

Manuel de l'Utilisateur

Raman data library 2.1



Sommaire

1 Généralités.....	3
1.1 Fonction du document.....	3
1.2 Symboles d'avertissement	3
2 Sécurité	4
2.1 Sécurité informatique.....	4
2.2 Conformité à la norme FDA 21 CFR Part 11.....	4
3 Phase du cycle de vie des produits ...	10
3.1 Glossaire.....	10
3.2 Documentation	11
3.3 Marques déposées	11
3.4 Diagnostic et suppression des défauts.....	12

4 Principe de fonctionnement et architecture du système	13
4.1 Description du produit.....	13
4.2 Fonctionnement du logiciel	18
4.3 Ajout de données à Raman data library	22
4.4 Analyse des blocs de données.....	32
4.5 Commande de l'analyseur Rxn Raman	56
5 Assistance.....	62
5.1 À propos de ("About")	62
5.2 Coordonnées.....	62
6 Informations de copyright.....	63
6.1 Contrat de licence utilisateur final	63

1 Généralités

1.1 Fonction du document

Ce document fournit des instructions relatives aux tâches générales de l'utilisateur concernant le logiciel Raman data library, y compris la navigation, l'explication des champs, la manipulation des données, etc. Pour les instructions administratives, y compris l'installation, la base de données et la gestion des utilisateurs, ainsi que la sécurité, voir le *Manuel de l'Administrateur Raman data library* (BA02564C).

1.2 Symboles d'avertissement

Structure des informations	Signification
 AVERTISSEMENT Cause (/conséquences) Si nécessaire, conséquences en cas de non-respect (si applicable) ► Action corrective	Ce symbole signale une situation dangereuse. Si cette situation n'est pas évitée, elle peut entraîner des blessures graves voire mortelles.
 ATTENTION Cause (/conséquences) Si nécessaire, conséquences en cas de non-respect (si applicable) ► Action corrective	Ce symbole signale une situation dangereuse. Si cette situation n'est pas évitée, elle peut entraîner des blessures de gravité légère à moyenne.
AVIS Cause / Situation Si nécessaire, conséquences en cas de non-respect (si applicable) ► Action / remarque	Ce symbole signale des situations qui pourraient entraîner des dégâts matériels.

2 Sécurité

Pour plus d'informations sur l'utilisation sûre des analyseurs Raman Rxn et du logiciel Raman RunTime, voir le *manuel de mise en service Raman RunTime v6.5 (BA02180C)*. Il est recommandé de lire l'intégralité du *manuel de mise en service Raman RunTime v6.4* (ou version plus récente) avant d'utiliser Raman data library.

2.1 Sécurité informatique

Les mesures de sécurité informatique, qui assurent une protection supplémentaire de l'appareil et du transfert de données associé, doivent être mises en œuvre par les exploitants en conformité avec leurs normes de sécurité.

2.2 Conformité à la norme FDA 21 CFR Part 11

La version cGxP de Raman data library offre des fonctionnalités supplémentaires pour la conformité à la norme FDA 21 CFR Part 11. Ces fonctionnalités permettent une mise en œuvre centralisée des exigences de la norme 21 CFR Part 11, ce qui permet de mettre en place un processus réglementé. La version cGxP de Raman data library comprend la prise en charge des fonctionnalités suivantes :

- Gestion des utilisateurs
- Enregistrements électroniques et signatures électroniques
- Gestion des paramètres système
- Audit Trail (fonction de contrôle des modifications)
- Journaux d'événements comprenant la traçabilité des actions de l'utilisateur et la traçabilité des données spectrales

Pour prendre en charge les implémentations 21 CFR Part 11 de Raman data library, les documents suivants sont disponibles avec la version cGxP :

- Évaluation Raman data library CFR Part 11 ER/ES (réf. 4005770)
- Spécification des exigences de l'utilisateur Raman data library (réf. 4005769)
- Amélioration de l'intégrité et de la conformité des données Raman selon les principes ALCOA+ (réf. et publication en attente)

2.2.1 Gestion des utilisateurs

Dans la norme 21 CFR Part 11, la gestion des utilisateurs se rapporte à l'ensemble des contrôles et des procédures qui garantissent un accès sécurisé et réglementé aux enregistrements électroniques et aux signatures électroniques. L'une des principales différences entre la version de base de Raman data library et la version cGxP est la gestion des utilisateurs. Pour soutenir cela, Raman data library cGxP intègre la gestion des utilisateurs, l'authentification des données d'identification pouvant être locale, c'est-à-dire par le logiciel lui-même, par des connexions locales à des postes de travail Windows ou par un lien avec un domaine Active Directory.

Lorsqu'un mode d'authentification local est utilisé, la possibilité d'imposer des aspects de complexité du mot de passe est prise en charge, ainsi que le verrouillage après un nombre déterminé d'échecs de connexion et le délai d'attente automatique. Si l'authentification est basée sur un domaine, tous ces aspects, à l'exception du délai d'attente du logiciel, sont régis par le domaine.

L'identification unique de l'utilisateur et le contrôle d'accès sont déployés de manière native. Les privilèges d'accès des utilisateurs peuvent être configurés avec des rôles utilisateur définis et contrôlés. La possibilité de désactiver des comptes et d'imposer un changement de mot de passe lors de la prochaine connexion est également disponible. L'Audit Trail spécifique à l'utilisateur est présent sous la forme de journaux d'événements.

La gestion des utilisateurs au sein de Raman data library est mise en œuvre de manière à garantir la sécurité des enregistrements électroniques, le contrôle de l'accès et la traçabilité de toutes les actions des utilisateurs, ce qui contribue à la fiabilité et à l'intégrité des données dans les secteurs réglementés.

Pour plus de détails sur la gestion des utilisateurs, voir *Gestion des utilisateurs (version cGxP uniquement)* → .

2.2.2 Enregistrements électroniques et signatures électroniques

Les enregistrements et les signatures électroniques sont des éléments fondamentaux de la norme 21 CFR Part 11, qui établit les critères selon lesquels ils sont considérés comme dignes de confiance, fiables et équivalents aux enregistrements sur papier et aux signatures manuscrites. Les signatures électroniques au sein de Raman data library sont liées à des utilisateurs individuels et à leurs références, ce qui les rend juridiquement contraignantes et non répudiables.

Pour aider les sites à mettre en œuvre Raman data library dans le cadre de la norme 21 CFR Part 11, et plus particulièrement en ce qui concerne les enregistrements et les signatures électroniques, Endress+Hauser a mis à disposition un document spécifique, Évaluation Raman data library 21 CFR Part 11 ER/ES (réf. 4005770), qui est livré avec la variante cGxP du logiciel.

2.2.3 Gestion des paramètres système

Les paramètres système au sein de Raman data library concernent les aspects de sécurité qui jouent un rôle essentiel dans la mise en conformité avec la norme 21 CFR Part 11. Les paramètres système sont gérés dans la fenêtre Security. Pour plus de détails sur la gestion des paramètres de sécurité, voir les *Paramètres de sécurité (version cGxP uniquement)* → .

2.2.4 Audit Trail à travers la fonction de contrôle des modifications

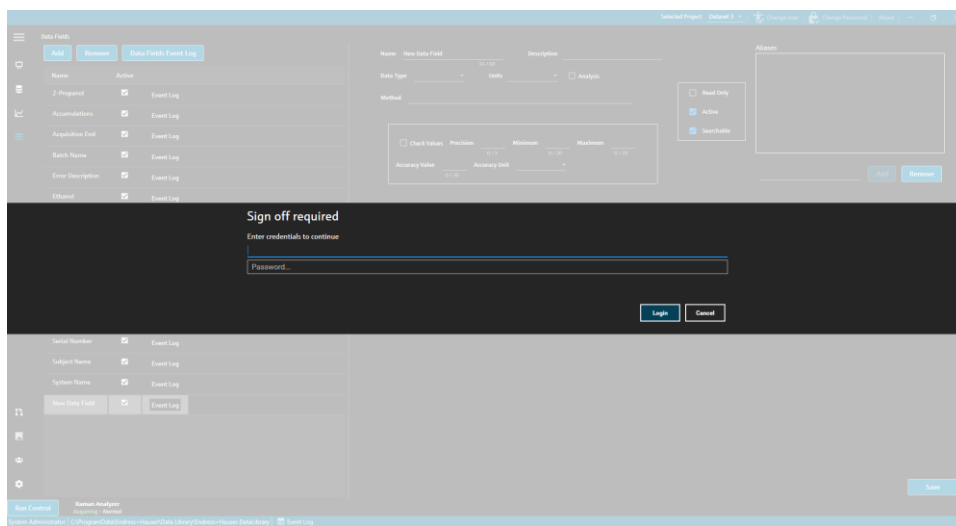
L'Audit Trail est un élément essentiel de la conformité à la norme 21 CFR Part 11, celui-ci garantissant que toute modification apportée aux enregistrements, systèmes ou processus électroniques est correctement gérée et documentée.

Dans la version cGxP de Raman data library, une fonction de contrôle des modifications a été mise en place en lien avec la gestion des utilisateurs. Cela garantit que toutes les modifications sont documentées, y compris le motif de la modification, la date et l'heure, ainsi que la personne responsable de la réalisation et de l'approbation de la modification. Un Audit Trail des modifications est suivi et documenté dans les différents journaux d'événements disponibles. En outre, la fonction de contrôle des modifications permet de s'assurer que seules les personnes disposant des autorisations nécessaires sont autorisées à effectuer des mises à jour ou des modifications.

Certaines actions, telles que la suppression ou l'annulation de blocs de données, l'ajout, la modification ou la suppression de champs de données, la suppression de projets ou de sources spectrales, nécessitent la signature de l'utilisateur avant que l'action ne puisse être mise en œuvre. Le cas échéant, l'utilisateur est invité à signer avec ses données d'identification et à sélectionner un motif pour la modification avec un espace pour tout commentaire associé.

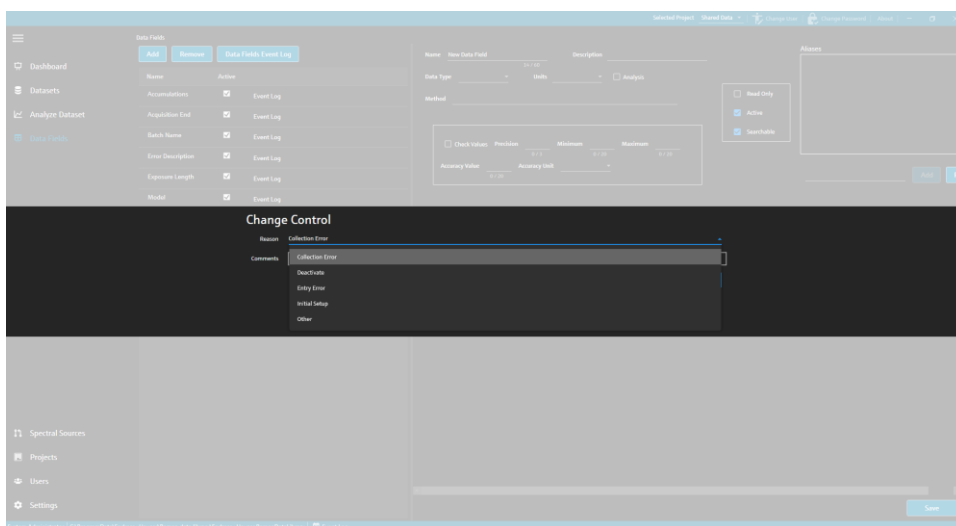
Les motifs par défaut disponibles pour le contrôle des modifications sont les suivants :

- Erreur de collecte
- Désactivation
- Erreur de saisie
- Configuration initiale
- Autre



A0056145

Figure 1. Contrôle des modifications – signature de l'utilisateur requise



A0056146

Figure 2. Contrôle des modifications – saisie d'une description et d'un motif de modification

Ces mesures de contrôle des modifications permettent de maintenir l'intégrité, la fiabilité et la conformité des enregistrements et des systèmes électroniques, et facilitent les processus d'approbation et d'audit par une équipe chargée de la qualité.

2.2.5 Utilisation des journaux d'événements

Pour assurer la traçabilité et l'enregistrement de tous les événements dans un environnement cGxP, Raman data library dispose de journaux d'événements qui comprennent un Audit Trail de base. Ces journaux vont du journal global (toutes les actions) aux journaux d'événements spécifiques à un utilisateur ou à une fonction. Les journaux d'événements et les Audit Trail sont des éléments essentiels de la conformité à la norme 21 CFR Part 11, ceux-ci garantissant l'intégrité et la traçabilité des enregistrements électroniques.

Les différents types de journaux d'événements dans lesquels un utilisateur peut visualiser les événements dans Raman data library sont les suivants :

- **Global event log.** Ce journal d'événements est accessible à partir de tous les écrans de Raman data library et se trouve dans la barre des tâches inférieure de la fenêtre de l'application.
- **User event logs.** Affiche les événements pour tous les utilisateurs ou un utilisateur spécifique. On y accède à partir de l'écran Users.
- **Project and dataset event logs.** Affiche les événements de tous les projets ou d'un projet spécifique, et répertorie les événements liés à un bloc de données. Ces journaux sont accessibles à partir de l'écran Projects et de l'écran de synthèse des blocs de données.

- **Spectral source event logs.** Affiche le journal d'événements pour des sources spectrales spécifiques ou pour toutes les sources spectrales.
- **Data field event logs.** Affiche le journal d'événements pour un champ de données spécifique ou pour tous les champs de données.

Les journaux d'événements peuvent être consultés et imprimés dans un format de document propriétaire, facilement visualisable et non modifiable. La recherche de texte dans le journal est possible. Avant d'ouvrir un autre journal d'événements, le journal d'événements actuel doit être fermé. Les journaux d'événements peuvent être enregistrés au format *.pdf, *.xlsx et *.docx, à des fins de visualisation uniquement.

2.2.5.1 Journal d'événements global

Le journal d'événements global affiche tous les événements survenus lors de la mise en œuvre de Raman data library. En raison de l'ampleur des informations enregistrées, le chargement du journal d'événements global peut prendre un certain temps.



Figure 3. Bouton du journal d'événements global

2.2.5.2 Journal d'événements utilisateur

La fenêtre Users permet d'afficher les journaux d'événements qui répertorient les événements liés à un utilisateur spécifique ou à tous les utilisateurs. Ce journal recueille toutes les modifications apportées aux utilisateurs, y compris l'ajout ou la suppression d'utilisateurs, l'ajout ou la suppression de rôles pour un utilisateur, les connexions d'utilisateurs et les tentatives de connexion ayant échoué. Les journaux d'événements suivants peuvent être sélectionnés dans la fenêtre Users :

- **Users Event Log.** Affiche le journal d'événements pour tous les utilisateurs.
- **Event Log.** Affiche le journal d'événements pour l'utilisateur spécifié.

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-GL3GVI4/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-GL3GVI4/Laura			User 'Administrator' signed in.

A0056147

Figure 4. Journal d'événements utilisateur

2.2.5.3 Journaux d'événements de projets et de blocs de données

La fenêtre Project permet d'afficher les journaux d'événements qui répertorient les événements liés à un projet, tels que l'ajout ou la suppression de blocs de données. Les options suivantes peuvent être sélectionnées dans la fenêtre Projects :

- **Projects Event Log.** Afficher un journal d'événements pour tous les projets.
- **Event Log.** Afficher le journal d'événements d'un projet spécifique.

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

A0056148

Figure 5. Journal d'événements de projet

2.2.5.4 Journaux d'événements de source spectrale

La fenêtre Spectral Sources permet d'afficher des journaux d'événements qui répertorient les événements à une source spectrale spécifique ou à tous les champs de données. Ce journal enregistre toutes les modifications apportées aux sources spectrales, telles que l'ajout de nouvelles sources spectrales, le démarrage ou l'arrêt de l'acquisition sur un analyseur Raman Rxn, ou la modification des paramètres de collecte par batch dans la fenêtre Raman Analyzer. Les options suivantes peuvent être sélectionnées dans la fenêtre Spectral Sources :

- **Spectral Sources Event Log.** Afficher un journal d'événements pour toutes les sources spectrales.
- **Event Log.** Afficher le journal d'événements d'une source spectrale spécifique.

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-GL3GVH4Laura			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-GL3GVH4Laura			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-GL3GVH4Laura			The laser power was set to 400 on analyzer 'Raman Analyzer'.
6/3/2024 5:48:49 PM	Rxn Control	DESKTOP-GL3GVH4Laura			The laser power was set to 400 on analyzer 'Raman Analyzer'.
6/3/2024 5:54:17 PM	Rxn Control	DESKTOP-GL3GVH4Laura			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-GL3GVH4Laura			The laser power was set to 400 on analyzer 'Raman Analyzer'.

A0056149

Figure 6. Journal d'événements de source spectrale

2.2.5.5 Journaux d'événements de champs de données

La fenêtre Data Fields permet d'afficher des journaux d'événements qui répertorient les actions liées à un champ de données spécifique ou à tous les champs de données. Ce journal recueille toutes les modifications apportées aux champs de données, y compris l'ajout de nouveaux champs, la suppression de champs ou l'ajout d'alias. Les options suivantes peuvent être sélectionnées dans la fenêtre Data Fields :

- **Data Fields Event Log.** Afficher un journal d'événements pour tous les champs de données.
- **Event Log.** Afficher le journal d'événements d'un champ de données spécifique.

Reports

1 of 1

Find | Next

Data Fields - Event Log

Software Version 2.0.2

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.

A0056150

Figure 7. Journal d'événements de champs de données

3 Phase du cycle de vie des produits

3.1 Glossaire

Terme	Description
Algorithme de Savitzky-Golay	Un filtre numérique pouvant être appliqué à un ensemble de points de données numériques afin de lisser les données, c'est-à-dire d'accroître la précision de ces dernières sans déformer la tendance du signal.
Analyse de données	Tout processus de travail visant à obtenir des informations utiles à partir de données brutes fournies par le spectromètre.
Analyseur Raman Rxn4	Système de spectroscopie intégré destiné à accueillir des sondes à fibres optiques pour l'analyse d'échantillons.
ASI	Alimentation sans interruption
Audit Trail	Enregistrement indépendant, généré par ordinateur, des modifications apportées aux enregistrements électroniques avec indication de la date, de l'utilisateur, de l'opération, du contenu et, au besoin, du motif
BDP	Good Documentation Practices (Bonnes pratiques de documentation)
°C	Degré Celsius
CFL	Nouveau format de fichier CFL défini dans "Galactic Industries Corp. Universal Data Format Specification", daté du 4 septembre 1997
Cfm	Cubic feet per minute (pied cube par minute)
CFR	Code of Federal Regulation (Code des règlements fédéraux)
cGMP	current Good Manufacturing Practices (Bonnes pratiques de fabrication actuelles)
cGxP	current Good clinical, laboratory, and/or manufacturing Practices (Bonnes pratiques actuelles de laboratoire et
COTS	Configurable Off-The-Shelf (Produit prêt à l'emploi configurable)
CTQ	Critique en termes de qualité
Données	Données, informations et attributs clés qui peuvent être présentés dans un format graphique.
Enregistrement électronique	Toute combinaison d'enregistrements présentée sous forme numérique qui est créée, modifiée, gérée, archivée, extraite ou distribuée par un système informatique et utilisée pour une activité réglementée par des
Exigence critique	Une exigence qui, si elle n'est pas remplie, a des répercussions négatives sur des exigences d'organismes de réglementation ou sur l'intégrité ou la sécurité des données.
Exigence non critique	Une exigence qui, si elle n'est pas remplie, n'a pas de répercussions négatives sur des exigences d'organismes de réglementation ou sur l'intégrité ou la sécurité des données.
GAML	Generalized Analytical Markup Language (Langage de balisage analytique généralisé)
GCC	Global Change Control (Contrôle des modifications globales)
GHz	Gigahertz
GMAO	Gestion de maintenance assistée par ordinateur : une base de données informatisée qui contient tous les ordres de travail de maintenance et qui est utilisée pour la planification des activités.
Hz	Hertz
IAPP	Information Asset Protection Policy (Politique de protection des actifs informationnels)
In situ	À son emplacement d'origine
LAN	Local Area Network (Réseau local)
Mot de passe	Code personnel unique entré par l'utilisateur pour s'identifier.
Nm	Nanomètres
OS	Operating System (Système d'exploitation)

Terme	Description
PAT	Process Analytical Technology (Technologie analytique des process)
PC	Personal Computer (Ordinateur personnel)
PCF	Précision de correction de fond
ppb	parts per billion (parties par milliard)
ppm	parts per million (parties par million)
psig	pounds per square inch gage (livres par pouce carré)
QC	Quality Control (Contrôle qualité)
QI	Qualification de l'installation
QO	Qualification opérationnelle
RAM	Random Access Memory (Mémoire vive)
Rapport final	Document récapitulant tous les résultats issus de la mise en œuvre d'un document de validation.
Signature électronique	Approbation d'un document électronique par une personne sous la forme d'une confirmation numérique juridiquement contraignante et équivalente à la signature manuscrite de la personne.
SPC	Format de fichier défini par un développeur.
Spectres	Les données brutes du spectromètre Raman après conversion au format SPC (GRAMS).
URS	User Requirements Specification (Spécification des exigences de l'utilisateur)
Utilisateur autorisé	Utilisateur final ayant suivi la formation requise et obtenu accès à l'application.

3.2 Documentation

Toute la documentation est disponible :

- Sur le support fourni (non inclus dans la livraison pour toutes les versions de l'appareil)
- Sur l'application mobile Endress+Hauser : www.endress.com/supporting-tools
- Dans l'espace Téléchargements du site web Endress+Hauser : www.fr.endress.com/Télécharger

Ce document fait partie intégrante de l'ensemble de documents comprenant :

Référence	Type de document	Description
BA02564C	Manuel de l'administrateur Raman data library	Un aperçu complet des opérations liées à la gestion de la sécurité et à la base de données Raman data library.
KA01717C	Instructions condensées Raman data library	Un guide de démarrage rapide après l'installation de Raman data library.
TI01869C	Information technique Raman data library	Aide à la planification du système d'analyse de données. Le document contient toutes les caractéristiques techniques relatives au logiciel.

3.3 Marques déposées

SIMCA®

Marque déposée de Sartorius Stedim Biotech.

GRAMS IQ™

Marque déposée de Thermo Fisher Scientific.

3.4 Diagnostic et suppression des défauts

3.4.1 Redémarrage ou mise hors tension de l'analyseur

Pour redémarrer ou mettre hors tension l'analyseur :

1. Dans la fenêtre **Raman Analyzer**, cliquer sur **Options**.

La boîte de dialogue Analyzer Options apparaît.

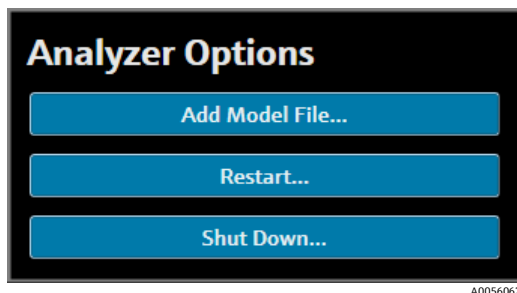


Figure 8. Options de l'analyseur

2. Choisir l'une des options suivantes :
 - Cliquer sur **Restart** pour redémarrer l'analyseur.
 - Cliquer sur **Shut Down** pour arrêter l'analyseur.
3. Cliquer sur **OK** dans la boîte de dialogue de confirmation.

Après avoir éteint ou réinitialisé un analyseur Raman RunTime, redémarrer le service Windows pour connecter Raman data library à RunTime. Pour redémarrer le service Windows, arrêter puis démarrer le service **Endress+Hauser Raman data library** à l'aide du gestionnaire de service de la barre d'état, ou redémarrer l'ordinateur Raman data library.

3.4.2 Les spectres ne sont pas collectés

En cas d'acquisition des spectres avec la fenêtre Raman Analyzer et si les spectres ne sont pas ajoutés à un bloc de données, cela signifie que le service Windows s'est déconnecté de l'analyseur Raman RunTime et que la connexion doit être rétablie.

Le service Windows peut se déconnecter de l'analyseur Raman RunTime pour diverses raisons, notamment :

- Arrêt de l'analyseur pendant des périodes prolongées
- Modification des réglages réseau dans le logiciel Raman RunTime
- Modification des réglages réseau sur l'ordinateur exécutant Raman data library.

Pour reconnecter le service Windows, arrêter puis démarrer le service **Endress+Hauser Raman data library** à l'aide du gestionnaire de service de la barre d'état, ou redémarrer l'ordinateur Raman data library.

4 Principe de fonctionnement et architecture du système

4.1 Description du produit

Raman data library, d'Endress+Hauser, est un logiciel conçu pour la gestion, la visualisation et l'analyse de données spectrales de Rxn Raman ainsi que la création de rapports sur ces dernières. Raman data library complète le logiciel Raman RunTime intégré dans l'analyseur Raman Rxn d'Endress+Hauser, en permettant le stockage, la gestion ainsi que l'analyse de spectres et la collecte de données de plusieurs analyseurs entre laboratoire et cGxP.

Le logiciel Raman data library a été créé pour les utilisateurs qui ont besoin de visualiser les spectres Raman, les associer à des données de référence et créer des modèles de pic univariés. Avec ce logiciel, les données préparées peuvent être exportées pour une modélisation multivariée externe.

Fonctionnalités de Raman data library :

- **Gestion des données.** Regroupe les spectres et valeurs de référence, prépare les données avant la modélisation chimométrique, permet de stocker et consulter les données, et assure l'intégrité des données.
- **Analyse de données.** Offre une vision plus large des spectres et permet une analyse simple comme la tendance des pics et la modélisation univariée.
- **Option cGxP.** Satisfait aux normes sectorielles pour la traçabilité, le stockage et l'archivage des données spectrales.

Raman data library stocke des données spectrales dans une base de données SQLite sécurisée intégrée, effectue des calculs sur les données spectrales et affiche ces dernières ainsi que les métadonnées associées dans des rapports. Cette fonctionnalité permet aux spectres Raman de servir de données de référence pour le développement de méthodes Raman quantitatives, et de répondre aux besoins définis par la norme FDA 21 CFR partie 11 dans le cadre d'une solution analytique validée.

Le logiciel Raman data library peut être mis en œuvre de manière conforme aux exigences de la norme FDA 21 CFR partie 11 lorsqu'il est installé avec le programme d'installation cGxP, et qualifié par QI/QO avec Endress+Hauser et QP avec le client. Lorsqu'il est installé en mode cGxP, le logiciel facilite la collecte, le stockage et la gestion des spectres Raman, de sorte que les spectres puissent :

- Servir de blocs de données d'étalonnage pour l'élaboration de modèles Raman quantitatifs dans le cadre d'une solution analytique validée, ou
- Servir d'entrée de données dans des modèles validés utilisés pour prévoir les propriétés de process ou d'échantillons

4.1.1 Module

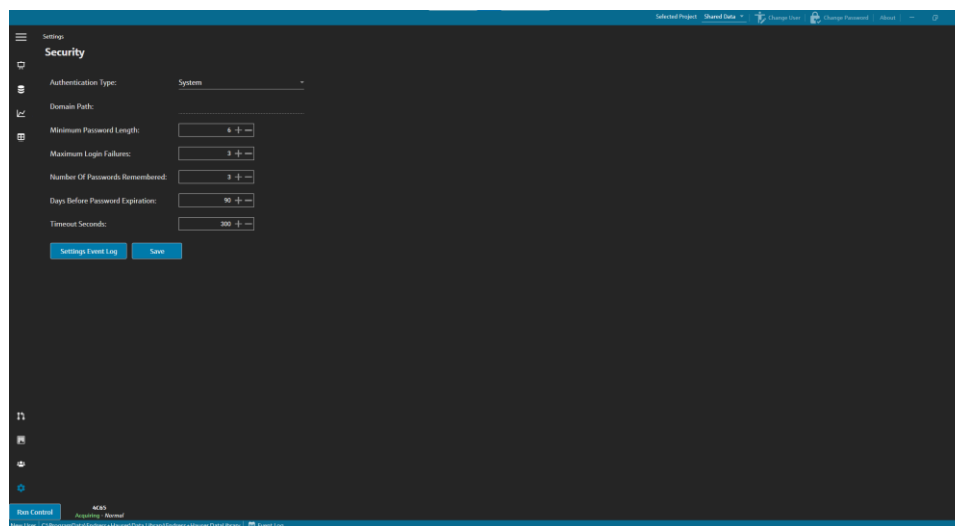
4.1.1.1 Installation

Le logiciel Raman data library est conçu pour être installé à un poste de travail autonome. Raman data library contient des fonctionnalités pour exporter les données de chaque instance de l'application et importer les données à un emplacement centralisé. Voir les Instructions d'installation dans le *Manuel de l'Administrateur Raman data library* (BA02349C).

4.1.1.2 Paramètres de sécurité (version cGxP uniquement)

Dans les environnements cGxP, Raman data library utilise l'authentification des utilisateurs pour garantir la traçabilité et l'enregistrement de tous les événements. Dans les environnements de base de Raman data library, la gestion et l'authentification des utilisateurs ne sont pas utilisées.

La fenêtre Settings permet de modifier les paramètres de sécurité du système. Pour modifier les paramètres de sécurité du système, il est nécessaire de se connecter avec un rôle de System Settings Manager.

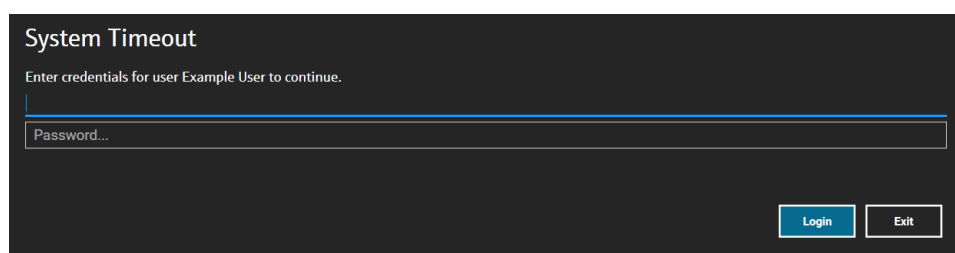


A0055947

Figure 9. Fenêtre Security

Les options suivantes peuvent être sélectionnées dans la fenêtre Settings :

- **Authentication type.** Le type d'authentification pour l'application. L'utilisateur peut choisir entre les modes d'authentification System, Domain et Local.
- **Domain path.** (mode d'authentification Domain uniquement) Chemin du domaine.
- **Minimum password length.** Nombre minimum de caractères pour un mot de passe utilisateur. Le nombre minimum de caractères autorisés est de 6.
- **Maximum login failures.** Nombre de tentatives de connexion en échec autorisées avant le verrouillage d'un compte utilisateur.
- **Number of passwords remembered.** Nombre de nouveaux mots de passe uniques qui doivent être associés à un compte utilisateur avant qu'un ancien mot de passe ne puisse être réutilisé.
- **Days before password expiration.** Période (en jours) pendant laquelle un mot de passe peut être utilisé avant que le système ne demande à l'utilisateur de le modifier. Il est possible de faire en sorte que les mots de passe expirent après un certain nombre de jours ou spécifier que les mots de passe n'expirent jamais en fixant le nombre de jours à 0.
- **Timeout seconds.** Période (en secondes) d'inactivité autorisée avant qu'une interruption ("timeout") du système ne se produise. Après un timeout du système, les utilisateurs doivent entrer à nouveau leurs données d'identification pour continuer ou quitter l'application. Si le paramètre "Timeout seconds" est réglé sur 0, le timeout du système est désactivé. Le timeout maximum configurable est de 3 600 secondes (60 minutes).



A0055948

Figure 10. Timeout du système

- **Save.** Enregistre les paramètres de sécurité du système.
- **Settings event log.** Affiche le journal d'événements pour les paramètres.

4.1.1.3 User management (cGxP version only)

Dans les environnements cGxP, Raman data library authentifie les utilisateurs pour garantir la traçabilité et l'enregistrement de tous les événements. La version de base de Raman data library ne permet pas la gestion ni l'authentification des utilisateurs.

La fenêtre des utilisateurs permet aux gestionnaires d'ajouter, de mettre à jour et de supprimer des comptes utilisateur. Elle permet également aux gestionnaires de visualiser les événements pour un utilisateur spécifié ou tous les événements pour tous les utilisateurs. Pour gérer les utilisateurs, il faut se connecter à un compte avec le rôle Users Manager.

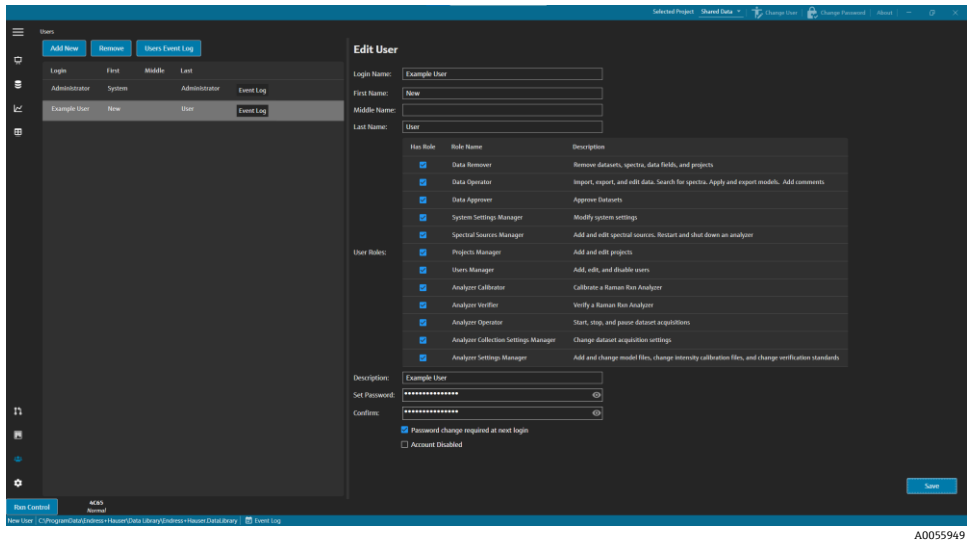


Figure 11. Fenêtre Users

Les options suivantes peuvent être sélectionnées dans la fenêtre Users :

- **Add New.** Crée un nouvel utilisateur.
- **Remove.** Supprime l'utilisateur sélectionné. Le rôle Data Remover est requis pour supprimer un utilisateur.
- **Users Event Log.** Affiche le journal d'événements pour tous les utilisateurs.
- **Event Log.** Affiche le journal d'événements pour l'utilisateur spécifié.

4.1.1.3.1 Rôles utilisateur

La fonctionnalité User roles permet à un gestionnaire d'utilisateurs de créer des utilisateurs avec des droits conformes à la structure organisationnelle déterminée par le client. C'est pourquoi il n'existe pas de groupes d'utilisateurs fixes. En remplacement, il existe de nombreuses options permettant de structurer les droits en affectant une combinaison de rôles utilisateur.

Les rôles utilisateur peuvent servir à limiter les fonctionnalités accessibles aux utilisateurs. Toutes les combinaisons de rôles peuvent être affectées à un utilisateur donné, que ce soit tous les rôles ou aucun rôle.

Rôle	Opérations autorisées
Data Remover	- Supprimer des blocs de données - Supprimer des spectres - Supprimer des champs de données - Supprimer des projets
Data Operator	- Importer, exporter et modifier des données - Rechercher des spectres - Appliquer et exporter des modèles - Ajouter des commentaires
Data Approver	Valider des blocs de données
System Settings Manager	Modifier les paramètres système
Spectral Sources Manager	- Ajouter et modifier des sources spectrales - Redémarrer et arrêter un analyseur
Projects Manager	- Ajouter des projets - Modifier des projets
Users Manager	Ajouter des utilisateurs

Rôle	Opérations autorisées
	▪ Modifier des utilisateurs ▪ Désactiver des utilisateurs
Analyzer Calibrator	Étalonner un analyseur Rxn Raman
Analyzer Verifier	Vérifier un analyseur Rxn Raman
Analyzer Operator	▪ Démarrer des acquisitions de blocs de données ▪ Arrêter des acquisitions de blocs de données ▪ Interrompre des acquisitions de blocs de données
Analyzer Collection Settings Manager	Modifier les paramètres d'acquisition de blocs de données
Analyzer Settings Manager	▪ Ajouter et modifier des fichiers de modèle ▪ Modifier les fichiers d'étalonnage d'intensité ▪ Modifier les normes de vérification

Les rôles utilisateur peuvent être limités à un ensemble de droits ou combinés en ensembles liés aux responsabilités d'un rôle fonctionnel. Le tableau suivant donne des exemples d'ensembles de rôles pouvant être affectés à des utilisateurs (User), superviseurs (Supervisor) et administrateurs (Administrator).

Niveau	Rôles appliqués
User	▪ Data Operator ▪ Spectral Sources Manager ▪ Analyzer Calibrator ▪ Analyzer Verifier ▪ Analyzer Operator ▪ Analyzer Collection Settings Manager ▪ Analyzer Settings Manager
Supervisor	▪ Data Remover ▪ Data Approver ▪ System Settings Manager ▪ Projects Manager
Administrator	▪ Users Manager

4.1.1.3.2 Création d'un nouvel utilisateur

Pour créer un nouvel utilisateur

4. Dans la fenêtre Users, cliquer sur **Add New**.

Créer des comptes utilisateur Raman data library pour tous les nouveaux utilisateurs système. Si Raman data library permet de renommer les utilisateurs, utiliser uniquement cette fonctionnalité pour l'actualisation suite au changement du nom d'un utilisateur. Ne pas renommer un compte utilisateur pour réaffecter ce compte à une nouvelle personne.

Un nouveau panneau Edit User s'affiche.

Edit User

Login Name:

First Name:

Middle Name:

Last Name:

Has Role	Role Name	Description
☒	Data Remover	Remove datasets, spectra, data fields, and projects
☒	Data Operator	Import, export, and edit data. Search for spectra. Apply and export models. Add comments
☒	Data Approver	Approve Datasets
☒	System Settings Manager	Modify system settings
☒	Spectral Sources Manager	Add and edit spectral sources. Restart and shut down an analyzer
☒	Projects Manager	Add and edit projects
☒	Users Manager	Add, edit, and disable users
☒	Analyzer Calibrator	Calibrate a Raman Rn Analyzer
☒	Analyzer Verifier	Verify a Raman Rn Analyzer
☒	Analyzer Operator	Start, stop, and pause dataset acquisitions
☒	Analyzer Collection Settings Manager	Change dataset acquisition settings
☒	Analyzer Settings Manager	Add and change model files, change intensity calibration files, and change verification standards

Description:

Set Password:

Confirm:

☐ Password change required at next login

☐ Account Disabled

A0055964

Figure 12. Panneau Edit User

5. Entrer les propriétés de l'utilisateur :
 - **Login Name.** Identifiant utilisé pour se connecter au système. Chaque identifiant doit être unique et composé de 1 à 100 caractères.
 - **First Name.** Prénom de l'utilisateur. Il peut être composé de 0 à 100 caractères.
 - **Middle Name.** Deuxième prénom de l'utilisateur. Il peut être composé de 0 à 100 caractères.
 - **Last Name.** Nom de l'utilisateur. Il peut être composé de 0 à 100 caractères.
 - **User Roles.** Les rôles attribués aux utilisateurs dans Raman data library. Les rôles utilisateur peuvent être ajoutés ou supprimés en sélectionnant ou en désélectionnant la case à cocher **Include** pour chaque rôle. Voir [User roles](#) →
 - **Description.** Description de l'utilisateur.
6. Entrer un mot de passe valide dans les champs **Set Password** et **Confirm Password**.
Un mot de passe doit répondre aux exigences minimales suivantes :
 - Doit contenir au moins un caractère spécial
 - Doit contenir un mélange de lettres majuscules et minuscules
 - Doit respecter la longueur minimum de mot de passe définie dans la fenêtre Settings
7. (En option) Sélectionner **Password change required at next login** lors de l'ajout d'un nouvel utilisateur.
8. Cliquer sur **Save**.

4.1.1.3.3 Désactivation d'un utilisateur

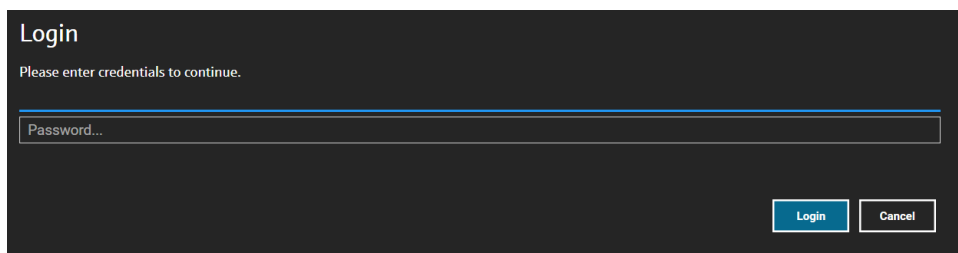
Les comptes utilisateur inactifs de Raman data library peuvent être désactivés. Il est cependant recommandé de les conserver dans Raman data library pour des raisons liées à l'historique et au journal des transactions. Un utilisateur désactivé ne peut pas se connecter.

Pour désactiver un utilisateur

1. Dans la fenêtre Users, sélectionner le compte utilisateur à désactiver.
2. Sélectionner **Account Disabled**.
3. Cliquer sur **Save**.

4.1.1.3.4 Changement d'utilisateur

Cliquer sur **Change User** dans la barre d'outils du ruban supérieur pour changer d'utilisateur. Les informations d'identification de l'utilisateur doivent être saisies correctement pour changer d'utilisateur.



A0055965

Figure 13. Connexion de l'utilisateur

4.1.1.3.5 Changement du mot de passe

Cliquer sur **Change Password** dans la barre d'outils du ruban supérieur pour modifier le mot de passe de l'utilisateur actuel. L'utilisateur doit saisir l'ancien mot de passe, le nouveau mot de passe, puis confirmer le nouveau mot de passe.

Un mot de passe doit répondre à des exigences minimales. Un mot de passe doit contenir au moins un caractère spécial, un mélange de lettres majuscules et minuscules, et respecter la longueur minimale du mot de passe, qui est définie dans la fenêtre Settings.



A0055966

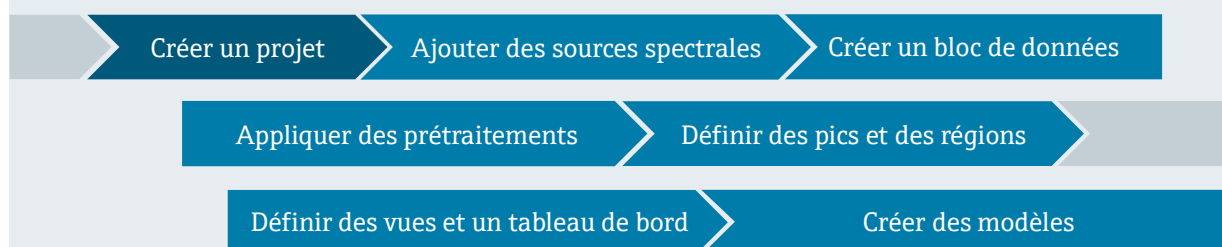
Figure 14. Boîte de dialogue Change Password

Cet élément de menu n'est pas disponible si le mode d'authentification est défini sur Local Windows ou Domain. Avec ces modes d'authentification, les changements de mot de passe sont gérés par le serveur d'authentification sélectionné.

4.2 Fonctionnement du logiciel

Raman data library dispose de fonctionnalités et de fonctions pouvant aider à mettre en place un flux de travail pour l'analyse des données spectrales. Une suggestion de flux de travail est présentée ci-dessous. Une fois qu'une partie du flux de travail est terminée, par exemple l'importation de données ou l'application de prétraitements, le logiciel passe à la prochaine étape de traitement des données.

Suggestion de flux de travail avec Raman data library



Ce manuel est conçu pour suivre ce flux de travail, de l'ajout de données à Raman data library à la création de projets, en passant par l'utilisation de prétraitements et l'analyse des données.

Après avoir installé Raman data library, l'utilisateur doit se familiariser avec l'interface du logiciel afin de développer un flux de travail d'analyse des données qui corresponde à ses besoins. Voir les *Instructions condensées Raman data library* (KA01717C) pour les instructions de démarrage rapide.

4.2.1 Se connecter (version cGxp uniquement)

Dans la version cGxp de Raman data library, l'utilisateur doit se connecter pour ouvrir Raman data library.

Le nom d'utilisateur et le mot de passe de connexion sont des champs obligatoires. Le nom d'utilisateur n'est pas sensible à la casse. Par exemple, le nom d'utilisateur "Jane" est équivalent au nom "jane".

Par mesure de précaution, si un utilisateur fait un nombre configurable de tentatives de connexion infructueuses, il est automatiquement bloqué. Un administrateur doit être contacté pour réactiver tout utilisateur bloqué.

4.2.2 Modes en ligne et hors ligne

Le logiciel Raman data library peut être utilisé dans deux modes différents :

- **En ligne.** Les données d'un analyseur Raman sont transmises en direct au logiciel de modélisation, permettant ainsi une analyse de composition en temps réel.
- **Hors ligne.** Les jeux de données sont importés et peuvent être analysés indépendamment du process en temps réel. En mode hors ligne, il est également possible de créer des modèles à partir d'analytes connus, ce qui permet de modéliser et de créer des modèles de bloc de données à utiliser et à comparer avec les données en temps réel.

L'utilisation de ces deux modes offre la possibilité de comprendre et d'agir sur les spectres Raman collectés dans des environnements de process en temps réel.

4.2.3 Interface utilisateur

Au premier lancement de Raman data library, un tableau de bord vide s'affiche avec des icônes de menu sur la gauche. Le menu de gauche peut être développé. Raman data library s'ouvre sur un tableau de bord vide jusqu'au chargement d'un bloc de données et à la configuration de vues.

Pour que l'interface de Raman data library puisse offrir l'expérience utilisateur prévue, régler l'échelle d'affichage de Windows sur 100 %.

4.2.3.1 Menus

Menu principal

Le menu principal sur le côté gauche de Raman data library permet de naviguer entre les fonctions du logiciel.

Élément de menu	Navigation
 A0055967	Développer/réduire. Afficher ou masquer les éléments de menu.
 A0055968	Tableau de bord. Créer et gérer des tableaux de bord utilisateur.
 A0055969	Blocs de données. Créer et de gérer des blocs de données.
 A0055970	Analyser le bloc de données. Analyser le bloc de données actif. Uniquement activé en présence d'un bloc de données actif. Cet élément contient cinq sous-onglets : ▪ Data ▪ Pretreat ▪ Peaks/Regions ▪ Views ▪ Summary
 A0055971	Champs de données. Créer et de gérer des champs de données.
 A0055972	Sources spectrales. Créer et gérer des sources spectrales (OPC/SPC).

 A0055973	Projets. Créer et gérer des projets.
 A0055974	Utilisateurs. Créer et gérer des utilisateurs. Cette fonctionnalité est disponible uniquement pour la version cGxp de Raman data library.
 A0055975	Paramètres. Gérer les paramètres système. Cette fonctionnalité est disponible uniquement pour la version cGxp de Raman data library.

Ruban de barre d'outils

Le haut de Raman data library contient un ruban de barre d'outils. Ce ruban de barre d'outils permet de :

- **Sélectionner un projet.** La liste Selected Project dans la barre de menu supérieure permet de basculer entre les projets. Pour plus d'informations sur les projets, voir *Projets* → .
- **Change user (version cGxP uniquement).** Un clic sur cet outil permet de passer à un autre utilisateur tout en conservant le programme en cours d'exécution. Pour les descriptions sur les changements d'utilisateurs et les mots de passe, voir *Gestion des utilisateurs (version cGxP uniquement)*.
- **Change password (version cGxP uniquement).** Un clic sur cet outil permet de changer de mot de passe.
- **About.** Un clic sur cet outil permet d'afficher la version du logiciel, le numéro de version, l'ID d'installation et les informations de copyright.



Figure 15. Ruban de barre d'outils

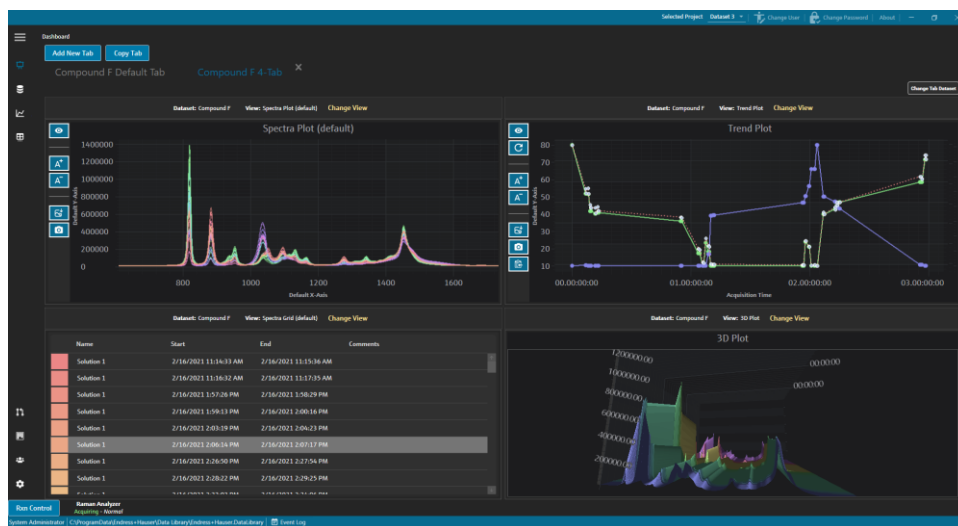
4.2.3.2 Tableau de bord de Data library

Le tableau de bord est la vue principale pour l'analyse de routine. Il affiche des onglets pouvant être configurés pour afficher les tracés de blocs de données enregistrés. Un onglet de tableau de bord peut contenir des vues provenant de plusieurs blocs de données. Un ou plusieurs blocs de données doivent être définis pour afficher les vues sur le tableau de bord.

Pour utiliser le tableau de bord, il faut d'abord suivre une configuration initiale décrite au début de ce chapitre et dans les sections *Ajout de données à Raman data library* →  et *Analyse des blocs de données* → . Se référer également aux *Instructions condensées Raman data library* (KA01717C) pour un guide de démarrage rapide.

Lorsque Raman data library est démarré, les onglets de tableau de bord de la session précédente sont chargés. Si aucun tableau de bord précédent n'a été défini, le tableau de bord est vide, comme lors de la première utilisation du logiciel. Les onglets de tableau de bord précédemment enregistrés peuvent être rechargés en cliquant sur **Launch Dashboard** dans l'onglet Summary de la fenêtre Analyze Dataset. Les onglets de tableau de bord sont automatiquement enregistrés lorsque Raman data library est fermé.

Lorsque le tableau de bord est configuré et démarré pour un nouveau bloc de données, il offre deux vues par défaut : la grille spectrale et le tracé spectral. Des vues supplémentaires pour un bloc de données sont définies à partir du bloc de données d'analyse, sous l'onglet **Views**. Voir *Création de vues de tableau de bord : grilles, tendances, spectres et tracés 3D* →  pour plus de détails sur la définition des vues.



A0055976

Figure 16. Tableau de bord à 4 vues

Les options suivantes sont disponibles dans le tableau de bord :

- **Add New Tab.** Ajoute un nouveau tableau de bord. Lors de l'ajout d'un nouvel onglet de tableau de bord, l'utilisateur est invité à sélectionner le nombre de vues (1 à 4). Un onglet de tableau de bord peut contenir des vues provenant de plusieurs blocs de données.
- **Copy Tab.** Crée une copie de l'onglet de tableau de bord actuel.
- **Change View.** Modifie la vue du bloc de données en permettant à l'utilisateur de sélectionner un autre tracé ou une autre grille.
- **Change Tab Dataset.** Sélectionne un bloc de données et supprime toutes les vues d'un onglet de tableau de bord. Le bloc de données sélectionné est chargé de sorte que les vues des tracés du bloc de données sélectionné peuvent être rapidement ajoutées à l'onglet de tableau de bord.
- **X.** Ferme un onglet de tableau de bord.

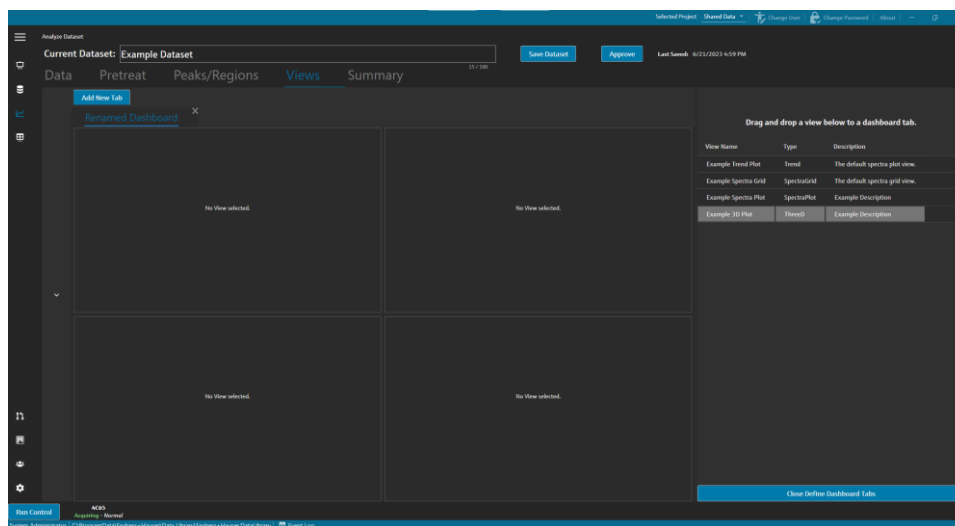
Création d'un nouveau tableau de bord

Cette procédure nécessite les actions préalables suivantes : ajout de sources spectrales, création d'un bloc de données à partir de ces sources et démarrage d'un tableau de bord initial à partir de la fenêtre Analyze Dataset. Voir *Ajout de données à Raman data library* → et *Analyse des blocs de données* → pour les instructions.

1. À partir du tableau de bord, cliquer sur **Add New Tab**.

La liste Add New Tab ajoute une sélection du nombre de vues sur le nouveau tableau de bord.

2. Dans la liste **Add New Tab**, sélectionner le nombre de vues affichées par le nouveau tableau de bord (1 à 4). Lorsqu'un nouveau tableau de bord est créé, aucune vue de tracé ou de grille n'est affichée.



A0055977

Figure 17. Tableau de bord vide

Pour créer une vue qui affiche plus que les vues par défaut du tracé spectral et de la grille spectrale, il faut ajouter des vues sur la fenêtre Analyze Dataset.

3. Définir les vues en suivant les instructions sous *Création de vues de tableau de bord : grilles, tendances, spectres et tracés 3D* → . Retour au tableau de bord.
4. Sur le nouveau tableau de bord, cliquer sur **Change View**.
La boîte de dialogue Change view s'affiche.
5. Sélectionner la source du bloc de données, puis sélectionner la vue. Cliquer sur **Change View**.

La nouvelle vue s'affiche sur le tableau de bord. Pour renommer un tableau de bord, double-cliquer sur le nom du tableau de bord.

Pour enregistrer un tableau de bord, il faut le définir et l'enregistrer dans l'onglet Views. Voir *Création de vues de tableau de bord : grilles, tendances, spectres et tracés 3D* → pour plus d'informations.

4.3 Ajout de données à Raman data library

Ce chapitre fournit des instructions sur la création de flux de données, de sources spectrales et d'importation de fichiers SPC à des blocs de données. L'ajout de données à Raman data library peut être automatique ou manuel. La collecte automatique de données est configurée dans la fenêtre des sources spectrales. Les importations manuelles de fichiers SPC sont effectuées via la fenêtre des blocs de données.

Il existe trois façons d'importer des spectres Raman dans Raman data library :

- Importation manuelle des dossiers contenant des fichiers SPC
- Importation automatique de fichiers SPC à partir d'un dossier surveillé
- Importation automatique d'une connexion OPC vers Raman RunTime

4.3.1 Projets

Les projets contiennent et organisent des données. Pour importer des données dans Raman data library, il faut d'abord créer un conteneur de projet pour les données. Les options suivantes sont disponibles dans la fenêtre des projets :

- **Add New.** Ajouter un nouveau projet.
- **Projects Event Log.** (Version cGxP uniquement) Afficher un journal d'événements pour tous les projets.
- **Event Log.** (Version cGxP uniquement) Afficher le journal d'événements d'un projet spécifique.
- **Remove.** Supprimer le projet sélectionné. Dans la version cGxP de Raman data library, le rôle Data Remover est nécessaire pour supprimer un projet.
- **Save.** Enregistrer un projet sélectionné.

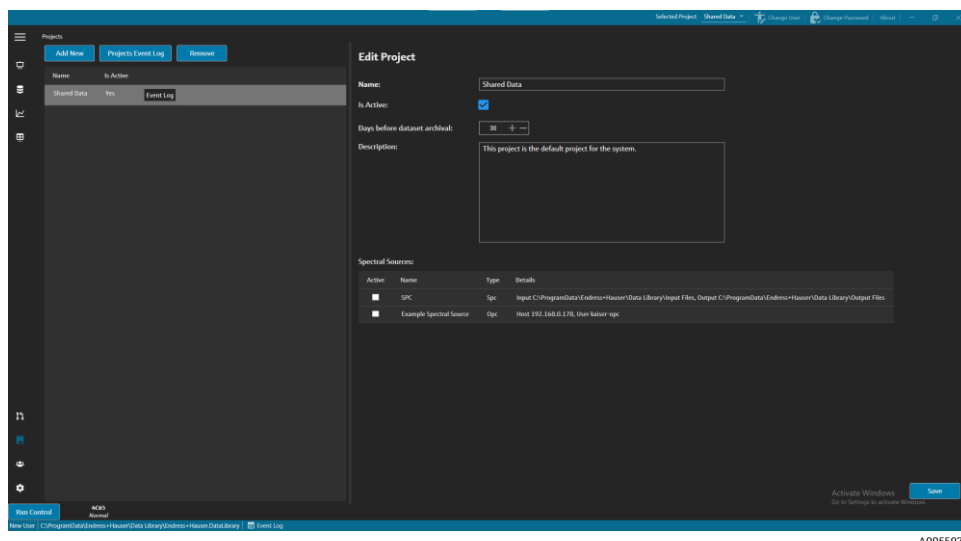


Figure 18. Fenêtre Projects

4.3.1.1 Ajout d'un nouveau projet

Pour ajouter un projet

1. Dans la fenêtre Projects , cliquer sur **Add New**.
Le volet Edit Project s'affiche.
2. Entrer les informations suivantes :
 - **Name.** Nom du projet.
 - **Is Active.** Indique si le projet est actif ou non. Si la case Is Active n'est pas cochée, le projet n'apparaît pas dans la liste de projets sélectionnée dans la barre de menus.
 - **Days before dataset archival.** Nombre de jours avant que les blocs de données ne soient automatiquement archivés et masqués dans la fenêtre des blocs de données. Les blocs de données archivés peuvent être visualisés dans la fenêtre des blocs de données en cochant la case Show Archived Datasets.
 - **Description.** Description du projet.
 - **Spectral sources.** Détermine quelles sources spectrales sont actives pour le projet sélectionné.
Les spectres, les champs de données et les blocs de données créés dans un projet ne peuvent pas être visualisés dans un autre projet. Cependant, avec les projets de données partagées, les données stockées dans un projet peuvent être partagées avec d'autres projets. Cette fonction est utile pour stocker des spectres de référence ou des champs de données communs afin de pouvoir les inclure facilement dans plusieurs projets. Pour créer un projet de données partagées, sélectionner dans la liste toutes les sources de données qui s'appliquent au projet.
3. Cliquer sur **Save**.

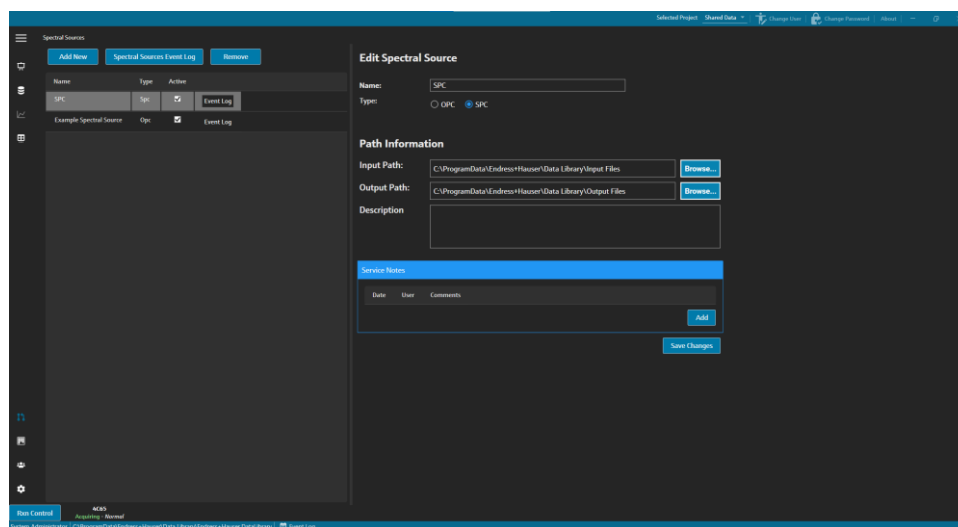
4.3.2 Sources spectrales

Les sources spectrales sont des sources de données spectrales. Une source spectrale peut être un dossier d'entrée surveillé contenant des fichiers spectroscopiques (.spc) ou des spectres transférés en temps réel via une connexion OPC à un analyseur Raman Rxn. Avec la version cGxp de Raman data library, le rôle de gestionnaire des sources spectrales est nécessaire pour ajouter ou modifier des sources spectrales.

Les options suivantes peuvent être sélectionnées à partir de la fenêtre Spectral sources :

- **Add New.** Créer une nouvelle source spectrale.
- **Spectral Sources Event Log.** Afficher le journal d'événements pour toutes les sources spectrales.
- **Event Log.** Afficher le journal d'événements d'une source spectrale spécifique.
- **Remove.** Retirer la source spectrale sélectionnée. Dans la version cGxp de Raman data library, le rôle Data Remover est requis pour supprimer une source spectrale.
- **Name.** Nom d'affichage de la source spectrale.

- **Type.** Type de la source spectrale, OPC ou SPC.



A0055979

Figure 19. Fenêtre des sources spectrales

4.3.2.1 Ajout d'une source spectrale OPC

Une source spectrale OPC peut être créée pour permettre à Raman data library de mettre en place une connexion client OPC unified automation (UA) à un serveur OPC Raman RunTime. La connexion OPC permet aux utilisateurs de visualiser, de gérer et de collecter des spectres provenant de systèmes d'analyseurs Raman Rxn Endress+Hauser. Plusieurs analyseurs Raman (jusqu'à 4) peuvent être connectés à Raman data library.

Au minimum, Raman RunTime v6.4 est nécessaire pour établir une connexion OPC entre Raman data library et Raman RunTime. Les analyseurs Raman Rxn utilisant des versions de Raman RunTime antérieures à v6.4 peuvent utiliser une source spectrale SPC comme décrit sous *Ajout d'une source spectrale SPC* → .

En cas d'utilisation d'une source spectrale OPC, désactiver la fonction de veille de l'appareil dans les paramètres Windows.

Pour ajouter une source spectrale OPC

1. Dans la fenêtre Spectral sources, cliquer sur **Add New**.
Le volet Edit Spectral source s'affiche.

Figure 20. Modifier une source spectrale OPC

2. Entrer un nom pour la source spectrale.
3. Sélectionner **OPC**.
4. Renseigner les paramètres de connexion suivants :
 - **Host Name.** Nom d'hôte du serveur OPC Raman RunTime.
 - **Username.** Le nom d'utilisateur utilisé pour la création de la connexion OPC au serveur OPC Raman RunTime. Le nom d'utilisateur par défaut est **kaiser-opc**.
 - **Password.** Le mot de passe utilisé pour la création de la connexion OPC au serveur OPC Raman RunTime. Le mot de passe par défaut est **opc**.
 - **Description.** Une description facultative de la source spectrale OPC.
 - **Status.** État de la source spectrale OPC : Active ou Inactive.
 - **Service Notes.** Commentaires du personnel de maintenance ou de l'utilisateur concernant la source spectrale OPC. Cliquer sur **Add** pour ajouter une nouvelle note de maintenance.
5. Cliquer sur **Test Connection** pour vérifier la connexion au serveur OPC Raman RunTime.
 Pour garantir une connexion réussie :
 - Effectuer un test de connexion avant d'enregistrer une source spectrale OPC.
 - Si la connexion de test ne réussit pas, s'assurer que l'analyseur Raman est sous tension, disponible et connecté au réseau, et que les ports réseau définis dans la *configuration du réseau Raman Rxn2 et Raman Rxn4* dans le *manuel de mise en service Raman RunTime* (BA02180C) sont configurés correctement.
 - L'échec de la connexion peut simplement être dû à une mauvaise configuration de la résolution de nom d'hôte dans le réseau local informatique/de technologie opérationnelle. Contacter l'administrateur informatique local.
 - En alternative aux données d'identification OPC par défaut, il est également possible d'utiliser les données d'identification utilisateur de l'un des comptes utilisateur configurés sur l'analyseur Raman RunTime pour authentifier la connexion OPC de l'analyseur.
6. Cliquer sur **Save Changes**.

Si la connexion a bien été établie, un message s'affiche et la barre d'outils de commande Rxn apparaît sur le ruban du bas en indiquant le nom de la source spectrale et son état.

4.3.2.2 Ajout d'une source spectrale SPC

La fonction de source spectrale SPC importe automatiquement les spectres des analyseurs Raman Rxn dotés d'une version de Raman RunTime antérieure à v6.4. Cela permet également d'utiliser Raman data library avec des solutions logicielles Raman Endress+Hauser héritées. L'ajout d'une source spectrale SPC permet à Raman data library d'importer et de stocker automatiquement les fichiers .spc dans sa base de données et de les mettre à disposition pour les blocs de données.

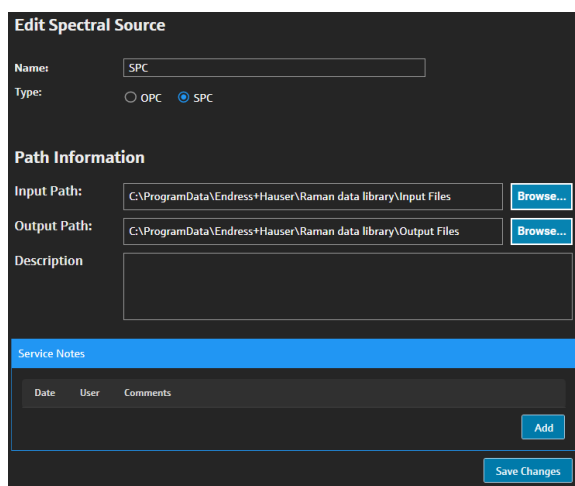
La source spectrale SPC nécessite un chemin d'entrée, utilisé par Raman data library pour rechercher les nouveaux fichiers et les importer, ainsi qu'un chemin de sortie lui indiquant où placer les fichiers SPC après les avoir importés.

Pour obtenir des instructions concernant l'exportation de fichiers .spc à partir du logiciel Raman RunTime, voir *Exportation du réseau de fichiers SPC* dans le *manuel de mise en service Raman RunTime* (BA02180C).

Pour ajouter une source spectrale SPC

- Sur l'ordinateur de Raman data library, créer un ou plusieurs dossier(s) .spc :
 - Avec les versions de Raman RunTime antérieures à v6.4, créer un dossier nommé **Output spectra**.
 - Pour les solutions logicielles héritées, créer deux dossiers. L'un doit être nommé **Input spectra** et l'autre **Output spectra**. Les fichiers SPC de solutions logicielles Raman héritées doivent être dirigés vers le dossier **Input spectra**.
- Cliquer sur **Spectral sources**  puis sur **Add New**.

Le volet Edit Spectral source s'affiche.



A0055981

Figure 21. Modifier une source spectrale SPC

- Entrer un nom pour la source spectrale.
- Sélectionner SPC.
- Dans **Input Path** :
 - Avec les versions de Raman RunTime antérieures à v6.4, naviguer jusqu'au dossier DataLibraryBatchExport partagé sur le réseau avec le chemin `\\nom de l'ordinateur ou adresse IP\DataLibraryBatchExport`.
 - Pour les solutions logicielles héritées, indiquer le chemin **Input path** vers le répertoire de sortie du logiciel hérité.
- Dans **Output Path**, naviguer jusqu'au dossier de sortie de spectres créé à l'Step 1. Il s'agit du chemin du répertoire utilisé pour la sortie des fichiers .spc après leur importation dans le système.
- (Facultatif) Entrer les données suivantes :
 - Description**. Une description de la source spectrale SPC.
 - Service Notes**. Commentaires de l'utilisateur concernant la source spectrale SPC. Cliquer sur le bouton **Add** pour ajouter une nouvelle note de maintenance.
- Cliquer sur **Save changes** et confirmer l'invite avec OK.

Dans le cas des versions de Raman RunTime antérieures à v6.4, le dossier partagé sur le réseau DataLibraryBatchExport contient des sous-dossiers et des fichiers .spc obtenus sur l'analyseur Raman. Une fois les

fichiers .spc importés et ajoutés dans Raman data library, ils sont déplacés de ce répertoire réseau vers le dossier Output spectra créé ci-avant. Tous les fichiers .spc sont conservés sur l'analyseur Raman. Les fichiers sont uniquement sortis du dossier DataLibraryBatchExport.

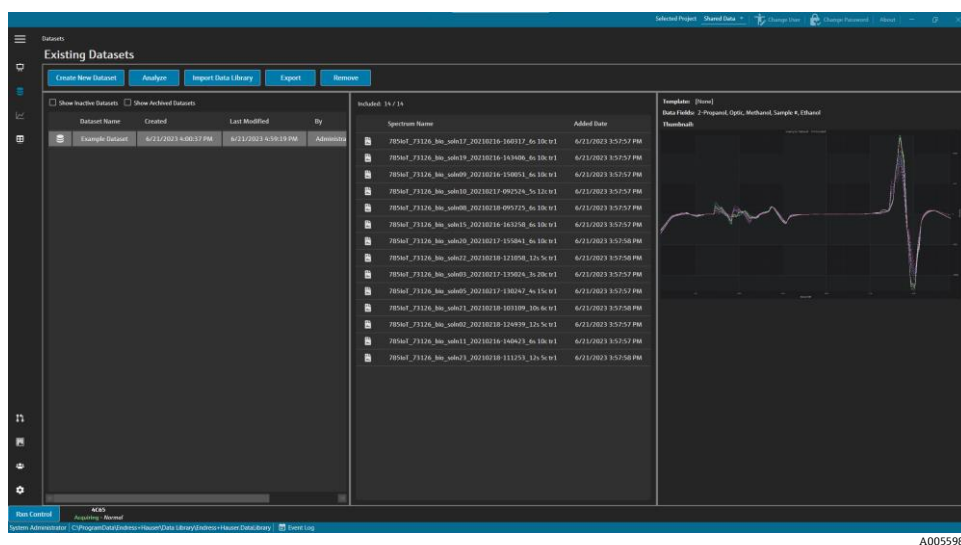
4.3.3 Blocs de données

La fenêtre Datasets permet de créer, d'afficher, d'importer, d'exporter et de supprimer des blocs de données. Des informations sommaires sur les blocs de données peuvent être consultées pour les blocs de données existants.

Dans Raman data library, un bloc de données contient au minimum un spectre. Les blocs de données peuvent être combinés pour l'analyse ou la modélisation dans le logiciel, ou pour l'exportation vers des programmes externes. Pour analyser les spectres en utilisant un bloc de données, sélectionner au moins 1 spectre.

Les options suivantes peuvent être sélectionnées dans la fenêtre Datasets :

- **Create New Dataset.** Affiche le volet **Create Dataset**. Dans la version cGxP de Raman data library, le rôle Data Operator est requis pour créer de nouveaux blocs de données.
- **Analyze.** Ouvre le bloc de données sélectionné et affiche le bloc de données dans la fenêtre Analyze.
- **Import Data Library.** Importe un fichier de bloc de données existant (.dlexport).
- **Export.** Affiche le volet Export.
- **Remove.** Supprime le bloc de données sélectionné. Pour supprimer un bloc de données, l'utilisateur doit être connecté avec le rôle Data Remover.
- **Show Inactive Datasets.** Affiche les blocs de données qui ont été marqués "Inactive".
- **Show Archived Datasets.** Affiche les blocs de données qui ont été marqués "Archived". Les blocs de données sont automatiquement marqués comme archivés après un nombre de jours configurable. La valeur "Days before dataset archival" peut être modifiée dans la fenêtre Projects.



A0055982

Figure 22. Blocs de données existants

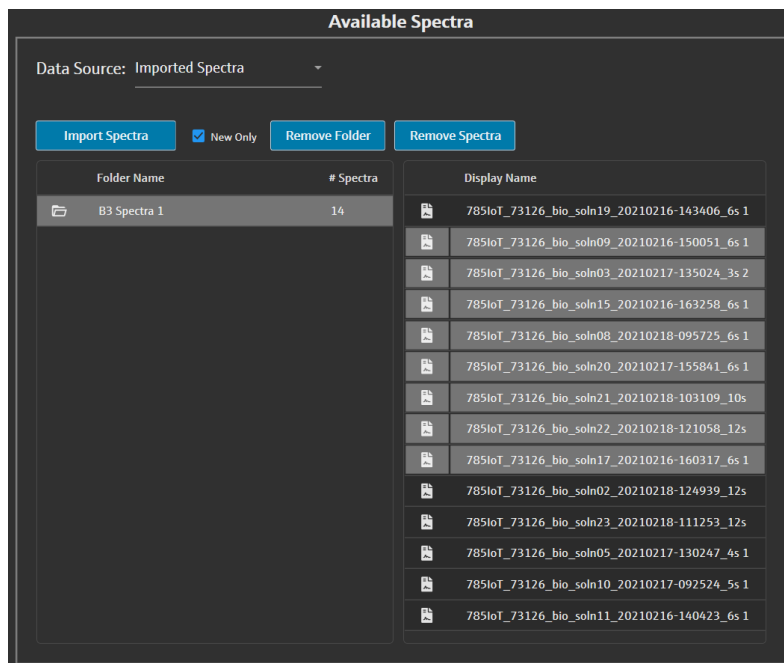
4.3.3.1 Creating a dataset

Il est possible de sélectionner des données à partir de diverses sources pour choisir les spectres à inclure dans un bloc de données. Les données peuvent être obtenues des manières suivantes :

- **Imported Spectra.** Cette sélection affiche tous les dossiers et spectres disponibles qui ont été importés dans Raman data library.
- **Reference Spectra.** Cette sélection affiche tous les spectres qui ont été marqués comme spectre de référence.
- **Search.** Cette sélection permet aux utilisateurs de rechercher des spectres répondant à des critères définis. Les critères de recherche peuvent être ajoutés ou supprimés individuellement. Les spectres peuvent être recherchés par un champ de nom, de date de début, de date de fin, ou par toute valeur de données définie pour les champs de données définis comme consultables.

- **Existing Datasets.** Cette sélection permet aux utilisateurs de rechercher des spectres qui existent dans un autre bloc de données. Une vue sommaire du bloc de données sélectionné s'affiche. Lorsque l'on clique sur **Include** ➤, tous les spectres du bloc de données sélectionné sont inclus.
- **Folders.** Cette sélection répertorie les spectres collectés par le biais d'une connexion OPC à Raman RunTime, qui sont stockés dans des dossiers situés sur l'ordinateur de Raman data library.

Une fois les spectres disponibles sélectionnés, utiliser **Include** ➤ pour inclure les spectres sélectionnés dans le nouveau bloc de données. Pour supprimer des spectres d'un nouveau bloc de données, sélectionner les spectres inclus et cliquer sur **Remove**.

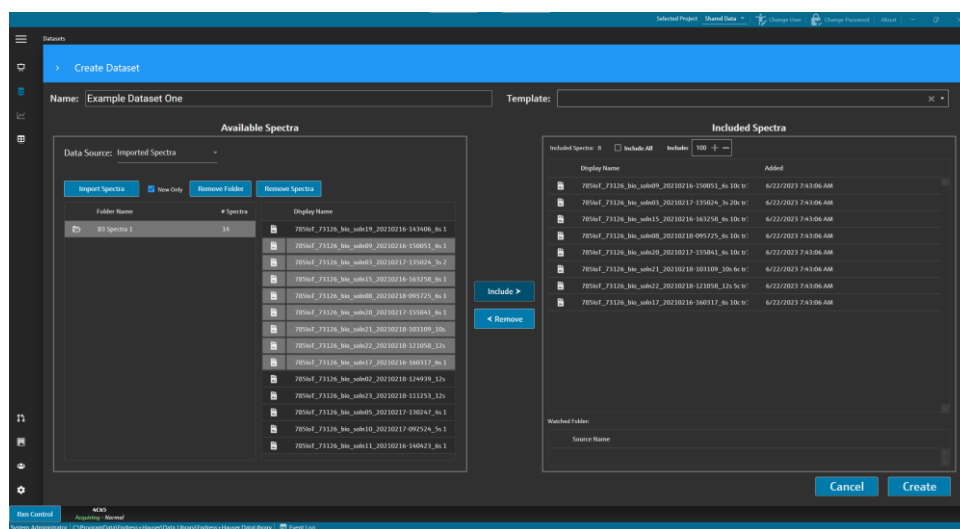


A0055983

Figure 23. Volet Data source, Imported spectra

Pour créer un bloc de données

1. Dans le menu principal, cliquer sur **Datasets** .
2. Cliquer sur **Create New Dataset**.
La fenêtre Create Dataset s'affiche.



A0055984

Figure 24. Fenêtre Create Dataset

3. Entrer les informations suivantes dans la fenêtre Create Dataset :
 - **Name.** Nom du nouveau bloc de données. Les noms des blocs de données doivent être uniques et comporter de 1 à 100 caractères.
 - **Template.** Modèle à utiliser lors de la création du bloc de données. Les modèles peuvent être utilisés pour appliquer automatiquement des champs de données présélectionnés, des prétraitements, des pics, des régions, des vues et des onglets de tableau de bord à un nouveau bloc de données.
4. Les options suivantes peuvent être sélectionnées dans la liste Data Source :
 - **Import Spectra** permet de sélectionner un dossier contenant des fichiers de spectres (.spc).
 - **Reference Spectra** permet de sélectionner des spectres ayant été marqués comme spectre de référence.
 - **Search** permet de rechercher des spectres qui répondent à des critères définis. Les spectres peuvent être recherchés par un champ de nom, date de début, date de fin ou d'autres valeurs de données.
 - **Existing Datasets** permet de rechercher des spectres qui existent dans un autre bloc de données. Lorsque l'on clique sur **Include ►**, tous les spectres du bloc de données sélectionné sont inclus.
 - **Folders** permet de sélectionner les spectres collectés par le biais d'une connexion OPC à Raman RunTime, qui sont stockés dans des dossiers situés sur l'ordinateur de Raman data library. Les noms de fichiers des spectres ne sont pas affichés dans le navigateur de dossiers.
5. Dans la fenêtre **Available Spectra**, sélectionner les spectres à inclure (**Include**) ou cliquer sur **Include All** dans la fenêtre Included Spectra pour importer tous les spectres dans le dossier.
Les spectres ajoutés dans le nouveau bloc de données sont affichés sous **Included Spectra**.
6. Dans la fenêtre **Included Spectra**, sélectionner les spectres à supprimer (**Remove**).
 - Sélectionner **Include All** pour inclure tous les spectres à partir de la sélection effectuée dans l'Step 5, ou n'inclure qu'un sous-ensemble de la sélection dans lequel le logiciel sélectionne tous les deux ou trois spectres.
 - Cliquer sur **Remove Folder** pour supprimer le dossier sélectionné et tous les spectres dans ce dossier. Dans la version cGxp de Raman data library, le rôle Data Remover est nécessaire pour supprimer un dossier.
 - Cliquer sur **Remove Spectra** pour supprimer les spectres sélectionnés du bloc de données. Dans la version cGxp de Raman data library, le rôle Data Remover est nécessaire pour supprimer des spectres.
7. Cliquer sur **Create**.
Le flux de travail de Raman data library crée le nouveau bloc de données et se déplace le long du flux de travail jusqu'à la fenêtre Analyser.
8. Cliquer sur **Save Dataset**.

4.3.3.2 Enregistrement d'un bloc de données

Les blocs de données ne sont pas automatiquement enregistrés dans Raman data library, sauf lorsque la collecte d'un bloc de données est lancée à partir de Raman data library. Il est important de prendre l'habitude de sauvegarder régulièrement les blocs de données.

Les blocs de données peuvent être enregistrés dans la fenêtre Analyze Dataset. Si Raman data library est fermé avant l'enregistrement du bloc de données, toutes les modifications sont perdues.

Pour enregistrer un bloc de données

1. Dans le menu principal, cliquer sur **Analyze Dataset** .
2. Cliquer sur **Save Dataset**.

La première fois qu'un bloc de données est enregistré, cela peut prendre quelques minutes. Les enregistrements ultérieurs sont plus rapides. Après avoir enregistré un bloc de données, le champ **Last Saved** est mis à jour pour indiquer la date et l'heure du dernier enregistrement.

4.3.3.3 Approbation d'un bloc de données

Les blocs de données approuvés sont en *lecture seule* et ne peuvent pas être modifiés. La fenêtre Analyze Dataset permet d'approuver ou de révoquer l'approbation d'un bloc de données.

Pour approuver ou révoquer l'approbation d'un bloc de données

- Dans la fenêtre Analyze Dataset, cliquer sur **Approve** pour marquer un bloc de données comme Approuvé.
- Cliquer sur **Unapprove** pour révoquer l'approbation du bloc de données.

4.3.4 Champs de données

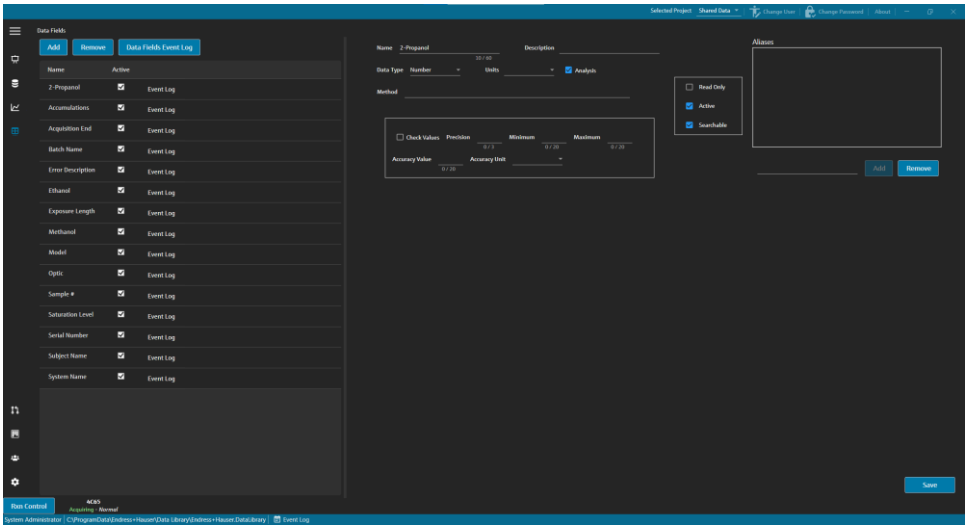
Les champs de données sont des informations qualitatives et quantitatives associées à un spectre. Pour l'analyse quantitative, l'utilisateur peut spécifier la précision, les unités, les détails de la méthode primaire et d'autres informations relatives au spectre.

Raman data library recueille des informations prédéfinies sur les champs de données à partir du journal SPC ou des sources de données OPC. Les unités et les valeurs des données affichées dans la liste des champs de données peuvent varier en fonction de la manière dont les spectres sont récupérés. L'importation de données via OPC à partir de Raman RunTime v6.4+ remplit automatiquement la plupart des champs de données par défaut. Des alias peuvent être ajoutés aux champs de données afin de réduire les erreurs d'utilisation lors des importations.

La fenêtre Data Fields permet d'ajouter, de mettre à jour et de supprimer des champs de données. Dans la version cGxP de Raman data library, l'utilisateur doit être connecté avec le rôle Data Fields Manager pour apporter des modifications aux champs de données.

Les options suivantes peuvent être sélectionnées dans la fenêtre Data Fields :

- **Add.** Crée un nouveau champ de données.
- **Remove.** Supprime le champ de données sélectionné. Dans la version cGxP de Raman data library, le rôle Data Remover est requis pour supprimer un champ de données.
- **Data Fields Event Log.** (Version cGxp uniquement) Affiche le journal d'événements pour tous les champs de données.
- **Event Log.** (Version cGxp uniquement) Affiche le journal d'événements d'un champ de données spécifique.
- **Save.** Enregistre le champ de données sélectionné.



A0055985

Figure 25. Fenêtre Data Fields

Propriétés de la fenêtre Data fields

Propriété	Signification
Name	Nom du champ de données.
Description	Description du champ de données.

Propriété	Signification
Aliases	Des alias pour les variations courantes de l'orthographe et de l'étiquetage peuvent être ajoutés pour réduire les erreurs d'utilisation. Par exemple, <i>Concentration</i> , <i>concentration</i> et <i>Conc.</i> peuvent correspondre au même nom de champ de données. L'ajout d'un alias permet d'éviter les erreurs de collecte courantes lors de l'importation de données et d'automatiser le marquage tout au long du flux de travail. Les alias sont utilisés lors de l'importation de données pour correspondre à un en-tête de colonne dans Excel. Un alias peut être ajouté ou supprimé ici.
Data Type	Type de valeur de données pouvant être entré pour le champ de données : ▪ Booléen ▪ Nombre ▪ Date ▪ Texte
Units	Unités utilisées pour le type de données.
Analysis	Les champs de données marqués 'Analysis' peuvent être utilisés dans des opérations d'analyse.
Method	Champ descriptif pour indiquer la méthode d'acquisition.
Read Only	Les champs de données marqués 'Read Only' (Lecture seule) ne peuvent pas être modifiés.
Active	Les champs de données marqués 'Active' apparaissent dans la fenêtre Analysis.
Searchable	Les champs de données marqués 'Searchable' peuvent être recherchés.
Check Values	Les champs de données marqués 'Check Values' excluent automatiquement les valeurs de données qui ne répondent pas aux exigences indiquées dans les champs Precision, Minimum, Maximum et Accuracy Value.
Precision	Cette valeur désigne le nombre requis de chiffres après la virgule.
Minimum	Limite inférieure pour les valeurs.
Maximum	Limite supérieure pour les valeurs.
Accuracy Value	Champ descriptif indiquant la valeur de précision.
Accuracy Unit	Champ descriptif indiquant l'unité de précision.

Pour ajouter un champ de données

1. Dans la fenêtre Data fields, cliquer sur **Add**.
2. Entrer les propriétés du champ de données. Voir le tableau des propriétés du champ de données ci-dessus.
3. Cliquer sur **Save**.

4.4 Analyse des blocs de données

La fenêtre Analyze Dataset est utilisée pour effectuer des opérations, des calculs et des analyses des blocs de données. La fenêtre Analyze Dataset est composée de 5 onglets principaux :

- Data
- Pretreat
- Peaks/Regions
- Views
- Summary

4.4.1 Visualisation des blocs de données

L'onglet Data est utilisé pour l'analyse des données spectrales. Les tuiles de l'onglet "Data" peuvent être configurées pour afficher des données spécifiques, être redimensionnées ou masquées en faisant glisser le bord gauche d'une tuile vers l'extrême droite.

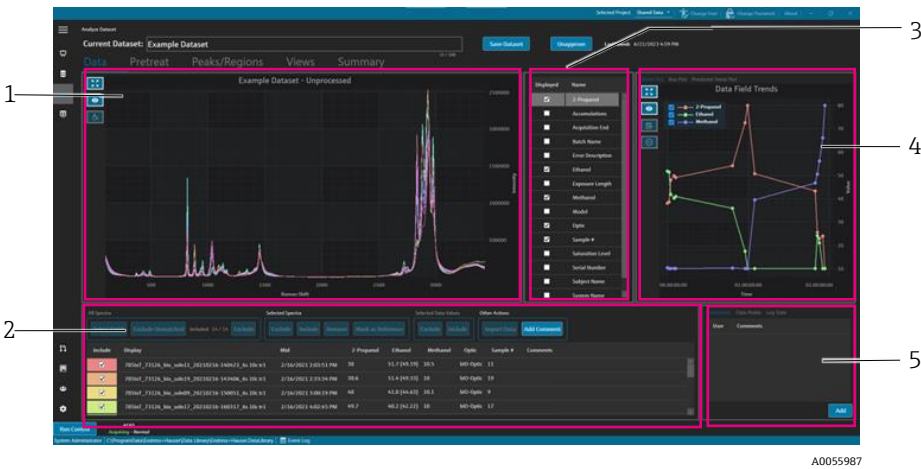


Figure 26. Onglet Data

Pos.	Description
1	Tracé spectral. Affiche les spectres non traités inclus dans le bloc de données. Les couleurs parcourent le spectre de l'arc-en-ciel (rose, orange, jaune... violet, rose).
2	Grille spectrale. Listes des spectres et valeurs de données associées pour les champs de données affichés. Fournit des options pour inclure ou exclure des spectres et des valeurs de données, et pour importer des données de référence.
3	Liste de champs de données. Permet d'alterner les champs de données affichés. Lorsqu'ils sont activés, ils peuvent être utilisés pour l'analyse et sont répertoriés dans la grille spectrale.
4	Tracé de champ de données. Affiche les champs de données sous la forme d'un tracé de tendance, d'un tracé en boîte ou d'un tracé de tendance prédite.
5	Autre zone d'information. Permet d'ajouter des commentaires aux spectres, de visualiser les informations de journal et les points de données.

4.4.1.1 Tracé spectral

Sur l'onglet Data, un tracé de données spectrales est affiché. Le tracé spectral montre tous les spectres inclus dans leur forme non traitée.

Navigation au sein du tracé spectral

Élément de navigation	Navigation
—	Cliquer et dessiner une boîte dans le tracé spectral pour zoomer sur une zone spécifique. Pour revenir en arrière, double-cliquer sur le tracé avec le bouton gauche de la souris.
 A0055988	Zoom intégral. Zoom sur l'intégralité des données. Ce bouton est affiché sur la plupart des tracés.
 A0055989	Afficher/masquer légende. Affiche ou masque la légende. Ce bouton est affiché sur la plupart des tracés.
 A0055990	Style spectre. Modifie la couleur du spectre sélectionné.

Modification d'un nom de spectre de référence

Il est possible de renommer un spectre spécifique, par exemple si l'on sait que le premier spectre collecté contient 100 % d'un analyte.

1. Dans le volet de la grille spectrale, sélectionner le spectre.
2. Cliquer avec le bouton droit, puis sélectionner **Mark as Reference** ou cliquer sur le bouton **Mark as Reference**.
La boîte de dialogue requise pour renommer le spectre s'affiche.
3. Entrer un nom approprié pour les spectres de référence, puis cliquer sur OK.
4. Afficher la légende du tracé spectral et vérifier que le spectre de référence est bien renommé.
5. Cliquer sur **Save Dataset**.

Pour rétablir le nom d'origine d'un spectre, cliquer sur **Select Fields**, puis sélectionner **Name**, puis **Close**. Le nom de spectre original apparaît dans la liste. Les noms affichés peuvent être modifiés, mais pas le nom original du logiciel de collecte.

Modification d'une couleur d'affichage du spectre

La couleur d'un spectre spécifique peut être modifiée, par exemple si l'on souhaite que le spectre de référence contraste visuellement avec d'autres spectres.

1. Dans le volet de la grille spectrale, sélectionner le spectre.
2. Cliquer sur **Style Spectre** , puis sélectionner la couleur souhaitée.
Le spectre s'affiche désormais dans la nouvelle couleur.
3. Cliquer sur **Save Dataset**.

4.4.1.2 Sélection des champs de données

Les champs de données sont répertoriés à droite du volet du tracé spectral. Des champs de données spécifiques peuvent être affichés ou retirés de l'affichage en cochant ou décochant la colonne **Displayed**. Si un champ de données est marqué "Displayed", il peut être utilisé dans l'analyse et est inclus dans l'exportation des données. Les champs de données affichés sont inclus dans les modèles. Voir *Création de modèles* →  pour plus d'informations.

Pour sélectionner des champs de données dans la liste Data fields, sélectionner **Displayed** à côté du champ que l'on souhaite afficher. Les champs sélectionnés sont maintenant affichés dans la grille spectrale. La première sélection de la liste des champs de données peut être retardée avant d'être affichée. Les champs de données suivants s'affichent rapidement.

La liste des champs de données peut être éditée. Voir *Champ de données* →  pour plus d'informations.

Pour sélectionner des champs de données dans la grille spectrale

1. Cliquer sur **Select Fields** dans la grille spectrale.
La fenêtre de sélection de champ s'affiche.

2. Sélectionner les champs souhaités. Les champs par défaut de Raman RunTime sont les suivants :

- Nom
- Nom d'affichage
- Date et heure de début
- Date et heure de fin
- Date et heure intermédiaire
- Erreur

3. Cliquer sur **Close**.

Les champs sélectionnés sont maintenant affichés dans la grille spectrale.

4.4.1.3 Tracé des tendances de champ de données

Un tracé des tendances de champ de données est affiché à la droite de la liste de champs de données. Le tracé des tendances de champ de données montre les valeurs de données du spectre au fil du temps.



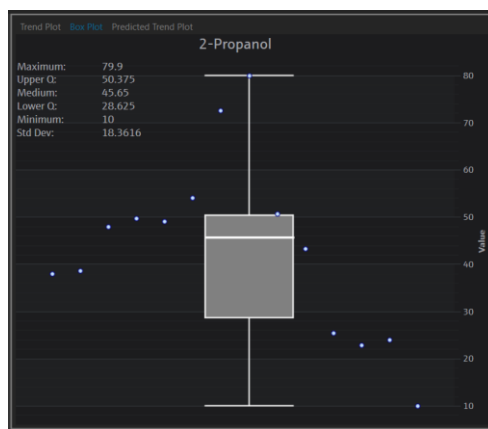
Figure 27. Tracé des tendances de champ de données

Les options suivantes sont disponibles dans le volet Data Field Trends :

Élément de navigation	Navigation
 A0055988	Zoom intégral. Zoom sur l'intégralité des données. Ce bouton est affiché sur la plupart des tracés.
 A0055989	Afficher/masquer légende. Affiche ou masque la légende. Ce bouton est affiché sur la plupart des tracés.
 A0055992	Copier les données de tracé dans le Presse-papiers. Copie les données de tracé de tendance actuelles dans le Presse-papiers.
 A0055993	Exclure points. Exclure les valeurs données sélectionnées.

4.4.1.4 Box plot

L'onglet Box Plot affiche un tracé en boîte pour le champ de données sélectionné. Le maximum, le quartile supérieur, la médiane, le quartile inférieur, le minimum et l'écart type du champ de données sont affichés. Le tracé en boîte peut être utile lors de l'analyse d'échantillons de données non séquentielles.



A0055994

Figure 28. Box plot

4.4.1.5 Tracé des tendances prédites de champs de données

L'onglet Predicted Trend Plot affiche les valeurs de données spectrales prédites au fil du temps.



A0055995

Figure 29. Tracé des tendances prédites de champs de données

4.4.1.6 Grille spectrale

Au bas de l'onglet Data, la grille spectrale affiche les spectres et leurs valeurs de données associées pour les champs affichés.

All Spectra		Selected Spectra				Selected Data Values		Other Actions	
Select Fields		Exclude Unmatched		Included: 8 / 8		Exclude		Exclude	
Exclude		Include		Remove		Mark as Reference		Exclude	
Exclude		Include		Remove		Mark as Reference		Exclude	
Exclude		Include		Remove		Mark as Reference		Exclude	
Exclude		Include		Remove		Mark as Reference		Exclude	
Exclude		Include		Remove		Mark as Reference		Exclude	
Exclude		Include		Remove		Mark as Reference		Exclude	
Exclude		Include		Remove		Mark as Reference		Exclude	
Exclude		Include		Remove		Mark as Reference		Exclude	
Exclude		Include		Remove		Mark as Reference		Exclude	
Exclude		Include		Remove		Mark as Reference		Exclude	
Exclude		Include		Remove		Mark as Reference		Exclude	
Exclude		Include		Remove		Mark as Reference		Exclude	
Exclude		Include		Remove		Mark as Reference		Exclude	
Exclude		Include		Remove		Mark as Reference		Exclude	
Exclude		Include		Remove		Mark as Reference		Exclude	
Exclude		Include		Remove		Mark as Reference		Exclude	
Exclude		Include		Remove		Mark as Reference		Exclude	
Exclude		Include		Remove		Mark as Reference		Exclude	
Exclude		Include		Remove		Mark as Reference		Exclude	
Exclude		Include		Remove		Mark as Reference		Exclude	
Exclude		Include		Remove		Mark as Reference		Exclude	
Exclude		Include		Remove		Mark as Reference		Exclude	
Exclude		Include		Remove		Mark as Reference		Exclude	
Exclude		Include		Remove		Mark as Reference		Exclude	
Exclude		Include		Remove		Mark as Reference		Exclude	
Exclude		Include		Remove		Mark as Reference		Exclude	
Exclude		Include		Remove		Mark as Reference		Exclude	
Exclude		Include		Remove		Mark as Reference		Exclude	
Exclude		Include		Remove		Mark as Reference		Exclude	
Exclude		Include		Remove		Mark as Reference		Exclude	
Exclude		Include		Remove		Mark as Reference		Exclude	
Exclude		Include		Remove		Mark as Reference		Exclude	
Exclude		Include		Remove		Mark as Reference		Exclude	
Exclude		Include		Remove		Mark as Reference		Exclude	
Exclude		Include		Remove		Mark as Reference		Exclude	
Exclude		Include		Remove		Mark as Reference		Exclude	
Exclude		Include		Remove		Mark as Reference		Exclude	
Exclude		Include		Remove		Mark as Reference		Exclude	
Exclude		Include		Remove		Mark as Reference		Exclude	
Exclude		Include		Remove		Mark as Reference		Exclude	
Exclude		Include		Remove		Mark as Reference		Exclude	
Exclude		Include		Remove		Mark as Reference		Exclude	
Exclude		Include		Remove		Mark as Reference		Exclude	
Exclude		Include		Remove		Mark as Reference		Exclude	
Exclude		Include		Remove		Mark as Reference		Exclude	
Exclude		Include		Remove		Mark as Reference		Exclude	
Exclude		Include		Remove		Mark as Reference		Exclude	
Exclude		Include		Remove		Mark as Reference		Exclude	
Exclude		Include		Remove		Mark as Reference		Exclude	
Exclude		Include		Remove		Mark as Reference		Exclude	
Exclude		Include		Remove		Mark as Reference		Exclude	
Exclude		Include		Remove		Mark as Reference		Exclude	
Exclude		Include		Remove		Mark as Reference		Exclude	
Exclude		Include		Remove		Mark as Reference		Exclude	
Exclude		Include		Remove		Mark as Reference		Exclude	
Exclude		Include		Remove		Mark as Reference		Exclude	
Exclude		Include		Remove		Mark as Reference		Exclude	
Exclude									

A0055996

Figure 30. Grille spectrale

Dans le volet de la grille spectrale, les spectres et champs à inclure peuvent être sélectionnés. La fonctionnalité de grille spectrale est la suivante.

Élément de grille spectrale	Fonctionnalité d'affichage
All spectra	▪ Select Fields. Sélectionner les champs à afficher dans la grille : nom, nom d'affichage, date et heure de début, date et heure de fin, date et heure intermédiaire et erreur. Pour les acquisitions de longue durée, il peut être utile de visualiser à la fois le point de départ et le point intermédiaire. ▪ Exclude Unmatched. Exclure tous les spectres qui n'ont pas au moins une valeur de données pour les champs de données sélectionnés. ▪ Exclude/Include. Exclure ou inclure tous les spectres.
Selected spectra	▪ Exclude. Exclure les spectres sélectionnés dans la grille spectrale. ▪ Include. Inclure les spectres sélectionnés dans la grille spectrale. ▪ Remove. Supprimer les spectres sélectionnés dans la grille spectrale. ▪ Mark as Reference. Marquer le premier spectre sélectionné dans la grille spectrale comme spectre de référence. L'utilisateur doit entrer un nouveau nom d'affichage pour le spectre.
Selected data values	▪ Exclude. Exclure les valeurs de données sélectionnées. ▪ Include. Inclure les valeurs de données sélectionnées.
Other Actions	▪ Import Data. Sélectionner un fichier Excel pour l'importation des données. Ouvre la fenêtre Import Data. ▪ Add Comment. Ajouter un commentaire de bloc de données. L'utilisateur est invité à sélectionner une date de début et une date de fin. Le commentaire est ajouté pour tous les spectres dans cette plage. Les commentaires relatifs au bloc de données sont spécifiques au bloc de données dans lequel ils sont ajoutés. Les commentaires relatifs au bloc de données ne sont pas affichés dans d'autres blocs de données.

Pour exclure des données de la grille ou du tracé spectral(e)

Il est possible d'exclure des spectres de la grille et du tracé si, par exemple, le laser est bloqué pendant une partie de l'expérience ou s'il produit des données inutilisables.

1. Sur le tracé spectral, faire un zoom avant pour ne voir que les données inutilisables.
2. Placer la souris sur une ligne du spectre dans le tracé et cliquer pour la sélectionner.
Le spectre est désormais également mis en évidence dans la grille spectrale.
3. Utiliser la touche majuscule pour mettre en évidence tous les spectres situés au-dessus du spectre sélectionné.
4. Cliquer sur **Exclude** dans la boîte Selected Spectra.
5. Cliquer sur **Save Dataset**.

Il faudra éventuellement exclure quelques autres spectres s'ils n'ont pas été tous mis en évidence lors de la première tentative. Un zoom arrière sur le tracé spectral devrait montrer que tous les spectres inutilisables sont maintenant exclus.

Pour importer des données

Les champs de données et les valeurs d'une feuille de calcul Excel existante peuvent être importés.

1. Dans la grille spectrale, cliquer sur **Import Data**.
Une fenêtre "Select a file to import" s'affiche.
2. Naviguer jusqu'à la feuille de calcul et cliquer sur **Open**.
Après avoir navigué vers la feuille de calcul, la fenêtre de données d'importation s'affiche.

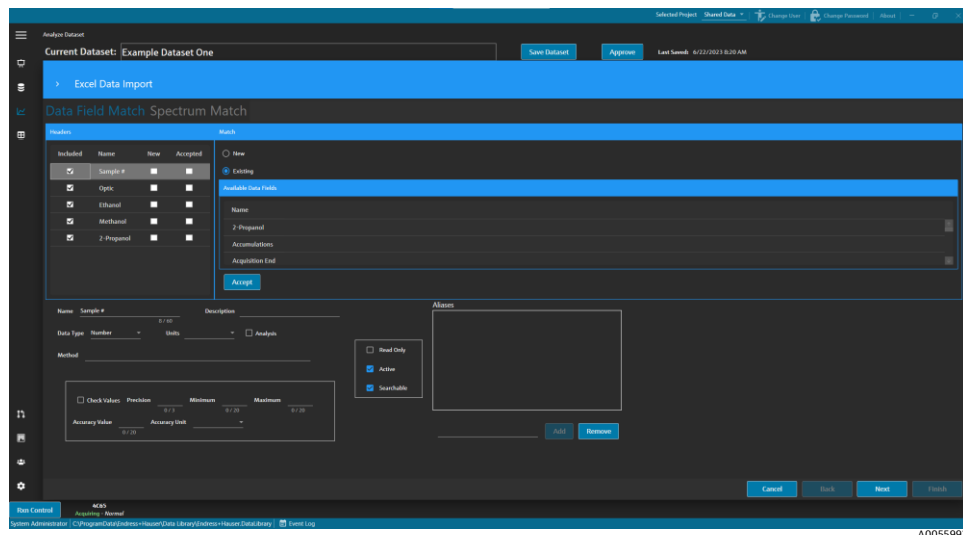


Figure 31. Importation de données, onglet "Data Field Match"

3. Les options suivantes peuvent être sélectionnées dans l'onglet Data Field Match :
 - **Included.** Détermine si le champ de données et ses valeurs sont importés.
 - **Match New/Existing.** Choisir manuellement si le champ sélectionné est traité comme nouveau ou existant. S'il existe ("Existing"), l'utilisateur peut choisir le champ avec lequel il sera mis en correspondance. S'il est nouveau ("New"), l'utilisateur peut modifier le champ de la même manière que l'éditeur de champ de données (voir ci-dessus).
 - **Accepted.** Les champs de données peuvent être marqués comme acceptés pour garder une trace des modifications.
4. Définir le champ de données. Ajouter une description, des unités, des alias et des limites inférieures et supérieures. Pour une description complète des paramètres de champs de données, voir le tableau décrivant les *Paramètres de champ de données* → .
5. Cliquer sur **Next**.
6. Les options suivantes peuvent être sélectionnées dans l'onglet Spectrum Match :
 - **Flèches Haut/Bas.** Ces flèches peuvent être utilisées pour déplacer les échantillons vers le haut ou vers le bas afin de les aligner sur les spectres.
 - **Threshold.** Différence autorisée entre l'heure du spectre et l'heure de l'échantillon le plus proche (en unités d'heures, de minutes ou de secondes).
 - **Apply Threshold.** Applique la valeur seuil aux spectres.
 - **Include Selected.** Inclure les valeurs de données sélectionnées.
 - **Exclude Selected.** Exclure les valeurs de données sélectionnées.
 - **Show Only Matched.** Afficher uniquement les spectres dont les valeurs correspondent.

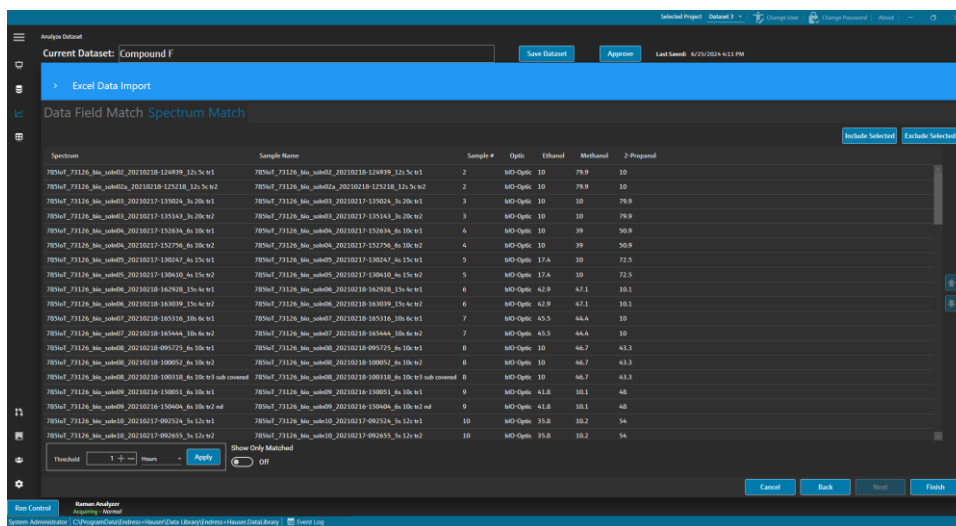


Figure 32. Importation de données, onglet "Spectrum Match"

7. Cliquer sur **Finish**. Dans la boîte de dialogue suivante, cliquer sur **OK**.
8. Cliquer sur **Save dataset**.

4.4.1.7 Commentaires

La tuile Commentaires permet d'ajouter des commentaires à un spectre. Ces commentaires ne sont pas spécifiques à un bloc de données et sont visibles dans tous les blocs de données qui font référence au spectre.

Des commentaires peuvent également être ajoutés pour un bloc de données ou pour une période de temps au sein d'un bloc de données. Cette opération s'effectue à partir du bouton **Add Comment** dans la tuile Spectra Grid. Voir *Modification d'une grille spectrale* →  pour plus d'informations.

Pour ajouter un commentaire à un spectre

1. Dans la tuile Commentaires, cliquer sur **Add**.
La boîte de dialogue Add Comment s'affiche.
2. Saisir un commentaire pertinent et cliquer sur **OK**.
La tuile Commentaires et la grille spectrale affichent désormais le commentaire du spectre sélectionné.

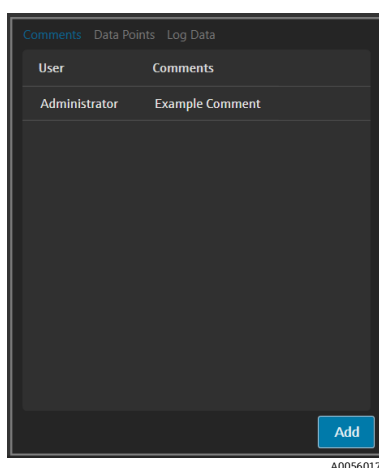


Figure 33. Commentaires sur le spectre

4.4.1.8 Points de données

L'onglet Data Points affiche une liste des points de données X et Y du spectre sélectionné.

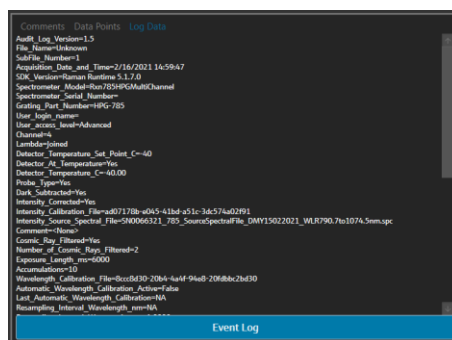
Comments Data Points Log Data		
X	Y	
100	251218.46875	
101	245982.421875	
102	240804.015625	
103	235678.640625	
104	230577.3125	
105	225458.1875	
106	220286.8125	
107	215050.125	
108	209759.90625	
109	204449.03125	
110	199163.703125	

A0056018

Figure 34. Liste des points de données

4.4.1.9 Log Data

L'onglet Log Data permet d'afficher les métadonnées (un journal d'audit .spc) concernant le spectre sélectionné. Cliquer sur **Event Log** pour afficher le journal d'événements pour le spectre sélectionné.

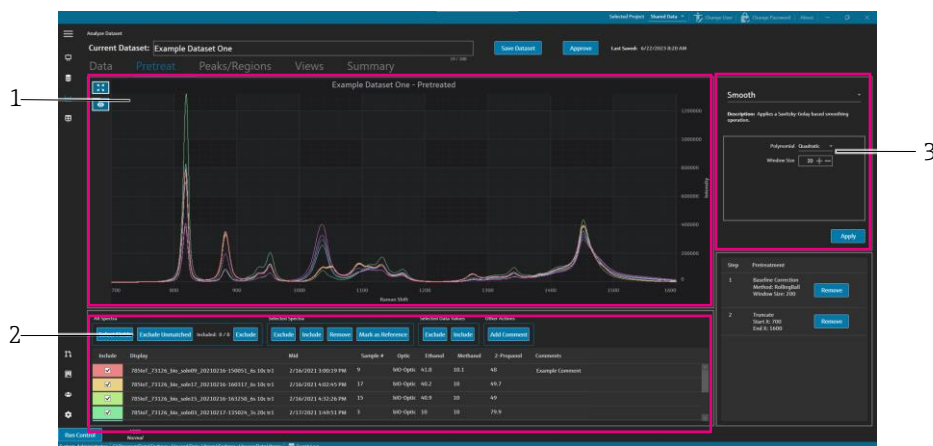


A0056019

Figure 35. Journal d'événements

4.4.2 Utilisation de prétraitements

L'onglet Pretreat permet d'appliquer des prétraitements aux spectres du bloc de données. Les prétraitements peuvent être supprimés, ajustés et réappliqués à tout moment et les changements sont reflétés dans le tracé spectral et dans l'analyse des pics et des régions. Les prétraitements sont inclus dans les *modèles* →



A0056020

Figure 36. Onglet Pretreat

Pos.	Description
1	Tracé spectral. Affiche les spectres non traités jusqu'à ce qu'un prétraitement soit appliqué, puis n'affiche ici que les spectres prétraités.
2	Grille spectrale. Listes des spectres et valeurs de données associées pour les champs de données affichés. Fournit des options pour inclure ou exclure des spectres et des valeurs de données, et pour importer des données de référence. La modification des options ici, comme l'inclusion ou l'exclusion de spectres, se répercute sur l'onglet Data et sur les onglets suivants du flux de travail.
3	Volet Pretreat. C'est ici que tous les prétraitements spectraux sont appliqués ou supprimés.

Les prétraitements sont appliqués dans l'ordre qu'ils sont choisis pour permettre une flexibilité séquentielle. Les prétraitements suivants peuvent être appliqués à un bloc de données :

- Cliquer sur **Apply** pour appliquer le prétraitement sélectionné.
- Cliquer sur **Remove** pour supprimer le prétraitement associé.

4.4.2.1 Troncature

Il est possible de tronquer une zone d'un spectre pour se concentrer sur des zones spécifiques d'un spectre. La troncature recadre les spectres dans la région sélectionnée sur l'axe des x.

Pour tronquer un spectre

1. Dans l'onglet Pretreat, zoomer sur la zone des spectres sur laquelle on souhaite se concentrer en cliquant sur le tracé et en dessinant un carré sur la zone, ou en cliquant sur **Zoom** .
2. Dans le volet Pretreat, sélectionner **Truncate**.
3. Modifier la région à recadrer en saisissant les valeurs **Start X** et **End X**. Cliquer sur **Apply**.

Le prétraitement Truncate est à présent répertorié dans le volet Pretreatment. Une fois la troncature appliquée, elle n'est plus disponible dans la liste des prétraitements.

4. Cliquer sur **Save Dataset**.

Pour modifier les limites de troncature, il convient de supprimer tout prétraitement de troncature en cours et de le réappliquer.

4.4.2.2 Lissage

Le prétraitement Smooth applique une opération de lissage basée sur Savitzky-Golay.

Pour lisser un spectre

1. Dans le volet Pretreat, sélectionner **Smooth**.
2. Les options suivantes peuvent être sélectionnées :
 - **Polynomial – Quadratic ou Cubic.** Utiliser de préférence les polynômes quadratiques lorsque les données d'une fenêtre de lissage particulière suivent approximativement une tendance parabolique. Des polynômes cubiques peuvent être utilisés pour ajuster les points de données locaux.
 - **Window size.** Détermine le nombre de points de données voisins pris en compte lors de l'opération de lissage. Permet d'ajuster la taille de la fenêtre en fonction du niveau de bruit dans le signal et du niveau de lissage souhaité. Des fenêtres plus grandes permettent un meilleur lissage mais peuvent également introduire plus de décalage ou de distorsion dans le signal, tandis que des fenêtres plus petites capturent des détails plus fins mais peuvent être sensibles au bruit.
3. Cliquer sur **Apply**.

Le prétraitement Smooth est à présent répertorié dans le volet Pretreatment. Une fois le lissage appliqué, il n'est plus disponible dans la liste des prétraitements.

4. Cliquer sur **Save Dataset**.

Pour modifier les paramètres de lissage, supprimer tout prétraitement de lissage en cours et le réappliquer.

4.4.2.3 *Application de la correction de la ligne de base*

Le prétraitement Baseline Correction élimine le bruit de fond des spectres à l'aide d'une sphère roulante, d'une méthode de Pearson ou d'une méthode dérivée. Il n'est pas possible d'appliquer deux corrections de ligne de base différentes.

Le choix des valeurs de la méthode de correction de la ligne de base doit être basé sur les caractéristiques spécifiques des données spectrales et sur la nature des distorsions de la ligne de base. Il peut être utile d'expérimenter différentes valeurs afin de trouver l'équilibre optimal pour une identification précise des pics.

Lors du choix de la correction de la ligne de base de Pearson, les valeurs du filtre et de l'ajustement de la ligne de base déterminent l'intensité ou le degré de la correction de la ligne de base.

- **Valeurs d'ajustement faibles (0-2).** Ces valeurs appliquent une légère correction de la ligne de base. Cela peut être bénéfique si la ligne de base est relativement stable et si l'on souhaite préserver les caractéristiques subtiles des données. Cependant, il se peut qu'elle ne supprime pas toutes les distorsions de la ligne de base, ce qui peut entraîner une identification moins précise des pics.
- **Valeurs d'ajustement moyennes (3-4).** Ces valeurs permettent d'équilibrer la suppression des distorsions de la ligne de base et la préservation de l'intégrité des pics. Il s'agit souvent d'un bon point de départ pour de nombreux blocs de données, car il permet d'améliorer l'identification des pics sans trop déformer les données.
- **Valeurs d'ajustement élevées (5).** Ces valeurs appliquent une forte correction de la ligne de base, ce qui peut être utile pour les données présentant une dérive ou un bruit important de la ligne de base. Cependant, une correction agressive peut supprimer ou déformer des pics plus petits, ce qui peut conduire à des pics manqués ou mal identifiés.

Pour appliquer la correction de la ligne de base

1. Dans le volet Pretreat, sélectionner **Baseline Correction**.
2. Sélectionner **Method** et les paramètres associés :
 - **Derivative.** Calcule une dérivée Savitzky-Golay lissée pour chaque spectre.
 - **Derivative.** Première ou seconde.
 - **Polynomial.** Quadratique ou cubique.
 - **Window size.** Détermine le nombre de points de données voisins pris en compte lors de la correction de la ligne de base.
 - **Pearson.** Estime la ligne de base pour chaque spectre par l'élimination itérative des polynômes de 4^{ème} ordre. Cette opération permet de supprimer les distorsions de la ligne de base en soustrayant l'ajustement polynomial du spectre original.
 - **Fit type.** Les types d'ajustement polynomial, de Legendre ou d'Hermite sont définis comme suit :
 - **Polynomial.** Ajuste une fonction polynomiale aux données spectrales pour modéliser la ligne de base.
 - **Legendre.** Utilise les polynômes de Legendre, qui sont un ensemble de polynômes orthogonaux, pour ajuster la ligne de base. Les polynômes de Legendre peuvent minimiser une erreur sur un intervalle spécifique.
 - **Hermite.** Utilise les polynômes d'Hermite, qui sont des polynômes orthogonaux définis par une fonction de poids impliquant une distribution gaussienne. Les polynômes d'Hermite peuvent être utilisés lorsque les données ont une distribution de type gaussien.
 - **Baseline filter (0 à 5).** Détermine le degré de correction de la ligne de base appliquée aux données spectrales.
 - **Fit (0 à 5).** Détermine l'intensité du processus d'ajustement appliqué aux données spectrales.
 - **Rolling ball.** Roule une sphère de taille fixe sous un spectre et la retire en douceur de tous les points de contact.
 - **Window size.** Détermine le nombre de points de données voisins pris en compte lors de l'opération de lissage.

3. Cliquer sur **Apply**.

Le prétraitement de correction de la ligne de base est maintenant répertorié sur la tuile Pretreatment. Une fois la correction de la ligne de base appliquée, elle n'est plus disponible dans la liste des prétraitements.

4. Cliquer sur **Save Dataset**.

Pour modifier les paramètres de correction de la ligne de base, retirer tout prétraitement de correction de la ligne de base en cours et le réappliquer.

4.4.2.4 Normalisation

Le prétraitement Normalize met les spectres à l'échelle d'une plage commune. Il n'est pas possible d'effectuer une double normalisation d'un spectre.

Pour normaliser un spectre

1. Dans le volet Pretreat, sélectionner **Baseline Correction**.

2. Sélectionner **Method** et les paramètres associés :

- **SNV**. Chaque spectre est normalisé en retirant sa moyenne et en la divisant par son écart-type.
- **Range**. Normalise toutes les valeurs d'un spectre pour qu'elles soient comprises entre 0 et 1.

3. Cliquer sur **Apply**.

Le prétraitement Normalize est à présent répertorié dans la tuile Pretreatment. Une fois la normalisation appliquée, elle n'est plus disponible dans la liste des prétraitements.

4. Cliquer sur **Save Dataset**.

Pour modifier les paramètres de normalisation, supprimer tout prétraitement de normalisation en cours et le réappliquer.

4.4.2.5 Soustraction

Le prétraitement Subtract soustrait un spectre de référence unique de tous les spectres.

Pour soustraire un spectre

1. Dans le volet Pretreat, sélectionner **Subtract**.

2. Sélectionner le spectre à soustraire dans la liste **Spectrum**. Cliquer sur **Apply**.

Le prétraitement Subtract est à présent répertorié dans la tuile Pretreatment. Une fois la soustraction appliquée, elle n'est plus disponible dans la liste des prétraitements.

3. Cliquer sur **Save Dataset**.

Pour modifier les paramètres de soustraction, supprimer tout prétraitement de soustraction en cours et le réappliquer.

4.4.2.6 Intensité de filtrage

Le prétraitement Intensity Filter exclut les spectres situés en dehors de la plage minimale et maximale sélectionnée sur l'axe des y. Ce filtre est utile si, par exemple, le laser est bloqué ou produit des données inutilisables pendant un certain temps.

Pour filtrer l'intensité

1. Dans le volet Pretreat, sélectionner **Intensity Filter**.

2. Entrer une plage d'intensité minimale et maximale dans les champs **Minimum Y** et **Maximum Y**. Cliquer sur **Apply**.

Le prétraitement Intensity Filter est désormais répertorié sur la tuile Pretreatment. Une fois le filtre d'intensité appliqué, il n'est plus disponible dans la liste des prétraitements.

3. Cliquer sur **Save Dataset**.

Pour modifier les paramètres du filtre d'intensité, retirer tout prétraitement du filtre d'intensité en cours et le réappliquer.

4.4.3 Pics et régions

L'onglet Peaks and Regions permet d'ajouter des calculs pour des plages spécifiques de l'axe des x d'un bloc de données. Les pics et les régions sont inclus dans les modèles. Voir *Création de modèles* →  pour plus d'informations.



Figure 37. Onglet Peaks and regions

Pos.	Description
1	Tracé spectral. Affiche les spectres prétraités. La tuile du tracé spectral est utilisée pour sélectionner les positions des pics et des régions. Dans cette tuile, il n'est possible d'effectuer un zoom avant ou arrière qu'en dessinant une boîte ou en double-cliquant.
2	Tracés de pics. Affiche les résultats d'analyse des pics. Dans cette tuile, il est possible de choisir entre l'analyse des pics (tendances) et le tracé du modèle (résultats de la régression).
3	Tracés de régions. Affiche les résultats de la résolution de courbes multivariées (MCR) ou de l'analyse en composantes principales (PCA) lorsque l'analyse des régions est appliquée.
4	◀ Peak et ▶ Region. Affiche une boîte de dialogue pour l'ajout et la définition de nouveaux pics et régions.
5	Listes de pics et de régions. Liste des pics et des régions définis. Il est possible de sélectionner et de modifier des pics et des régions dans cette tuile.
6	Tracé Data Field Trend. Le tracé Data Field Trend permet de comparer les résultats des pics et des régions aux données mesurées. Tracé 3D. Affiche le tracé spectral en 3D.

4.4.3.1 Ajout de pics et de régions

La fenêtre de sélection des pics/régions présente une représentation visuelle des pics et des régions au sein d'un bloc de données.

Pour ajouter des pics

1. Dans l'onglet Peaks/Regions, cliquer sur **◀ Peak**.
La fenêtre contextuelle Add Peak s'affiche.

Figure 38. Fenêtre contextuelle Add Peak

2. Entrer le nom du pic (**Peak Name**). Il s'agit du nom d'affichage du pic.
3. Sélectionner le type de pic (**Peak Type**) (hauteur, surface ou centre). Le pic central est utile lorsque les pics se déplacent au lieu d'augmenter ou de diminuer en raison d'un changement chimique ou physique.
4. Entrer la plage du pic dans **X1** et **X2**.
5. (En option) Sélectionner un champ de données (**Data Field**) à ajouter au pic. Le champ de données est utilisé dans le calcul de la modélisation.
6. (En option) Activer **Model** si un modèle est créé pour le pic pendant l'exportation.
7. Cliquer sur **Add** pour créer un nouveau pic.
8. Cliquer sur **Save Dataset**.

Une fois le pic ajouté, une zone en surbrillance du tracé du spectre s'affiche. Il est possible de déplacer, de développer ou de réduire le pic en déplaçant ou en faisant glisser les coins de la fenêtre du pic sur le tracé du spectre.

Après avoir créé un pic, visualiser la tendance de l'analyse du pic dans la zone de tracé du pic. Les fenêtres inutilisées peuvent être déplacées pour redimensionner le diagramme de tendance afin d'obtenir une vue plus large des tendances.



Figure 39. Tracé spectral montrant l'analyse des pics

Pour ajouter des régions

1. Dans l'onglet Peaks/Regions, cliquer sur **Region**.
La fenêtre contextuelle Add Region s'affiche.

Figure 40. Fenêtre contextuelle Add Region

2. Entrer les informations suivantes :
 - Le champ **Region Name** est le nom d'affichage de la région.
 - Les champs **X1** et **X2** constituent la plage de la région.
 - Le champ **Calculation** détermine le type de calcul effectué pour la région (PCA ou MCR).
3. Cliquer sur **Add** pour créer une nouvelle région.

4.4.3.2 Modification de pics et de régions

Pour inclure des spectres supplémentaires dans l'analyse de pics

1. Sélectionner l'onglet **Data** ou **Pretreat**.
2. Dans la grille spectrale, naviguer jusqu'au spectre à inclure.
Pour inclure tous les spectres d'une plage, maintenir la touche Majuscule enfoncée et naviguer jusqu'au dernier spectre.
3. Cliquer sur **Include** dans la boîte Selected Spectra.
4. Sélectionner l'onglet **Peaks/Regions** et cliquer sur **Refresh Plot** .
D'autres spectres sont inclus à la fois dans les tendances des pics et dans le tracé spectral.
5. Cliquer sur **Save Dataset**.

Pour exclure des spectres de l'analyse des pics

Des données peuvent être exclues directement du tracé de tendance. Cette méthode est utile pour exclure les valeurs aberrantes évidentes ou lorsqu'il n'y a pas de changement dans une expérience.

1. Sélectionner les points de données à exclure en cliquant et en faisant glisser la souris sur la zone du tracé de l'analyse des pics.
Les points apparaissent en gras et le bouton d'exclusion est activé.
2. Cliquer sur **Exclude Points** .
3. Cliquer sur OK pour la liste des spectres exclus. Si les points ont été sélectionnés sur plusieurs tendances de pic, les noms des spectres peuvent apparaître plusieurs fois.
4. Cliquer sur **Refresh Plot** .
L'analyse des pics ne montre plus que les données non exclues.
5. Cliquer sur **Save Dataset**.

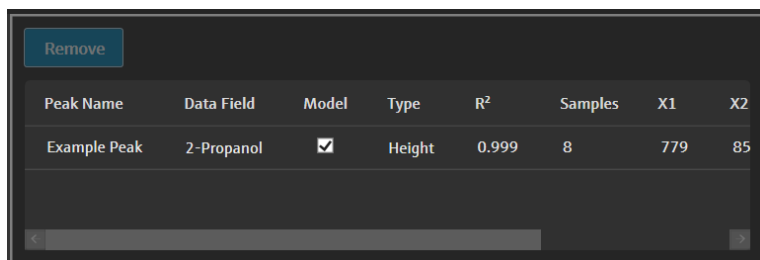
Pour déplacer et redimensionner les pics et les régions

Les pics et les régions peuvent être déplacés et redimensionnés en cliquant sur les poignées et en les faisant glisser. Après le redimensionnement d'un pic ou d'une région, l'analyse est recalculée.

Pour modifier ou supprimer un pic ou une région

Les pics et les régions sont répertoriés à droite du volet des pics et des régions. Ces listes permettent de visualiser et de modifier les propriétés d'un pic ou d'une région. Sélectionner un pic ou une région, puis cliquer sur **Remove** pour supprimer le pic ou la région sélectionné(e).

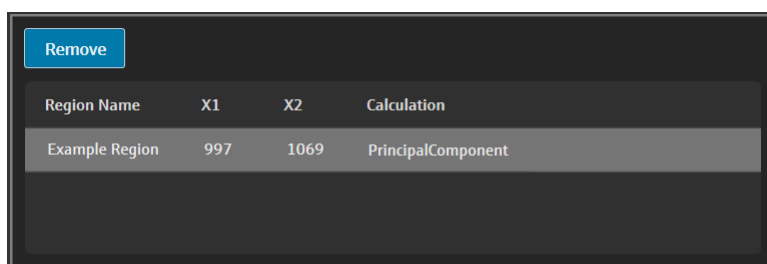
Lors de la suppression d'un pic ou d'une région, toutes les vues utilisant une tendance générée à partir de ce pic ou de cette région doivent être supprimées ou mises à jour en fonction d'un nouveau pic ou d'une nouvelle région. L'absence de mise à jour ou de suppression d'une vue de tendance basée sur un pic ou une région supprimé(e) entraîne l'impossibilité d'analyser le bloc de données associé. Les utilisateurs ayant une vue enregistrée dans leur tableau de bord ne pourront pas se connecter si un pic ou une région est supprimé(e) et que la vue associée n'est pas mise à jour ou supprimée.



Peak Name	Data Field	Model	Type	R ²	Samples	X1	X2
Example Peak	2-Propanol	☒	Height	0.999	8	779	85

A0056048

Figure 41. Liste de pics



Region Name	X1	X2	Calculation
Example Region	997	1069	PrincipalComponent

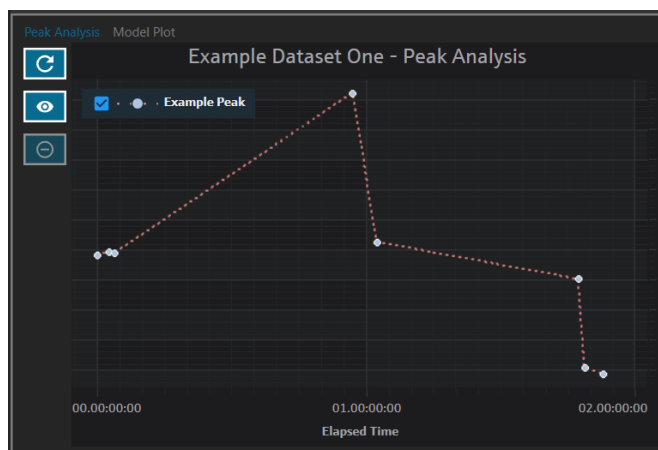
A0056049

Figure 42. Liste de régions

4.4.3.3 Visualisation de l'analyse des pics

L'onglet Peak Analysis affiche un tracé de tendance pour tous les pics ajoutés. Les pics sont ajoutés avec leur propre axe y. Les options suivantes sont disponibles dans l'onglet Peak Analysis :

- Cliquer sur **Exclude Points**  pour supprimer des points de données spécifiques.
- Cliquer sur **Refresh Plot**  pour rafraîchir le graphique après avoir modifié des points de données.



A0056050

Figure 43. Analyse des pics

4.4.3.4 Visualisation du tracé du modèle

L'onglet Model Plot affiche le tracé du modèle pour le pic sélectionné. Les options suivantes sont disponibles dans l'onglet Model Plot :

- Cliquer sur **Exclude Points**  pour supprimer des points de données spécifiques.
- Cliquer sur **Refresh Plot**  pour rafraîchir le graphique après avoir modifié des points de données. Lorsque des spectres ou des valeurs de données sont exclus de l'onglet Data, utiliser l'option **Refresh Plot** pour recalculer le tracé du modèle.



A0056051

Figure 44. Onglet Model Plot

4.4.4 Création de vues de tableau de bord : grilles, tendances, spectres et tracés 3D

L'onglet Views est utilisé pour définir les tracés les plus pertinents et pour chaque cas d'utilisation. Il existe de nombreuses options de visualisation des tracés, même pour des blocs de données simples. Chaque vue peut être ajoutée à un tableau de bord en tant que partie d'une collection de vues. Il est possible de créer des onglets de tableau de bord préférés, qui affichent un à quatre tracés dans des quadrants.

Tous les blocs de données sont créés avec deux vues prédéfinies : tracé spectral et grille spectrale. Les vues personnalisées sont ajoutées, modifiées et supprimées dans l'onglet Views. Un aperçu de la vue sélectionnée est affiché dans la partie droite de l'onglet Views.

Il existe 4 types de vue :

- Tracé de tendance
- Tracé spectral
- Grille spectrale
- Tracé 3D

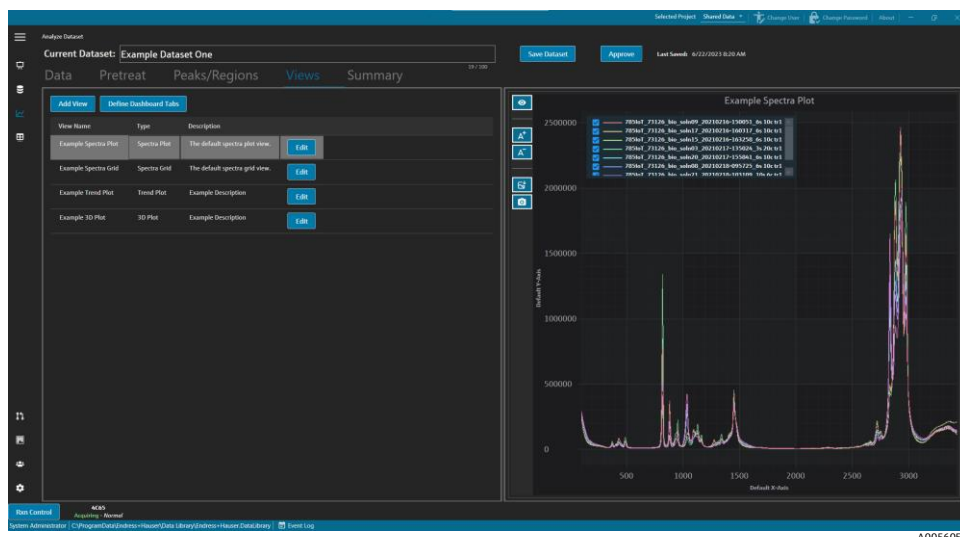


Figure 45. Onglet Views

Dans l'onglet Views, l'utilisateur peut également cliquer sur **Define Dashboard Tabs** pour ouvrir la fenêtre Define Dashboard Tabs. Voir *Définition d'un tableau de bord* →

Pour supprimer une vue, sélectionner la vue et cliquer sur **Remove**. Il est possible de supprimer une vue en la sélectionnant et en appuyant sur la touche de suppression du clavier.

4.4.4.1 Création ou modification d'une vue du tracé spectral

Une vue du tracé spectral peut être utilisée pour visualiser les spectres du bloc de données sur un tracé zoomable. Le tracé spectral est une vue par défaut qui est générée pour chaque bloc de données.

Pour modifier une vue de tracé spectral

1. Dans l'onglet Views, cliquer sur **Add View**.
La boîte de dialogue View Definition s'affiche.
2. Entrer les informations suivantes :
 - **Name.** Nom d'affichage de la vue.
 - **Description.** Brève description de la vue.
 - **View Type.** Sélectionner le tracé spectral.
3. Les options suivantes peuvent être sélectionnées :
 - **Use Pretreated data.** Sélectionner cette option pour afficher les données prétraitées dans la vue. Si cette case n'est pas cochée, les données brutes (non prétraitées) s'affichent dans la vue.
 - **Show latest spectrum only.** Sélectionner cette option pour n'afficher que les spectres dont la date et l'heure de fin sont les plus récentes. Si la case n'est pas cochée, tous les spectres sont affichés.
4. Cliquer sur **Close**.
5. Cliquer sur **Save Dataset**.

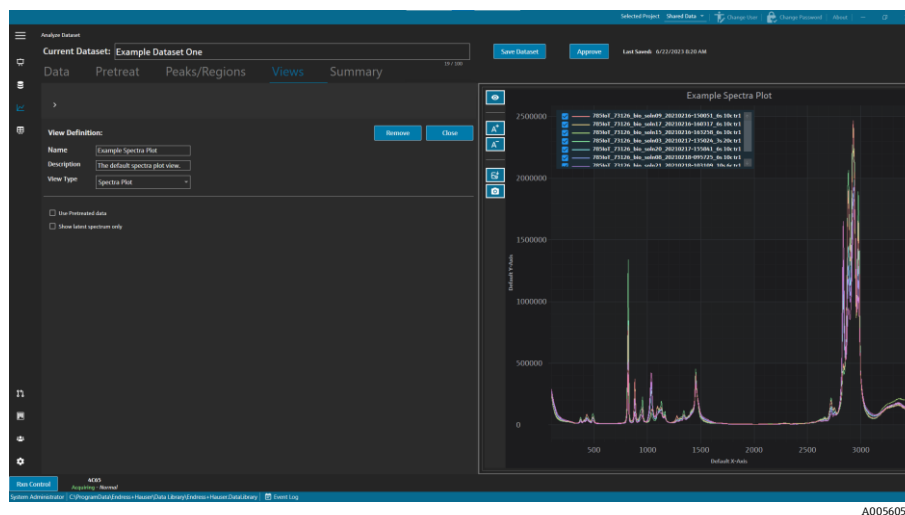


Figure 46. Vue du tracé spectral

A0056052

4.4.4.2 Modification d'une grille spectrale

La vue Spectra Grid peut être utilisée pour afficher des spectres individuels sous forme de grille. La grille spectrale est une vue par défaut générée pour chaque bloc de données.

Pour modifier une vue de grille spectrale

1. Dans l'onglet Views, cliquer sur **Add View**.
La boîte de dialogue View Definition s'affiche.
2. Sélectionner la grille spectrale et cliquer sur **Edit**.
3. Entrer les informations suivantes :
 - **Name**. Nom d'affichage de la vue.
 - **Description**. Brève description de la vue.
 - **View Type**. Sélectionner **Spectra Grid**.
4. Cliquer sur **Close**.
5. Cliquer sur **Save Dataset**.

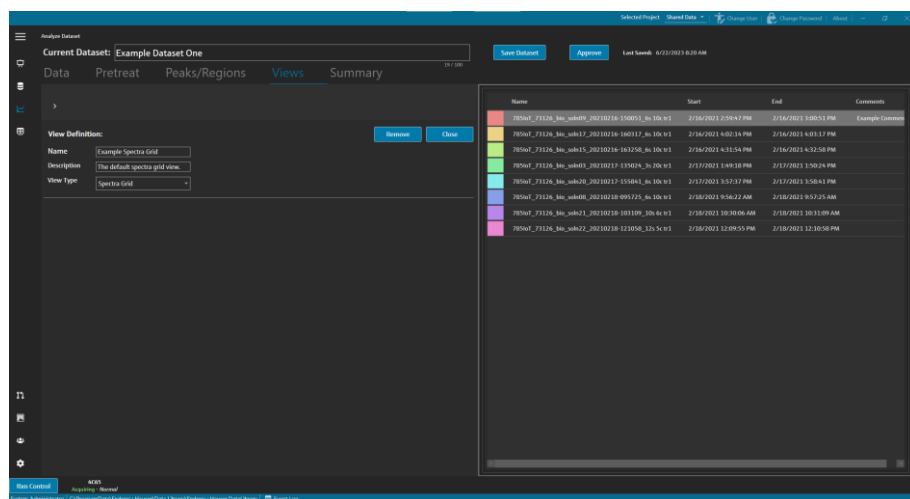


Figure 47. Vue de la grille spectrale

A0056054

4.4.4.3 Création ou modification d'une vue de tracé de tendance

Une vue de tracé de tendance peut être utilisée pour visualiser les tendances d'un bloc de données. Dans le tracé de tendance, l'axe des x représente le temps d'acquisition relatif des spectres. L'axe des y représente les valeurs des données, les valeurs prédites des données ou les pics de mesure.

Il est possible de choisir les champs de données et les pics à inclure dans la vue. Lorsque l'option **Model** est sélectionnée pour un champ de données utilisé dans un pic, les valeurs prédites sont affichées dans la vue.

Pour créer et modifier une vue graphique de tendance

1. Dans l'onglet Views, cliquer sur **Add View**.
La boîte de dialogue View Definition s'affiche.
2. Entrer les informations suivantes :
 - **Name.** Nom d'affichage de la vue.
 - **Description.** Brève description de la vue.
 - **View Type.** Type de vue. Sélectionner **Trend Plot**.
3. Dans **Available data fields**, sélectionner les champs de données à tracer. Cliquer sur **Include** ➤.
4. Dans **Available peaks**, sélectionner les pics à tracer. Cliquer sur **Include** ➤.
5. Cliquer sur **Close**.
6. Cliquer sur **Save Dataset**.

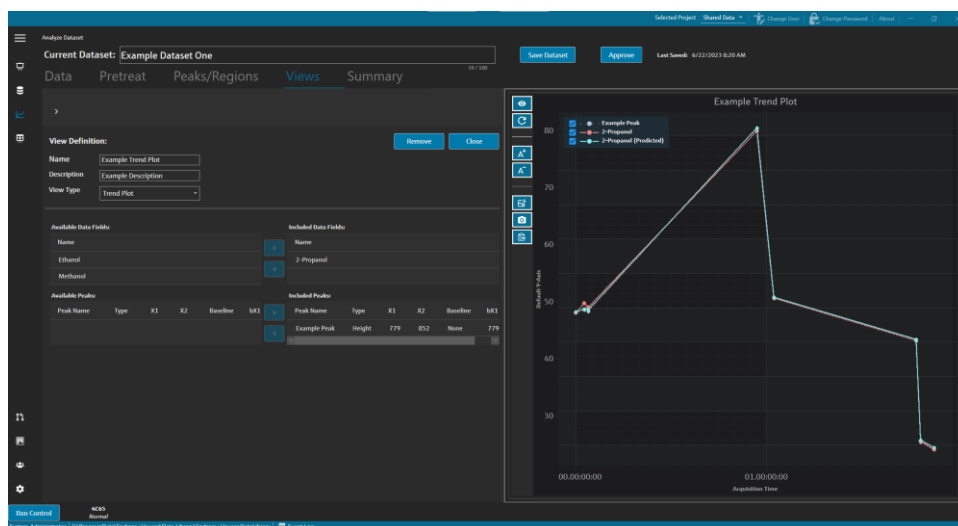


Figure 48. Vue du tracé de tendance

4.4.4.4 Création ou modification d'un tracé 3D

La vue du tracé 3D affiche les spectres dans un graphique avec des axes x, y et z. Ce graphique peut fournir des informations supplémentaires sur les différences entre les spectres au fil du temps ou lorsque des variables sont ajoutées ou supprimées.

Pour modifier une vue de tracé 3D

1. Dans l'onglet Views, cliquer sur **Add View**.
La boîte de dialogue View Definition s'affiche.
2. Entrer les informations suivantes :
 - **Name.** Nom d'affichage de la vue.
 - **Description.** Brève description de la vue.
 - **View Type.** Sélectionner le tracé 3D.
3. Ajuster le tracé à la vue souhaitée :
 - **Draw Contours.** Dessine des lignes de contour le long d'une longueur d'onde pour mettre en évidence les différences entre les spectres.
 - **Show Spectrum Colors.** Permet d'activer ou de désactiver les couleurs des spectres afin de mettre en évidence les changements spectraux au fil du temps.

- **Modifier l'angle des axes x, y et z.** L'angle de vue peut être ajusté en cliquant sur le tracé et en le faisant glisser jusqu'à la position souhaitée.
 - **Zoom avant ou arrière.** La molette de la souris permet d'effectuer des zooms avant et arrière.
4. Cliquer sur **Close**.
 5. Cliquer sur **Save Dataset**.

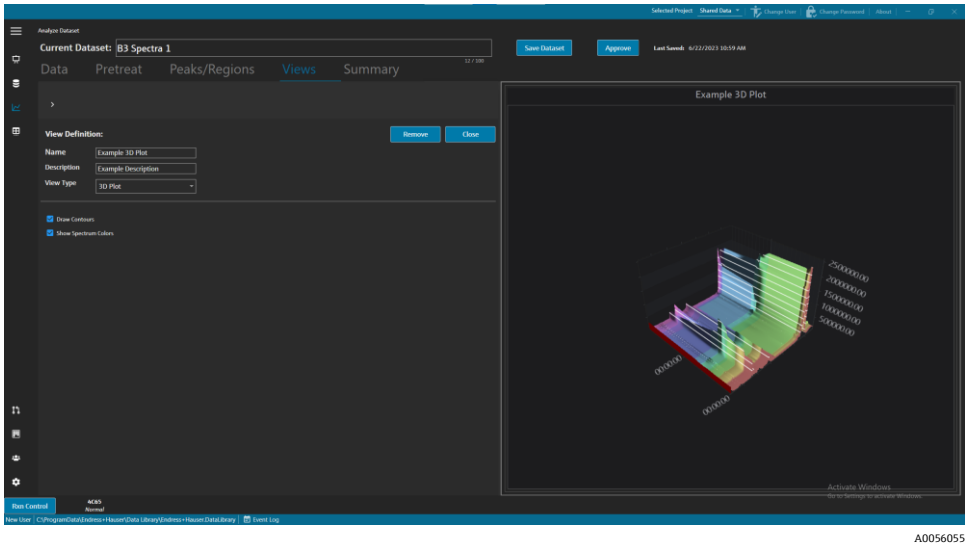


Figure 49. Vue du tracé 3D

4.4.4.5 Ajout d'annotations temporaires

Dans l'onglet Views, l'utilisateur peut créer des annotations temporaires, notamment des zones en surbrillance, des étiquettes, des lignes et des flèches. Il peut ensuite enregistrer les annotations avec la vue pour s'y référer ultérieurement ou pour les partager.

Les options suivantes sont disponibles dans l'onglet Views :

Élément de navigation	Navigation
A0056085	Add Temporary Annotation. Ajoute une annotation temporaire à la vue.
A0056086	Save Image File. Enregistre la vue avec les annotations.
A0056087	Copy Image to Clipboard. Copie la vue actuelle avec les annotations dans le Presse-papiers.
A0055992	Copy Plot Data to Clipboard. Copie les données de tracé de tendance actuelles dans le Presse-papiers.
A0055993	Remove Temporary Annotation. Supprime une annotation temporaire de la vue.

Pour créer des annotations temporaires

1. Dans l'onglet Views, sélectionner une vue devant être annotée.
2. Cliquer sur **Add Temporary Annotation**
3. Sélectionner le type d'annotation (**Annotation type**) :
 - **Line.** Place une ligne sur la vue.
 - **Line arrow.** Place une ligne fléchée sur la vue.

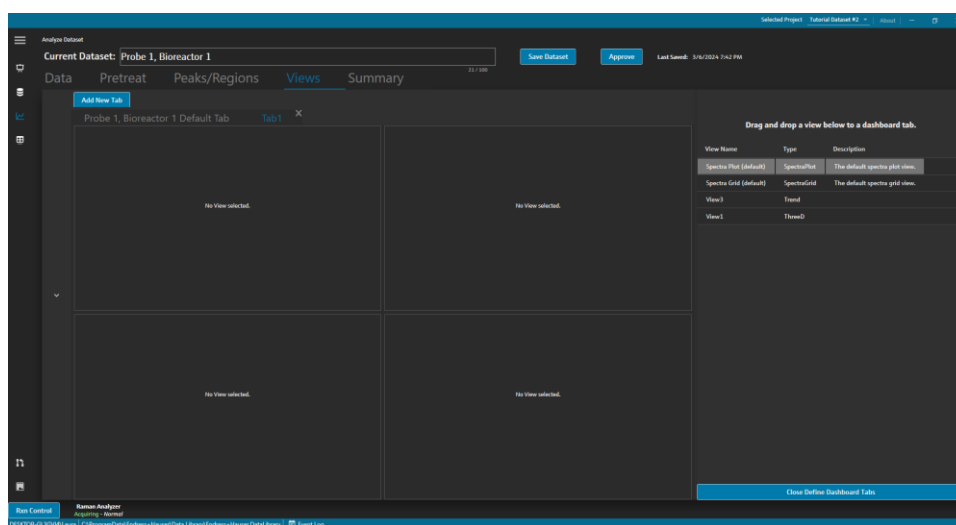
- **Text.** Place un texte sur la vue.
 - **Box.** Place un cadre en surbrillance sur la vue.
 - **Horizontal line.** Place une ligne horizontale sur la vue.
 - **Vertical line.** Place une ligne verticale sur la vue.
 - **Axis Marker.** Place un marqueur d'axe sur la vue.
4. Cliquer sur **Add Temporary Annotation**, puis cliquer sur la vue pour placer le marqueur.
 5. Enregistrer la vue en effectuant l'une des opérations suivantes :
 - Cliquer sur **Save Image File**  pour enregistrer la vue avec les annotations.
 - Cliquer sur **Copy Image to Clipboard** .
 - Cliquer sur **Copy Plot Data to Clipboard** .
 6. Cliquer sur **Save Dataset**.

4.4.4.6 Définition d'un tableau de bord

Dans l'onglet Views, il est possible de définir et d'enregistrer un tableau de bord. Pour ce faire, il faut d'abord créer des vues qui ont été définies dans les sections précédentes. Par défaut, l'onglet Views contient une vue de tracé spectral et de grille spectrale pour chaque bloc de données.

Pour définir un tableau de bord

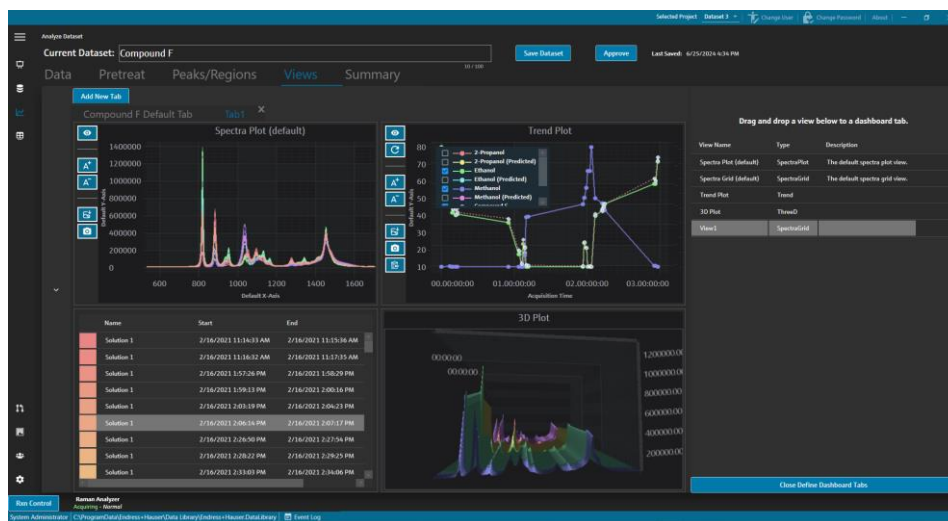
1. Dans la vue Views, cliquer sur **Define Dashboard Tabs**.
Un onglet par défaut pour le bloc de données actuel affiche le tracé spectral et la grille spectrale.
2. Cliquer sur **Add New Tab**.
La fenêtre contextuelle Add New Tab s'affiche.
3. Sélectionner le nombre de vues à afficher :
 - Onglet à 1 vue
 - Onglet à 2 vues
 - Onglet à 3 vues
 - Onglet à 4 vues
 Un nouveau tableau de bord s'affiche.



A0055977

Figure 50. Définition d'un nouveau tableau de bord

4. Glisser-déposer les vues souhaitées de la liste de droite vers la zone souhaitée du tableau de bord.



A0056056

Figure 51. Vues sélectionnées sur un nouveau tableau de bord

- Double-cliquer sur le nom de l'onglet et renommer le tableau de bord comme souhaité.
- Cliquer sur **Save Dataset**.
- Cliquer sur **Close Define Dashboard Tabs**.

4.4.5 Summary

Les blocs de données sont résumés et l'analyse est appliquée dans l'onglet Summary. L'onglet Summary est également l'endroit où les modèles sont enregistrés, où les fichiers de modèle de Raman data library sont exportés et où les blocs de données peuvent être exportés pour une modélisation externe.

L'onglet Summary permet de/d' :

- **Visualiser les informations sommaires** ("Summary Information") concernant le bloc de données. Les informations sommaires indiquent l'état du bloc de données, son état d'approbation, le nombre total de spectres inclus et les champs de données applicables. Les prétraitements, les pics, les régions et un instantané du tracé sont également affichés.
- **Exporter le bloc de données.** Cliquer sur **Export** pour exporter le bloc de données actuel. Voir *Exportation de données, de blocs de données et de modèles* → pour plus d'informations.
- **Onglets Launch dashboard.** Cliquer sur **Launch Dashboard** pour ajouter une copie du tableau de bord du bloc de données à la fenêtre de tableau de bord. Le tableau de bord est défini dans l'onglet Views. Voir *Création de vues de tableau de bord : grilles, tendances, spectres et tracés 3D* → pour plus d'informations.
- **Créer des modèles** à partir du bloc de données. Voir *Création de modèles* → pour plus d'informations.
- **Visualiser des événements** relatifs au bloc de données. Cliquer sur **Dataset Event Log** pour visualiser le journal d'événements relatif au bloc de données actuel.

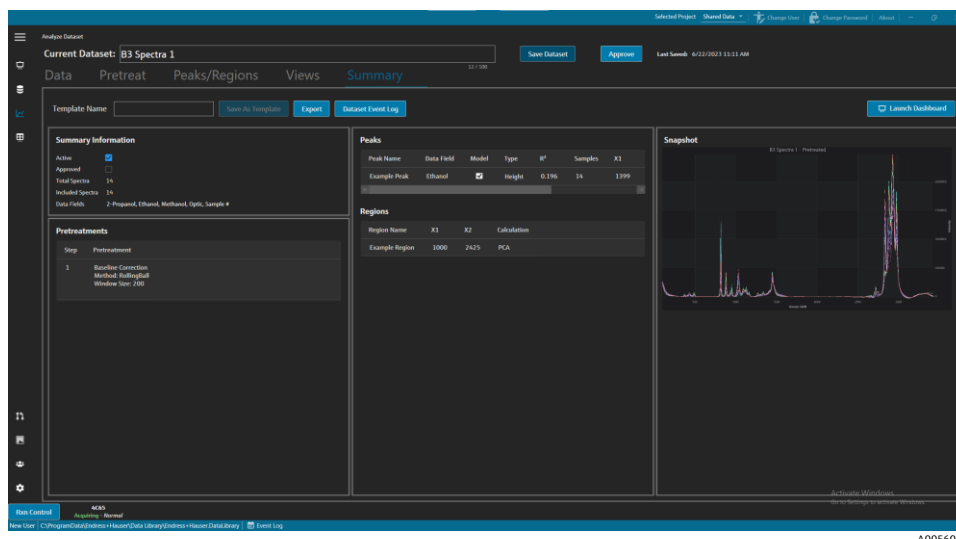


Figure 52. Onglet Summary

4.4.5.1 Création de modèles

Lorsque les composants d'un bloc de données peuvent être réutilisés dans d'autres blocs de données, les modèles simplifient la création de blocs de données. Les modèles stockent tous les prétraitements, les analyses et les paramètres de visualisation, et peuvent être appliqués aux nouveaux blocs de données. Un modèle contient les éléments suivants :

- Champs de données affichés
- Prétraitements
- Pics
- Régions
- Vues
- Onglets de tableau de bord

Un modèle ne contient pas de données spectrales.

Les modèles enregistrés peuvent être sélectionnés dans la fenêtre Create Dataset lors de la création d'un nouveau bloc de données, ou dans la fenêtre Rxn Control. Si un modèle est sélectionné lors de la création d'un bloc de données, tous les composants du modèle sont ajoutés au nouveau bloc de données.

Pour créer un modèle à partir du bloc de données actuel

1. Sélectionner l'onglet **Summary**.
2. Entrer un nom dans le champ **Template Name**.
3. Cliquer sur **Save As Template**.
4. Cliquer sur **OK**.

4.4.5.2 Application de modèles

Lors de la création d'un nouveau bloc de données, l'utilisateur peut appliquer un modèle.

Pour appliquer un modèle

1. Dans la fenêtre Datasets , cliquer sur **Create New Dataset**.
2. Nommer le bloc de données, importer les spectres correspondants, puis cliquer sur **Include >**.
3. Dans le champ **Template**, sélectionner le modèle dans la liste.
4. Cliquer sur **Create**. Si l'utilisateur obtient une invite à enregistrer un bloc de données non enregistré, cliquer sur **OK**.

Une fois l'opération terminée, Raman data library se déplace le long du flux de travail jusqu'à la fenêtre Analyze Dataset.

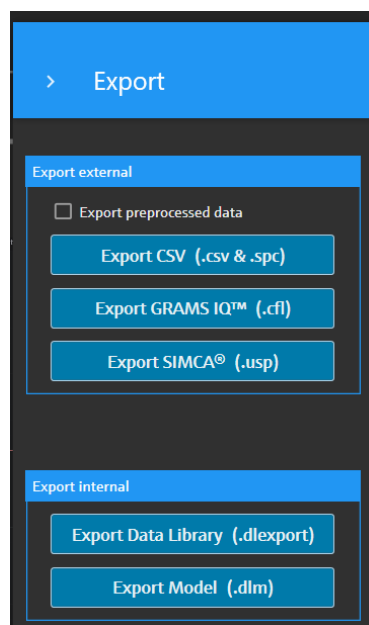
4.4.5.3 Exportation de données, de blocs de données et de modèles

Le volet Export est utilisé pour exporter des blocs de données Raman data library vers des systèmes logiciels externes et internes. Un fichier d'exportation Raman data library (.dllexport) peut être utilisé pour déplacer des blocs de données d'une instance Raman data library vers une autre. Pour l'exportation vers des systèmes logiciels externes, le bloc de données doit être approuvé.

Pour exporter des données, un bloc de données ou un modèle

1. Dans la fenêtre **Datasets** , cliquer sur **Export**.

Le menu Export s'affiche.



A0055986

Figure 53. Menu Export

2. Les options suivantes peuvent être sélectionnées :
 - **Export preprocessed data.** Lorsque cette option est cochée, les données sont exportées sans prétraitements appliqués.
 - **Export CSV.** Exporte le bloc de données sous la forme d'un fichier de valeurs séparées par des virgules (.csv) contenant les noms des spectres et les valeurs des données pour tous les champs de données inclus. Exporte également un dossier zippé contenant les spectres inclus au format SPC (.spc).
 - **Export GRAMS IQ™.** Exporte le bloc de données en tant que fichier GRAMS IQ™ (.cfl). Exporte également les spectres inclus au format SPC (.spc). Une installation GRAMS IQ™ valide sur le même ordinateur que Raman data library est nécessaire pour pouvoir exporter sous forme de fichier GRAMS IQ™ (.cfl).
 - **Export SIMCA®.** Exporte le bloc de données en tant que fichier SIMCA® (.usp). Une installation SIMCA® valide sur le même ordinateur que Raman data library est nécessaire pour pouvoir exporter sous forme de fichier SIMCA® (.usp).
 - **Export Data Library.** Exporte le bloc de données en tant que fichier Raman data library (.dllexport). Ce type de fichier peut être importé dans la fenêtre Datasets.
 - **Export Model.** Exporte un fichier de modèle (.dlm) qui est créé à l'aide des prétraitements et des pics du bloc de données. Ce fichier peut être exporté vers Raman RunTime à l'aide de la fenêtre Rxn Control de Raman data library. Le fichier de modèle peut être utilisé pour générer des valeurs process de composant dans RunTime.
3. Naviguer jusqu'à l'emplacement du dossier et nommer le fichier de données.
4. Sélectionner **Mark Inactive** ou **Keep Active** pour le bloc de données actuel.

4.5 Commande de l'analyseur Rxn Raman

Rxn Control est utilisé pour gérer les analyseurs Raman RunTime Rxn pour la collecte et la modélisation des spectres Raman et est conçu pour imiter l'interface utilisateur de Raman RunTime. Pour accéder à la fenêtre de l'analyseur Raman, une connexion à la source spectrale OPC doit être créée. Voir *Ajout d'une source spectrale OPC* →  pour les instructions.

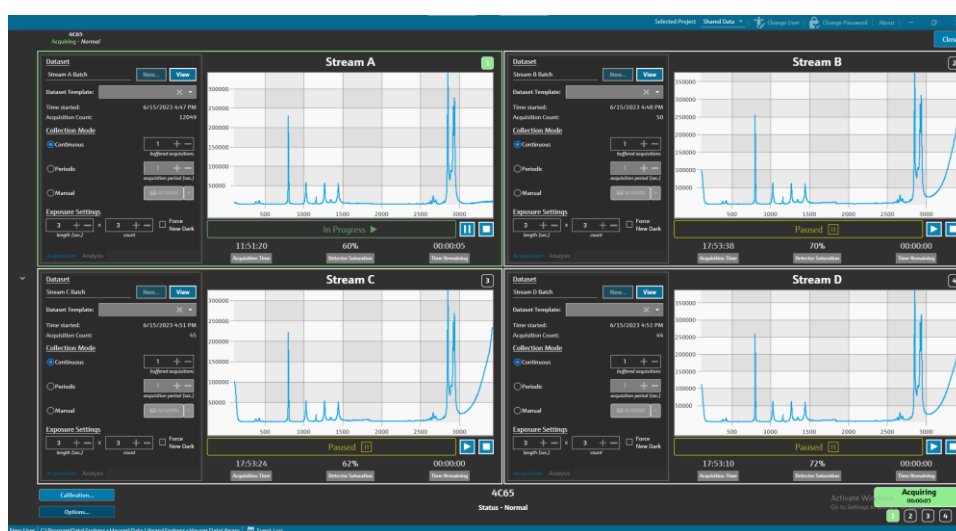
AVIS

Pour plus d'informations sur le fonctionnement sûr des analyseurs Raman Rxn et le logiciel Raman RunTime, consulter le *manuel de mise en service Raman RunTime (BA02180C)*.

- Selon la version de Raman RunTime utilisée, lire le manuel de mise en service *Raman RunTime* correspondant avant d'utiliser Raman data library Rxn Control.



Figure 54. Bouton Rxn Control



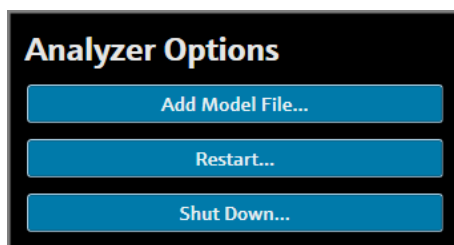
A0056059

Figure 55. Fenêtre Raman Analyzer

Le bouton **Rxn Control** n'est présent que lorsqu'un analyseur Raman Rxn est connecté à Raman data library. Pour connecter un analyseur, voir les instructions sous *Ajout d'une source spectrale OPC* → .

4.5.1 Analyzer options

Le menu **Analyzer Options** est accessible en cliquant sur **Options** au bas de la fenêtre **Raman Analyzer**.



A0056062

Figure 56. Options de l'analyseur Rxn

4.5.1.1 Ajout d'un fichier de modèle

Pour ajouter un fichier de modèle :

1. Dans la fenêtre **Rxn Control**, cliquer sur **Options**.
La boîte de dialogue Analyzer Options apparaît.

2. Cliquer sur **Add Model File** pour sélectionner un fichier de modèle à envoyer à Raman RunTime.

Les fichiers de modèle ajoutés peuvent être utilisés pour l'analyse. Ils sont activés ou désactivés en cliquant sur l'onglet **Analysis** dans une fenêtre de sonde. Les types de fichiers valides sont les suivants : .usp, .rusp, .dlm, .pxm, .pxs, .cal, .mat et .unsb. Pour plus de détails sur les types de modèles pris en charge par Raman RunTime, voir le *manuel de mise en service Raman RunTime* (BA02180).

Pour les instructions sur le redémarrage ou l'arrêt de l'analyseur, voir *Redémarrage ou mise hors tension de l'analyseur* → .

4.5.2 Contrôle des voies

Les analyseurs Raman Rxn peuvent avoir jusqu'à 4 sondes, ou voies de mesure, dans la fenêtre Rxn Control. Chaque voie dispose d'un volet de contrôle dans la fenêtre Raman Analyzer. Le volet "Channel" permet de sélectionner et d'afficher des blocs de données, de définir des modes de collecte, des paramètres d'exposition, etc.

Chaque volet "Channel" contient des paramètres qui reflètent les opérations Raman RunTime. Pour une description complète des fonctionnalités d'un volet "Channel", voir le *manuel de mise en service Raman RunTime* (BA02180).

4.5.2.1 Acquisition de voie

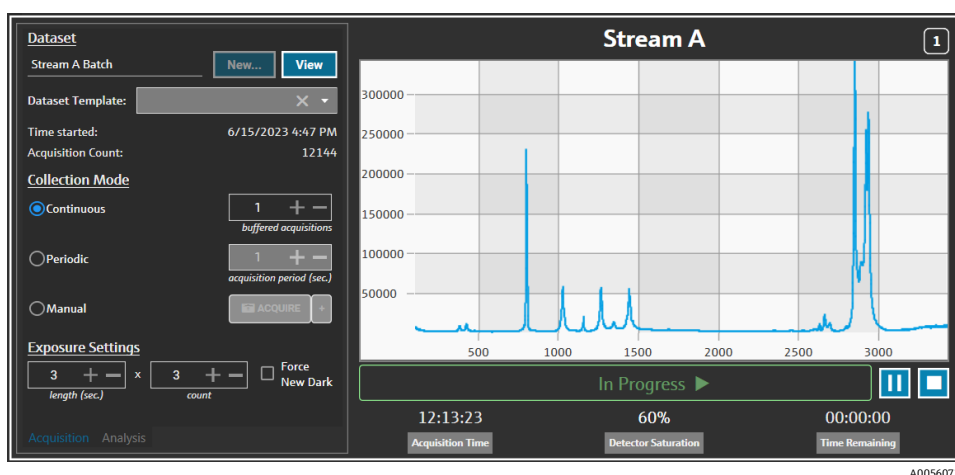


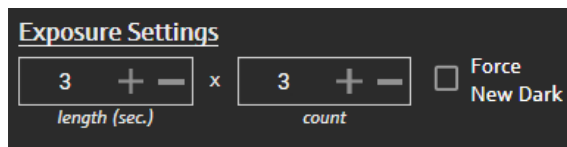
Figure 57. Volet de contrôle de voie

Les options suivantes peuvent être sélectionnées dans l'onglet **Acquisition** de voie :

- **New.** Permet de créer un nouveau bloc de données nommé.
- **View.** Permet d'afficher le bloc de données actuel dans la fenêtre du tableau de bord.
- **Dataset template.** Permet de sélectionner un modèle à appliquer au nouveau bloc de données. Un modèle doit être sélectionné avant le démarrage d'un batch.
- **Time Started.** Temps (en secondes) qui s'est écoulé depuis le démarrage du bloc de données actuel.
- **Acquisition Count.** Nombre d'acquisitions pour le bloc de données actuel.
- **Collection Modes.** Le mode de collecte de la sonde peut être modifié en sélectionnant l'une des trois options suivantes :
 - **Continuous.** Le mode de collecte "Continuous" utilise cycliquement chaque sonde active aussi rapidement que possible. Ce réglage est recommandé pour l'élaboration de méthodes lors de la collecte fréquente d'échantillons de référence, ainsi que pour la surveillance et le contrôle lorsque les modèles sont actifs. Le mode "Continuous" comprend une option d'acquisition en mémoire tampon.
 - **Periodic.** Le mode de collecte "Periodic" permet d'acquérir des spectres à des intervalles spécifiés et est généralement utilisé lors du développement de méthodes pour permettre la synchronisation des spectres avec les échantillons prélevés dans les réacteurs ou avec d'autres événements de process cadencés. L'option d'acquisition en mémoire tampon n'est pas possible en mode "Periodic".
 - **Manual.** Utiliser le mode de collecte "Manual" pour acquérir des spectres déclenchés manuellement par le bouton  **Acquire**. Les noms des échantillons peuvent être spécifiés pour chaque spectre en cliquant sur +.

- **Exposure Settings.** Les paramètres d'exposition, à savoir "length (sec.)" et "count", peuvent être modifiés en cliquant sur + et – ou en entrant manuellement une valeur à l'aide du clavier. Sélectionner **Force New Dark** pour forcer une nouvelle exposition à l'obscurité après chaque acquisition.

La collecte d'une nouvelle exposition à l'obscurité peut atténuer les contributions non liées à l'échantillon dans la mesure, dues au courant d'obscurité. Pour plus d'informations sur Force New Dark, voir le *manuel de mise en service Raman RunTime* (BA02180).

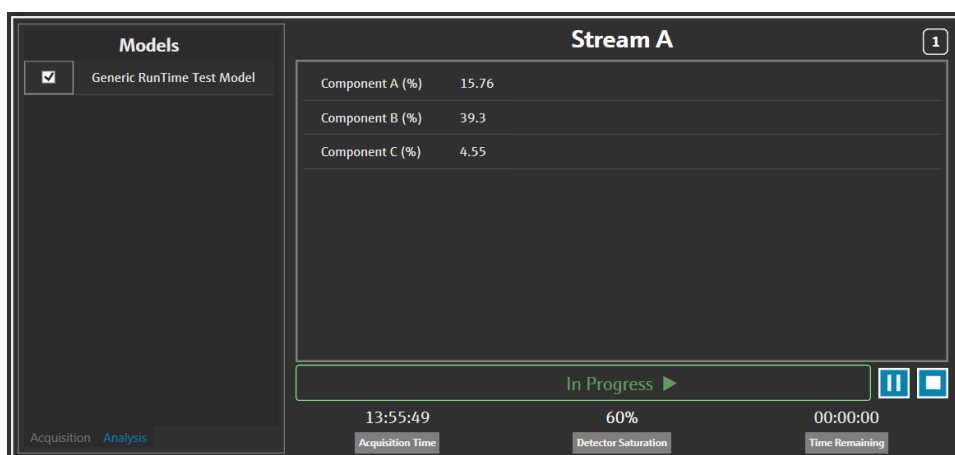


A0056075

Figure 58. Paramètres d'exposition

4.5.2.2 Application de modèles sur l'onglet Analysis de voie

L'onglet **Analysis** de voie permet de sélectionner et d'appliquer des modèles dans Raman RunTime afin de recevoir des prédictions de modèles pendant l'acquisition du bloc de données.



A0056076

Figure 59. Onglet "Analysis" de la voie

Pour choisir un modèle, vérifier le nom du fichier de modèle. Les informations suivantes s'affichent :

- Les valeurs prédites s'affichent dans l'onglet Analysis.
- Les résultats prédits par le modèle Raman RunTime s'affichent entre crochets dans la fenêtre Analyze, par exemple [8.14].

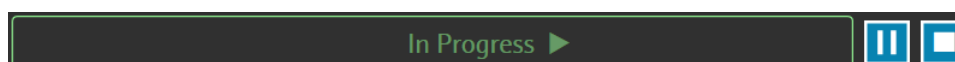
4.5.2.3 Acquisition de spectres

Pour démarrer l'acquisition d'un bloc de données, cliquer sur **Lecture** ►. Une fois que l'acquisition du bloc de données a commencé, le bouton de lecture se transforme en bouton de pause.

Cliquer sur **Arrêt** ■ pour arrêter l'acquisition du bloc de données.

4.5.2.4 Barre d'état de voie

La barre d'état de la voie est affichée sous le tracé spectral. Une voie peut avoir un état Not Started, In Process, Paused ou Completed.

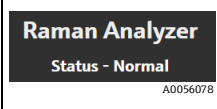
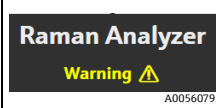
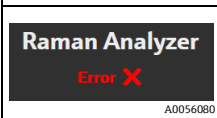


A0056077

Figure 60. Barre d'état de voie

4.5.2.5 Indicateurs d'état et d'action de l'analyseur

L'indicateur d'état de l'analyseur est affiché en bas au centre de la fenêtre Rxn Control. Il existe trois états de l'analyseur : Normal, Warning et Error.

État	Description
	L'état est normal.
	En cas d'avertissement du système, l'affichage passe à "Warning" en jaune. Les avertissements doivent être pris en compte, mais il n'est pas forcément nécessaire d'agir immédiatement. Cliquer sur l'état pour afficher les détails de l'avertissement.
	En cas d'erreur du système, l'affichage passe à "Error" en rouge. Les erreurs nécessitent une action immédiate. Cliquer sur l'état pour afficher les détails de l'avertissement.

Voir le manuel de mise en service Raman RunTime (BA02180) pour une liste complète des avertissements et des erreurs du système.

4.5.2.6 Indicateur d'action de l'analyseur

L'indicateur d'action de l'analyseur est affiché en bas à droite de la fenêtre Rxn Control. L'indicateur montre l'action actuellement exécutée. Si l'action est spécifique à la voie, le numéro de voie affecté clignote. En cas d'urgence, le bouton rouge d'arrêt de l'indicateur annule le processus d'étalonnage ou de vérification en cours.



Figure 61. Acquisition de spectres

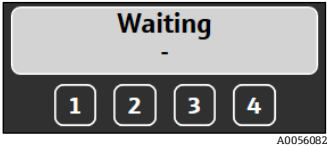


Figure 62. Mise en pause ou attente d'entrée par l'utilisateur

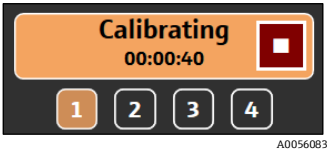


Figure 63. Étalonnage (sonde ou interne)

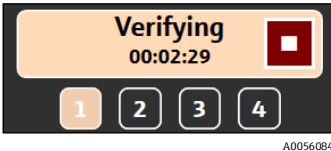


Figure 64. Vérification de la sonde

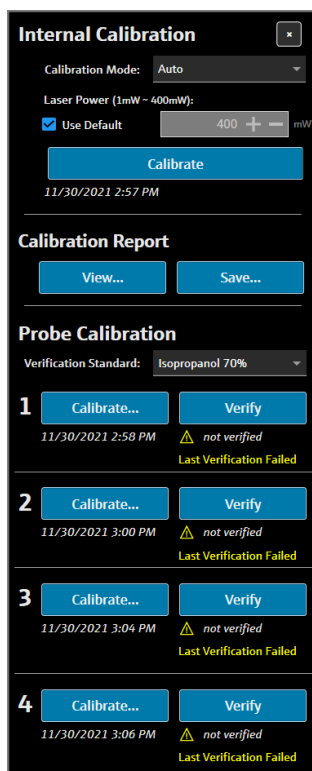
4.5.3 Étalonnage et vérification de l'analyseur Raman Rxn

Le contrôle de l'analyseur Raman Rxn via Raman data library ne permet pas de collecter des spectres sans avoir effectué les étalonnages internes et de la sonde. Tous les étalonnages sont nécessaires avant l'acquisition spectrale. La vérification est facultative mais recommandée.

Pour des instructions complètes sur l'étalonnage ou la vérification d'un analyseur ou d'une sonde Raman Rxn, voir les instructions du kit d'étalonnage de la sonde applicable et le *manuel de mise en service Raman RunTime* (BA02180).

Pour effectuer l'étalonnage et la vérification de l'analyseur Rxn :

1. Dans la fenêtre **Raman Analyzer**, cliquer sur **Calibration**.
La boîte de dialogue Calibration s'ouvre.
2. Les options suivantes peuvent être sélectionnées dans "Internal Calibration" :
 - **Calibration Mode.** Mode pour l'étalonnage interne (Auto, XAxis ou All).
 - **Laser Power.** Puissance du laser en mW.
 - Cliquer sur **Calibrate** pour effectuer un étalonnage interne.



A0056060

Figure 65. Boîte de dialogue Calibration

3. Sélectionner les options "Calibration Report" :
 - Cliquer sur **View** pour visualiser le fichier d'étalonnage (.pdf).
 - Cliquer sur **Save** pour enregistrer une copie du fichier d'étalonnage (.pdf).
4. Sélectionner les options "Probe Calibration" et "Verification" :
 - **Verification Standard.** L'échantillon de référence standard est utilisé pour vérifier les résultats de l'étalonnage de la sonde. Bien que cette étape ne soit pas obligatoire pour collecter un spectre Raman, elle est fortement recommandée.
 - Cliquer sur **Calibrate** sous une voie pour ouvrir la fenêtre d'étalonnage de la sonde. Suivre les instructions d'étalonnage et cliquer sur **Load** pour sélectionner un fichier de référence d'intensité à utiliser pour l'étalonnage de la sonde. Cliquer sur **Save** pour enregistrer une copie du fichier de référence d'intensité sélectionné.

L'utilisation du kit d'étalonnage et de vérification Raman avec un fichier spectral source basé sur un étalon de référence d'étalonnage (CRS) n'est actuellement pas prise en charge par l'interface de contrôle de l'analyseur Rxn de Raman data library.

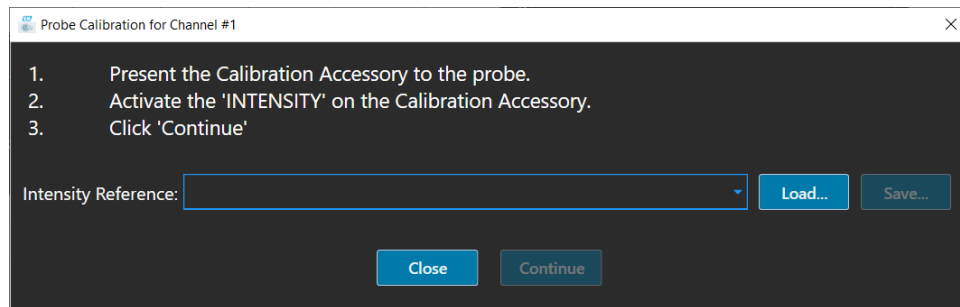


Figure 66. Fenêtre Probe Calibration, HCA

- Cliquer sur **Continue** pour démarrer l'étalonnage de la sonde. Lorsque l'étalonnage de la sonde est terminé, la date et l'heure de l'étalonnage sont mises à jour.
 - Cliquer sur **Verify** pour vérifier les résultats de l'étalonnage de la sonde.
5. Répéter les étapes ci-dessus pour chaque analyseur et sonde.
 6. Lorsque l'étalonnage et la vérification sont terminés, fermer la boîte de dialogue d'étalonnage.

5 Assistance

5.1 À propos de ("About")

Cliquer sur **About** dans le ruban supérieur pour ouvrir la fenêtre About Raman Data Library. Cette fenêtre permet d'afficher la version du logiciel, le numéro de version, l'ID d'installation et les informations de copyright.

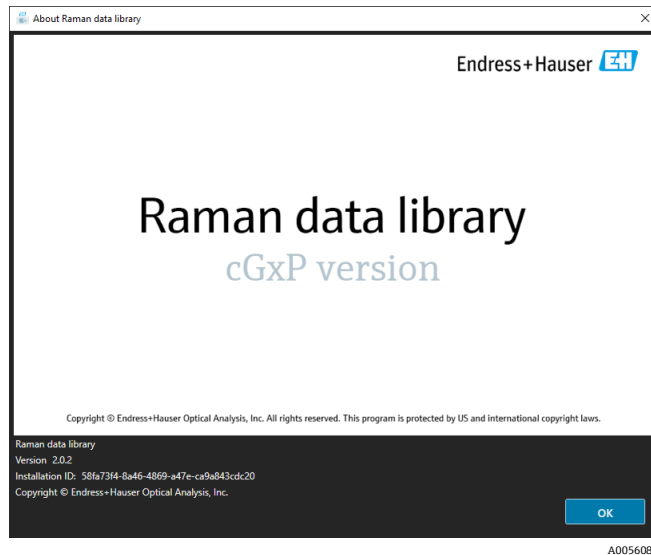


Figure 67. Fenêtre "About"

5.2 Coordonnées

Pour le SAV, consulter notre site web (<https://endress.com/contact>) pour obtenir la liste des canaux de vente locaux.

6 Informations de copyright

6.1 Contrat de licence utilisateur final

UNE COPIE DU CONTRAT DE LICENCE UTILISATEUR FINAL POUR LE LOGICIEL *Raman data library* EST JOINTE AU PRÉSENT DOCUMENT À TITRE DE RÉFÉRENCE.

VEUILLEZ LIRE ATTENTIVEMENT CE CONTRAT DE LICENCE AVANT D'INSTALLER OU D'UTILISER LE LOGICIEL.

EN CLIQUANT SUR LE BOUTON "ACCEPTE", EN INSTALLANT LE PRODUIT OU EN UTILISANT L'ÉQUIPEMENT QU'IL CONTIENT, VOUS CONSENTEZ À ÊTRE LIÉ PAR LE PRÉSENT ACCORD. SI VOUS N'ACCEPTEZ PAS TOUTES LES DISPOSITIONS DE CE CONTRAT, CLIQUEZ SUR LE BOUTON "N'ACCEPTE PAS" ET L'INSTALLATION PRENDRA FIN.

Ceci est un contrat de licence utilisateur final entre vous, l'utilisateur final du logiciel *Raman data library* ("bénéficiaire de la licence"), et Endress+Hauser Optical Analysis, Inc. ("concédant de la licence" ou "Endress+Hauser"), une entreprise du Delaware dont l'un des principaux établissements se trouve à l'adresse 371 Parkland Plaza, Ann Arbor, Michigan 48103. En installant le logiciel *Raman data library*, vous acceptez d'être lié par les dispositions et conditions du présent contrat.

1.0. Licence non exclusive. Le concédant de la licence vous accorde une licence non exclusive pour l'utilisation de *Raman data library*, qui comprend le pack de programmes informatiques et des données sous forme lisible par machine ainsi que les manuels d'utilisation, qui constituent ensemble le "logiciel sous licence", soumis aux présentes modalités et conditions valables pour toutes les versions du logiciel sous licence installées par vos soins

2.0. Étendue des droits. Le bénéficiaire de la licence est autorisé à :

2.1. Installer le logiciel sous licence sur un seul ordinateur pour l'utiliser en vue de la commande d'instruments de spectrographie fabriqués par Endress+Hauser ;

2.2. Utiliser et exécuter le logiciel sous licence sur un ordinateur tel que défini sous 2.1 dans le but de répondre aux besoins de l'utilisateur final ;

2.3. En complément de l'utilisation autorisée que vous faite du logiciel sous licence : utiliser des machines associées au dit/aux dits ordinateur/ordinateurs pour enregistrer, transmettre et afficher les instructions ou données lisibles par machine du logiciel sous licence ; et

2.4. Faire une copie du logiciel sous licence sous forme de code natif lisible par machine, uniquement à des fins de sauvegarde non productive.

3.0. Protection des droits de propriété et restrictions.

3.1. Le logiciel sous licence est protégé par le droit d'auteur. Le droit d'auteur est détenu par Endress+Hauser. Le logiciel est fourni sous licence, et non vendu, pour l'utilisation par le bénéficiaire de la licence. Le concédant de la licence ne vend pas le logiciel sous licence et n'en transfère pas le titre de propriété au bénéficiaire de la licence.

3.2. Vous n'êtes propriétaire d'aucun des droits, titres et intérêts relatifs au logiciel sous licence et à toutes ses modifications et améliorations (y compris la propriété de tous les secrets commerciaux et droits d'auteur qui s'y rapportent).

3.3. Ce logiciel sous licence contient des informations confidentielles et/ou renseignements exclusifs qui sont protégés par le droit d'auteur et les dispositions de traités internationaux. Tous les droits sont réservés. Toute photocopie, reproduction ou traduction dans une autre langue d'une partie ou de l'intégralité du logiciel sous licence est interdite sans l'autorisation écrite du concédant de la licence. Toute utilisation, divulgation, cession, transfert ou reproduction non autorisée de ces informations confidentielles sera poursuivie avec toute la rigueur de la loi.

3.4. Vous n'êtes pas autorisé à utiliser, copier, modifier ou distribuer le logiciel sous licence (par voie électronique ou autre), ou toute copie, adaptation, transcription, ou parties fusionnées de celui-ci, sauf comme expressément autorisé par le concédant de la licence. Le bénéficiaire de la licence n'est pas autorisé à désassembler, à décompiler ou à traduire d'une quelconque autre manière que ce soit le logiciel sous licence. Vous n'êtes pas autorisé à transférer, louer, céder ou concéder en sous-licence vos droits, à l'exception d'un transfert du logiciel sous licence dans son intégralité à (1) un successeur dans l'intérêt de l'ensemble des activités du bénéficiaire de la licence qui assume les obligations du présent contrat ou (2) toute autre partie raisonnablement acceptable pour le concédant de la licence, qui conclut une version de remplacement du présent contrat et paie des frais administratifs destinés à couvrir les coûts qui en découlent. Le bénéficiaire de la licence n'est pas autorisé à installer le logiciel sous licence dans un autre système informatique quelconque ou à l'utiliser à un autre endroit quelconque sans avoir obtenu au préalable l'autorisation expresse du concédant de la licence. Si vous utilisez, copiez ou modifiez le logiciel sous licence, ou que

vous transférez à toute autre partie la possession d'une quelconque copie, adaptation, transcription, ou partie fusionnée de celui-ci, d'une manière quelconque non expressément autorisée par le concédant de la licence, votre licence prend automatiquement fin.

3.5. Vous autorisez par la présente le concédant de la licence à pénétrer dans les locaux du bénéficiaire de la licence afin d'inspecter le logiciel sous licence d'une manière raisonnable, aux heures d'ouverture normales, afin de s'assurer que le bénéficiaire de la licence respecte les dispositions du présent contrat.

3.6. Vous convenez du fait qu'en cas de violation par le bénéficiaire de la licence de l'une des dispositions ci-avant, le concédant de la licence ne dispose pas d'un recours approprié par dommages et intérêts. Le concédant de la licence a donc le droit d'obtenir de tout tribunal compétent, immédiatement sur demande, une injonction contre une telle violation. Le droit du concédant de la licence à obtenir une injonction ne limite pas son droit à rechercher d'autres recours.

4.0. Garantie limitée et limitation de responsabilité.

4.1. Le concédant de la licence a veillé, dans votre intérêt, à assurer la précision et la fiabilité du logiciel sous licence. Cette garantie est expressément subordonnée à votre respect des procédures d'utilisation, de sécurité et de contrôle des données définies dans les documents fournis avec le logiciel sous licence.

4.2. Dans la mesure où la loi ne l'interdit pas, Endress+Hauser en sera en aucun cas responsable des dommages corporels ou de tout autre dommage accessoire, particulier, indirect ou consécutif, y compris, mais sans s'y limiter, des dommages par manque à gagner, perte de données, interruption des activités ou tout autre dommage ou perte de nature commerciale, résultant de/lié à votre utilisation du logiciel d'Endress+Hauser ou l'impossibilité de l'utiliser quelle qu'en soit la cause, indépendamment de la responsabilité théorique (contractuelle, délictuelle ou autre) et même si Endress+Hauser a été informé de la possibilité de tels dommages. Certaines juridictions ne permettant pas la limitation de responsabilité pour les dommages corporels, accessoires ou consécutifs, il est possible que cette limitation ne s'applique pas à vous. La responsabilité totale d'Endress+Hauser à votre égard pour tous les dommages (contrairement à ce qui est susceptible d'être prévu par la loi applicable dans les cas de dommages corporels) ne dépassera en aucun cas le montant total de tous les droits de licence payés au concédant de la licence en vertu du présent contrat. Les limitations indiquées ci-avant s'appliqueront même si le recours susmentionné n'atteint pas son but essentiel.

4.3. Le concédant de la licence ne saurait être tenu responsable des erreurs ou omissions dans le logiciel sous licence et se réserve le droit d'apporter des modifications et des améliorations, sans préavis, à tout produit qu'il contient et pour quelque raison que ce soit.

4.4. Sauf dans les cas expressément prévus dans le présent contrat, le concédant de la licence décline toute promesse, déclaration et garantie concernant le logiciel sous licence, y compris son état, sa conformité à une déclaration ou description quelconque, toute négligence et sa qualité marchande ou son adéquation à un usage particulier. Les informations fournies avec le logiciel sous licence ne sont pas conçues comme des déclarations ou garanties concernant le logiciel sous licence décrit et ne doivent pas être considérées comme telles.

4.5. La responsabilité cumulée du concédant de la licence à votre égard pour toutes les réclamations relatives au logiciel sous licence et au présent contrat, y compris toute cause d'action fondée sur un contrat, un délit ou une responsabilité stricte, ne dépassera pas le montant total de tous les droits de licence payés au concédant de la licence en vertu du présent contrat. La limitation de responsabilité s'applique même si d'autres dispositions du présent accord ont été violées ou se sont révélées sans effet. Le concédant de la licence ne saurait être tenu responsable de pertes de données ou de documentation, étant entendu qu'il incombe au bénéficiaire de la licence de prendre des mesures de précaution raisonnables en matière de sauvegarde.

4.6. Le logiciel sous licence est vendu "en l'état" et l'intégralité du risque concernant sa qualité et ses performances vous incombe.

4.7. Il est possible que vous bénéficiiez de droits supplémentaires en vertu de certaines lois, *par ex.* des lois de protection des consommateurs, qui ne permettent pas l'exclusion des garanties implicites ou l'exclusion ou la limitation de certains dommages. Si de telles lois s'appliquent, ces exclusions et limitations peuvent ne pas s'appliquer à vous.

5.0. Divers.

5.1. Le présent contrat est régi par la législation de l'État du Michigan (États-Unis d'Amérique), et interprété conformément à celle-ci, mais à l'exclusion spécifique des règles de conflit de lois de l'État du Michigan.

5.2. Aucune modification du présent contrat n'est contraignante si elle n'est pas formulée par écrit et signée par un représentant habilité de la partie envers laquelle l'application de la modification est demandée.

5.3. Toute notification requise ou autorisée en vertu du présent contrat doit être faite par écrit et remise en mains propres ou envoyée par courrier recommandé ou certifié, avec accusé de réception, et affranchissement en bonne et due forme.

5.4. Si l'une des dispositions du présent contrat est, devient ou est déclarée invalide ou nulle par une cour ou un tribunal compétent, cette ou ces dispositions seront nulles et non avenues et seront considérées comme dissociées du présent contrat, et toutes les autres dispositions du présent contrat resteront pleinement valables et en vigueur.

5.5. LE PRÉSENT CONTRAT CONSTITUE LA DÉCLARATION COMPLÈTE ET EXCLUSIVE DES OBLIGATIONS ET RESPONSABILITÉS DU CONCÉDANT DE LA LICENCE À L'ÉGARD DU BÉNÉFICIAIRE DE LA LICENCE ET REMPLACE TOUTE AUTRE PROPOSITION, DÉCLARATION OU AUTRE COMMUNICATION FAITE PAR LE CONCÉDANT DE LA LICENCE OU EN SON NOM CONCERNANT L'OBJET DU PRÉSENT CONTRAT.

6.0 Documentation.

Le présent document est destiné à être utilisé par les employés et les représentants habilités de la société Endress+Hauser Optical Analysis, Inc. Aucune partie du présent document ne peut être reproduite ou transmise sous quelque forme ou par quelque moyen que ce soit, électronique ou mécanique, y compris la photocopie, l'enregistrement ou les systèmes de stockage et de recherche d'informations, à des fins autres que l'usage personnel de l'acheteur, sans l'autorisation écrite expresse de la société Endress+Hauser Optical Analysis, Inc. La loi assimile la traduction dans une autre langue à la réalisation d'une copie.

Les informations contenues dans le présent document sont réputées exactes au moment de la rédaction. Endress+Hauser Optical Analysis, Inc. se réserve le droit de modifier sans préavis les informations contenues dans le présent document.

www.addresses.endress.com
