用)	「Read Only (読み取り専用)」とマークされたデータフィールドは、データ値を変更できません。
Active (アクティブ)	「Active (アクティブ)」とマークされたデータフィールドは、Analysis (解析) ウィンドウに表示されます。
Searchable (検索可能)	「Searchable (検索可能)」とマークされたデータフィールドは検索対象になります。
Check Values (値チェック)	「Check Values (値チェック)」とマークされたデータフィールドでは、Precision (正確さ)、Minimum (最小)、Maximum (最大)、Accuracy Value (精度値) の各フィールドに設定された要件を満たしていないデータ値は除外されます。
Precision (小数部の桁数)	この値は、小数点以下の必要な桁数を示します。
Minimum (最小)	値の下限値
Maximum (最大)	値の上限値
Accuracy Value (精度値)	精度値を示す説明フィールド
Accuracy Unit (精度単位)	精度単位を示す説明フィールド

### データフィールドを追加する手順

1. Data Fields (データフィールド) ウィンドウで、**Add (追加)** をクリックします。
2. データフィールドのプロパティを入力します。上記の「データフィールドのプロパティ」表を参照してください。
3. **Save (保存)** をクリックします。

## 4.4 データセットの解析

Analyze Datasets (データセットの解析) ウィンドウは、データセットの操作、計算、解析を行う場合に使用します。Analyze Datasets (データセットの解析) ウィンドウは、以下の 5 つのメインタブで構成されています。

- Data (データ)
- Pretreat (前処理)
- Peaks/Regions (ピーク/領域)
- Views (ビュー)
- Summary (サマリー)

### 4.4.1 データセットの表示

Data (データ) タブは、スペクトルデータの解析に使用します。Data (データ) タブのタイルは、特定のデータの表示やサイズの変更を行うことができ、また、タイルの左の枠線を右端にドラッグすると非表示にすることもできます。



図 26. Data (データ) タブ

#	説明
1	<b>スペクトルプロット</b> : データセットに含まれる未処理のスペクトルを表示します。色は虹のスペクトルを循環します（ピンク、橙、黄...紫、ピンク）。
2	<b>スペクトルグリッド</b> : 表示されたデータフィールドのスペクトルおよび関連付けられたデータ値を表示します。スペクトルとデータ値の包含/除外、およびリファレンスデータのインポートを実行できます。
3	<b>データフィールドリスト</b> : 表示するデータフィールドを切り替えます。オンにすると、そのデータフィールドを解析に使用でき、スペクトルグリッドに表示されます。
4	<b>データフィールドプロット</b> : データフィールドをトレンドプロット、ボックスプロット、または予測トレンドプロットとして表示します。
5	<b>その他の情報エリア</b> : スペクトルにコメントを追加し、ログ情報とデータポイントを表示します。

#### 4.4.1.1 スペクトルプロット

Data (データ) タブには、スペクトルデータのプロットが表示されます。スペクトルプロットには、含まれるすべてのスペクトルが未処理形式で表示されます。

#### スペクトルプロットのナビゲーション

ナビゲーション項目	ナビゲーション
–	スペクトルプロット内をクリックしてボックスを描画すると、特定の領域を拡大表示できます。元の表示に戻すには、プロットを左ダブルクリックします。
 A0055988	<b>Zoom Extents (全範囲表示)</b> : データの全範囲を表示します。このボタンは大部分のプロットに表示されます。
 A0055989	<b>Toggle Legend (凡例の切り替え)</b> : 凡例の表示/非表示を切り替えます。このボタンは大部分のプロットに表示されます。
 A0055990	<b>Style Spectrum (スペクトルのスタイル設定)</b> : 選択したスペクトルの色を変更します。

#### 基準スペクトル名の変更

たとえば、最初に収集されたスペクトルが測定対象物の 100 % であることがわかっている場合などに、特定のスペクトルの名前を変更できます。

1. スペクトルグリッドペインで、スペクトルを選択します。
2. 右クリックして **Mark as Reference (リファレンスとしてマーク)** を選択するか、または **Mark as Reference (リファレンスとしてマーク)** ボタンをクリックします。  
Spectrum rename required (スペクトル名の変更が必要) ダイアログが表示されます。
3. 基準スペクトルの適切な名前を入力し、OKをクリックします。
4. スペクトルプロットの凡例を切り替えて、基準スペクトルの名前が変更されていることを確認します。
5. **Save Dataset (データセットを保存)** をクリックします。

スペクトルを元の名前に戻すには、**Select Fields (フィールドを選択)** をクリックし、**Name (名前を付ける)** を選択して **Close (閉じる)** を選択します。元のスペクトル名がリストに表示されます。表示名は編集できますが、収集ソフトウェアの元の名前を編集することはできません。

#### スペクトル表示色の変更

たとえば、基準スペクトルを他のスペクトルと視覚的に対比する場合などに、特定のスペクトルの色を変更できます。

1. スペクトルグリッドペインで、スペクトルを選択します。
2. **Style Spectrum (スペクトルのスタイル設定)**  をクリックし、目的の色を選択します。  
スペクトルがスタイル設定された色で表示されます。
3. **Save Dataset (データセットを保存)** をクリックします。

#### 4.4.1.2 データフィールドの選択

スペクトルプロットペインの右側にデータフィールドが一覧表示されます。「Displayed (表示)」列のオン/オフを切り替えることで、特定のデータフィールドを表示/非表示を切り替えることができます。データフィールドの Displayed (表示) がオンの場合、そのデータフィールドは解析に使用でき、データのエクスポートに含まれます。表示されるデータフィールドはテンプレートの構成要素です。詳細については、テンプレートの作成→図を参照してください。

データフィールドリストでデータフィールドを選択するには、表示するフィールドの横の Displayed (表示) をオンにする必要があります。選択したフィールドはスペクトルグリッドに表示されます。データフィールドリストの最初の選択項目は、表示されるまでに時間がかかる場合があります。後続のデータフィールドはすばやく表示されます。

データフィールドリストは編集できます。詳細については、データフィールド→図を参照してください。

#### スペクトルグリッドでデータフィールドを選択する手順

1. スペクトルグリッドで **Select Fields (フィールドを選択)** をクリックします。

フィールド選択ウィンドウが表示されます。

2. 必要なフィールドを選択します。Raman RunTime の初期設定フィールドは以下のとおりです。

- Name (名称)
- Display name (表示名)
- Start date time (開始日時)
- End date time (終了日時)
- Midpoint date time (中間点日時)
- Error (エラー)

3. **Close (閉じる)** をクリックします。

選択したフィールドはスペクトルグリッドに表示されます。

#### 4.4.1.3 データフィールドのトレンドプロット

データフィールドリストの右側にデータトレンドグラフが表示されます。データフィールドのトレンドプロットは、スペクトルデータ値を経時的に示します。



図 27. データフィールドのトレンドプロット

Data Fields Trends (データフィールドトレンド) ペインでは、以下の操作を実行できます。

ナビゲーション項目	ナビゲーション
 A0055988	<b>Zoom Extents (全範囲表示)</b> : データの全範囲を表示します。このボタンは大部分のプロットに表示されます。
 A0055989	<b>Toggle Legend (凡例の切り替え)</b> : 凡例の表示/非表示を切り替えます。このボタンは大部分のプロットに表示されます。
 A0055992	<b>Copy Plot Data to Clipboard (プロットデータをクリップボードにコピー)</b> : 現在のトレンドプロットデータをクリップボードにコピーします。
 A0055993	<b>Exclude Points (ポイントを除外)</b> : 選択したデータ値を除外します。

#### 4.4.1.4 ボックスプロット

Box Plot (ボックスプロット) タブには、選択したデータフィールドのボックスプロットが表示されます。データフィールドの最大値、上位四分位数、中央値、下位四分位数、最小値、標準偏差が表示されます。ボックスプロットは、不連続データサンプルを解析する場合に役立ちます。

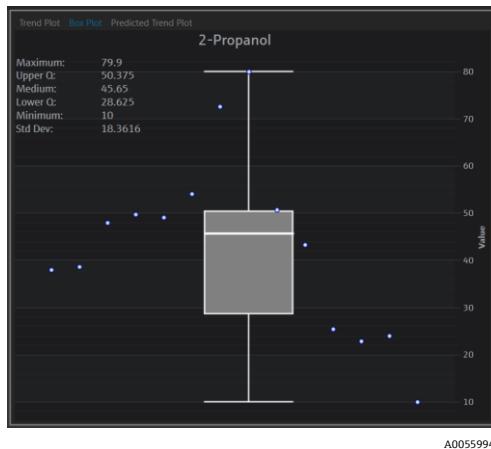


図 28. ボックスプロット

#### 4.4.1.5 データフィールドの予測トレンドプロット

Predicted Trend Plot (予測トレンドプロット) タブは、予測スペクトルデータ値を経時的に表示します。



図 29. データフィールドの予測トレンドプロット

#### 4.4.1.6 スペクトルグリッド

Data (データ) タブの下部にあるスペクトルグリッドには、表示フィールドのスペクトルとそれに関連するデータ値が表示されます。

All Spectra		Selected Spectra		Selected Data Values		Other Actions				
Select Fields	Exclude Unmatched	Included: 0 / 0	Exclude	Include	Remove	Mark as Reference	Exclude	Include	Import Data	Add Comment
<input checked="" type="checkbox"/>	Display	Mid	Sample #	Optic	Ethanol	Methanol	2-Propanol			Comments
<input checked="" type="checkbox"/>	785IoT_73126_bio_solv09_20210216-150051_6s 10c tr1	2/16/2021 3:00:19 PM	9	bIO-Optic	41.8	10.1	48			
<input checked="" type="checkbox"/>	785IoT_73126_bio_solv17_20210216-160317_6s 10c tr1	2/16/2021 4:02:45 PM	17	bIO-Optic	40.2	10	49.7			
<input checked="" type="checkbox"/>	785IoT_73126_bio_solv15_20210216-163258_6s 10c tr1	2/16/2021 4:32:26 PM	15	bIO-Optic	40.9	10	49			
<input checked="" type="checkbox"/>	785IoT_73126_bio_solv03_20210217-135024_3s 20c tr1	2/17/2021 1:49:51 PM	3	bIO-Optic	10	10	79.9			
<input checked="" type="checkbox"/>	785IoT_73126_bio_solv20_20210217-155841_6s 10c tr1	2/17/2021 3:58:09 PM	20	bIO-Optic	10	39.4	50.6			
<input checked="" type="checkbox"/>	785IoT_73126_bio_solv08_20210218-095727_6s 10c tr1	2/18/2021 9:56:53 AM	8	bIO-Optic	10	46.7	43.3			
<input checked="" type="checkbox"/>	785IoT_73126_bio_solv21_20210218-103109_10s 6c tr1	2/18/2021 10:30:37 AM	21	bIO-Optic	24.1	50.4	25.5			
<input checked="" type="checkbox"/>	785IoT_73126_bio_solv22_20210218-121058_12s 5c tr1	2/18/2021 12:10:26 PM	22	bIO-Optic	10	66	24			

図 30. スペクトルグリッド

スペクトルグリッドペインでは、スペクトルとフィールドを選択して含めることができます。スペクトルグリッドの機能を以下に示します。

スペクトルグリッドの項目	表示機能
All spectra (全スペクトル)	<ul style="list-style-type: none"> <li><b>Select Fields (フィールドを選択)</b> : グリッドに表示するフィールド : Name (名称) 、 Display name (表示名) 、 Start date time (開始日時) 、 End date time (終了日時) 、 Midpoint date time (中間点日時) 、 Error (エラー) を選択します。収集が中期間の場合、開始点と中間点の表示が役立ちます。</li> <li><b>Exclude Unmatched (一致しないものを除外)</b> : 選択したデータフィールドのデータ値が 1 つも存在しないスペクトルをすべて除外します。</li> <li><b>Exclude/Include (除外する/含める)</b> : すべてのスペクトルを除外または含めます。</li> </ul>
Selected spectra (スペクトルの選択)	<ul style="list-style-type: none"> <li><b>Exclude (除外する)</b> : スペクトルグリッドで選択されているスペクトルを除外します。</li> <li><b>Include (含める)</b> : スペクトルグリッドで選択されているスペクトルを含めます。</li> <li><b>Remove (削除)</b> : スペクトルグリッドで選択されているスペクトルを削除します。</li> <li><b>Mark as Reference (リファレンスとしてマーク)</b> : スペクトルグリッドで選択されている最初のスペクトルを基準スペクトルとしてマークします。ユーザーは、そのスペクトルの新しい表示名を入力する必要があります。</li> </ul>
Selected data values (データ値の選択)	<ul style="list-style-type: none"> <li><b>Exclude (除外する)</b> : 選択したデータ値を除外します。</li> <li><b>Include (含める)</b> : 選択したデータ値を含めます。</li> </ul>
Other Actions (その他のアクション)	<ul style="list-style-type: none"> <li><b>Import Data (データのインポート)</b> : データをインポートする Excel ファイルを選択します。 Import Data (データのインポート) ウィンドウが表示されます。</li> <li><b>Add Comment (コメントの追加)</b> : データセットのコメントを追加します。開始日付と終了日付を選択するプロンプトが表示されます。選択した範囲のすべてのスペクトルに対してコメントが追加されます。データセットのコメントは、コメントが追加されるデータセットに固有のものであり、他のデータセットには表示されません。</li> </ul>

### スペクトルグリッドまたはプロットからデータを除外する手順

グリッドとプロットからスペクトルを除外できるのは、たとえば、実験の一環としてレーザーがブロックされている場合や、使用できないデータが生成される場合などです。

- スペクトルプロットで、ジャンクデータのみを拡大して表示します。
- プロット内の 1 つのスペクトルラインにマウスを合わせ、クリックして選択します。  
そのスペクトルがスペクトルグリッドでも強調表示されます。
- Shift キーを使用して、選択したスペクトルの上にあるすべてのスペクトルを強調表示します。
- Selected Spectra (スペクトルの選択) ボックスの **Exclude (除外する)** をクリックします。
- Save Dataset (データセットを保存)** をクリックします。

必要に応じて、最初の操作で強調表示されていなかった他のスペクトルについても除外してください。スペクトルプロットを縮小表示すると、すべてのジャンクスペクトルが除外されていることがわかります。

### データのインポート手順

既存の Excel スプレッドシートからデータフィールドと値をインポートできます。

- スペクトルグリッドで **Import Data (データのインポート)** をクリックします。  
インポートするファイルを選択するウィンドウが表示されます。
- スプレッドシートに移動し、**Open (開く)** をクリックします。  
スプレッドシートに移動すると、Import Data (データのインポート) ウィンドウが表示されます。

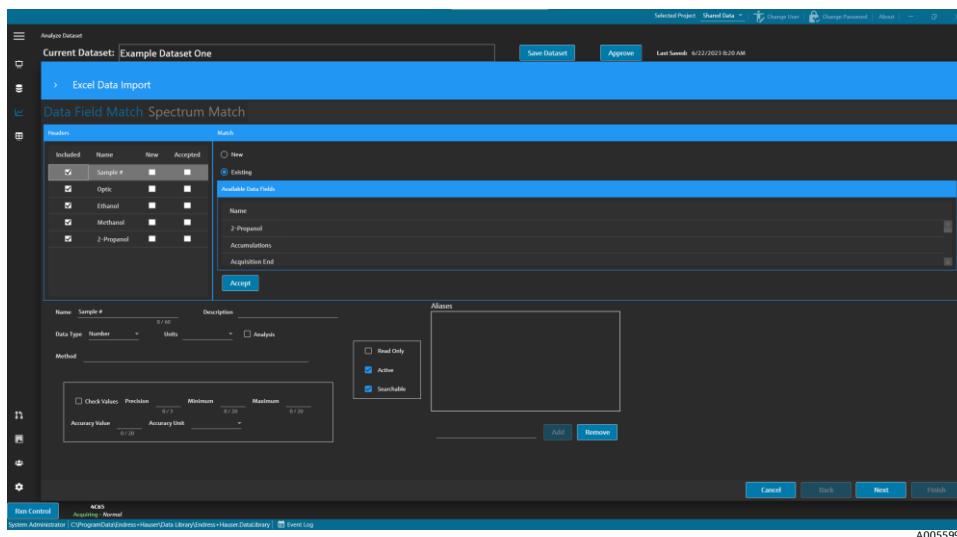


図 31. データのインポート、Data Field Match (データフィールドのマッチング)

### 3. Data Field Match (データフィールドのマッチング) タブで、以下を選択します。

- Included (含める)** : データフィールドとその値をインポートするかどうかを指定します。
- Match (マッチング) 、 New/Existing (新規/既存)** : 選択したフィールドを、新規または既存のどちらのフィールドとして扱うかを手動で選択します。Existing (既存) を選択した場合、それに適合するフィールドを選択できます。New (新規) を選択した場合、データフィールドエディタ (上記を参照) と同じ方法でフィールドを編集できます。
- Accepted (承認済み)** : データフィールドに「Accepted (承認済み)」のマークを付加すると、編集履歴を追跡できます。

4. データフィールドを定義します。説明、単位、別名、および下限値/上限値を追加します。データフィールドパラメータの詳細については、データフィールドパラメータ → が記載された表を参照してください。

5. **Next** をクリックします。

6. Spectrum Match (スペクトルのマッチング) タブで、以下を選択します。

- 上/下矢印** : これらの矢印を使用して、サンプルを上下に動かしてスペクトルに合わせることができます。
- Threshold (しきい値)** : スペクトルの時間と最も近いサンプルの時間の許容差 (単位 : Hours (時間) 、 Minutes (分) 、 Seconds (秒) )
- Apply Threshold (しきい値の適用)** : スペクトルにしきい値を適用します。
- Include Selected (選択項目を含める)** : 選択したデータ値を含めます。
- Exclude Selected (選択項目を除外する)** : 選択したデータ値を除外します。
- Show Only Matched (一致のみを表示)** : 値の一致するスペクトルのみを表示します。

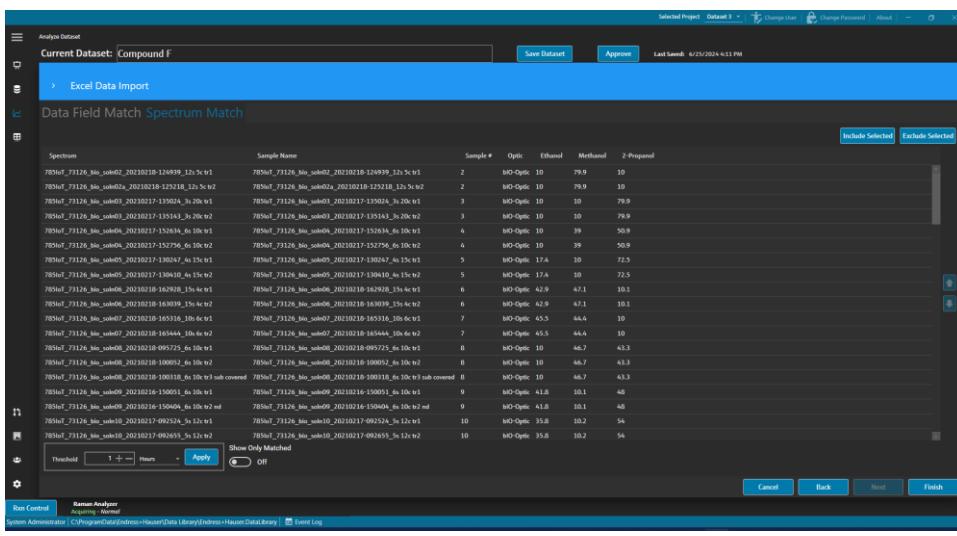


図 32. データのインポート、Spectrum Match (スペクトルのマッチング)

7. **Finish (完了)** をクリックします。続いて表示されるダイアログで **OK** をクリックします。
8. **Save Dataset (データセットを保存)** をクリックします。

#### 4.4.1.7 コメント

コメントタイルを使用すると、1つのスペクトルにコメントを追加できます。これはデータセット固有のコメントではなく、スペクトルを参照するすべてのデータセットで表示できます。

コメントは、データセットに対して追加することや、データセット内の一定期間に対して追加することもできます。これを行うには、スペクトルグリッドタイルの **Add Comment (コメントの追加)** ボタンを使用します。詳細については、スペクトルグリッドの変更→ を参照してください。

#### スペクトルにコメントを追加する手順

1. コメントタイルで **Add (追加)** をクリックします。  
Add Comment (コメントの追加) ダイアログが表示されます。
2. 必要なコメントを入力して **OK** をクリックします。  
コメントタイルとスペクトルグリッドに、選択したスペクトルのコメントが表示されます。

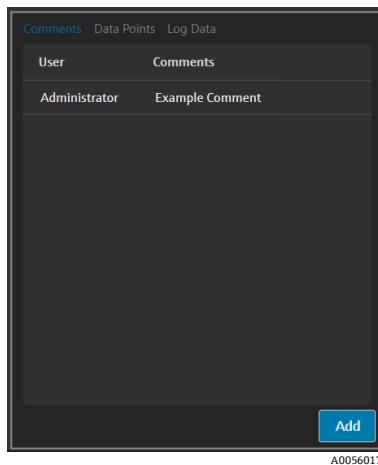


図 33. スペクトルのコメント

#### 4.4.1.8 データポイント

Data Points (データポイント) タブには、選択したスペクトルの X および Y データポイントのリストが表示されます。

Comments		Data Points	Log Data
X	Y		
100	251218.46875		↑
101	245982.421875		
102	240804.015625		
103	235678.640625		
104	230577.3125		
105	225458.1875		
106	220286.8125		
107	215050.125		
108	209759.90625		
109	204449.03125		
110	100163.703125		↓

図 34. データポイントリスト

#### 4.4.1.9 ログデータ

Log Data (ログデータ) タブは、選択したスペクトルに関するメタデータ (.spc 監査ログ) を表示する場合に使用します。Event Log (イベントログ) をクリックすると、選択したスペクトルのイベントログが表示されます。



図 35. イベントログ

#### 4.4.2 前処理の使用

Pretreat (前処理) タブは、データセットのスペクトルに前処理を適用する場合に使用します。前処理はいつでも削除、調整、再適用することができ、変更はスペクトルプロットとピーク/領域解析に反映されます。前処理は、テンプレート → 圖 の構成要素です。

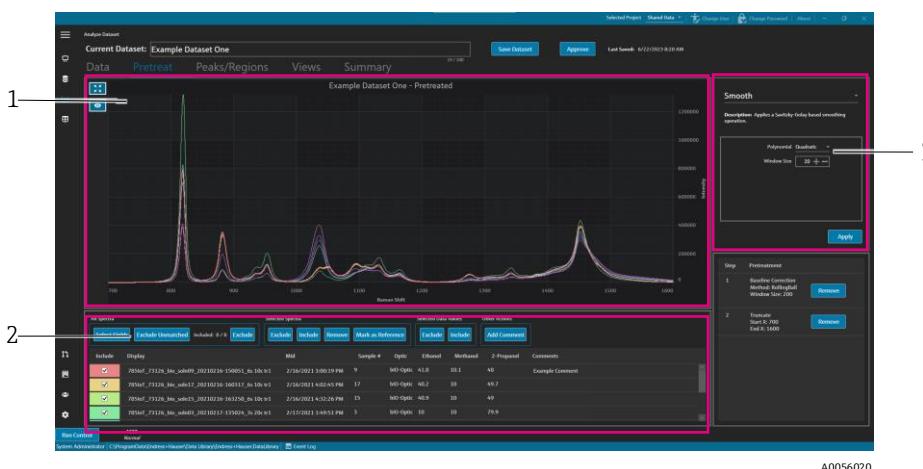


図 36. Pretreat (前処理) タブ

#	説明
1	スペクトルプロット：前処理が適用されるまでは未処理のスペクトルを表示し、前処理が適用されると前処理済みのスペクトルのみをここに表示します。
2	スペクトルグリッド：表示されたデータフィールドのスペクトルおよび関連付けられたデータ値を示します。スペクトルとデータ値の包含/除外、およびリファレンスデータのインポートを実行できます。ここで実行した変更操作 (スペクトルの包含/除外など) は、Data (データ) タブとワークフローの次のタブに反映されます。
3	Pretreat (前処理) ペイン：ここでは、スペクトルのすべての前処理を適用/削除できます。

前処理は、シーケンスの柔軟性を考慮して選択された順序で適用されます。データセットには、以下の前処理を適用できます。

- **Apply (適用)** をクリックして、選択した前処理を適用します。
- **Remove (削除)** をクリックして、関連付けられた前処理を削除します。

#### 4.4.2.1 切り取り

スペクトルの一部の領域を切り取り、スペクトルの特定の領域に焦点を合わせることができます。切り取りでは、スペクトルは選択した X 軸領域に基づいて切り取られます。

##### スペクトルを切り取る手順

1. Pretreat (前処理) タブで、プロットをクリックして領域に矩形を描画するか、または **Zoom (ズーム)**  をクリックして、焦点を合わせるスペクトルの領域を拡大表示します。
2. Pretreat (前処理) ペインで **Truncate (切り取り)** を選択します。
3. **Start X (始点 X)** と **End X (終点 X)** の値を入力して、切り取る領域を修正します。 **Apply (適用)** をクリックします。

**Truncate (切り取り)** 前処理が Pretreatment (前処理) ペインに表示されます。切り取りが適用されると、切り取りは前処理のリストでは使用できなくなります。

4. **Save Dataset (データセットを保存)** をクリックします。

切り取りの制限を変更する場合は、現在の切り取り前処理をすべて削除してから再適用してください。

#### 4.4.2.2 平滑化

平滑化前処理では、Savitzky-Golay 法に基づく平滑化処理を適用します。

##### スペクトルを平滑化する手順

1. Pretreat (前処理) ペインで **Smooth (平滑化)** を選択します。
2. 以下を選択します。
  - **Polynomial-Quadratic or Cubic (多項式-2 次または 3 次)** : 2 次多項式は、特定の平滑化窓枠内のデータがほぼ放物線状のトレンドを示している場合に適しています。3 次多項式は、ローカルデータポイントを当てはめる場合に使用できます。
  - **Window size (窓枠サイズ)** : 平滑化プロセスで考慮される隣接データポイントの数を指定します。信号のノイズレベルと必要な平滑化レベルに基づいて窓枠サイズを調整します。窓枠サイズを大きくすると平滑化効果は高まりますが、信号の遅延や歪みが大きくなる場合があります。一方、窓枠サイズを小さくすると細部を取り込むことができますが、ノイズの影響を受けやすくなる場合があります。
3. **Apply (適用)** をクリックします。

**Smooth (平滑化)** 前処理が Pretreatment (前処理) ペインに表示されます。平滑化が適用されると、平滑化は前処理のリストでは使用できなくなります。

4. **Save Dataset (データセットを保存)** をクリックします。

平滑化の設定を変更する場合は、現在の平滑化前処理をすべて削除してから再適用してください。

#### 4.4.2.3 ベースライン補正の適用

ベースライン補正前処理は、ローリングボール、ピアソン、または微分法を使用してスペクトルからバックグラウンドノイズを除去します。2 つの異なるベースライン補正を適用することはできません。

ベースライン補正のメソッド値は、スペクトルデータの特性とベースラインの歪みの性質に基づいて選択する必要があります。さまざまな値を試して、正確なピーク同定のための最適なバランスを見つけることをお勧めします。

ピアソンベースライン補正を選択する場合、ベースラインフィルタとフィットの値によってベースライン補正の強度や度合いが決まります。

- **Low Fit Values (0-2) (低フィット値 (0~2))** : これらの値では、軽度のベースライン補正が適用されます。これはベースラインが比較的安定しており、データ内の微細な特性を保持する場合に便利です。ただし、ベースラインの一部の歪みを適切に除去できない場合があり、ピーク同定の精度が低下する可能性があります。
- **Medium Fit Values (3-4) (中フィット値 (3~4))** : これらの値では、ベースラインの歪み除去とピークの完全性維持のバランスを取ることができます。データを過度に歪曲することなくピーク同定を改善できるため、多くのデータセットに有効な開始点となります。
- **High Fit Values (5) (高フィット値 (5))** : これらの値では、強力なベースライン補正が適用されるため、ベースラインのドリフトやノイズが大きいデータに適しています。ただし、強力な補正を行うと、より小さなピークの削除や歪みが生じ、これがピークの欠落や不正確な同定につながる可能性があります。

## ベースライン補正を適用する手順

1. Pretreat (前処理) ペインで **Baseline Correction (ベースライン補正)** を選択します。
2. **Method (メソッド)** および関連する設定を選択します。
  - **Derivative (微分)** : 各スペクトルに対して Savitzky-Golay 法の平滑化微分計算を行います。
    - **Derivative (微分)** : 1 次または 2 次
    - **Polynomial (多項式)** : 2 次または 3 次
  - **Window size (窓枠サイズ)** : ベースライン補正で考慮される隣接データポイントの数を指定します。
  - **Pearson (ピアソン)** : 4 次多項式の反復的な除去により、各スペクトルのベースラインを推定します。元のスペクトルから多項式フィットを減算することにより、ベースラインの歪みを除去します。
  - **Fit type (フィットタイプ)** : 多項式、ルジャンドル、またはエルミートのフィットタイプは、以下のように定義されます。
    - **Polynomial (多項式)** : 多項式関数をスペクトルデータに適合させてベースラインをモデル化します。
    - **Legendre (ルジャンドル)** : 直交多項式の 1 つであるルジャンドル多項式を使用して、ベースラインを適合させます。ルジャンドル多項式は特定の間隔における誤差を最小化できます。
    - **Hermite (エルミート)** : エルミート多項式を使用します。エルミート多項式はガウス分布を伴う重み関数によって定義される直交多項式です。エルミート多項式は、データがガウス分布に類似した分布を持つ場合に使用できます。
  - **Baseline filter (0 to 5) (ベースラインフィルタ (0~5))** : スペクトルデータに適用するベースライン補正の度合いを指定します。
  - **Fit (0 to 5) (フィット (0~5))** : スペクトルデータに適用するフィッティングプロセスの強度を指定します。
- **Rolling ball (ローリングボール法)** : スペクトルの下側に一定サイズの円を転がして、すべての接点からスムーズに取り除きます。
  - **Window size (窓枠サイズ)** : 平滑化プロセスで考慮される隣接データポイントの数を指定します。
3. **Apply (適用)** をクリックします。
 

Baseline Correction (ベースライン補正) 前処理が Pretreatment (前処理) タイルに表示されます。ベースライン補正が適用されると、ベースライン補正是前処理のリストでは使用できなくなります。
4. **Save Dataset (データセットを保存)** をクリックします。
 

ベースライン補正の設定を変更する場合は、現在のベースライン補正前処理をすべて削除してから再適用してください。

### 4.4.2.4 正規化

正規化前処理は、スペクトルを共通範囲にスケーリングします。スペクトルを二重正規化することはできません。

## スペクトルを正規化する手順

1. Pretreat (前処理) ペインで **Baseline Correction (ベースライン補正)** を選択します。
2. **Method (メソッド)** および関連する設定を選択します。
  - **SNV** : 各スペクトルは、その平均を減算して標準偏差で除算することにより正規化されます。
  - **Range (範囲)** : スペクトル内のすべての値が 0~1 の範囲になるように正規化します。
3. **Apply (適用)** をクリックします。
 

Normalize (正規化) 前処理が Pretreatment (前処理) タイルに表示されます。正規化が適用されると、正規化は前処理のリストでは使用できなくなります。
4. **Save Dataset (データセットを保存)** をクリックします。
 

正規化の設定を変更する場合は、現在の正規化前処理をすべて削除してから再適用してください。

#### 4.4.2.5 減算

減算前処理は、すべてのスペクトルから单一の基準スペクトルを減算します。

##### スペクトルを減算する手順

1. Pretreat (前処理) ペインで **Subtract** (減算) を選択します。
2. **Spectrum** (スペクトル) リストで、減算するスペクトルを選択します **Apply (適用)** をクリックします。 Subtract (減算) 前処理が Pretreatment (前処理) タイルに表示されます。 減算が適用されると、減算は前処理のリストでは使用できなくなります。
3. **Save Dataset (データセットを保存)** をクリックします。

減算の設定を変更する場合は、現在の減算前処理をすべて削除してから再適用してください。

#### 4.4.2.6 強度のフィルタリング

強度フィルタ前処理では、選択した Y 軸の最小範囲と最大範囲から外れているスペクトルを除外します。このフィルタは、たとえば、レーザーがブロックされている場合や、使用できないデータが一定期間生成される場合などに便利です。

##### 強度フィルタを適用する手順

1. Pretreat (前処理) ペインで **Intensity Filter** (強度フィルタ) を選択します。
2. **Minimum Y (最小範囲 Y)** および **Maximum Y (最大範囲 Y)** フィールドに最小強度範囲と最大強度範囲を入力します。 **Apply (適用)** をクリックします。 Intensity Filter (強度フィルタ) 前処理が Pretreatment (前処理) タイルに表示されます。 強度フィルタが適用されると、強度フィルタは前処理のリストでは使用できなくなります。
3. **Save Dataset (データセットを保存)** をクリックします。

強度フィルタの設定を変更する場合は、現在の強度フィルタ前処理をすべて削除してから再適用してください。

#### 4.4.3 ピークと領域

Peaks/Regions (ピーク/領域) タブを使用すると、データセット上の特定の X 軸範囲に対する計算を追加できます。 ピークと領域はテンプレートの構成要素です。 詳細については、テンプレートの作成 →  を参照してください。

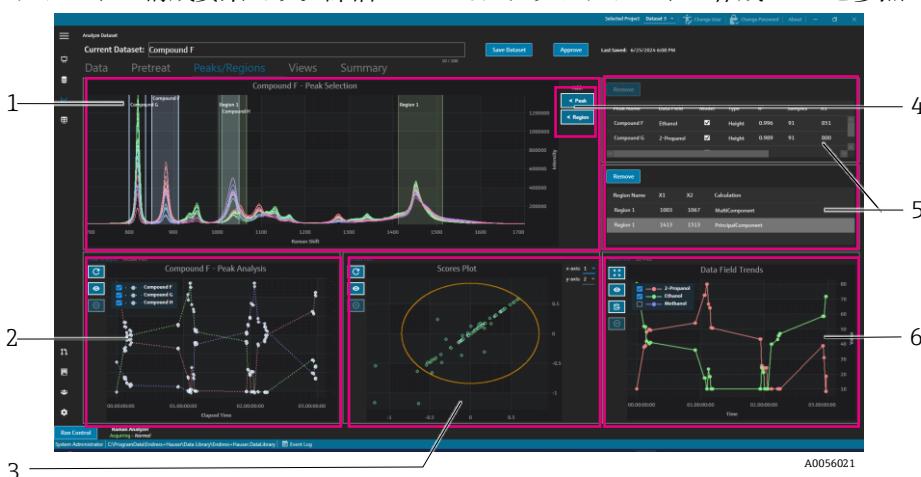


図 37. Peaks/Regions (ピーク/領域) タブ

#	説明
1	スペクトルプロット：前処理済みのスペクトルを表示します。スペクトルプロットタイルは、ピークと領域の位置を選択するために使用します。このタイルでは、ボックスを描画するか、またはダブルクリックして拡大/縮小表示のみを行うことができます。
2	ピークプロット：ピーク解析結果を表示します。このタイルでは、Peak Analysis (ピーク解析) (トレンド) と Model Plot (モデルプロット) (回帰結果) の間でタブ移動できます。
3	領域プロット：領域解析が適用された場合に多変量曲線分解 (MCR) または主成分分析 (PCA) の結果を表示します。
4	◀Peak (ピーク) 、◀Region (領域) : 新しいピーク/領域を追加して定義するためのダイアログが表示されます。
5	ピーク/領域リスト：定義されているピークと領域を表示します。このタイルでは、ピークと領域を選択して編集できます。

#	説明
6	<b>Data Field Trend (データフィールドトレンド) プロット</b> : Data Field Trend (データフィールドトレンド) プロットでは、ピークと領域の結果を測定データと比較できます。 <b>3D プロット</b> : スペクトルプロットを 3D で表示します。

#### 4.4.3.1 ピークと領域の追加

ピーク/領域の選択ウィンドウには、データセット内のピークと領域が視覚的に表示されます。

##### ピークを追加する手順

- Peaks/Regions (ピーク/領域) タブで、**Peak (ピーク)** を選択します。

Add Peak (ピークの追加) ポップアップが表示されます。

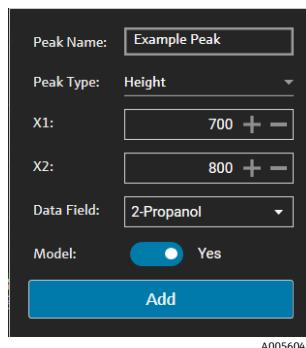


図 38. Add Peak (ピークの追加) ポップアップ

- Peak Name (ピーク名) を入力します。これがピークの表示名になります。
- Peak Type (ピークタイプ) (Height (高さ)、Area (面積)、または Center (中心)) を選択します。Center (中心) のピークは、化学的または物理的な変化によってピークが拡大/縮小するのではなく、ピークがシフトする場合に便利です。
- X1 と X2 には、ピークの範囲を入力します。
- (任意) ピークにマッピングする Data Field (データフィールド) を選択します。このデータフィールドはモーデリング計算に使用されます。
- (任意) エクスポート時にピークのモデルを作成する場合は、Model (モデル) をオンに切り替えます。
- Add (追加) をクリックして新規ピークを作成します。
- Save Dataset (データセットを保存) をクリックします。

ピークが追加されると、スペクトルプロットに強調表示された領域が表示されます。スペクトルプロット上のピークウィンドウの移動やコーナーのドラッグにより、ピークを移動/拡大/縮小できます。

ピークを作成すると、ピークプロット領域にピーク解析トレンドが表示されます。未使用のウィンドウを移動してトレンドプロットのサイズを変更することで、トレンドの表示を拡大できます。



図 39. ピークおよびピーク解析を示すスペクトルプロット

## 領域を追加する手順

- Peaks/Regions (ピーク/領域) タブで、◀ Region (領域) を選択します。  
Add Region (領域の追加) ポップアップが表示されます。

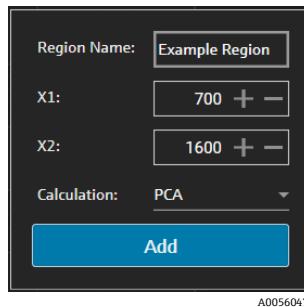


図 40. Add Region (領域の追加) ポップアップ

- 以下の情報を入力します。
  - Region Name (領域名) フィールドは領域の表示名です。
  - X1 および X2 フィールドは領域の範囲です。
  - Calculation (計算) フィールドには、領域に対して実行される計算のタイプ (PCA または MCR) を指定します。
- Add (追加) をクリックして新規領域を作成します。

### 4.4.3.2 ピークと領域の変更

#### ピーク解析に追加のスペクトルを含める手順

- Data (データ) タブまたは Pretreat (前処理) タブを選択します。
- スペクトルグリッドで、含めるスペクトルまでスクロールします。  
Shift キーを押しながら最後のスペクトルまでスクロールすると、範囲内のすべてのスペクトルを含めることができます。
- Selected Spectra (スペクトルの選択) ボックス内の Include (含める) をクリックします。
- Peaks/Regions (ピーク/領域) タブを選択し、Refresh Plot (プロットの再描画)  をクリックします。  
ピークトレンドとスペクトルプロットの両方で、含まれるスペクトルが増加します。
- Save Dataset (データセットを保存) をクリックします。

#### ピーク解析からスペクトルを除外する手順

トレンドプロットからデータを直接除外することができます。これは、明らかな異常値を除外する場合や、実験に変更がない場合に便利です。

- Peak Analysis (ピーク解析) プロット内の領域をクリックしてドラッグし、除外するデータポイントを選択します。  
ポイントが太字で表示され、除外ボタンが有効になります。
- Exclude Points (ポイントを除外)  をクリックします。
- OKをクリックし、Excluded Spectra (除外されたスペクトル) のリストを確認します。ポイントが複数のピークトレンドで選択された場合、スペクトル名が複数回表示されることがあります。
- Refresh Plot (プロットの再描画)  をクリックします。  
Peak Analysis (ピーク解析) では、除外されていないデータのみが表示されます。
- Save Dataset (データセットを保存) をクリックします。

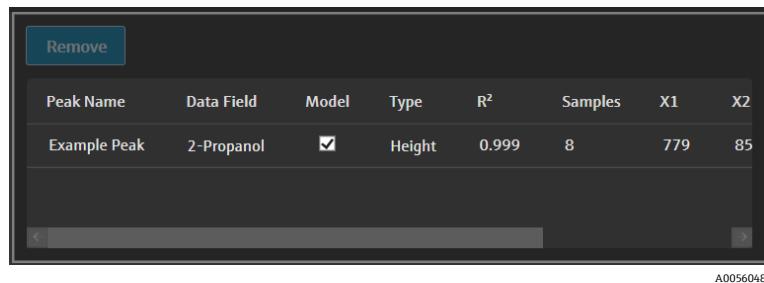
## ピーク/領域を移動およびサイズ変更する手順

ピークと領域は、グリップハンドルをクリックしてドラッグすることで移動およびサイズ変更できます。ピーク/領域のサイズが変更された場合、結果が再解析されます。

## ピーク/領域を変更または削除する手順

ピーク/領域ペインの右側に、ピークと領域が一覧表示されます。これらのリストでは、ピーク/領域のプロパティを表示して変更できます。ピークまたは領域を選択し、**Remove (削除)** をクリックして、選択したピークまたは領域を削除します。

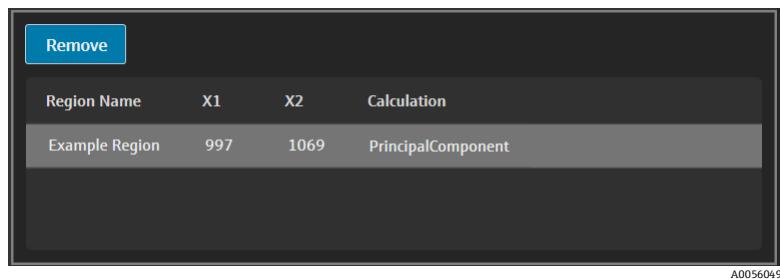
ピークまたは領域を削除した場合、そのピークまたは領域から生成されたトレンドを使用しているビューをすべて削除するか、または新しいピークまたは領域に更新する必要があります。削除されたピークまたは領域に基づいたトレンドビューを更新または削除しないと、関連するデータセットを解析できなくなります。自分のダッシュボードにビューを保存しているユーザーは、ピークまたは領域が削除され、関連するビューが更新または削除されていない場合、ログインできなくなります。



Peak Name	Data Field	Model	Type	R <sup>2</sup>	Samples	X1	X2
Example Peak	2-Propanol	<input checked="" type="checkbox"/>	Height	0.999	8	779	85

A0056048

図 41. ピークリスト



Region Name	X1	X2	Calculation
Example Region	997	1069	PrincipalComponent

A0056049

図 42. 領域リスト

### 4.4.3.3 ピーク解析の表示

Peak Analysis (ピーク解析) タブには、追加されたすべてのピークのトレンドプロットが表示されます。ピークはそれぞれ固有のY軸を使用して追加されます。Peak Analysis (ピーク解析) タブでは、以下の操作を実行できます。

- **Exclude Points (ポイントを除外)**  をクリックして、特定のデータポイントを削除します。
- **Refresh Plot (プロットの再描画)**  をクリックして、データポイント変更後にグラフを再描画します。



図 43. Peak Analysis (ピーク解析) タブ

#### 4.4.3.4 モデルプロットの表示

Model Plot (モデルプロット) タブには、選択したピークのモデルプロットが表示されます。Model Plot (モデルプロット) タブでは、以下の操作を実行できます。

- Exclude Points (ポイントを除外)  をクリックして、特定のデータポイントを削除します。
- Refresh Plot (プロットの再描画)  をクリックして、データポイント変更後にグラフを再描画します。スペクトルまたはデータ値を Data (データ) タブから除外した場合、Refresh Plot (プロットの再描画) を使用してモデルプロットを再計算します。

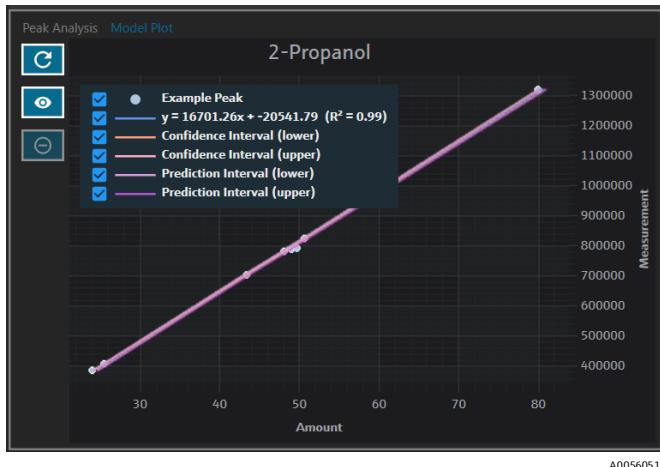


図 44. Model Plot (モデルプロット) タブ

#### 4.4.4 ダッシュボードビューの作成：グリッド、トレンド、スペクトル、3D プロット

Views (ビュー) タブは、各ユースケースに最も関連性の高いプロットを定義するために使用します。単純なデータセットの場合でも、プロットの表示には多数のオプションがあります。各ビューは、ビューの収集の一環としてダッシュボードに追加できます。ユーザーは、1~4 つのプロットを象限に表示する最適なダッシュボードタブを作成できます。

すべてのデータセットは、2 つの事前定義済みビュー（スペクトルプロットとスペクトルグリッド）を使用して作成されます。カスタムビューは、Views (ビュー) タブで追加/変更/削除します。選択したビューのプレビューが Views (ビュー) タブの右側に表示されます。

以下の 4 つのビュータイプがあります。

- トレンドプロット
- スペクトルプロット
- スペクトルグリッド
- 3D プロット

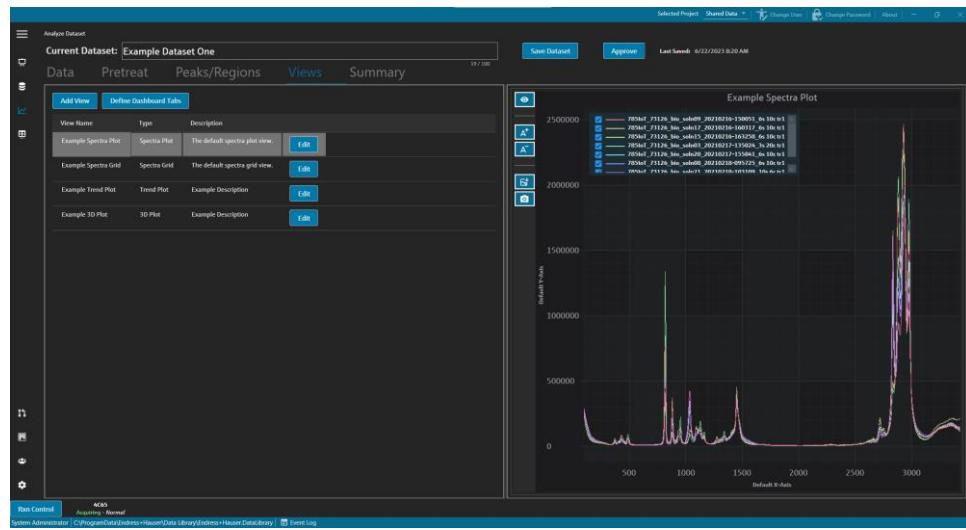


図 45. Views (ビュー) タブ

Views (ビュー) タブの **Define Dashboard Tabs** (ダッシュボードタブの定義) をクリックすると、Define Dashboard Tabs (ダッシュボードタブの定義) ウィンドウが開きます。ダッシュボードの定義→図を参照してください。

ビューを削除するには、ビューを選択して **Remove** (削除) をクリックします。あるいは、ビューを選択してキーボードの delete キーを押すことによっても、ビューを削除できます。

#### 4.4.4.1 スペクトルプロットビューの作成または変更

スペクトルプロットビューを使用すると、ズーム可能なプロットにデータセットのスペクトルを表示できます。スペクトルプロットは、すべてのデータセットに対して生成される初期設定のビューです。

##### スペクトルプロットビューを変更する手順

- Views (ビュー) タブで **Add View** (ビューの追加) をクリックします。  
View Definition (ビューの定義) ダイアログが表示されます。
- 以下の情報を入力します。
  - Name (名称)** : ビューの表示名
  - Description (説明)** : ビューの簡潔な説明
  - View Type (ビュータイプ)** : Spectra Plot (スペクトルプロット) を選択します。
- 以下を選択します。
  - Use Pretreated data (前処理済みデータを使用)** : 前処理済みのデータをビューに表示する場合に選択します。オフにした場合、生データ (前処理されていないデータ) がビューに表示されます。
  - Show latest spectrum only (最新スペクトルのみを表示)** : オンにすると、終了日時が最も新しいスペクトルのみが表示されます。オフにすると、すべてのスペクトルが表示されます。
- Close (閉じる)** をクリックします。
- Save Dataset** (データセットを保存) をクリックします。

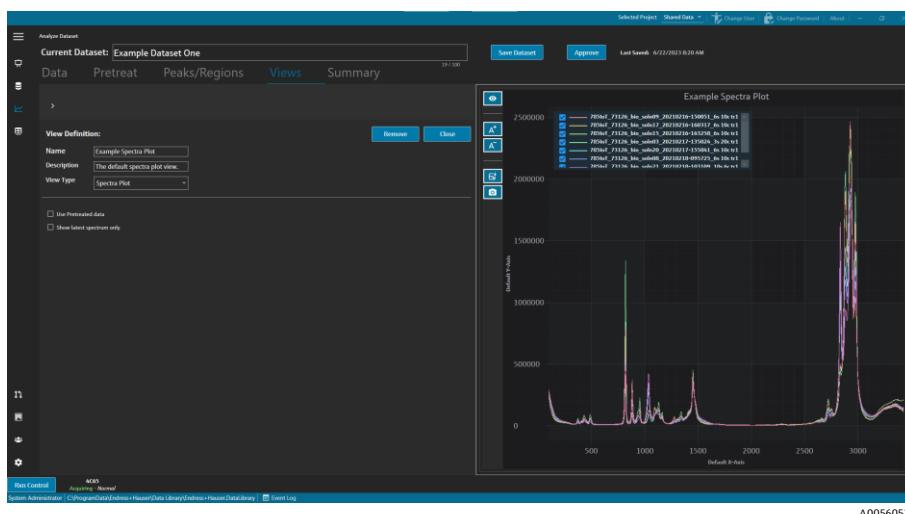


図 46. スペクトルプロットビュー

#### 4.4.4.2 スペクトルグリッドの変更

スペクトルグリッドビューを使用すると、個々のスペクトルをグリッド形式で表示できます。スペクトルグリッドは、すべてのデータセットに対して生成される初期設定のビューです。

##### スペクトルグリッドビューを変更する手順

- Views (ビュー) タブで **Add View** (ビューの追加) をクリックします。  
View Definition (ビューの定義) ダイアログが表示されます。
- スペクトルグリッドを選択して **Edit** (編集) をクリックします。
- 以下の情報を入力します。
  - Name (名称)** : ビューの表示名
  - Description (説明)** : ビューの簡潔な説明
  - View Type (ビュータイプ)** : Spectra Grid (スペクトルグリッド) を選択します。

4. **Close (閉じる)** をクリックします。
5. **Save Dataset (データセットを保存)** をクリックします。

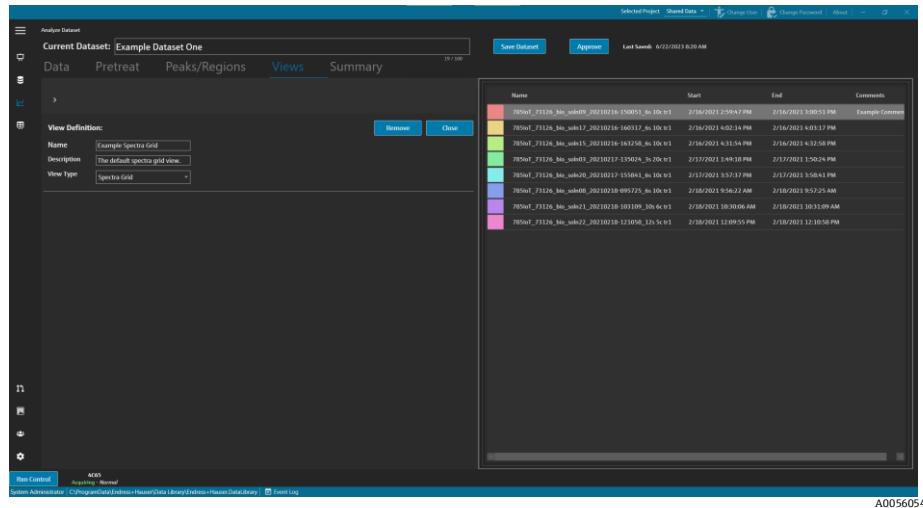


図 47. スペクトルグリッドビュー

#### 4.4.4.3 トレンドプロットビューの作成または変更

トレンドプロットビューを使用すると、データセットのトレンドを表示できます。トレンドプロットビューでは、X 軸はスペクトルの相対的な収集時間を表します。Y 軸は、データ値、予測データ値、またはピーク指標を表します。

ビューに含めるデータフィールドとピークを選択できます。ピークで使用されるデータフィールドに対して **Model (モデル)** が選択されている場合、予測値がビューに表示されます。

##### トレンドプロットビューを作成および変更する手順

1. **Views (ビュー) タブ**で **Add View (ビューの追加)** をクリックします。  
View Definition (ビューの定義) ダイアログが表示されます。
2. 以下の情報を入力します。
  - **Name (名称)** : ビューの表示名
  - **Description (説明)** : ビューの簡潔な説明
  - **View Type (ビュータイプ)** : ビューのタイプ **Trend Plot (トレンドプロット)** を選択します。
3. **Available data fields (使用可能なデータフィールド)** で、プロットするデータフィールドを選択します。**Include (含める)** ▶ をクリックします。
4. **Available peaks (使用可能なピーク)** で、プロットするピークを選択します。**Include (含める)** ▶ をクリックします。
5. **Close (閉じる)** をクリックします。
6. **Save Dataset (データセットを保存)** をクリックします。

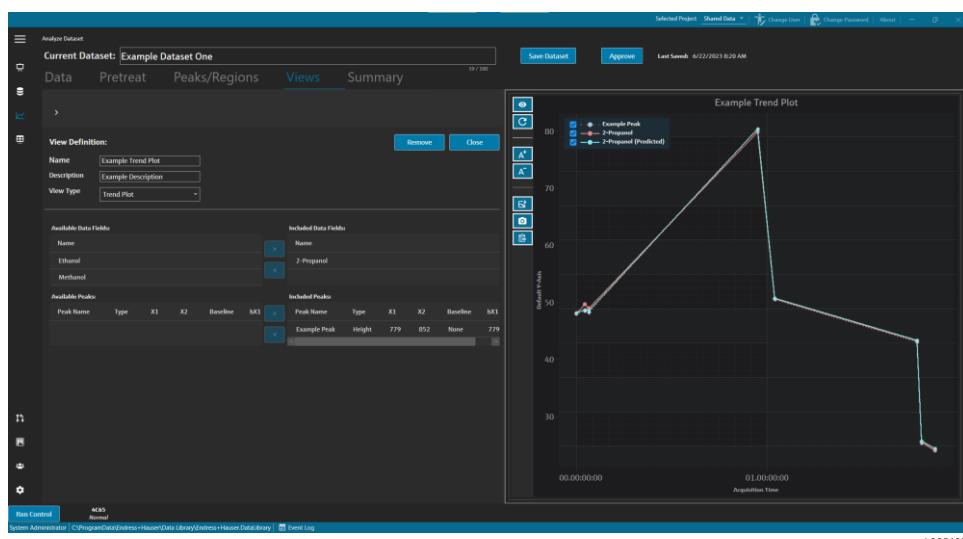


図 48. トレンドプロットビュー

#### 4.4.4.4 3D プロットビューの作成または変更

3D プロットビューは、X、Y、Z 軸で表されるグラフにスペクトルを表示します。このグラフから、時間の経過や変数の追加/削除によるスペクトルの変化（差）に関する追加情報を取得できます。

##### 3D プロットビューを変更する手順

- Views (ビュー) タブで **Add View (ビューの追加)** をクリックします。  
View Definition (ビューの定義) ダイアログが表示されます。
- 以下の情報を入力します。
  - Name (名称)** : ビューの表示名
  - Description (説明)** : ビューの簡潔な説明
  - View Type (ビュータイプ)** : 3D Plot (3D プロット) を選択します。
- プロットを調整して必要なビューを設定します。
  - Draw Contours (等高線を描画)** : 波長に沿って等高線を描画し、スペクトルの差を強調表示します。
  - Show Spectrum Colors (スペクトルの色を表示)** : スペクトルの色のオン/オフを切り替えて、スペクトルの経時的な変化を強調表示します。
  - Change angle of x, y, and z axes (X、Y、Z 軸の角度を変更)** : プロットをクリックして目的の位置にドラッグすることで視野角を調整できます。
  - Zoom in or out (ズームイン/アウト)** : マウスホイールでプロットの表示を拡大/縮小します。
- Close (閉じる)** をクリックします。
- Save Dataset (データセットを保存)** をクリックします。

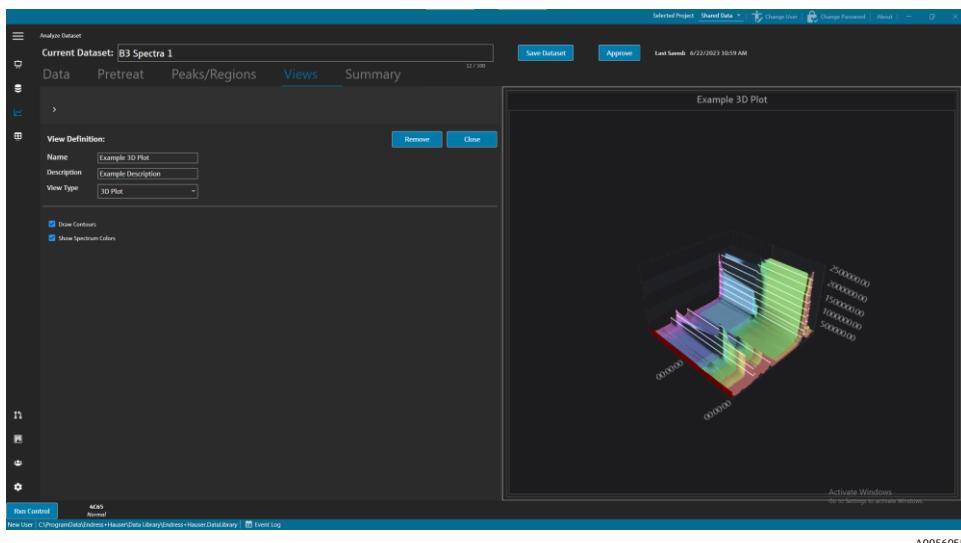


図 49. 3D プロットビュー

#### 4.4.4.5 一時的な注釈の追加

Views (ビュー) タブでは、一時的な注釈（強調表示された領域、ラベル、線、矢印など）を作成できます。作成した注釈はビューとともに保存して、後から参照や共有のために利用できます。

Views (ビュー) タブでは、以下の操作を実行できます。

ナビゲーション項目	ナビゲーション
 A0056085	<b>Add Temporary Annotation (一時的な注釈を追加)</b> : ビューに一時的な注釈を追加します。
 A0056086	<b>Save Image File (画像ファイルを保存)</b> : 注釈付きのビューを保存します。
 A0056087	<b>Copy Image to Clipboard (画像をクリップボードにコピー)</b> : 現在の注釈付きビューをクリップボードにコピーします。
 A0055992	<b>Copy Plot Data to Clipboard (プロットデータをクリップボードにコピー)</b> : 現在のトレンドプロットデータをクリップボードにコピーします。
 A0055993	<b>Remove Temporary Annotation (一時的な注釈を削除)</b> : ビューから一時的な注釈を削除します。

#### 一時的な注釈の作成手順

- Views (ビュー) タブで、注釈を付けるビューを選択します。
- Add Temporary Annotation (一時的な注釈を追加)**  をクリックします。
- Annotation type (注釈タイプ)** を以下から選択します。
  - **Line (線)** : ビューに線を配置します。
  - **Line arrow (矢印線)** : ビューに矢印線を配置します。
  - **Text (テキスト)** : ビューにテキストを配置します。
  - **Box (ボックス)** : ビューに強調表示されたボックスを配置します。
  - **Horizontal line (水平線)** : ビューに水平線を配置します。
  - **Vertical line (垂直線)** : ビューに垂直線を配置します。
  - **Axis Marker (軸マーカー)** : ビューに軸マーカーを配置します。
- Add Temporary Annotation (一時的な注釈を追加)** をクリックし、マーカーを配置するビューをクリックします。
- 以下のいずれかの操作を実行してビューを保存します。
  - **Save Image File (画像ファイルを保存)**  をクリックして、注釈付きのビューを保存します。
  - **Copy Image to Clipboard (画像をクリップボードにコピー)**  をクリックします。
  - **Copy Plot Data to Clipboard (プロットデータをクリップボードにコピー)**  をクリックします。
- Save Dataset (データセットを保存)** をクリックします。

#### 4.4.4.6 ダッシュボードの定義

Views (ビュー) タブでは、ダッシュボードを定義して保存できます。これを行うには、まず前述のセクションに従ってビューを作成する必要があります。初期設定では、Views (ビュー) タブには、データセットごとにスペクトルプロットビューとスペクトルグリッドビューが含まれています。

##### ダッシュボードを定義する手順

- Views (ビュー) タブで **Define Dashboard Tabs (ダッシュボードタブの定義)** をクリックします。  
現在のデータセットの初期設定タブが表示され、スペクトルプロットとスペクトルグリッドが表示されます。
- Add New Tab (タブの新規追加)** をクリックします。  
Add New Tab (タブの新規追加) ポップアップが表示されます。
- 表示するビューの数を選択します。
  - 1-View Tab (1 x ビュータブ)
  - 2-View Tab (2 x ビュータブ)
  - 3-View Tab (3 x ビュータブ)
  - 4-View Tab (4 x ビュータブ)
- 新しいダッシュボードが表示されます。

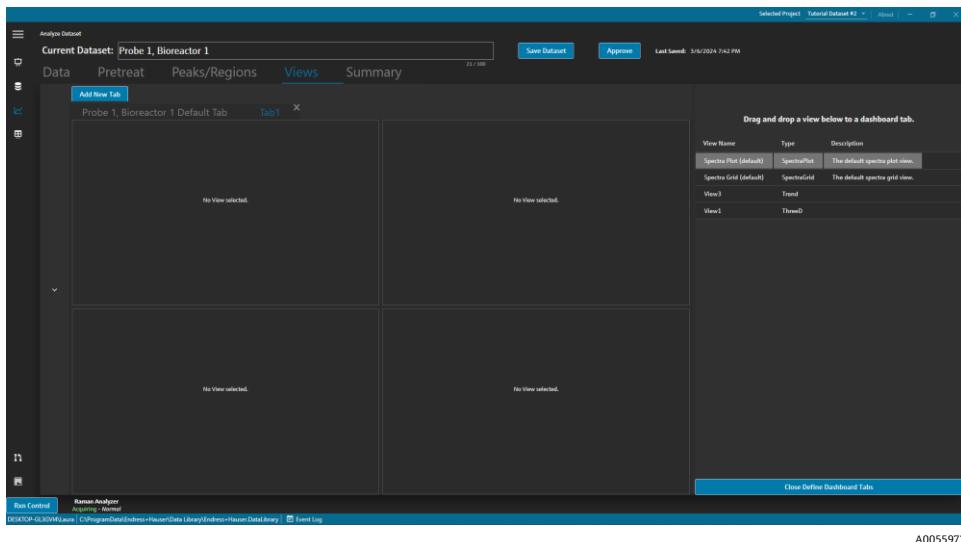


図 50. 新規ダッシュボードの定義

- 右側のリストから必要なビューをダッシュボードの目的の領域にドラッグアンドドロップします。

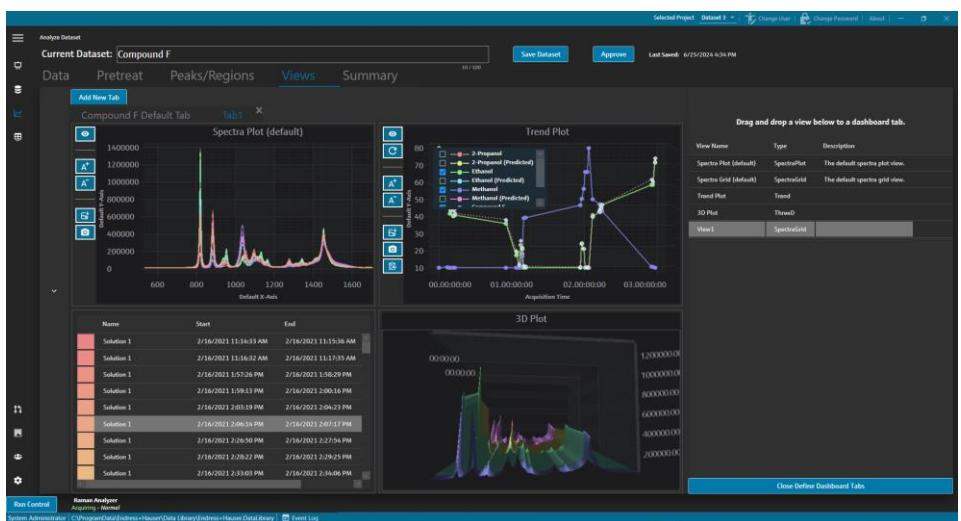


図 51. 新規ダッシュボード上の選択されたビュー

5. 必要に応じて、タブ名をダブルクリックしてダッシュボードの名前を変更します。
6. **Save Dataset (データセットを保存)** をクリックします。
7. **Close Define Dashboard Tabs (ダッシュボードタブ定義の終了)** をクリックします。

#### 4.4.5 サマリー

Summary (サマリー) タブでは、データセットが集約され、解析が適用されます。また、Summary (サマリー) タブでは、テンプレートの保存、Raman data library モデルファイルのエクスポート、外部モデリング用のデータセットのエクスポートも行うことができます。

Summary (サマリー) タブでは、以下の操作を実行できます。

- データセットに関する**概要情報を表示**します。概要情報は、データセットのステータス、承認状態、含まれるスペクトルの総数、および適用可能なデータフィールドを示します。前処理、ピーク、領域、プロットのスナップショットも表示されます。
- **データセットをエクスポート**します。Export (エクスポート) をクリックして、現在のデータセットをエクスポートします。詳細については、データ、データセット、モデルのエクスポート→図を参照してください。
- **ダッシュボードタブを起動**します。Launch Dashboard (ダッシュボードの起動) をクリックして、データセットのダッシュボードのコピーをダッシュボードウィンドウに追加します。ダッシュボードは Views (ビュー) タブで定義します。詳細については、ダッシュボードビューの作成: グリッド、トレンド、スペクトル、3D プロット→図を参照してください。
- データセットから**テンプレートを作成**します。詳細については、テンプレートの作成→図を参照してください。
- データセットに関する**イベントを表示**します。Dataset Event Log (データセットイベントログ) をクリックして、現在のデータセットのイベントログを表示します。

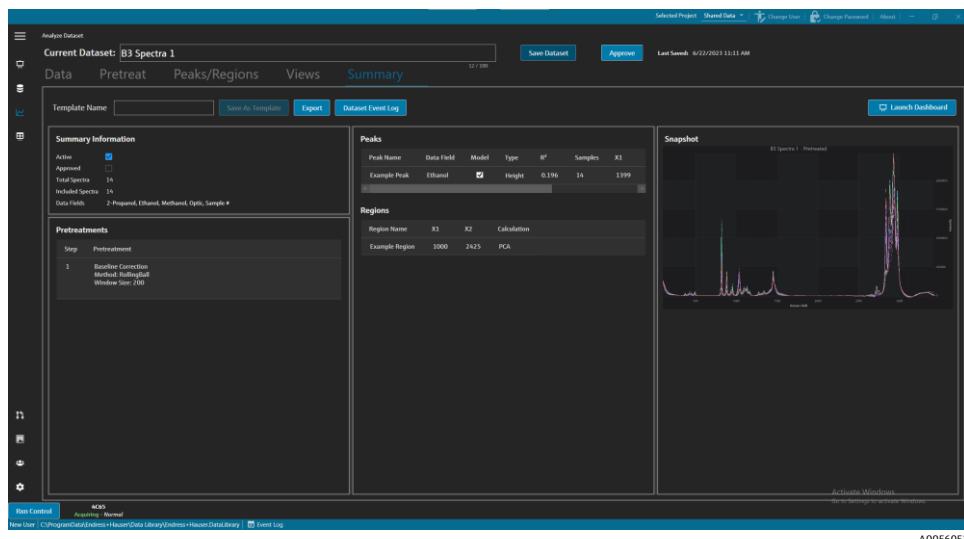


図 52. Summary (サマリー) タブ

##### 4.4.5.1 テンプレートの作成

データセットの構成要素を他のデータセットで再利用できる場合は、テンプレートを利用してデータセットの作成を簡素化できます。テンプレートに保存されたすべての前処理、解析、ビューの設定を新しいデータセットに適用することができます。テンプレートには、以下の要素が含まれます。

- 表示されるデータフィールド
- 前処理
- ピーク
- 領域
- ビュー
- ダッシュボードタブ

テンプレートにはスペクトルデータは含まれません。

保存したテンプレートは、新しいデータセットの作成時に Create Dataset (データセットの作成) ウィンドウで選択でき、また、Rxn Control (Rxn の管理) ウィンドウでも選択できます。データセットの作成時にテンプレートを選択すると、テンプレートのすべての構成要素が新しいデータセットに追加されます。

## 現在のデータセットからテンプレートを作成する手順

1. **Summary (サマリー)** タブを選択します。
2. **Template Name (テンプレート名)** フィールドに名前を入力します
3. **Save As Template (テンプレートとして保存)** をクリックします。
4. **OK** をクリックします。

### 4.4.5.2 テンプレートの適用

新しいデータセットを作成する場合、テンプレートを適用できます。

## テンプレートを適用する手順

1. Datasets (データセット)  ウィンドウで **Create New Dataset (新規データセットを作成)** をクリックします。
2. データセットに名前を付け、対応するスペクトルをインポートして、**Include (含める) >**をクリックします。
3. **Template (テンプレート)** フィールドで、リストからテンプレートを選択します。
4. **Create (作成)** をクリックします。保存されていないデータセットを保存するように求めるプロンプトが表示されたら、OK をクリックします。

処理が完了すると、Raman data library はワークフローに沿って **Analyze Dataset (データセットの解析)** ウィンドウに進みます。

### 4.4.5.3 データ、データセット、モデルのエクスポート

**Export (エクスポート)** ペインは、Raman data library のデータセットを外部/内部のソフトウェアシステムにエクスポートする場合に使用します。Raman data library のエクスポートファイル (.dlexport) を使用して、Raman data library の 1 つのインスタンスから別のインスタンスにデータセットを移動できます。外部のソフトウェアシステムにエクスポートする場合は、データセットを承認する必要があります。

## データ、データセット、モデルをエクスポートする手順

1. **Datasets (データセット)** ウィンドウ  で **Export (エクスポート)** をクリックします。
- Export (エクスポート) メニューが表示されます。

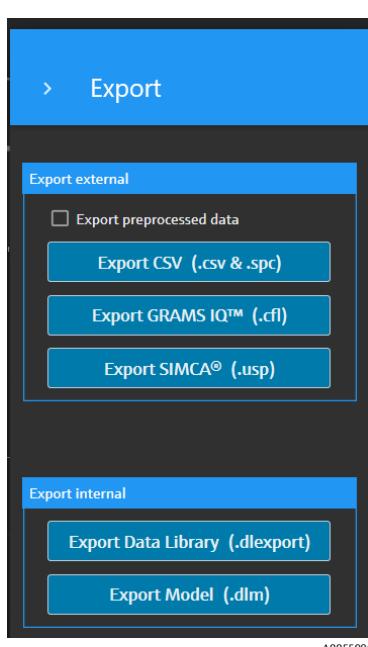


図 53. Export (エクスポート) メニュー

2. 以下の項目を選択します。

- **Export preprocessed data (前処理済みデータをエクスポート)** : これをオンにすると、前処理を適用せずにデータがエクスポートされます。
- **Export CSV (CSV をエクスポート)** : 含まれるすべてのデータフィールドのスペクトル名とデータ値を収めたカンマ区切り値ファイル (.csv) として、データセットをエクスポートします。また、含まれるスペクトルを SPC (.spc) 形式で収めた圧縮フォルダ (.zip) もエクスポートします。
- **Export GRAMS IQ™ (GRAMS IQ™ をエクスポート)** : データセットを GRAMS IQ™ (.cfl) ファイルとしてエクスポートします。また、含まれるスペクトルを SPC (.spc) 形式でエクスポートします。 GRAMS IQ™ (.cfl) ファイルとしてエクスポートするには、Raman data library と有効な GRAMS IQ™ が同じコンピュータにインストールされている必要があります。
- **Export SIMCA® (SIMCA® をエクスポート)** : データセットを SIMCA® (.usp) ファイルとしてエクスポートします。 SIMCA® (.usp) ファイルとしてエクスポートするには、Raman data library と有効な SIMCA® が同じコンピュータにインストールされている必要があります。
- **Export Data Library (データライブラリをエクスポート)** : データセットを Raman data library (.dlexport) ファイルとしてエクスポートします。このファイルタイプは、Datasets (データセット) ウィンドウでインポートできます。
- **Export Model (モデルをエクスポート)** : データセットの前処理とピークを使用して作成されたモデルファイル (.dlm) をエクスポートします。このファイルは、Raman data library の Rxn Control (Rxn の管理) ウィンドウを使用して Raman RunTime にエクスポートできます。モデルファイルを使用すると、RunTime でコンポーネントプロセス値を生成できます。

3. フォルダの場所に移動し、データファイルに名前を付けます。

4. 現在のデータセットに対して **Mark Inactive (無効にする)** または **Keep Active (有効のままにする)** を選択します。

## 4.5 Raman Rxn アナライザの管理

Rxn Control (Rxn の管理) は、ラマンスペクトルの収集とモデリングに関して Raman RunTime Rxn アナライザを管理するために使用し、Raman RunTime と類似したユーザーインターフェースで構成されています。ラマン分光計ウィンドウにアクセスするには、OPC スペクトルソースの接続を確立する必要があります。手順や方法については、*OPC スペクトルソースの追加* を参照してください。

### 注意

Raman Rxn アナライザと Raman RunTime ソフトウェアの安全な操作については、**Raman RunTime 取扱説明書 (BA02180C)** を参照してください。

- ▶ Raman data library の Rxn Control (Rxn の管理) を使用する前に、お使いの Raman RunTime のバージョンに対応した *Raman RunTime* 取扱説明書を参照してください。



図 54. Rxn Control (Rxn の管理) ボタン

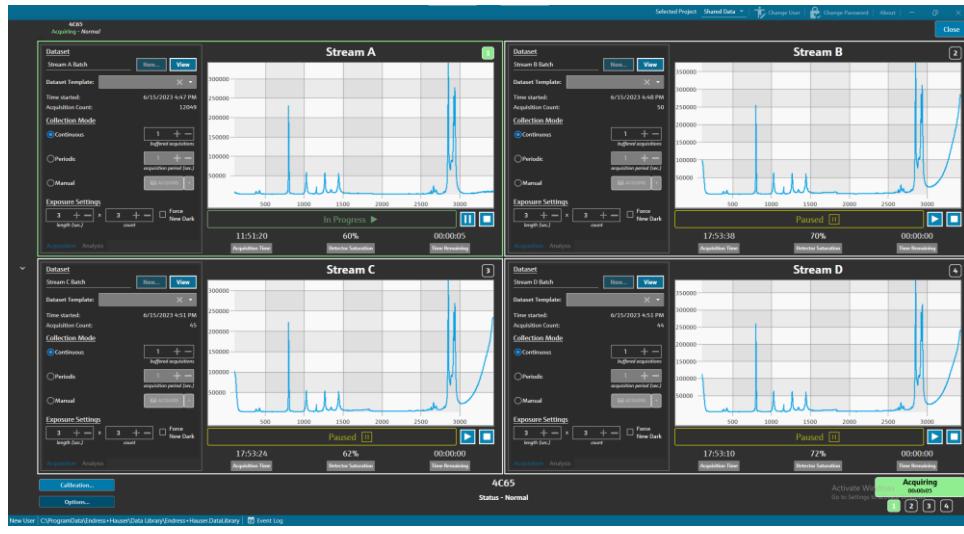


図 55. ラマン分光計ウィンドウ

**Rxn Control (Rxn の管理)** ボタンは、Raman Rxn アナライザが Raman data library に接続されている場合にのみ表示されます。アナライザの接続方法については、*OPC スペクトルソースの追加*→図を参照してください。

## 4.5.1 アナライザオプション

**Analyzer Options (アナライザオプション)** メニューにアクセスするには、ラマン分光計ウィンドウの下部にある **Options (オプション)** をクリックします。

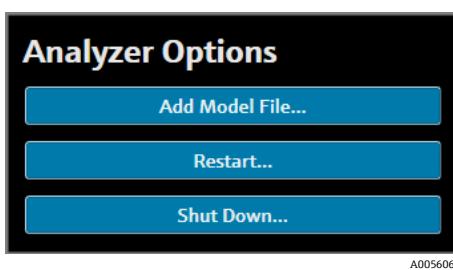


図 56. Rxn アナライザオプション

### 4.5.1.1 モデルファイルの追加

#### モデルファイルを追加する手順

1. Rxn Control (Rxn の管理) ウィンドウで **Options (オプション)** をクリックします。Analyzer Options (アナライザオプション) ダイアログが表示されます。
2. **Add Model File (モデルファイルの追加)** をクリックして、Raman RunTime に送信するモデルファイルを選択します。

追加したモデルファイルは解析に使用できます。プローブ窓の **Analysis (解析)** タブをクリックすると、モデルファイルの有効/無効を切り替えることができます。有効なファイルタイプには、.usp、.rusp、.dlm、.pxm、.pxs、.cal、.mat、.unsb ファイルなどがあります。Raman RunTime でサポートされているモデルタイプの詳細については、*Raman RunTime 取扱説明書 (BA02180)* を参照してください。

アナライザの再起動またはシャットダウンの手順については、*アナライザの再起動またはオフ*→図を参照してください。

## 4.5.2 チャンネルの管理

Raman Rxn アナライザでは、Rxn Control (Rxn の管理) ウィンドウに最大 4 つのプローブ (測定チャンネル) を表示できます。ラマン分光計ウィンドウには、各チャンネルの管理ペインがあります。チャンネルペインを使用して、データセットの選択/表示、収集モードの設定、露光設定などを行います。

各チャンネルペインには、Raman RunTime の操作を反映した設定が含まれます。チャンネルペイン内の機能の詳細については、*Raman RunTime 取扱説明書 (BA02180)* を参照してください。

### 4.5.2.1 チャンネルの取得

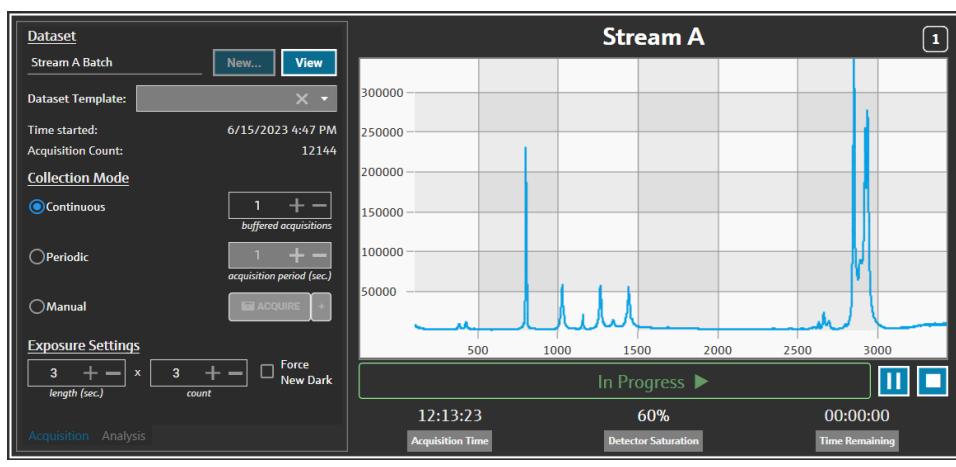


図 57. チャンネル管理ペイン

チャンネルの **Acquisition (取得)** タブで、以下を選択します。

- **New (新規)** : 新しい名前のデータセットを作成します。
  - **View (表示)** : 現在のデータセットをダッシュボードウィンドウで起動します。
  - **Analyze Dataset (データセットのテンプレート)** : 新しいデータセットに適用するテンプレートを選択します。テンプレートは、バッチが開始される前に選択する必要があります。
  - **Time Started (開始時間)** : 現在のデータセットが開始されてから経過した時間 (単位: 秒)
  - **Acquisition Count (取得カウント)** : 現在のデータセットの取得回数
  - **Collection Modes (収集モード)** : プローブ収集モードは、以下の 3 つの項目のいずれかを選択することで変更できます。
    - **Continuous (連続)** : Continuous (連続) 収集モードは、アクティブな各プローブを可能な限り迅速に循環させます。この設定は、頻繁に基準液を収集する場合のメソッド開発や、モデルがアクティブな状態での監視と制御に推奨されます。連続モードには、バッファ収集オプションが含まれます。
    - **Periodic (周期)** : Periodic (周期) 収集モードは、指定された間隔でスペクトルを取得し、リアクタから採取されるサンプルや他の時間指定されたプロセスイベントとスペクトルを同期させるために、通常はメソッド開発中に使用されます。バッファ収集のオプションは、周期モードにはありません。
    - **Manual (手動)** : Manual (手動) 収集モードは、 **Acquire (取得)** ボタンをクリックして、スペクトルの取得を手動で作動させる場合に使用します。サンプル名をスペクトルごとに指定するには、**+** をクリックします。
  - **Exposure Settings (露光設定)** : 長さ (秒) とカウントの露光設定を変更するには、**+** と **-** をクリックするか、またはキーボードから値を手動で入力します。 **Force New Dark (新規暗露光の強制)** を選択すると、収集のたびに新しい暗露光が強制されます。
- 新しい暗露光を収集することで、測定時の暗電流によるサンプル以外の影響を軽減できます。 **Force New Dark (新規暗露光の強制)** の詳細については、*Raman RunTime 取扱説明書 (BA02180)* を参照してください。



A0056075

図 58. 露光設定

#### 4.5.2.2 チャンネルの **Analysis (解析)** タブにおけるモデルの適用

チャンネルの **Analysis (解析)** タブでは、Raman RunTime 内でモデルを選択して適用し、データセット取得時にモデル予測を受け取ることができます。

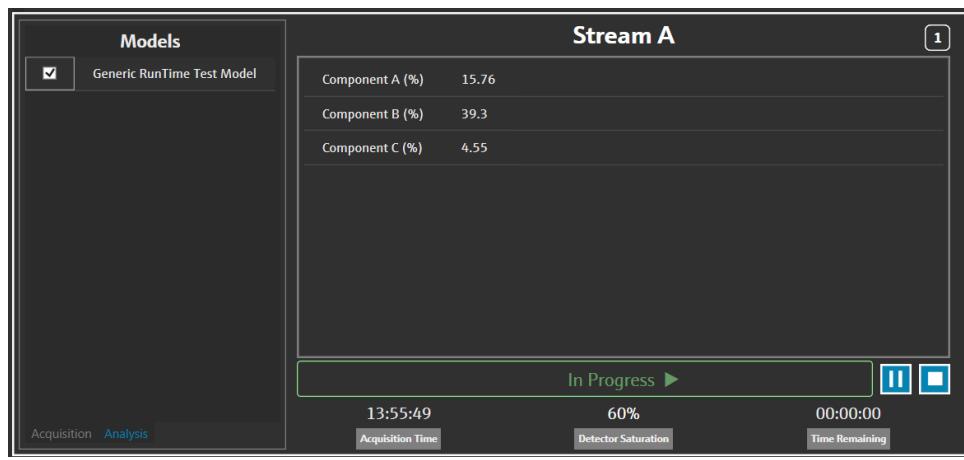


図 59. チャンネルの解析管理タブ

モデルを選択するには、モデルファイル名をオンにします。以下の情報が表示されます。

- 予測値が **Analysis (解析)** タブに表示されます。
- Raman RunTime のモデル予測結果は、**Analysis (解析)** ウィンドウに角括弧で囲まれて表示されます (例: [8.14])。

#### 4.5.2.3 スペクトルの取得

データセット取得を開始するには、**Play (再生)**  をクリックします。データセット取得を開始すると、再生ボタンが一時停止ボタンに変わります。

データセット取得を停止するには、**Stop (停止)**  をクリックします。

#### 4.5.2.4 チャンネルステータスバー

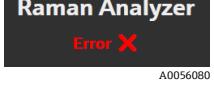
チャンネルステータスバーは、スペクトルプロットの下に表示されます。チャンネルのステータスは、Not Started (未開始) 、In Process (実行中) 、Paused (一時停止) 、またはCompleted (完了) です。



図 60. チャンネルステータスバー

#### 4.5.2.5 アナライザのステータス/アクションインジケータ

アナライザのステータスインジケータは、Rxn Control (Rxn の管理) ウィンドウの中央下に表示されます。アナライザには、Normal (正常) 、Warning (警告) 、Error (エラー) の 3 つのステータスがあります。

ステータス	説明
 Raman Analyzer Status - Normal A0056078	ステータスは正常です
 Raman Analyzer Warning  A0056079	システム警告が発生すると、表示が黄色の Warning (警告) に変わります。警告は確認する必要がありますが、直ちに対処する必要はありません。警告の詳細を表示するには、ステータスをクリックします。
 Raman Analyzer Error  A0056080	システムエラーが発生すると、表示が赤色の Error (エラー) に変わります。エラーは直ちに対処する必要があります。警告の詳細を表示するには、ステータスをクリックします。

システム警告とシステムエラーの詳細な一覧については、*Raman RunTime 取扱説明書 (BA02180)* を参照してください。

#### 4.5.2.6 アナライザのアクションインジケータ

アナライザのアクションインジケータは、Rxn Control (Rxn の管理) ウィンドウの右下に表示されます。このインジケータは、現在実行されているアクションを示します。アクションがチャンネル固有の場合は、該当するチャンネル番号が点滅します。緊急時には、インジケータの赤色の停止ボタンをクリックすると、現在実行中の校正/検証プロセスが中止されます。



図 61. スペクトルの取得中



図 62. 一時停止またはユーザー入力の待機中



図 63. 校正中 (プローブまたは内部)



図 64. プローブの検証中

### 4.5.3 Raman Rxn アナライザの校正と検証

内部校正およびプローブ校正に合格しない限り、Raman data library の Raman Rxn アナライザの管理機能を使用してスペクトルを収集することはできません。スペクトル収集の前に、すべての校正を行う必要があります。検証は任意ですが推奨されます。

Raman Rxn アナライザまたはプローブの校正/検証に関する詳細な手順については、該当するプローブ校正キットの説明書および *Raman RunTime 取扱説明書 (BA02180)* を参照してください。

#### Rxn アナライザの校正/検証手順 :

1. ラマン分光計ウィンドウで **Calibration (校正)** をクリックします。  
校正ダイアログが表示されます。
2. Internal Calibration (内部校正) の以下の項目を選択します。
  - **Calibration Mode (校正モード)** : 内部校正用の校正モード (Auto (自動) 、 XAxis (X軸) 、 All (すべて) )
  - **Laser Power (レーザー出力)** : レーザーの出力 (単位 : mW)
  - **Calibrate (校正)** をクリックして内部校正を実行します。

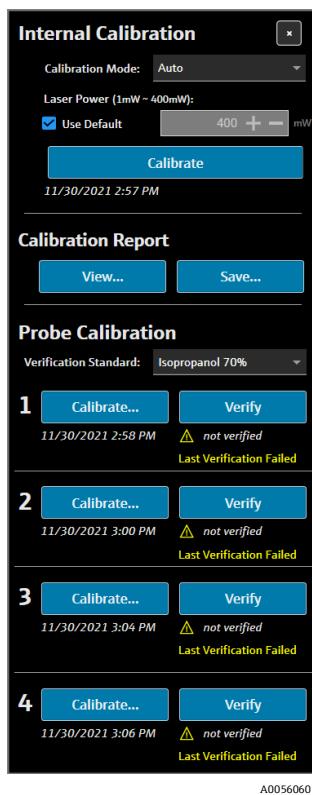


図 65. 校正ダイアログ

3. Calibration Report (校正レポート) の以下の項目を選択します。
  - 校正ファイル (.pdf) を表示する場合は、**View (表示)** をクリックします。
  - 校正ファイル (.pdf) のコピーを保存する場合は、**Save (保存)** をクリックします。
4. Probe Calibration (プローブ校正) および Verification (検証) の以下の項目を選択します。
  - **Verification Standard (検証基準)** : プローブの校正結果の検証に使用する標準基準液。この手順は、ラマンスペクトルの収集に必須ではありませんが、強く推奨されます。
  - 校正を実施するチャンネルの **Calibrate (校正)** をクリックして、プローブ校正ウィンドウを開きます。校正に関する指示に従って **Load (読み込み)** をクリックし、プローブ校正に使用する強度リファレンスファイルを選択します。 **Save (保存)** をクリックして、選択した強度リファレンスファイルのコピーを保存します。

現在、Raman data library の Rxn アナライザ管理インターフェースでは、ラマン校正/検証キットを校正用標準物質 (CRS) ベースの光源スペクトルファイルとともに使用することはできません。

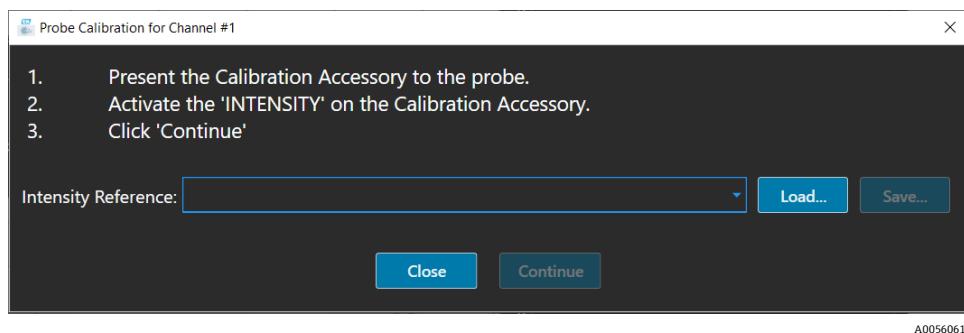


図 66. プローブ校正ウィンドウ、HCA

- **Continue (続行)** をクリックしてプローブ校正を開始します。プローブ校正が完了すると、校正日時が更新されます。
  - **Verify (検証)** をクリックしてプローブの校正結果を検証します。
5. 各アナライザとプローブについて、上記の手順を繰り返します。
  6. 校正と検証が完了したら、校正ダイアログを閉じます。

## 5 サポート

### 5.1 About (製品情報)

上部のリボンにある **About (製品情報)** をクリックすると、「About Raman Data Library (Raman data library の製品情報)」ウィンドウが開きます。このウィンドウには、ソフトウェアバージョンとバージョン番号、インストール ID、および著作権情報が表示されます。

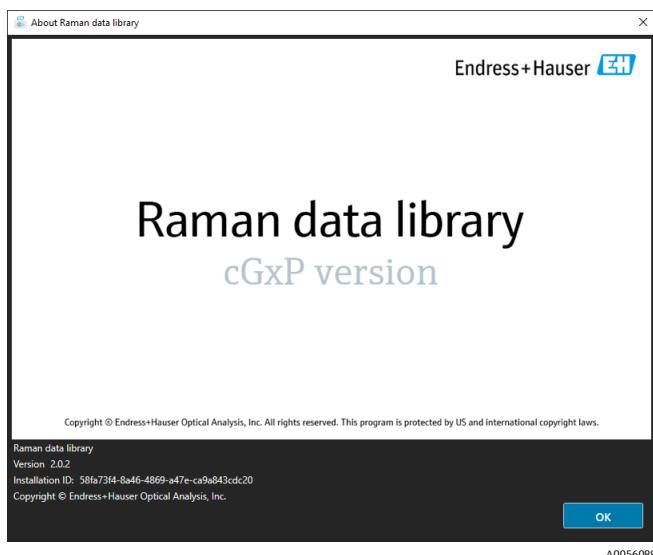


図 67. About (製品情報) ウィンドウ

### 5.2 ご連絡先の情報

技術サービスについては、弊社ウェブサイト (<https://www.endress.com/contact>) からお近くの販売窓口をご確認の上、そちらにお問い合わせください。

## 6 著作権情報

### 6.1 エンドユーザーライセンス契約書

*Raman data library* ソフトウェアのエンドユーザーライセンス契約書のコピーは、参照目的で本資料に含まれています。

ソフトウェアをインストールまたは使用する前に、本ソフトウェアライセンス契約書をよくお読みください。

「ACCEPT」ボタンをクリックするか、本製品をインストールするか、または本製品が含まれる機器を使用することにより、お客様は本契約に拘束されることに同意するものとします。本契約に同意できない条項がある場合は「DO NOT ACCEPT」ボタンをクリックしてください。これによりインストール処理が中断されます。

これは *Raman data library* ソフトウェアのエンドユーザーであるお客様（以下「ライセンサー」）と、371 Parkland Plaza, Ann Arbor, Michigan 48103 に主たる事業所を有するデラウェア州法人である Endress+Hauser Optical Analysis, Inc.（以下「ライセンサー」または「Endress+Hauser」）との間のエンドユーザーライセンス契約です。お客様は、*Raman data library* ソフトウェアをインストールすることにより、本契約の条件に拘束されることに同意するものとします。

**1.0. 非独占ライセンス。** ライセンサーは、お客様がインストールしたライセンスプログラムのすべてのバージョンに適用される以下の条件に従って、機械可読形式のコンピュータプログラムおよびデータのパッケージとユーザー マニュアルを含む *Raman data library* を使用するための非独占ライセンスをお客様に付与します。

**2.0. 権利の範囲。** ライセンサーは、以下の権利を付与されるものとします。

2.1. Endress+Hauser 製分光器の制御に使用するライセンスプログラムを 1 台のコンピュータにインストールすること。

2.2. エンドユーザーのニーズに応える目的で、第 2.1 条に定める当該コンピュータ上でライセンスプログラムを使用および実行すること。

2.3. お客様によるライセンスプログラムの正規使用を支援するために、ライセンスプログラムの機械可読形式の命令またはデータを規定コンピュータに関連付けられた機械に保管、送信、表示すること。および

2.4. 生産活動を伴わないバックアップのみの目的で、ライセンスプログラムの機械可読オブジェクトコード形式のコピーを 1 つ作成すること。

#### 3.0. 所有权の保護および制限。

3.1. ライセンスプログラムは著作権で保護されています。著作権は Endress+Hauser が所有しています。ライセンスプログラムは、ライセンサーによる使用を許諾するものであり、販売されるものではありません。ライセンサーは、ライセンスプログラムの所有権をライセンサーに販売または譲渡しません。

3.2. お客様は、ライセンスプログラムおよびそのすべての変更および拡張に対するすべての権利、権原および利益の所有権を有しないものとします（それに関連するすべての企業秘密および著作権の所有を含む）。

3.3. 本ライセンスプログラムには、著作権および国際条約の規定により保護されている機密情報および/または専有情報が含まれています。すべての権利が留保されています。ライセンスプログラムのいかなる部分も、ライセンサーの書面による許可なしに、複写、複製、または他の言語に翻訳することはできません。この機密情報の不正使用、開示、譲渡、移転、または複製を行った場合、法律の及ぶ最大限の範囲まで告訴されます。

3.4. お客様は、ライセンサーが明示的に許可した場合を除き、ライセンスプログラム、またはその複製、翻案、転写、結合された部分を（電子的またはその他の方法により）使用、複製、変更、または配布することはできません。ライセンサーは、ライセンスプログラムを逆アセンブル、逆コンパイル、またはその他の方法で翻訳することはできません。お客様の権利は、ライセンスプログラム全体を、（1）本契約の義務を負うライセンサーの事業全体の利益の承継人、または（2）ライセンサーが合理的に受け入れができるその他の当事者が、本契約の代替となる契約を締結し、付随費用を賄うために事務手数料を支払った場合を除いて、移転、貸与、譲渡、またはサブライセンス許諾することはできません。ライセンサーは、ライセンサーの明示的な事前許可を得ずに、ライセンスプログラムを他のコンピュータシステムにインストールすること、または他の場所で使用することはできません。お客様がライセンスプログラムを使用、複製、または修正した場合、あるいはライセンスプログラムの複製、翻案、転写、または結合された部分の所有権を、ライセンサーが明示的に許可していない方法で他者に譲渡した場合、お客様のライセンスは自動的に終了します。

3.5. お客様は、ライセンサーがライセンシーの施設に立ち入り、通常の営業時間内に合理的な方法でライセンスプログラムを検査し、ライセンシーが本契約の条件を遵守していることを確認することを本契約書によって許可するものとします。

3.6. お客様は、ライセンシーが上記規定のいずれかに違反した場合、ライセンサーは金銭または損害賠償について適切な救済を受けられないことを認めるものとします。したがって、ライセンサーは、要請に応じて直ちに管轄裁判所からそのような違反に対する差止命令を得る権利を有するものとします。差止命令による救済を得るライセンサーの権利は、さらなる救済を求める権利を制限するものではありません。

#### 4.0. 限定的保証および責任の制限。

4.1. ライセンサーは、お客様の利益のために、ライセンスプログラムの正確性と信頼性を確保するよう配慮しています。この保証は、ライセンスプログラムの付属資料で規定されている運用、セキュリティ、およびデータ管理手順をお客様が遵守することを明示的な条件としています。

4.2. 法律で禁止されていない範囲で、Endress+Hauser は、いかなる場合においても、Endress+Hauser ソフトウェアの使用または使用不能に起因または関連して生じる人身傷害、もしくは付随的損害、特別損害、間接的損害、または派生的損害（逸失利益、データの損失、もしくは事業の中止による損害、その他の商業上の損害、損失などを含むがこれに限定されない）について、発生原因を問わず、いかなる責任の法理（契約、不法行為、その他）に基づかにかかわらず、また、Endress+Hauser が当該損害の可能性を知らされていた場合でも、一切責任を負いません。一部の管轄区域においては、人身傷害、もしくは付隨的損害または間接的損害の責任の制限が認められていないため、本制限事項がお客様に適用されない場合があります。いかなる場合も（人身傷害を伴う場合に、適用法によって要求される場合は除きます）、あらゆる損害について Endress+Hauser がお客様に負う賠償責任の総額は、本契約に基づいてライセンサーに支払われたすべてのライセンス料の総額を超えないものとします。上述の制限は、上記の救済手段が本質的な目的を果たせない場合にも適用されます。

4.3. ライセンサーは、ライセンスプログラムの誤りまたは欠落について一切の責任を負わず、理由の如何を問わず、本契約のいかなる製品に対しても、通知なしに変更および改良を行う権利を留保します。

4.4. 本契約に明示的に規定されている場合を除き、ライセンサーは、ライセンスプログラムに関するすべての約束、表明、および保証（その状態、表明または説明への適合性、過失、商品性または特定用途への適合性を含む）を否認します。ライセンスプログラムとともに提供される情報は、当該ライセンスプログラムに関する表明または保証を意図したものではなく、また、そのように理解されるべきではありません。

4.5. 契約、不法行為、または厳格責任に関係する訴因を含む、ライセンスプログラムおよび本契約に関連するすべての請求に対するライセンサーのお客様に対する累積責任は、本契約に基づいてライセンサーに支払われたすべてのライセンス料の総額を超えないものとします。この責任の制限は、本契約の他の条項に違反したかどうか、または無効であることが証明されたかどうかに関係なく適用されることを意図しています。ライセンサーは、データまたは資料の損失について責任を負わないものとし、ライセンシーは合理的なバックアップ予防措置を講じる責任を負うものとします。

4.6. ライセンスプログラムは「現状有姿」で販売され、お客様はその品質および性能に関するすべてのリスクを負うものとします。

4.7. お客様は、消費者法などの特定の法律に基づき、默示保証の除外、もしくは特定の損害の除外または制限を認めない追加の権利を有する場合があります。当該法が適用される場合、これらの除外および制限はお客様に適用されない場合があります。

#### 5.0. 雜則。

5.1. 本契約は、アメリカ合衆国ミシガン州の法律に準拠し、同法に従って解釈されるものとしますが、特にミシガン州の法選択の規則は除外されます。

5.2. 本契約の変更は、書面によらない限り、かつ、変更の執行を求める当事者の権限を有する代表者が署名しない限り、拘束力を持たないものとします。

5.3. 本契約に基づいて要求または許可される通知は、書面により行い、直接手渡し、もしくは書留郵便または配達証明郵便で送付し、適切な郵便切手を貼付して受け取り証明を要求するものとします。

5.4. 本契約のいずれかの条項が、無効である場合または失効した場合、もしくは管轄裁判所または法廷によって無効と宣告された場合、当該条項は無効となり、本契約から分離されたものとみなされ、本契約の残りのすべての条項は有効に存続するものとします。

5.5. 本契約は、ライセンシーに対するライセンサーの義務と責任の完全かつ排他的な声明であり、本契約の内容に関するライセンサーによる、またはライセンサーの代理人によるその他の提案、表明、またはその他の通信に優先します。

## 6.0 関連資料。

本資料は、権限が与えられた従業員およびEndress+Hauser Optical Analysis, Inc. の担当者が使用することを目的としています。Endress+Hauser Optical Analysis, Inc. の書面による明示的な許可なしに、購入者の個人的利用以外の目的で、電子的または機械的に（複写、記録、または情報の蓄積と検索システムを含む）、いかなる形式または手段によっても複製または送信することはできません。法律の下では、複製には別の言語への翻訳が含まれます。

本資料に記載されている情報は、原稿執筆時点で正確なものとみなされます。Endress+Hauser Optical Analysis, Inc. は、予告なしに情報を変更する権利を留保します。

[www.addresses.endress.com](http://www.addresses.endress.com)

---