

Manual de instrucciones del usuario

Raman data library 2.0



Índice

1 Sobre este documento.....	3
1.1 Función del documento.....	3
1.2 Símbolos de seguridad.....	3
1.3 Seguridad.....	3
1.4 Glosario.....	3
1.5 Documentación.....	5
1.6 Marcas registradas.....	5
2 Descripción del producto.....	6
2.1 Instalación.....	6
2.2 Ajustes de seguridad (solo versión cGxP).....	6
2.3 Gestión de usuarios (solo versión cGxP).....	8
3 Manejo del software.....	12
3.1 Inicio de sesión (solo versión cGxP).....	12
3.2 Modos en línea y fuera de línea.....	12
3.3 Interfaz de usuario.....	12
4 Cómo añadir datos a Raman data library.....	16
4.1 Proyectos.....	16
4.2 Fuentes espectrales.....	17
4.3 Conjuntos de datos.....	20
4.4 Campos de datos.....	23
5 Análisis de conjuntos de datos.....	26
5.1 Visualización de conjuntos de datos.....	26
5.2 Uso de tratamientos previos.....	33
5.3 Picos y regiones.....	37
5.4 Creación de vistas de tablero de instrumentos: tablas, tendencias, espectros y gráficos 3D.....	41
5.5 Resumen.....	47
6 Control del analizador Raman Rxn....	50
6.1 Opciones del analizador.....	50
6.2 Control del canal.....	51
6.3 Calibración y verificación del analizador Raman Rxn.....	54
7 Cumplimiento de la norma FDA 21 CFR, parte 11.....	56
7.1 Gestión de usuarios.....	56
7.2 Registros electrónicos y firmas electrónicas.....	56
7.3 Administración de los ajustes del sistema.....	56
7.4 Seguimiento de auditoría mediante la función de control de cambios.....	57
7.5 Cómo trabajar con registros de eventos.....	58
8 Diagnóstico y localización y resolución de fallos.....	61
8.1 Reinicio o apagado del analizador.....	61
8.2 No se están capturando espectros.....	61
9 Apoyo.....	62
9.1 Acerca de.....	62
9.2 Información de contacto.....	62
10 Información de copyright.....	63
10.1 Contrato de licencia de usuario final.....	63

1 Sobre este documento

1.1 Función del documento

El presente documento proporciona instrucciones relativas a las tareas generales de los usuarios de Raman data library, incluida la navegación, la explicación de los campos, la manipulación de los datos, etc. Las instrucciones administrativas, incluidas las referidas a la instalación, la administración de la base de datos y de los usuarios y la seguridad se pueden consultar en el *Manual de instrucciones del administrador de Raman data library* (BA02349C).

1.2 Símbolos de seguridad

Estructura de la información	Significado
<p>⚠ ADVERTENCIA</p> <p>Causas (/consecuencias) En caso necesario, consecuencias del no cumplimiento (si procede) ► Medida correctiva</p>	Este símbolo le advierte de una situación peligrosa. No evitar dicha situación peligrosa puede provocar lesiones muy graves o accidentes mortales.
<p>⚠ ATENCIÓN</p> <p>Causas (/consecuencias) En caso necesario, consecuencias del no cumplimiento (si procede) ► Medida correctiva</p>	Este símbolo le advierte de una situación peligrosa. Si no se evita dicha situación, se pueden producir lesiones leves o de mayor gravedad.
<p>NOTA</p> <p>Causa/situación En caso necesario, consecuencias del no cumplimiento (si procede) ► Acción/observación</p>	Este símbolo le alerta ante situaciones que pueden derivar en daños materiales.

1.3 Seguridad

Para obtener información sobre el manejo seguro de los analizadores Raman Rxn y el software Raman RunTime, véase el *manual de instrucciones de Raman RunTime v6.5* (BA02180C). Se recomienda leer todo el *manual de instrucciones de Raman RunTime v6.4* (o posterior) antes de usar Raman data library.

1.3.1 Seguridad informática

El explotador, de conformidad con sus normas de seguridad, debe implementar medidas de seguridad informática que proporcionen protección adicional tanto al equipo como a la transmisión de datos asociada.

1.4 Glosario

Término	Descripción
Registro de auditoría	Registro independiente generado por ordenador de los cambios efectuados en los registros electrónicos, incluido el punto temporal, el operador, la acción, el contenido y, si se requiere, el motivo.
Usuario autorizado	Usuario final que ha completado la formación requerida y al que se le ha otorgado acceso a la aplicación.
BCA	Precisión de la corrección de fondo (Background Correction Accuracy)
°C	Grados Celsius
Cfm	Pies cúbicos por minuto
CFL	Nuevo formato de fichero CFL definido en la "Especificación del formato de datos universal de Galactic Industries Corp. ", de fecha 4 de septiembre de 1997
CFR	Código de reglamentos federales (Code of Federal Regulation)

Término	Descripción
cGMP	Buenas prácticas de fabricación actuales (Current good manufacturing practices)
cGxP	Buenas prácticas clínicas, de laboratorio y/o de fabricación actuales (Current good clinical, laboratory, and/or manufacturing practices)
CMMS	Sistema de gestión computerizada del mantenimiento (Computerized maintenance management system): Base de datos para ordenador que contiene todas las órdenes de trabajo de mantenimiento y que se usa para planificar las actividades.
COTS	Disponible y configurable (Configurable off-the-shelf)
CTQ	Crítico para la calidad (Critical to quality)
Requisito crítico	Requisito que, si no se cumple, tiene una repercusión negativa en algún requerimiento del organismo de control, en la integridad de los datos o en la seguridad.
Análisis de datos	Todo proceso de trabajo cuyo objetivo consista en obtener información de gran utilidad a partir de los datos brutos suministrados por el espectrómetro.
Registro electrónico	Toda combinación de registros representados de forma digital que se cree, modifique, mantenga, archive, recupere o distribuya por medio de un sistema basado en ordenador y que se use para una actividad regulada de tipo cGxP.
Firma electrónica	Autorización del registro electrónico por parte de una persona en forma de confirmación digital vinculante legalmente y equivalente a la firma a mano de la persona.
Informe final	Documento que resume todos los resultados derivados de la ejecución de un documento de validación.
GAML	Lenguaje de marcado analítico generalizado (Generalized Analytical Markup Language)
GDP	Buenas prácticas de documentación (Good Documentation Practices)
GCC	Control global de cambios (Global Change Control)
GHz	Gigahercio
Datos gráficos	Datos clave, información o atributos que se pueden representar de forma gráfica.
Hz	Hertz
IAPP	Política de protección de activos de información (Information Asset Protection Policy)
In situ	En su lugar original
IQ	Cualificación durante la instalación (Installation Qualification)
LAN	Red de área local (Local Area Network)
Nm	Nanómetro
Requisito no crítico	Requisito que, si no se cumple, no tiene repercusión negativa en los requerimientos del organismo de control, en la integridad de los datos ni en la seguridad.
OQ	Cualificación en operación (Operational Qualification)
OS	Sistema operativo
Contraseña	Introducción por parte del usuario de un código privado unívoco para fines de identificación.
PAT	Tecnología analítica de proceso (Process Analytical Technology)
PC	Ordenador personal (Personal Computer)
ppb	Partes por miles de millones
ppm	Partes por millón
psig	Libras por pulgada cuadrada (relativa)
Filtro de Savitzky-Golay	Filtro digital que se puede aplicar a un conjunto de puntos de datos digitales con el propósito de suavizar los datos, es decir, aumentar la precisión de los datos sin distorsionar la tendencia de la señal.
SPC	Forma de fichero definida por el desarrollador.

Término	Descripción
Espectros	Datos brutos obtenidos del espectrómetro Raman tras procesarlos en formato de SPC (GRAMS).
QC	Control de calidad
Analizador Raman Rxn4	Sistema con espectroscopia integrada destinado a albergar sondas ópticas de fibra con el fin de analizar muestras.
RAM	Memoria de acceso aleatorio (Random Access Memory)
UPS	Sistema de alimentación ininterrumpida (Uninterruptable Power Supply)
URS	Especificación de requerimientos del usuario (User Requirements Specification)

1.5 Documentación

Toda la documentación está disponible en:

- En el dispositivo multimedia suministrado (no se incluye en el suministro de todas las versiones del equipo)
- En la aplicación móvil de Endress+Hauser: www.endress.com/supporting-tools
- En la sección de descargas del sitio web de Endress+Hauser: www.endress.com/downloads

El presente documento forma parte integral del paquete de documentos, que incluye los elementos siguientes:

Número de pieza	Tipo de documento	Descripción
BA02349C	Manual de instrucciones del administrador de la Raman data library	Completa visión general de las operaciones relacionadas con la administración de la seguridad y de la base de datos de Raman data library.
KA01717C	Manual de instrucciones abreviado de Raman data library	Guía de inicio rápido para hacer funcionar Raman data library después de la instalación.
TI01802C	Información técnica de la Raman data library	Ayuda para la planificación de su sistema de análisis de datos. El documento contiene todos los datos técnicos del software.

1.6 Marcas registradas

SIMCA®

Marca registrada de Sartorius Stedim Biotech.

GRAMS IQ™

Marca registrada de Thermo Fisher Scientific.

2 Descripción del producto

Raman data library de Endress+Hauser es un programa de software destinado a organizar, visualizar, analizar e informar sobre los datos espectrales del Raman Rxn. Raman data library es un complemento a Raman RunTime integrado en Raman Rxn de Endress+Hauser que permite almacenar espectros, organizarlos, analizarlos y recopilar datos de múltiples analizadores, desde el laboratorio a cGxP.

La Raman data library se ha creado para los usuarios que necesitan visualizar espectros Raman, asociarlos con datos de referencia y crear modelos de picos univariantes. Con este software, los datos preparados se pueden exportar para su modelado multivariable externo.

Características de Raman data library:

- **Organización de los datos.** Empareja espectros con valores de referencia, prepara los datos antes del modelado quimiométrico, proporciona almacenamiento de datos apto para búsquedas y asegura la integridad de los datos
- **Análisis de datos.** Ofrece una visualización mejorada de los espectros y análisis simples, como tendencia de picos y modelado univariable.
- **Opción cGxP.** Cumple los estándares de la industria relativos a trazabilidad, almacenamiento y archivo de los datos espectrales.

Raman data library guarda los datos espectrales en una base de datos segura SQLite integrada, efectúa cálculos con los datos espectrales y muestra los datos espectrales y sus metadatos asociados tanto en informes como en la pantalla. Esta funcionalidad permite usar los espectros de Raman como datos de referencia para desarrollar el método Raman cuantitativo y satisfacer las necesidades reflejadas en la norma FDA 21 CFR, parte 11, formando parte de una solución analítica validada.

Raman data library se puede implementar de manera que cumpla la norma 21 CFR, parte 11, cuando se instala con el instalador cGxP Setup, así como cualificarse a través de IQ/OQ con Endress+Hauser y PQ con el cliente. Al instalarse en modo cGxP, el programa permite la recopilación, almacenamiento y organización de espectros Raman para que estos puedan:

- Actuar como datos de set para calibración para el desarrollo de modelos Raman cuantitativos, como parte de una solución analítica validada, o
- Actuar como entrada de datos en modelos validados usados para predicciones del proceso o propiedades de la muestra

2.1 Instalación

Raman data library está diseñada para instalarse en una estación de trabajo independiente. Raman data library contiene funciones para exportar datos de cada instancia de la aplicación e importar los datos a una ubicación centralizada. Consulte las instrucciones de instalación en el *manual de instrucciones del administrador de Raman data library* (BA02349C).

2.2 Ajustes de seguridad (solo versión cGxP)

En los entornos cGxP, Raman data library emplea la autenticación de usuario para asegurar la trazabilidad y el registro de todos los eventos. En los entornos Core de Raman data library no se utilizan la gestión ni la autenticación de usuarios.

Desde la ventana "Ajustes" se pueden modificar los ajustes de seguridad del sistema. Para hacer cambios en los ajustes de seguridad del sistema debe iniciar sesión con el rol de gestor de ajustes del sistema.

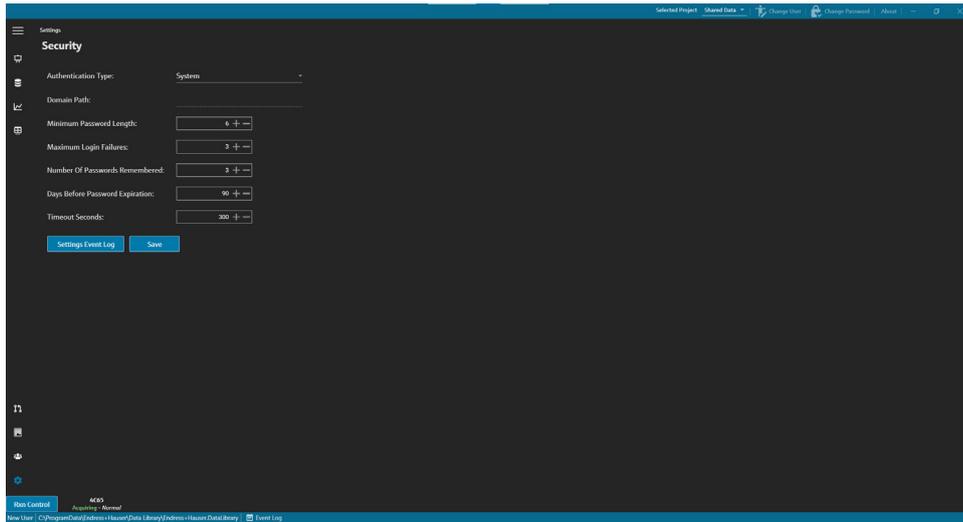


Figura 1. Ventana "Seguridad"

En la ventana "Ajustes" puede seleccionar los elementos siguientes:

- **Tipo de autenticación.** Tipo de autenticación para la aplicación. El usuario puede elegir entre los modos de autenticación "Sistema", "Dominio" y "Local".
- **Ruta de dominio.** (Solo para autenticación de dominio) Ruta del dominio.
- **Longitud mínima de la contraseña.** Número mínimo de caracteres que debe contener la contraseña del usuario. El número mínimo de caracteres admisible es 6.
- **Fallos máximos de inicio de sesión.** Número de intentos fallidos de inicio de sesión que se permiten antes de bloquear una cuenta de usuario.
- **Número de contraseñas recordadas.** Número de contraseñas nuevas únicas que se deben asociar a una cuenta de usuario antes de permitir la reutilización de una contraseña ya usada.
- **Días antes de la caducidad de la contraseña.** Periodo (en días) que se puede usar una contraseña antes de que el sistema solicite al usuario que la modifique. Se puede ajustar que las contraseñas caduquen al cabo de un cierto número de días o bien se puede ajustar el número de días a 0 para especificar que las contraseñas no caduquen nunca.
- **Segundos de tiempo de espera.** Periodo (en segundos) de inactividad admisible antes de que se produzca un bloqueo del sistema por tiempo de espera. Tras un bloqueo del sistema por tiempo de espera, se solicita a los usuarios que vuelvan a introducir sus credenciales para continuar o bien que salgan de la aplicación. Si "Segundos de tiempo de espera" se ajusta a 0, el bloqueo del sistema por tiempo de espera queda deshabilitado. El valor máximo configurable para el tiempo de espera es de 3600 segundos (60 minutos).

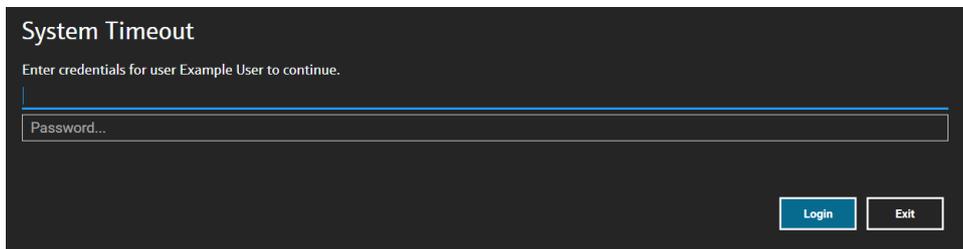


Figura 2. Tiempo de espera del sistema

- **Guardar.** Guarda los ajustes de seguridad del sistema.
- **Registro de eventos de ajustes.** Muestra el registro de eventos de los ajustes.

2.3 Gestión de usuarios (solo versión cGxP)

En los entornos cGxP, Raman data library autentica a los usuarios para asegurar la trazabilidad y el registro de todos los eventos. La versión básica de Raman data library no ofrece funciones de gestión de usuarios y autenticación.

La ventana "Usuarios" permite a los gestores añadir cuentas de usuario, actualizarlas y borrarlas. También permite a los gestores visualizar los eventos de un usuario específico o todos los eventos de todos los usuarios. Para gestionar a los usuarios, es preciso iniciar sesión en una cuenta con el rol "Gestor de usuarios".

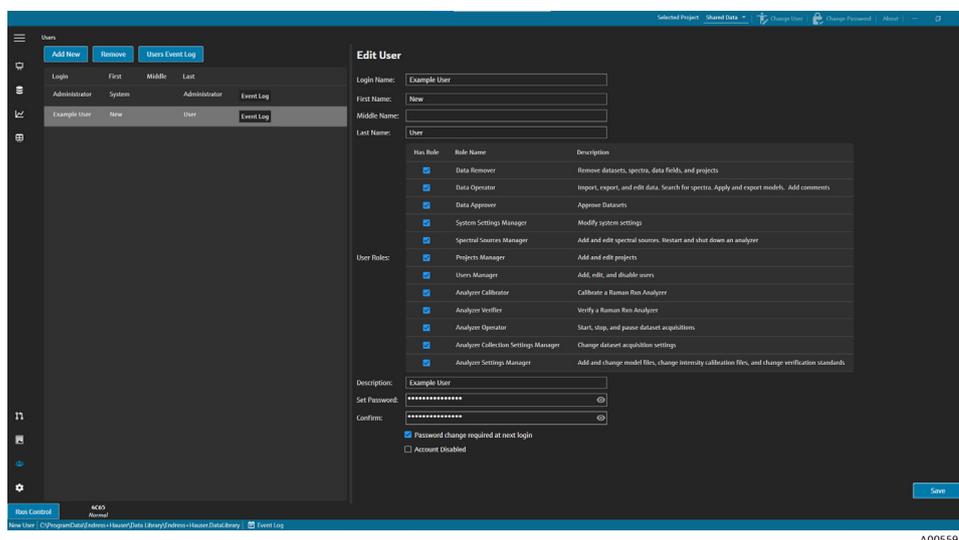


Figura 3. Ventana "Usuarios"

En la ventana "Usuarios" puede seleccionar los elementos siguientes:

- **Añadir nuevo.** Crea un nuevo usuario.
- **Eliminar.** Elimina el usuario seleccionado. Para eliminar un usuario se necesita el rol "Eliminador de datos".
- **Registro de eventos de usuarios.** Muestra el registro de eventos de todos los usuarios.
- **Registro de eventos.** Muestra el registro de eventos del usuario especificado.

2.3.1 Roles de usuario

En el marco de la funcionalidad de los roles de usuario, un gestor de usuarios puede crear usuarios con permisos que repliquen la estructura organizativa determinada por el cliente. No hay grupos fijos de usuarios como tales. En su lugar, se dispone de muchas opciones para estructurar los permisos mediante la asignación de una combinación de roles de usuario.

Los roles de usuario se pueden usar para limitar la funcionalidad del usuario. A un usuario determinado se le puede asignar cualquier combinación de roles, desde ningún rol a todos los roles.

Función	Acciones permitidas
Eliminación de datos	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Borrar conjuntos de datos ▪ Borrar espectros ▪ Borrar campos de datos ▪ Borrar proyectos
Manejo de datos	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Importar, exportar y editar datos ▪ Búsqueda de espectros ▪ Aplicación y exportación de modelos ▪ Adición de comentarios
Aprobación de datos	Aprobación de conjuntos de datos
Gestión de los ajustes del sistema	Modificación de la configuración del sistema
Gestión de fuentes espectrales	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Añadir y editar fuentes espectrales ▪ Reinicio y apagado de un analizador

Función	Acciones permitidas
Administración de proyectos	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Añadir proyectos ▪ Editar proyectos
Administración de usuarios	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Añadir usuarios ▪ Editar usuarios ▪ Deshabilitar usuarios
Calibración del analizador	Calibración de un analizador Raman Rxn
Verificación del analizador	Verificación de un analizador Raman Rxn
Manejo del analizador	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Iniciar adquisiciones de conjuntos de datos ▪ Detener adquisiciones de conjuntos de datos ▪ Pausar adquisiciones de conjuntos de datos
Gestión de los ajustes de recopilación del analizador	Cambio de la configuración de adquisición de los conjuntos de datos
Gestión de los ajustes del analizador	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Adición y cambio de archivos de los modelos ▪ Cambio de los ficheros de calibración de la intensidad ▪ Cambio de los estándares de verificación

Los roles de usuario se pueden restringir a un conjunto de permisos o bien combinarse en conjuntos relacionados con las responsabilidades de los roles funcionales. La tabla siguiente proporciona ejemplos de los conjuntos de roles que se podrían asignar a los usuarios, supervisores y administradores.

Nivel de usuario	Roles aplicados
Usuario	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Manejo de datos ▪ Gestión de fuentes espectrales ▪ Calibración del analizador ▪ Verificación del analizador ▪ Manejo del analizador ▪ Gestión de los ajustes de recopilación del analizador ▪ Gestión de los ajustes del analizador
Supervisor	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Eliminación de datos ▪ Aprobación de datos ▪ Gestión de los ajustes del sistema ▪ Administración de proyectos
Administrador	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Administración de usuarios

2.3.2 Creación de un nuevo usuario

Cómo crear un usuario nuevo

1. Desde la ventana "Usuarios", haga clic en **Añadir nuevo**.

Crea cuentas de usuario nuevas en Raman data library para todos los usuarios nuevos del sistema. Si bien Raman data library permite cambiar el nombre de los usuarios, use esta funcionalidad únicamente para modificar el nombre de un usuario debido a un cambio de nombre. No cambie el nombre de una cuenta de usuario con el fin de reasignar la cuenta a otra persona.

Se muestra un nuevo panel "Editar usuario".

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

Figura 4. Panel "Editar usuario"

- Introduzca las propiedades del usuario:
 - Nombre de inicio de sesión.** Nombre usado para iniciar sesión en el sistema. Cada nombre de usuario debe ser único y de una longitud de entre 1 y 100 caracteres.
 - Nombre de pila.** Nombre de pila del usuario. Puede tener entre 0 y 100 caracteres de longitud.
 - Segundo nombre.** Segundo nombre del usuario. Puede tener entre 0 y 100 caracteres de longitud.
 - Apellido.** Apellido del usuario. Puede tener entre 0 y 100 caracteres de longitud.
 - Roles de usuario.** Roles asignados al usuario en Raman data library. Los roles de usuario se pueden añadir y retirar mediante la selección o deselección de la casilla **Incluir** para cada rol. Véase *Roles de usuario* →
 - Descripción.** Descripción del usuario.
- Introduzca una contraseña válida en los campos **Definir contraseña** y **Confirmar contraseña**.
Una contraseña debe satisfacer los requisitos mínimos siguientes:
 - Debe contener al menos un carácter especial
 - Debe contener una mezcla de letras mayúsculas y minúsculas
 - Debe cumplir la longitud mínima de contraseña definida en la ventana "Ajustes"
- (Opcional) Seleccione **Cambio de contraseña requerido en el siguiente inicio de sesión** cuando añada un usuario nuevo.
- Haga clic en **Guardar**.

2.3.3 Deshabilitación de un usuario

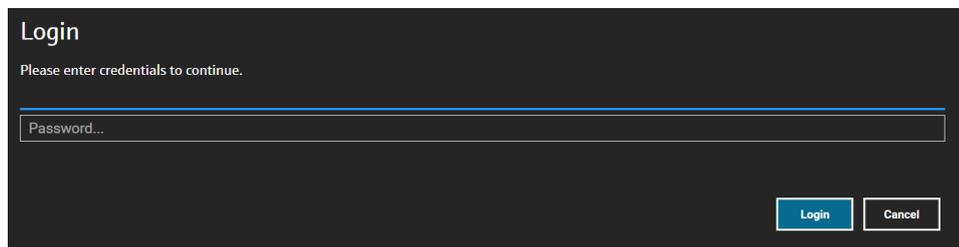
Las cuentas de usuario inactivas de Raman data library se pueden deshabilitar, pero siempre es preciso conservarlas en Raman data library para fines de historial y registro de auditoría. Un usuario deshabilitado no puede iniciar sesión.

Cómo deshabilitar a un usuario

- Desde la ventana "Usuarios", seleccione la cuenta de usuario que se tenga que deshabilitar.
- Seleccione **Cuenta deshabilitada**.
- Haga clic en **Guardar**.

2.3.4 Cambiar el usuario

Haga clic en **Cambiar el usuario**, situado en la barra de herramientas de cinta superior, para cambiar a otro usuario distinto. Para poder cambiar a otro usuario distinto se debe introducir las credenciales de usuario correctas.



A0055965

Figura 5. Inicio de sesión de usuario

2.3.5 Cambie la contraseña

Haga clic en **Cambiar la contraseña**, situado en la barra de herramientas de cinta superior, para cambiar la contraseña del usuario actual. Se solicita al usuario que introduzca la contraseña antigua y la contraseña nueva y a continuación confirme la contraseña nueva.

La contraseña debe satisfacer los correspondientes requisitos mínimos. Una contraseña debe contener al menos un carácter especial, una mezcla de mayúsculas y minúsculas y cumplir la longitud mínima de contraseña definida en la ventana "Ajustes".



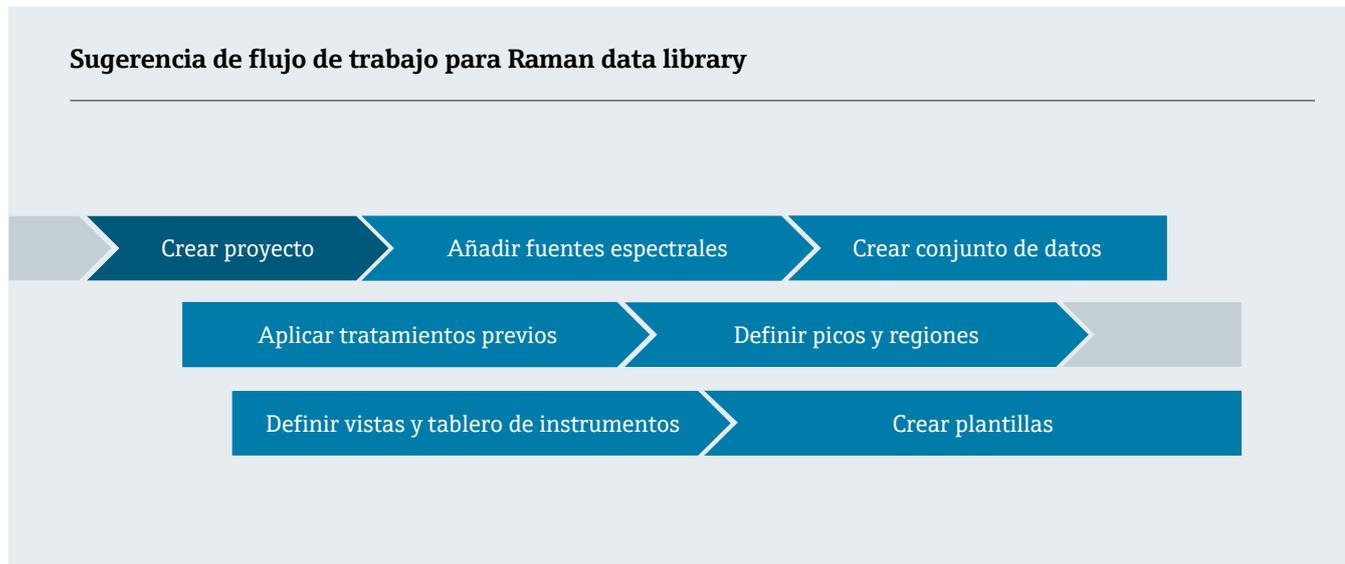
A0055966

Figura 6. Cuadro de diálogo "Cambiar la contraseña"

Este elemento de menú no está disponible si el modo de autenticación ajustado es "Local", "Windows" o "Dominio". Con estos modos de autenticación, los cambios de contraseña son gestionados por el servidor de autenticación seleccionado.

3 Manejo del software

Raman Data Library dispone de características y funciones que le pueden ayudar a estructurar un flujo de trabajo para el análisis de datos espectrales. A continuación se muestra una sugerencia de flujo de trabajo. Cuando complete una porción del flujo de trabajo, como importar datos o aplicar tratamientos previos, el software abre el siguiente paso del procesamiento de datos.



Este manual está diseñado para seguir dicho flujo de trabajo, desde la adición de datos a Raman data library hasta la creación de proyectos, el uso de tratamientos previos y el análisis de datos.

Después de instalar Raman data library, se debe familiarizar con la interfaz del software para poder así desarrollar un flujo de trabajo de análisis de datos que se adapte a sus necesidades. Consulte las instrucciones de inicio rápido en el *manual de instrucciones abreviado de Raman data library (KA01717C)*.

3.1 Inicio de sesión (solo versión cGxP)

En la versión cGxP de Raman data library, para abrir Raman data library debe iniciar una sesión.

El nombre de inicio de sesión y la contraseña son campos obligatorios. El nombre de inicio de sesión no diferencia entre mayúsculas y minúsculas. Por ejemplo, el nombre de inicio de sesión "Jane" es equivalente al nombre "jane."

Como medida de seguridad, si un usuario hace un cierto número (configurable) de inicios de sesión fallidos, se bloquea su acceso automáticamente. Para volver a habilitar al usuario bloqueado es preciso ponerse en contacto con un administrador.

3.2 Modos en línea y fuera de línea

Raman data library se puede utilizar en dos modos diferentes:

- **En línea.** El software de modelado recibe datos en directo de un analizador Raman y ofrece un análisis de la composición en tiempo real.
- **Fuera de línea.** Los conjuntos de datos se importan y se pueden analizar con independencia del proceso de tiempo real. En el modo fuera de línea también se pueden crear plantillas a partir de analitos conocidos, lo que permite elaborar plantillas de modelos y conjuntos de datos para su uso y comparación con datos en tiempo real.

Utilizar estos dos modos le permite entender los espectros Raman capturados en entornos de proceso en tiempo real y actuar en consecuencia.

3.3 Interfaz de usuario

La primera vez que se inicia Raman data library se muestra un tablero de instrumentos vacío con iconos de menú en el lado izquierdo. El menú de la izquierda se puede expandir. Raman data library se abre con un tablero de instrumentos vacío hasta que se carga un conjunto de datos y se configuran las vistas.

Para asegurar que la experiencia de la interfaz de usuario en Raman data library coincida con el comportamiento previsto, ajuste la escala de visualización de Windows al 100 %.

3.3.1 Menús

Menú principal

El menú principal situado en el lado izquierdo de Raman data library permite navegar entre las distintas funciones del software.

Opción de menú	Navegación
 A0055967	Expandir/contraer. Mostrar u ocultar los elementos del menú.
 A0055968	Tablero de instrumentos. Crear y gestionar los tableros de instrumentos del usuario.
 A0055969	Conjuntos de datos. Crear y gestionar los conjuntos de datos.
 A0055970	Analizar conjunto de datos. Analizar el conjunto de datos activo. Solo está habilitado si hay un conjunto de datos activo. Este elemento contiene cinco subpestañas: <ul style="list-style-type: none"> ▪ Datos ▪ Tratamiento previo ▪ Picos/regiones ▪ Vistas ▪ Resumen
 A0055971	Campos de datos. Crear y gestionar campos de datos.
 A0055972	Fuentes espectrales. Crear y gestionar fuentes espectrales (OPC/SPC).
 A0055973	Proyectos. Crear y gestionar proyectos.
 A0055974	Usuarios. Crear y gestionar usuarios. Esta función solo está disponible para la versión cGxP de Raman data library.
 A0055975	Ajustes. Gestionar la configuración del sistema. Esta función solo está disponible para la versión cGxP de Raman data library.

Barra de herramientas de cinta

En la parte superior de Raman data library se encuentra una barra de herramientas de cinta. En la barra de herramientas de cinta se puede hacer lo siguiente:

- **Seleccionar un proyecto.** La lista "Proyecto seleccionado" de la barra de menú superior le permite pasar de un proyecto a otro. Para obtener información sobre los proyectos, consulte *Proyectos* → .
- **Cambiar usuario (solo versión cGxP).** Hacer clic en esta herramienta le permite cambiar a otro usuario diferente mientras se ejecuta el programa. Para obtener descripciones sobre cómo cambiar los usuarios y las contraseñas, véase *Gestión de usuarios (solo versión cGxP)*.
- **Cambiar contraseña (solo versión cGxP).** Hacer clic en esta herramienta le permite cambiar la contraseña.
- **Acerca de.** Tras hacer clic en esta herramienta se muestra la versión de software, el número de versión, la ID de instalación y la información de propiedad intelectual.



A0056151

Figura 7. Barra de herramientas de cinta

3.3.2 Tablero de instrumentos de Data library

El tablero de instrumentos es la vista principal para el análisis rutinario. Muestra pestañas que se pueden configurar para visualizar gráficos de los conjuntos de datos guardados. La pestaña del tablero de instrumentos puede contener vistas de más de un conjunto de datos. Para mostrar vistas en el tablero de instrumentos es preciso definir uno o varios conjuntos de datos.

Para usar el tablero de instrumentos, primero debe seguir una configuración inicial que se esboza al principio de este capítulo y que está descrita en *Cómo añadir datos a Raman data library* →  y *Análisis de conjuntos de datos* → . También puede consultar la guía de inicio rápido disponible en el *manual de instrucciones abreviado de Raman data library* (KA01717C).

Cuando se inicia Raman data library, se cargan las pestañas de tablero de instrumentos de la sesión anterior. Si no se ha definido anteriormente ningún tablero de instrumentos, como sucede, p. ej., la primera vez que se usa el software, el tablero de instrumentos está vacío. Las pestañas de tablero de instrumentos guardadas con anterioridad se pueden recargar haciendo clic en **Iniciar tablero de instrumentos** desde la pestaña "Resumen" de la ventana "Analizar conjunto de datos". Las pestañas de tablero de instrumentos se guardan de manera automática al cerrar Raman data library.

Cuando un tablero de instrumentos se configura y se inicia para un conjunto de datos nuevo, ofrece dos vistas predeterminadas: la tabla de espectros y el gráfico de espectros. Las vistas adicionales de un conjunto de datos se definen desde dentro del análisis del conjunto de datos, en la pestaña **Vistas**. Consulte *Creación de vistas de tablero de instrumentos: tablas, tendencias, espectros y gráficos 3D* →  para conocer más detalles sobre cómo definir las vistas.

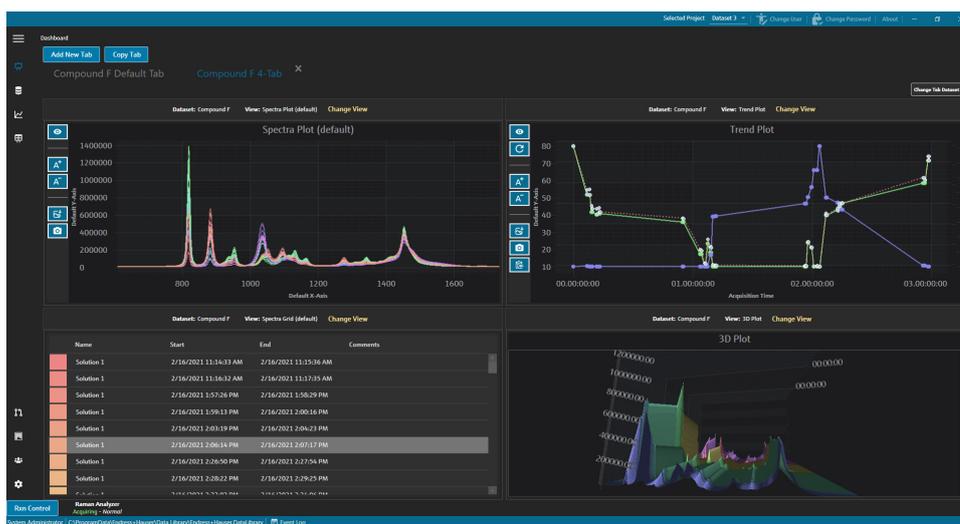


Figura 8. Pestaña de tablero de instrumentos de 4 vistas

Desde el tablero de instrumentos puede hacer lo siguiente:

- **Añadir nueva pestaña.** Añade un tablero de instrumentos nuevo. Cuando se añade una nueva pestaña de tablero de instrumentos, se solicita la selección del número de vistas (de 1 a 4). La pestaña del tablero de instrumentos puede contener vistas de más de un conjunto de datos.
- **Copiar pestaña.** Crea una copia nueva de la pestaña de tablero de instrumentos actual.
- **Cambiar vista.** Cambia la vista del conjunto de datos y permite al usuario seleccionar otro gráfico u otra tabla distintos.
- **Cambiar conjunto de datos de la pestaña.** Selecciona un conjunto de datos y elimina todas las vistas de una pestaña de tablero de instrumentos. Se carga el conjunto de datos seleccionado, de manera que las vistas de gráficos correspondientes al conjunto de datos seleccionado se pueden añadir rápidamente a la pestaña de tablero de instrumentos.
- **X.** Cierra una pestaña de tablero de instrumentos.

Cómo crear un tablero de instrumentos nuevo

Este procedimiento requiere que se hayan añadido fuentes espectrales, que se haya creado un conjunto de datos a partir de dichas fuentes y que se haya puesto en marcha un tablero de instrumentos inicial desde la ventana "Analizar conjunto de datos". Véase *Cómo añadir datos a Raman data library* →  y *Análisis de conjuntos de datos* →  para consultar las instrucciones respectivas.

1. En el tablero de instrumentos, haga clic en **Añadir nueva pestaña**.
En la lista "Añadir nueva pestaña" se muestra una selección del número de vistas en el tablero de instrumentos nuevo.
2. En la lista "**Añadir nueva pestaña**", seleccione el número de vistas mostradas en el tablero de instrumentos nuevo (de 1 a 4).

Cuando se crea un tablero de instrumentos nuevo, no se muestran vistas de gráficos ni de tablas.

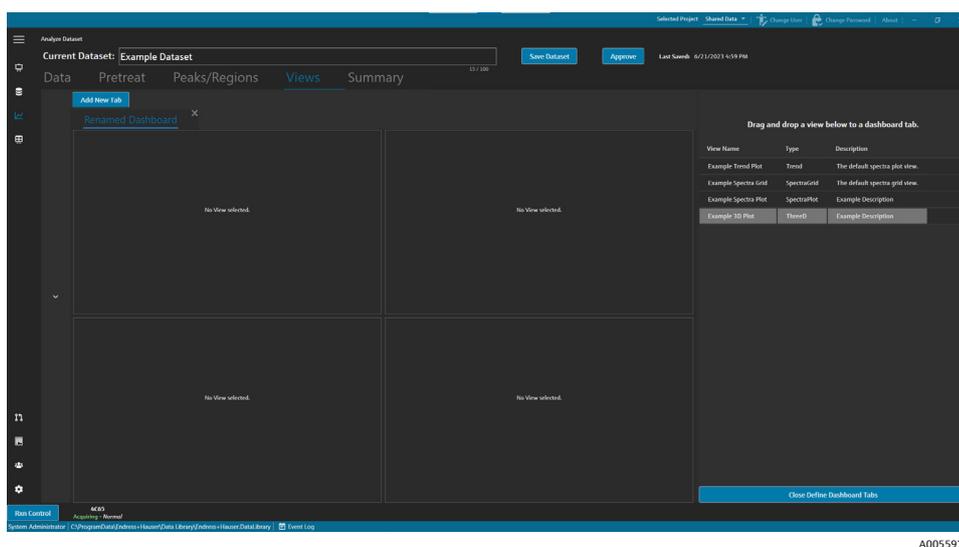


Figura 9. Pestaña de tablero de instrumentos vacía

Para crear una vista en la que se muestren otras vistas además del gráfico de espectros y la tabla de espectros predeterminados, es necesario añadir vistas en la ventana "Analizar conjunto de datos".

3. Defina las vistas siguiendo las instrucciones recogidas en *Creación de vistas de tablero de instrumentos: tablas, tendencias, espectros y gráficos 3D* → . Regrese al tablero de instrumentos.
4. En la nueva pestaña de tablero de instrumentos, haga clic en **Cambiar vista**.
Se muestra el cuadro de diálogo "Cambiar vista".
5. Seleccione el origen del conjunto de datos y a continuación seleccione la vista. Haga clic en **Cambiar vista**.

La nueva vista se muestra en el tablero de instrumentos. Para cambiar el nombre de un tablero de instrumentos, haga doble clic en el nombre de la pestaña del tablero de instrumentos.

Para guardar un tablero de instrumentos, debe definirlo y guardarlo en la pestaña "Vistas". Consulte *Creación de vistas de tablero de instrumentos: tablas, tendencias, espectros y gráficos 3D* →  para obtener más información.

4 Cómo añadir datos a Raman data library

Este capítulo proporciona instrucciones sobre cómo crear flujos de datos y fuentes espectrales y sobre cómo importar ficheros SPC a los conjuntos de datos. Se pueden añadir datos a Raman data library tanto de manera automática como manual. El suministro automático de datos se configura a través de la ventana "Fuentes espectrales". Las importaciones manuales de ficheros SPC se llevan a cabo por medio de la ventana "Conjuntos de datos".

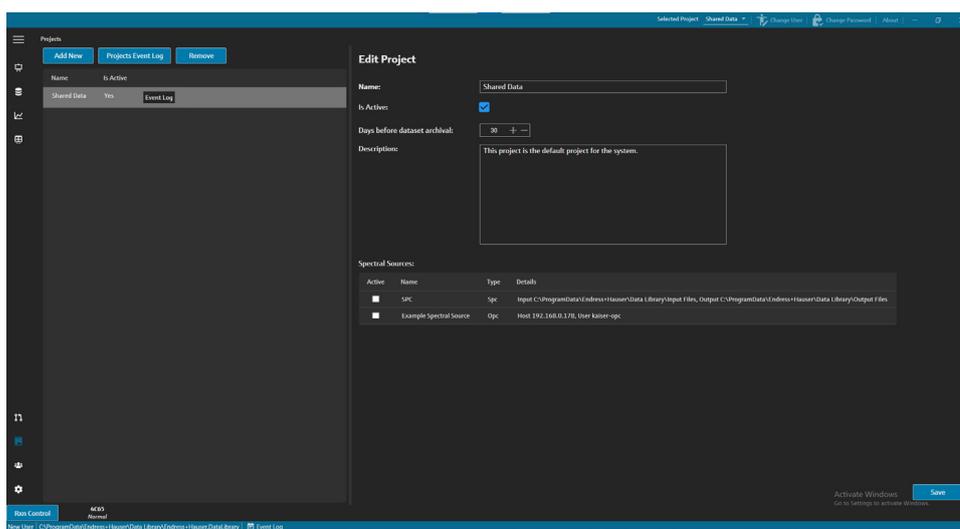
Los espectros de Raman se pueden aportar a Raman data library de 3 maneras distintas:

- Importación manual de carpetas que contengan ficheros SPC
- Importación automática de ficheros SPC desde una carpeta supervisada
- Importación automática desde una conexión OPC a Raman RunTime

4.1 Proyectos

Los proyectos contienen datos y los organizan. Para importar datos a Raman data library, primero se debe crear un contenedor de proyecto para los datos. En la ventana "Proyectos" se puede hacer lo siguiente:

- **Añadir nuevo.** Añade un proyecto nuevo.
- **Registro de eventos de proyectos.** (Solo versión cGxP) Muestra un registro de eventos para todos los proyectos.
- **Registro de eventos.** (Solo versión cGxP) Muestra el registro de eventos para un proyecto específico.
- **Eliminar.** Elimina el proyecto seleccionado. En la versión cGxP de Raman data library, para eliminar un proyecto se necesita el rol "Eliminador de datos".
- **Guardar.** Guarda un proyecto seleccionado.



A0055978

Figura 10. Ventana "Proyectos"

4.1.1 Añadir un nuevo proyecto

Cómo añadir un proyecto

1. En la ventana "Proyectos" , haga clic en **Añadir nuevo**. Se muestra el panel "Editar proyecto".
2. Introduzca la información siguiente:
 - **Nombre.** Nombre del proyecto.
 - **Está activo.** Indica si el proyecto está activo o no. Si la casilla "Está activo" está deseleccionada, el proyecto no aparece en la lista "Proyecto seleccionado" de la barra de menú.
 - **Días antes de archivar el conjunto de datos.** Número de días antes de archivar automáticamente los conjuntos de datos y que queden ocultos en la ventana "Conjuntos de datos". Los conjuntos de datos archivados se pueden visualizar en la ventana "Conjuntos de datos"; para ello basta con activar la casilla "Mostrar conjuntos de datos archivados".

- **Descripción.** Descripción del proyecto.
- **Fuentes espectrales.** Determina las fuentes espectrales que están activas para el proyecto seleccionado. Los espectros, los campos de datos y los conjuntos de datos que se crean en un proyecto no se pueden visualizar en otro proyecto. No obstante, en el caso de los proyectos con datos compartidos, los datos guardados en un proyecto se pueden compartir con otros proyectos. Esta posibilidad resulta útil para guardar espectros de referencia o campos de datos comunes de modo que se puedan incluir fácilmente en múltiples proyectos. Para crear un proyecto de datos compartidos, seleccione en la lista todas las fuentes de datos que sean aplicables al proyecto.

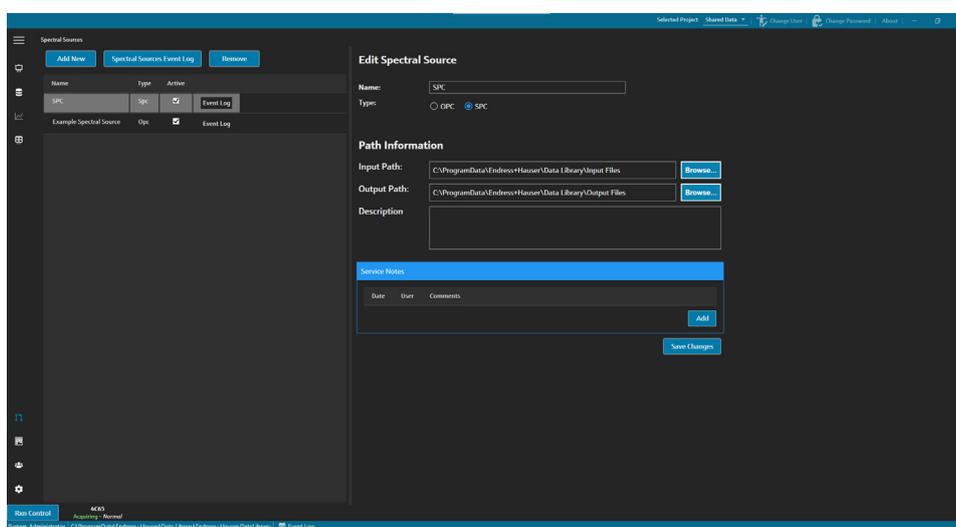
3. Haga clic en **Guardar**.

4.2 Fuentes espectrales

Las fuentes espectrales son las fuentes de las que proceden los datos de los espectros. Una fuente espectral puede ser una carpeta de entrada supervisada que contenga ficheros espectroscópicos (.spc) o espectros transferidos en tiempo real a través de una conexión OPC a un analizador Raman Rxn. En la versión cGxP de Raman data library, para añadir fuentes espectrales o efectuar cambios en estas se necesita el rol "Gestor de fuentes espectrales".

En la ventana "Fuentes espectrales" puede seleccionar los elementos siguientes:

- **Añadir nuevo.** Crea una fuente espectral nueva.
- **Registro de eventos de fuentes espectrales.** Muestra el registro de eventos para todas las fuentes espectrales.
- **Registro de eventos.** Muestra el registro de eventos para una fuente espectral específica.
- **Eliminar.** Elimina la fuente espectral seleccionada. En la versión cGxP de Raman data library, para eliminar una fuente espectral se necesita el rol "Eliminador de datos".
- **Nombre.** Nombre de visualización de la fuente espectral.
- **Tipo.** Tipo de fuente espectral, que puede ser OPC o SPC.



A0055979

Figura 11. Ventana de fuentes espectrales

4.2.1 Cómo añadir una fuente espectral OPC

Se puede crear una fuente espectral para permitir que Raman data library establezca una conexión de cliente OPC de automatización unificada (UA) con un servidor Raman RunTime OPC. La conexión OPC permite que los usuarios visualicen, controlen y capturen espectros de los sistemas analizadores Raman Rxn de Endress+Hauser. Se pueden conectar múltiples analizadores Raman (hasta 4) a Raman data library.

Para establecer una conexión OPC entre Raman data library y Raman RunTime se necesita como mínimo Raman RunTime v6.4. Los analizadores Raman Rxn en los que se ejecutan versiones de Raman RunTime anteriores a la v6.4 pueden usar una fuente espectral SPC de la manera descrita en [Cómo añadir una fuente espectral SPC](#) → .

Cuando se use una fuente espectral OPC es preciso deshabilitar la característica de suspensión del equipo en los ajustes de Windows.

Cómo añadir una fuente espectral OPC

1. En la ventana de fuentes espectrales, haga clic en **Añadir nueva**. Aparece el panel "Editar fuente espectral".

Figura 12. Editar fuente espectral OPC

2. Introduzca un nombre para la fuente espectral.
3. Seleccione **OPC**.
4. Introduzca la información siguiente relativa a los ajustes de la conexión:
 - **Nombre de host.** Nombre de host del servidor OPC de Raman RunTime.
 - **Nombre de usuario.** Nombre de usuario utilizado para crear la conexión OPC al servidor OPC de Raman RunTime. El nombre de usuario predeterminado es **kaiser-opc**.
 - **Contraseña.** Contraseña utilizada para crear la conexión OPC al servidor OPC de Raman RunTime. La contraseña predeterminada es **opc**.
 - **Descripción.** Descripción opcional de la fuente espectral OPC.
 - **Estado.** Estado de la fuente espectral OPC, que puede ser "Activo" o "Inactivo".
 - **Notas de servicio.** Comentarios del personal de servicio o de los usuarios sobre la fuente espectral OPC. Haga clic en **Añadir** para añadir una nota de servicio nueva.
5. Haga clic en **Probar conexión** para comprobar la conexión al servidor OPC de Raman RunTime. Para asegurar una conexión satisfactoria:
 - Haga una conexión de prueba antes de guardar una fuente espectral OPC.
 - Si la conexión de prueba no resulta satisfactoria, asegúrese de que el analizador Raman esté encendido, disponible y conectado a la red y de que los puertos de red definidos en el apartado *Configuración de red de Raman Rxn2 y Raman Rxn4* del *manual de instrucciones de Raman RunTime (BA02180C)* estén configurados de la manera requerida.
 - Una conexión insatisfactoria se puede deber simplemente a una configuración incorrecta de la resolución del nombre del host en su red IT/OT local. Póngase en contacto con su administrador local de IT.
 - Como alternativa a las credenciales OPC predeterminadas, también puede utilizar las credenciales de una de las cuentas de usuario configuradas en el analizador Raman RunTime para autenticar la conexión OPC del analizador.
6. Haga clic en **Guardar cambios**.

Si la conexión es satisfactoria, se muestra un mensaje y aparece la barra de herramientas "Control Rxn" en la cinta inferior, donde se muestra el nombre asignado a la fuente espectral y su estado.

4.2.2 Cómo añadir una fuente espectral SPC

La función de fuente espectral SPC importa automáticamente espectros de los analizadores Raman Rxn que ejecutan versiones de Raman RunTime anteriores a la v6.4. Esto también hace posible el uso de Raman data library con soluciones antiguas de software Raman de Endress+Hauser. Añadir una fuente espectral SPC permite que Raman data library lea y guarde automáticamente ficheros .spc en su base de datos y los ponga a disposición de los conjuntos de datos.

La fuente espectral SPC requiere una ruta de entrada, en la que Raman data library detecta los ficheros nuevos y los importa, y una ruta de salida, a la que Raman data library mueve los ficheros SPC después de importarlos.

Consulte *Exportación de red de ficheros SPC* en el *Manual de instrucciones de Raman RunTime* (BA02180C) para obtener instrucciones sobre la exportación de ficheros .spc desde Raman RunTime.

Cómo añadir una fuente espectral SPC

1. Cree una o varias carpetas .spc en el ordenador de Raman data library:
 - Para las versiones de Raman RunTime anteriores a la v6.4, cree una carpeta llamada **Espectros de salida**.
 - Para las soluciones de software antiguas, cree dos carpetas. Llame a una **Espectros de entrada** y a la otra **Espectros de salida**. Los ficheros SPC de las soluciones antiguas de software Raman se deben dirigir a la carpeta **Espectros de entrada**.
2. Haga clic en **Fuentes espectrales** . A continuación, haga clic en **Añadir nueva**. Aparece el panel "Editar fuente espectral".

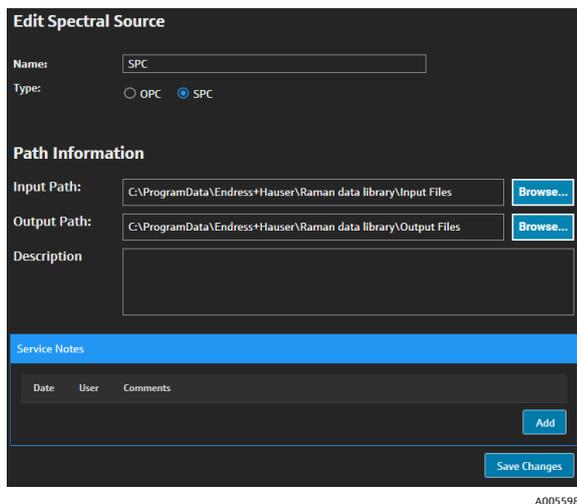


Figura 13. Editar fuente espectral SPC

3. Introduzca un nombre para la fuente espectral.
4. Seleccione SPC.
5. En **Ruta de entrada**:
 - En las versiones de Raman RunTime anteriores a la v6.4, vaya a la carpeta de red compartida DataLibraryBatchExport situada en la ruta *\\nombre del ordenador o dirección IP\DataLibraryBatchExport*.
 - Para las soluciones de software antiguas, dirija la **Ruta de entrada** hacia el directorio de salida del software antiguo.
6. En **Ruta de salida**, navegue a la carpeta de espectros de salida creada en el Step 1. Esta es la ruta del directorio que se utiliza para enviar los ficheros .spc después de registrarlos en el sistema.
7. (Opcional) Introduzca la información siguiente:
 - **Descripción**. Descripción de la fuente espectral SPC.
 - **Notas de servicio**. Comentarios de los usuarios sobre la fuente espectral SPC. Haga clic en el botón **Añadir** para añadir una nota de servicio nueva.

8. Haga clic en **Guardar cambios** y responda al mensaje que aparece con "Aceptar".

En las versiones de Raman RunTime anteriores a la v6.4, la carpeta de red compartida DataLibraryBatchExport contiene subcarpetas y ficheros .spc adquiridos en el analizador Raman. Una vez que los ficheros .spc se han leído y añadido a Raman data library, son movidos desde este directorio de red a la carpeta "Espectros de salida" creada en los pasos anteriores. Todos los ficheros .spc se mantienen en el analizador Raman. Los ficheros solo se quitan de la carpeta DataLibraryBatchExport.

4.3 Conjuntos de datos

La ventana "Conjuntos de datos" se usa para crear, visualizar, importar, exportar y eliminar conjuntos de datos. Para los conjuntos de datos existentes se puede visualizar la información resumida del conjunto de datos.

En Raman data library, cada conjunto de datos contiene como mínimo un espectro. Los conjuntos de datos se pueden combinar para su análisis o modelado en el seno del software o bien para exportarse a programas externos. Para analizar espectros usando un conjunto de datos, seleccione al menos 1 espectro.

En la ventana "Conjuntos de datos" puede seleccionar los elementos siguientes:

- **Crear nuevo conjunto de datos.** Muestra el panel **Crear conjunto de datos**. En la versión cGxP de Raman data library, para crear conjuntos de datos nuevos se debe usar el rol "Operador de datos".
- **Analizar.** Abre el conjunto de datos seleccionado y muestra el conjunto de datos en la ventana "Analizar".
- **Importar biblioteca de datos.** Importa un fichero existente de conjuntos de datos (.dlexport).
- **Exportar.** Muestra el panel "Exportar".
- **Eliminar.** Elimina el conjunto de datos seleccionado. Para eliminar un conjunto de datos se debe iniciar sesión con el rol "Eliminador de datos".
- **Mostrar conjuntos de datos inactivos.** Muestra conjuntos de datos que se han marcado como "Inactivos".
- **Mostrar conjuntos de datos archivados.** Muestra conjuntos de datos que se han marcado como "Archivados". Los conjuntos de datos se marcan automáticamente como "Archivados" tras un número configurable de días. El valor de "Días antes de archivar el conjunto de datos" se puede modificar en la ventana "Proyectos".

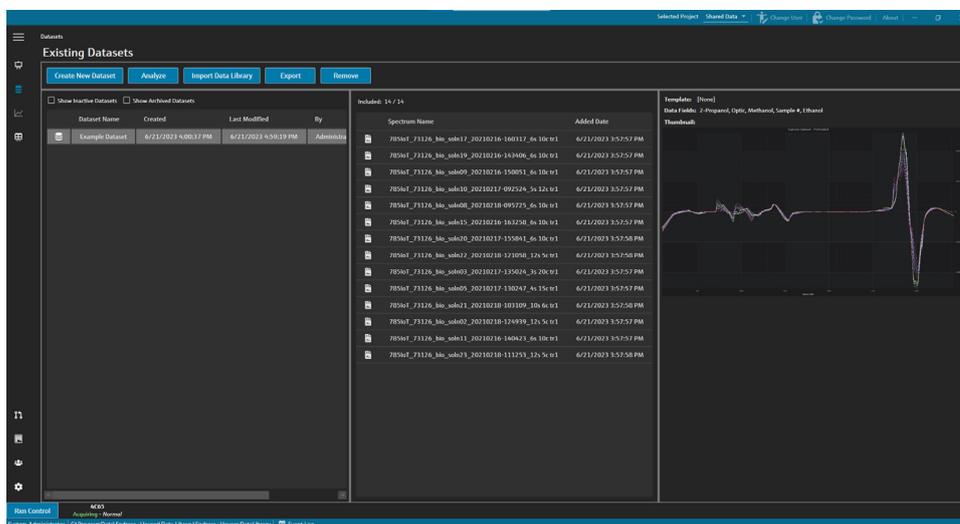


Figura 14. Conjuntos de datos existentes

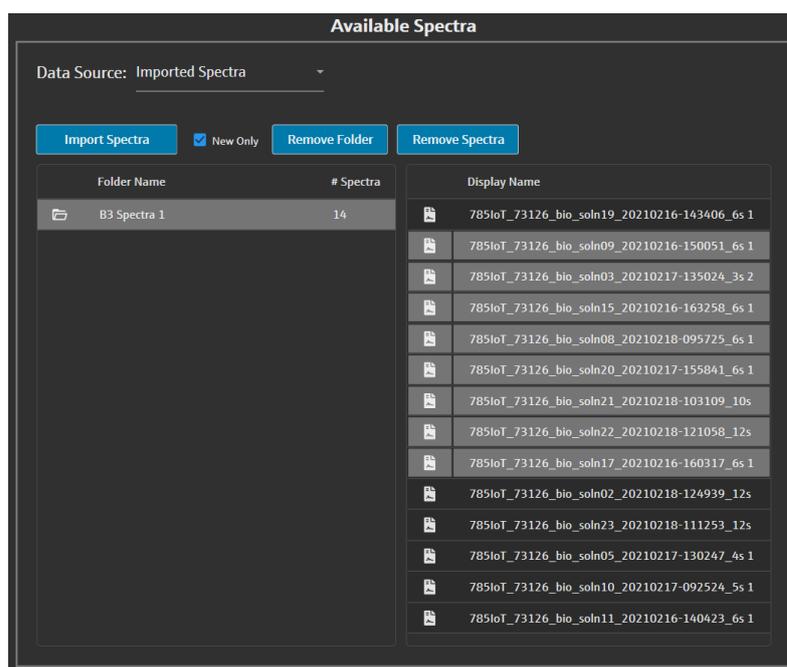
4.3.1 Creación de un conjunto de datos

Para seleccionar los espectros que desee incluir en un conjunto de datos puede elegir datos de varias fuentes. Los datos pueden proceder de:

- **Espectros importados.** Esta selección muestra todas las carpetas y espectros disponibles que han sido importados en Raman data library.
- **Espectros de referencia.** Esta selección muestra todos los espectros que están marcados como un espectro de referencia.

- **Buscar.** Esta selección permite a los usuarios buscar espectros que satisfagan ciertos criterios definidos. Los criterios de búsqueda se pueden añadir o eliminar de manera individual. La búsqueda de espectros se puede basar en un campo de nombre, la fecha inicial, la fecha final o cualquier valor concreto de un campo de datos definido como apto para búsquedas.
- **Conjuntos de datos existentes.** Esta selección permite a los usuarios buscar espectros que se encuentren en otro conjunto de datos. Se muestra una vista resumen del conjunto de datos seleccionado. Si se hace clic en **Incluir** ►, todos los espectros del conjunto de datos seleccionado quedan incluidos.
- **Carpetas.** Esta selección muestra una lista de los espectros capturados a través de una conexión OPC a Raman RunTime que se encuentren guardados en carpetas situadas en el ordenador de Raman data library.

Una vez seleccionados los espectros disponibles, use **Incluir** ► para incluir los espectros seleccionados en el conjunto de datos nuevo. Para eliminar espectros de un conjunto de datos nuevo, seleccione los espectros incluidos y haga clic en **Eliminar**.



A0055983

Figura 15. Fuente de datos, panel de espectros importados

Cómo crear un conjunto de datos

1. En el menú principal, haga clic en **Conjuntos de datos** .
2. Haga clic en **Crear nuevo conjunto de datos**.
Se muestra la ventana "Crear conjunto de datos".

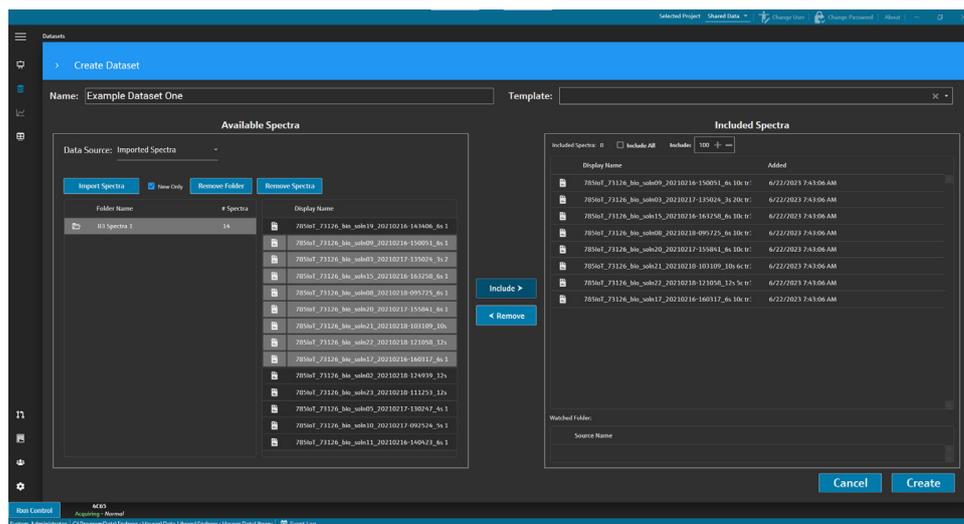


Figura 16. Ventana "Crear conjunto de datos"

3. Introduzca la información siguiente en la ventana "Crear conjunto de datos":
 - **Nombre.** Nombre del conjunto de datos nuevo. Los nombres de los conjuntos de datos deben ser únicos y de una longitud de entre 1 y 100 caracteres.
 - **Plantilla.** Plantilla que se debe usar cuando se crea el conjunto de datos. Las plantillas se pueden emplear para aplicar de manera automática en un conjunto de datos nuevo los campos de datos, tratamientos previos, picos, regiones, vistas y pestañas de tablero de instrumentos que se hayan preseleccionado.
4. En la lista "Fuente de datos", seleccione:
 - **Importar espectros** para seleccionar una carpeta que contenga ficheros de espectros (.spc).
 - **Espectros de referencia** para seleccionar los espectros que estén marcados como espectro de referencia.
 - **Buscar** para buscar espectros que cumplan los criterios definidos. La búsqueda de espectros se puede basar en un campo de nombre, la fecha inicial, la fecha final u otros valores de datos.
 - **Conjuntos de datos existentes** para buscar espectros que se encuentran en otro conjunto de datos. Si se hace clic en **Incluir >**, todos los espectros del conjunto de datos seleccionado quedan incluidos.
 - **Carpetas** para seleccionar espectros capturados a través de una conexión OPC a Raman RunTime que se encuentren guardados en carpetas situadas en el ordenador de Raman data library. Los nombres de los ficheros de los espectros no se muestran en el navegador de carpetas.
5. En la ventana **Espectros disponibles**, seleccione los espectros que desee **incluir** en la ventana "Espectros incluidos", o bien haga clic en **Incluir todos** para importar todos los espectros a la carpeta.

Los espectros incluidos en el nuevo conjunto de datos se muestran en **Espectros incluidos**.
6. En la ventana **Espectros incluidos**, seleccione espectros para **eliminar**.
 - Seleccione **Incluir todos** para incluir todos los espectros de la selección en el Step 5, o bien incluya solo un subconjunto de la selección de manera que el software elija únicamente uno de cada dos o de cada tres espectros.
 - Haga clic en **Eliminar carpeta** para eliminar la carpeta seleccionada y todos los espectros contenidos en ella. En la versión cGxP de Raman data library, para eliminar una carpeta se necesita el rol "Eliminador de datos".
 - Haga clic en **Eliminar espectros** para eliminar los espectros seleccionados del conjunto de datos. En la versión cGxP de Raman data library, para eliminar espectros se necesita el rol "Eliminador de datos".
7. Haga clic en **Crear**.

El flujo de datos de Raman data library crea el nuevo conjunto de datos y lo mueve a lo largo del flujo de trabajo hasta la ventana "Analizar".
8. Haga clic en **Guardar conjunto de datos**.

4.3.2 Guardar un conjunto de datos

Los conjuntos de datos no se guardan automáticamente en Raman data library, a no ser que la captura de un conjunto de datos se inicie desde dentro de Raman data library. Es importante habituarse a guardar los conjuntos de datos con regularidad.

Los conjuntos de datos se pueden guardar a través de la ventana "Analizar conjunto de datos". Si se cierra Raman data library antes de guardar el conjunto de datos, todos los cambios se pierden.

Cómo guardar un conjunto de datos

1. En el menú principal, haga clic en **Analizar conjuntos de datos** .
2. Haga clic en **Guardar conjunto de datos**.

La primera vez que se guarda un conjunto de datos, esta operación puede durar varios minutos. Los siguientes guardados son más rápidos. Tras guardar un conjunto de datos, el campo **Última vez que se guardó** se actualiza para mostrar la fecha y hora en la que se guardó por última vez.

4.3.3 Aprobación de un conjunto de datos

Los conjuntos de datos aprobados son de *solo lectura* y no se pueden modificar. La ventana "Analizar conjunto de datos" le permite aprobar un conjunto de datos o revocar la aprobación del mismo.

Cómo aprobar un conjunto de datos o revocar su aprobación

- En la ventana "Analizar conjunto de datos", haga clic en **Aprobar** para marcar el conjunto de datos como "Aprobado".
- Haga clic en **Anular aprobación** para revocar la aprobación del conjunto de datos.

4.4 Campos de datos

Los campos de datos contienen información cualitativa y cuantitativa que permite etiquetar un espectro. En el caso de los análisis cuantitativos, el usuario puede especificar la precisión, las unidades, detalles del método primario y demás información relativa al espectro.

Raman data library captura la información predefinida de los campos de datos en el registro SPC o en las fuentes de datos OPC. Las unidades y los valores de los datos que se muestran en la lista de los campos de datos pueden variar según cómo se recuperen los espectros. Si los datos se importan de Raman RunTime v6.4+ a través de OPC, la mayor parte de los campos de datos predeterminados se rellenan de manera automática. Se pueden añadir alias a los campos de datos con el fin de reducir los errores de usuario durante las importaciones.

En la ventana "Campos de datos" puede añadir, actualizar y eliminar campos de datos. En la versión cGxP de Raman data library, para hacer modificaciones en los campos de datos se debe iniciar sesión con el rol "Gestor de campos de datos".

En la ventana "Campos de datos" puede seleccionar los elementos siguientes:

- **Añadir.** Crea un nuevo campo de datos.
- **Eliminar.** Elimina el campo de datos seleccionado. En la versión cGxP de Raman data library, para eliminar un campo de datos se necesita el rol "Eliminador de datos".
- **Registro de eventos de campos de datos.** (Solo versión cGxP) Muestra el registro de eventos para todos los campos de datos.
- **Registro de eventos.** (Solo versión cGxP) Muestra el registro de eventos para un campo de datos específico.
- **Guardar.** Guarda el campo de datos seleccionado.

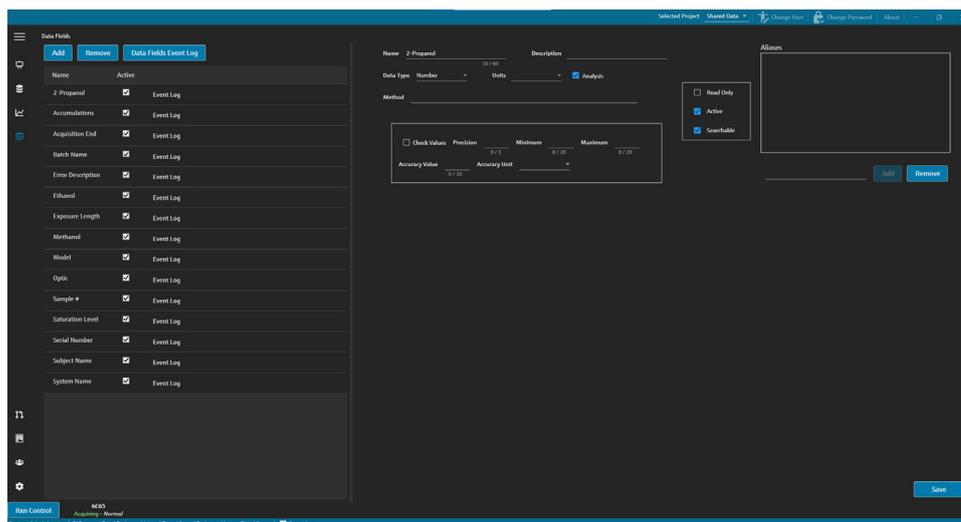


Figura 17. Ventana "Campos de datos"

A0055985

Propiedades del campo de datos

Propiedad	Significado
Nombre	Nombre del campo de datos.
Descripción	Descripción del campo de datos.
Alias	A fin de reducir los errores de usuario, se pueden añadir alias para las variaciones más comunes de escritura y etiquetado. Por ejemplo, se puede definir que <i>Concentración</i> , <i>concentración</i> y <i>Conc.</i> sean equivalentes al nombre de un mismo campo de datos. Añadir alias evita los errores de captura más habituales en la importación de datos y automatiza el etiquetado a lo largo del flujo de trabajo. Los alias se usan durante la importación de datos para concordar con un encabezado de columna en Excel. Aquí es donde se puede añadir un alias o eliminarlo.
Tipo de datos	Tipo de valores de los datos que se pueden introducir en el campo de datos: <ul style="list-style-type: none"> ▪ Booleano ▪ Número ▪ Fecha ▪ Texto
Unidades	Unidades usadas para el tipo de datos.
Análisis	Los campos de datos que tienen la marca "Análisis" se pueden usar en operaciones de análisis.
Método	Campo descriptivo para indicar el método de adquisición.
Solo lectura	Los campos de datos que tienen la marca "Solo lectura" no permiten la modificación de los valores de sus datos.
Activo	Los campos de datos que tienen la marca "Activo" aparecen en la ventana "Análisis".
Apto para búsquedas	Si un campo de datos tiene la marca "Apto para búsquedas", significa que se pueden hacer búsquedas en el mismo.

Propiedad	Significado
Comprobación de valores	Los campos de datos que tienen la marca "Comprobación de valores" descartan automáticamente los valores de datos que no cumplen los requisitos indicados en los campos "Precisión", "Mínimo", "Máximo" y "Valor de precisión".
Precisión	Este valor designa el número requerido de dígitos a continuación del separador decimal.
Mínimo	Límite inferior para los valores.
Máximo	Límite superior para los valores.
Valor de precisión	Campo descriptivo que indica el valor de precisión.
Unidad de precisión	Campo descriptivo que indica la unidad de precisión.

Cómo añadir un campo de datos

1. En la ventana "Campos de datos", haga clic en **Añadir**.
2. Introduzca las propiedades del campo de datos. Consulte la tabla anterior de propiedades de los campos de datos.
3. Haga clic en **Guardar**.

Navegación por el gráfico de espectros

Elemento de navegación	Navegación
—	Para ampliar una zona específica del gráfico de espectros, haga clic y dibuje el recuadro de interés. Para recuperar el nivel anterior de ampliación, haga doble clic en el gráfico.
 A0055988	Ampliar hasta límites. Amplía hasta mostrar los datos en toda su extensión. Este botón se muestra en casi todos los gráficos.
 A0055989	Mostrar/ocultar leyenda. Muestra la leyenda o la oculta. Este botón se muestra en casi todos los gráficos.
 A0055990	Estilo del espectro. Cambia el color del espectro seleccionado.

Cambio de nombre de un espectro de referencia

Se puede cambiar el nombre de un espectro específico, p. ej., si se sabe que el primer espectro capturado corresponde al 100 % a un analito determinado.

1. En el panel de la tabla de espectros, seleccione los espectros.
2. Haga clic con el botón derecho y, seguidamente, seleccione **Marcar como referencia** o haga clic en el botón **Marcar como referencia**.
Se muestra el cuadro de diálogo necesario "Renombrar espectro".
3. Escriba un nombre relevante para los espectros de referencia y haga clic en "Aceptar".
4. Active la leyenda del gráfico de espectros para confirmar si se ha cambiado el nombre del espectro de referencia.
5. Haga clic en **Guardar conjunto de datos**.

Para devolverle a un espectro su nombre original, haga clic en **Seleccionar campos**, seleccione **Nombre** y a continuación **Cerrar**. El nombre original del espectro aparece en la lista. Los nombres de visualización se pueden editar, pero el nombre original procedente del software de captura no es editable.

Cambio del color de visualización de un espectro

Se puede modificar el color de un espectro específico, p. ej., si desea que el espectro de referencia contraste visualmente con otros espectros.

1. En el panel de la tabla de espectros, seleccione el espectro.
2. Haga clic en **Estilo del espectro**  y seguidamente seleccione el color deseado.
El espectro se muestra ahora con el color correspondiente a dicho estilo.
3. Haga clic en **Guardar conjunto de datos**.

5.1.2 Selección de campos de datos

A la derecha del panel del gráfico de espectros se encuentra una lista de campos de datos. Los campos de datos específicos se pueden mostrar u ocultar en la visualización; para ello basta con seleccionar o deseleccionar la casilla de la columna **Mostrado**. Si un campo de datos tiene la marca "Mostrado", significa que se puede usar en los análisis y que se incluye en la exportación de datos. Los campos de datos mostrados son un componente de una plantilla. Véase *Creación de plantillas* →  para obtener más información.

Para seleccionar campos de datos en la lista "Campos de datos", active la casilla **Mostrado** contigua al campo que desee visualizar. Los campos seleccionados se muestran ahora en la tabla de espectros. La primera selección en la lista de campos de datos puede presentar un retardo antes de mostrarse. Los campos de datos subsiguientes se muestran con más rapidez.

La lista de campos de datos se puede editar. Véase *Campos de datos* →  para obtener más información.

Cómo seleccionar campos de datos en la tabla de espectros

1. Haga clic en **Seleccionar campos** en la tabla de espectros.

Se muestra la ventana de selección de campos.

2. Seleccione los campos deseados. Entre los campos predeterminados de Raman RunTime se incluyen los siguientes:

- Nombre
- Nombre de visualización
- Fecha y hora inicial
- Fecha y hora final
- Fecha y hora del punto medio
- Error

3. Haga clic en **Cerrar**.

Los campos seleccionados se muestran ahora en la tabla de espectros.

5.1.3 Gráfico de tendencias de los campos de datos

A la derecha de la lista de campos de datos se muestra un gráfico de tendencias de los datos. El gráfico de tendencias de los campos de datos muestra valores de los datos del espectro a lo largo del tiempo.



Figura 19. Gráfico de tendencias de los campos de datos

En el panel de tendencias de campos de datos puede hacer lo siguiente:

Elemento de navegación	Navegación
 A0055988	Ampliar hasta límites. Amplía hasta mostrar los datos en toda su extensión. Este botón se muestra en casi todos los gráficos.
 A0055989	Mostrar/ocultar leyenda. Muestra la leyenda o la oculta. Este botón se muestra en casi todos los gráficos.
 A0055992	Copiar datos del gráfico en el portapapeles. Copia los datos del gráfico de tendencia actual en el portapapeles.
 A0055993	Excluir puntos. Excluye los valores de los datos seleccionados.

5.1.4 Diagrama de caja

La pestaña "Diagrama de caja" muestra un diagrama de caja para el campo de datos seleccionado. Se muestran el máximo, el cuartil superior, la mediana, el cuartil inferior, el mínimo y la desviación estándar del campo de datos. El diagrama de caja puede resultar de utilidad para analizar muestras de datos no secuenciales.

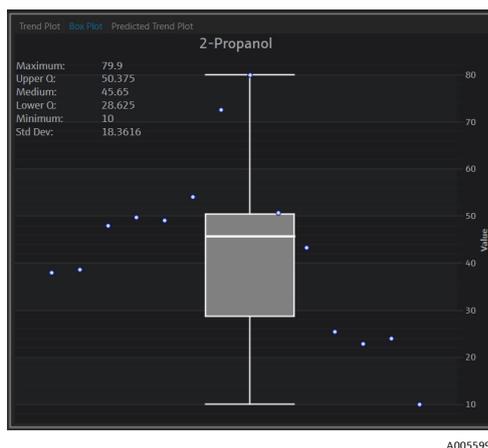


Figura 20. Diagrama de caja

5.1.5 Gráfico de tendencias previstas de los campos de datos

La pestaña "Gráfico de tendencias previstas" muestra los valores previstos para los datos del espectro a lo largo del tiempo.

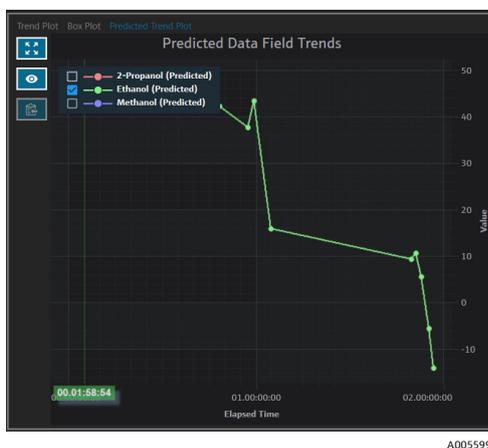


Figura 21. Gráfico de tendencias previstas de los campos de datos

5.1.6 Tabla de espectros

En la parte inferior de la pestaña "Datos", la tabla de espectros muestra los espectros y los valores de los datos asociados para los campos mostrados.

All Spectra		Selected Spectra			Selected Data Values			Other Actions												
<input type="checkbox"/>	Select Fields	<input type="checkbox"/>	Exclude Unmatched	Included: 8 / 8	<input type="checkbox"/>	Exclude	<input type="checkbox"/>	Include	<input type="checkbox"/>	Remove	<input type="checkbox"/>	Mark as Reference	<input type="checkbox"/>	Exclude	<input type="checkbox"/>	Include	<input type="checkbox"/>	Import Data	<input type="checkbox"/>	Add Comment
Include	Display	Mid	Sample #	Optic	Ethanol	Methanol	2-Propanol	Comments												
<input checked="" type="checkbox"/>	785lot_73126_bio_solm09_20210216-150051_0s_10c.tr1	2/16/2021 3:00:19 PM	9	BIO-Optic	41.8	10.1	48													
<input checked="" type="checkbox"/>	785lot_73126_bio_solm17_20210216-160317_0s_10c.tr1	2/16/2021 4:02:45 PM	17	BIO-Optic	40.2	10	49.7													
<input checked="" type="checkbox"/>	785lot_73126_bio_solm15_20210216-163258_0s_10c.tr1	2/16/2021 4:32:26 PM	15	BIO-Optic	40.9	10	49													
<input checked="" type="checkbox"/>	785lot_73126_bio_solm03_20210217-135024_3s_20c.tr1	2/17/2021 1:49:51 PM	3	BIO-Optic	10	10	79.9													
<input checked="" type="checkbox"/>	785lot_73126_bio_solm20_20210217-1558A1_0s_10c.tr1	2/17/2021 3:58:09 PM	20	BIO-Optic	10	39.4	50.6													
<input checked="" type="checkbox"/>	785lot_73126_bio_solm08_20210218-095725_0s_10c.tr1	2/18/2021 9:56:53 AM	8	BIO-Optic	10	46.7	43.3													
<input checked="" type="checkbox"/>	785lot_73126_bio_solm21_20210218-103109_10s_0c.tr1	2/18/2021 10:30:37 AM	21	BIO-Optic	24.1	50.4	25.5													
<input checked="" type="checkbox"/>	785lot_73126_bio_solm22_20210218-121058_12s_5c.tr1	2/18/2021 12:10:26 PM	22	BIO-Optic	10	66	24													

A0055996

Figura 22. Tabla de espectros

En el panel de la tabla de espectros, puede seleccionar los espectros y los campos que se deben incluir. A continuación se explica la funcionalidad de la tabla de espectros.

Elemento de la tabla de espectros	Función del indicador
Todos los espectros	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Seleccionar campos. Selecciona los campos que se muestran en la tabla: nombre, nombre de visualización, fecha y hora inicial, fecha y hora final, fecha y hora del punto medio y error. En el caso de las adquisiciones prolongadas, puede resultar útil visualizar tanto el punto inicial como el punto medio. ▪ Excluir si no hay coincidencia. Excluye todos los espectros que no tengan al menos un valor de dato para los campos de datos seleccionados. ▪ Excluir/incluir. Excluir o incluir todos los espectros.
Espectros seleccionados	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Excluir. Excluye los espectros seleccionados en la tabla de espectros. ▪ Incluir. Incluye los espectros seleccionados en la tabla de espectros. ▪ Eliminar. Elimina los espectros seleccionados en la tabla de espectros. ▪ Marcar como referencia. Marca como espectro de referencia el primer espectro seleccionado en la tabla de espectros. Se solicita al usuario que introduzca un nombre de visualización nuevo para el espectro.
Valores de datos seleccionados	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Excluir. Excluye los valores de los datos seleccionados. ▪ Incluir. Incluye los valores de los datos seleccionados.
Otras acciones	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Importar datos. Selecciona un fichero Excel para la importación de datos. Abre la ventana "Importar datos". ▪ Añadir comentario. Añade un comentario al conjunto de datos. Se solicita al usuario que selecciona una fecha inicial y una fecha final. El comentario se añade para todos los espectros en ese rango. Los comentarios del conjunto de datos son específicos únicamente para el conjunto de datos al que se han añadido. Los comentarios del conjunto de datos no se muestran en otros conjuntos de datos.

Cómo excluir datos de la tabla o del gráfico de espectros

Existe la posibilidad de excluir espectros de la tabla y del gráfico si, p. ej., el láser se bloquea durante una parte del experimento o si produce datos que no resultan utilizables.

1. En el gráfico espectral, haga una ampliación de forma que solo se vean los datos no deseados.
2. Sitúe el ratón sobre una línea de espectro del gráfico y haga clic para seleccionarla.
Ahora el espectro aparece destacado en la tabla de espectros.
3. Use la tecla de desplazamiento para destacar todos los espectros situados por encima del seleccionado.
4. Haga clic en **Excluir** en el cuadro "Espectros seleccionados".
5. Haga clic en **Guardar conjunto de datos**.

Si no ha destacado todos los espectros en el primer intento, posiblemente necesitará excluir algunos espectros más. Tras reducir la ampliación en el gráfico de espectros debería verse que todos los espectros no deseados han quedado excluidos.

Cómo importar datos

Puede importar campos de datos y valores de una hoja de cálculo de Excel ya existente.

1. En la tabla de espectros, haga clic en **Importar datos**.
Se muestra la ventana "Seleccione un fichero para importar".
2. Vaya a la hoja de cálculo y haga clic en **Abrir**.
Tras ir a la hoja de cálculo se muestra la ventana de importación de datos.

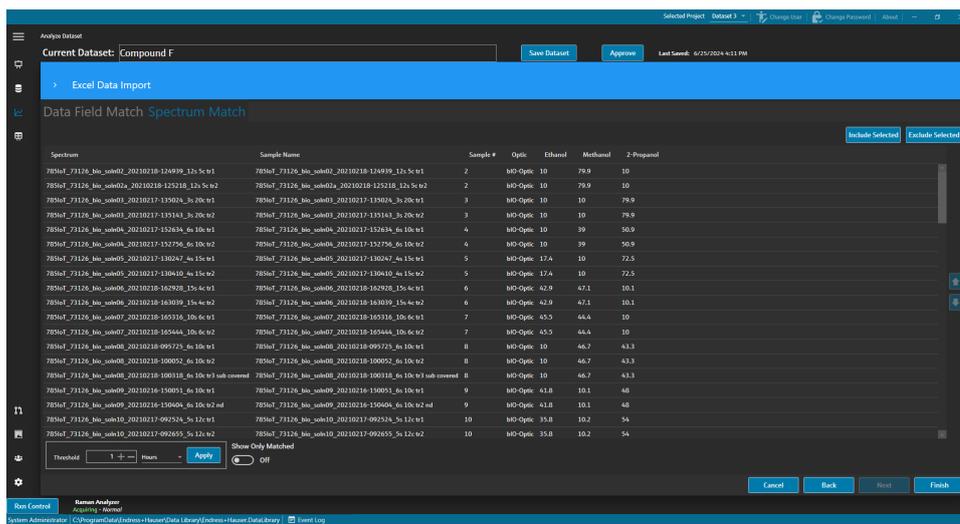


Figura 24. Importación de datos, emparejamiento de espectro

- Haga clic en **Finalizar**. En el cuadro de diálogo de continuación, haga clic en **Aceptar**.
- Haga clic en **Guardar conjunto de datos**.

5.1.7 Comentarios

La tesela de comentarios le permite añadir comentarios a un espectro. Estos comentarios no son específicos del conjunto de datos, sino que son visibles en todos los conjuntos de datos que hacen referencia al espectro.

También se pueden añadir comentarios para un conjunto de datos, o bien para un periodo temporal concreto dentro de un conjunto de datos. Esta operación se lleva a cabo con el botón **Añadir comentario** situado en la tesela "Tabla de espectros". Véase *Modificación de una tabla de espectros* →  para obtener más información.

Cómo añadir un comentario a un espectro

- En la tesela "Comentarios", haga clic en **Añadir**.
Se muestra el cuadro de diálogo "Añadir comentario".
- Escriba un comentario relevante y haga clic en **Aceptar**.

La tesela de comentarios y la tabla de espectros muestran ahora el comentario para el espectro seleccionado.

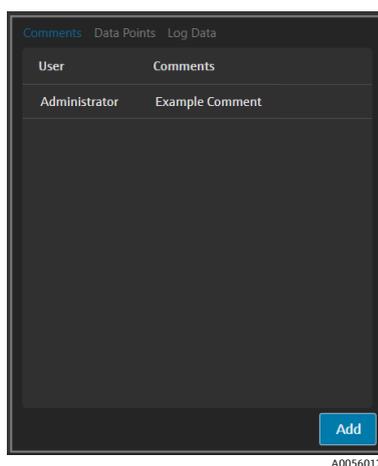


Figura 25. Comentarios del espectro

5.1.8 Puntos de datos

La pestaña "Puntos de datos" muestra una lista de puntos X e Y del espectro seleccionado.

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

Figura 26. Lista de puntos de datos

5.1.9 Datos del registro

La pestaña "Datos del registro" se usa para visualizar los metadatos (registro de auditoría .spc) relativos al espectro seleccionado. Haga clic en **Registro de eventos** para visualizar el registro de eventos del espectro seleccionado.

```

Comments Data Points Log Data
Audit_Log_Version=1.5
File_Name=Unknown
SubFile_Number=1
Acquisition_Date_and_Time=2/16/2021 14:59:47
S/N_Version=Raman Runtime 5.1.7.0
Spectrometer_Model=Run785HPGMultiChannel
Spectrometer_Serial_Number=
Grating_Part_Number=HPC-785
User_Email=User
User_Access_Level=Advanced
Channel=4
Lambert=0.00
Detector_Temperature_Set_Point_C=-40
Detector_2_Temperature=Yes
Detector_Temperature_C=-60.00
Probe_Type=Yes
Dark_Subtracted=Yes
Intensity_Corrected=Yes
Intensity_Calibration_File=sd717b-v645-61hd-e51a-3657a60101
Intensity_Source_Spectral_File=SN0066321_785_SourceSpectralFile_DMY15022021_WLR790.No1074.5em.spc
Comment=None
Cosmic-Ray_Filtered=Yes
Number_of_Cosmic_Rays_Filtered=2
Exposure_Length_min=0000
Accumulations=10
Wavelength_Calibration_File=Scottd30-2084-4a4f-9a4b-20dab2bd30
Automatic_Wavelength_Calibration_Active=No
Last_Automatic_Wavelength_Calibration=NA
Resampling_Interval_Wavelength_nm=NA
    
```

Figura 27. Registro de eventos

5.2 Uso de tratamientos previos

La pestaña "Tratamientos previos" se usa para aplicar pretratamientos a los espectros del conjunto de datos. Los tratamientos previos se pueden eliminar, ajustar y volver a aplicar en todo momento y las modificaciones se reflejan en el gráfico de espectros y en el análisis de picos y regiones. Los tratamientos previos son un componente de las plantillas → .

The screenshot displays the 'Previous Treatment' tab in the software. At the top, there's a 'Current Dataset: Example Dataset One' with 'Save Dataset' and 'Apply' buttons. Below this is a spectral plot (1) showing intensity vs. Wavenumber (cm⁻¹) with several peaks. To the right of the plot is a 'Smooth' panel (3) with 'Predefined Defaults' and 'Window Size' (set to 20) and an 'Apply' button. Below the plot is a table (2) with columns for 'Include', 'Exclude', 'Mark as Reference', and 'Add Comment'. The table lists four rows of data with checkboxes and numerical values.

Figura 28. Pestaña "Tratamiento previo"

#	Descripción
1	Gráfico de espectros. Muestra los espectros sin procesar hasta que se aplica un tratamiento previo; después solo se muestra aquí el espectro sometido al tratamiento previo.
2	Tabla de espectros. Ofrece una lista de los espectros y los valores de los datos asociados para los campos de datos mostrados. Proporciona opciones para incluir o excluir espectros y valores de datos, así como para importar datos de referencia. La modificación de alguna de estas opciones, como la inclusión de espectros o su exclusión, se refleja en la pestaña "Datos" y en las pestañas siguientes del flujo de trabajo.
3	Panel de tratamiento previo. Aquí es donde se aplican o se eliminan todos los pretratamientos espectrales.

Los tratamientos previos se aplican en el mismo orden en el que se han seleccionado, lo que ofrece flexibilidad en la secuencia. Los tratamientos previos que se pueden aplicar a un conjunto de datos son los siguientes:

- Haga clic en **Aplicar** para aplicar el tratamiento previo seleccionado.
- Haga clic en **Eliminar** para eliminar el tratamiento previo asociado.

5.2.1 Truncamiento

Existe la posibilidad de truncar una zona de los espectros para centrar la atención en áreas específicas del espectro. El truncamiento recorta los espectros y solo conserva la región que se ha seleccionado en el eje x.

Cómo truncar un espectro

1. En la pestaña de tratamiento previo, amplíe la zona del espectro en la que desee centrar la atención; para ello, haga clic en el gráfico y dibuje un rectángulo sobre dicha zona o bien haga clic en **Ampliar** .
2. En el panel "Tratamiento previo", seleccione **Truncar**.
3. Introduzca los valores **X inicial** y **X final** para modificar la región que desee recortar. Haga clic en **Aplicar**. Ahora el tratamiento previo "Truncar" aparece en la lista del panel "Tratamiento previo". Una vez que "Truncar" ya ha sido aplicado, deja de estar disponible en la lista de tratamientos previos.
4. Haga clic en **Guardar conjunto de datos**.

Para cambiar los límites del truncamiento, elimine todo tratamiento previo de truncamiento en curso y vuelva a aplicarlo.

5.2.2 Suavización

El tratamiento previo "Suavizar" aplica una operación de suavización basada en el método de Savitzky-Golay.

Cómo suavizar un espectro

1. En el panel "Tratamiento previo", seleccione **Suavizar**.
2. Seleccione lo siguiente:
 - **Polinómico: Cuadrático o Cúbico.** La opción polinómica "Cuadrático" puede resultar preferible si los datos de una ventana de suavización concreta siguen aproximadamente una tendencia parabólica. La opción polinómica "Cúbico" se puede usar para ajustar los puntos de datos locales.
 - **Tamaño de la ventana.** Determina cuántos puntos de datos contiguos se tienen en cuenta durante el proceso de suavizado. Ajuste el tamaño de la ventana basándose en el nivel de ruido presente en la señal y en el nivel de suavización deseado. Una ventana grande proporciona una mayor suavización pero también puede introducir más retardo o distorsión en la señal, mientras que una ventana pequeña permite capturar los detalles finos pero puede resultar sensible al ruido.
3. Haga clic en **Aplicar**. Ahora el tratamiento previo "Suavizar" aparece en la lista del panel "Tratamiento previo". Una vez que "Suavizar" ya ha sido aplicado, deja de estar disponible en la lista de tratamientos previos.
4. Haga clic en **Guardar conjunto de datos**.

Para cambiar los ajustes de la suavización, elimine todo tratamiento previo de suavización en curso y vuelva a aplicarlo.

5.2.3 Aplicación de la corrección de la línea de base

El tratamiento previo "Corrección de la línea de base" elimina el ruido de fondo de los espectros usando el método de la bola rodante, el método de Pearson o el método derivativo. No se pueden aplicar dos correcciones de la línea de base diferentes.

La elección de valores para los métodos de corrección de la línea de base debe basarse en las características específicas de los datos espectrales y en la naturaleza de las distorsiones de la línea de base. Puede ser de utilidad hacer pruebas con diferentes valores con el fin de hallar un equilibrio óptimo para identificar los picos con precisión.

Si se elige la corrección de la línea de base mediante el método de Pearson, los valores de filtrado y encaje de la línea de base determinan la intensidad o el grado de corrección de la línea de base.

- **Valores de encaje bajos (0-2).** Con estos valores, la corrección que se aplica a la línea de base es suave. Este comportamiento puede ser beneficioso si la línea de base es relativamente estable y se desea preservar las características finas de los datos. No obstante, es posible que no consiga eliminar todas las distorsiones de la línea de base y, por consiguiente, puede reducir la precisión en la identificación de los picos.
- **Valores de encaje medianos (3-4).** Estos valores ofrecen un equilibrio entre la eliminación de las distorsiones de la línea de base y la conservación de la integridad de los picos. Suelen ser un buen punto de partida para muchos conjuntos de datos, ya que consiguen mejorar la identificación de los picos sin distorsionar demasiado los datos.
- **Valores de encaje altos (5).** Con estos valores, la corrección que se aplica a la línea de base es contundente, por lo que pueden resultar útiles para datos en los que la línea de base presente una deriva notable o un nivel de ruido considerable. Sin embargo, la agresividad de la corrección puede eliminar o distorsionar los picos de pequeño tamaño y llegar a ocasionar la pérdida o identificación incorrecta de algunos picos.

Cómo aplicar la corrección de la línea de base

1. En el panel "Tratamiento previo", seleccione **Corrección de la línea de base**.
2. Seleccione el **Método** y los ajustes relacionados:
 - **Derivativo.** Aplica el método derivativo suavizado de Savitzky-Golay a cada espectro.
 - **Derivativo.** Primera o segunda.
 - **Polinómico.** Cuadrático o cúbico.
 - **Tamaño de la ventana.** Determina cuántos puntos de datos contiguos se tienen en cuenta durante la corrección de la línea de base.
 - **Pearson.** Estima la línea de base de cada espectro mediante la eliminación reiterada de polinomios de 4.^o orden. De esta manera, la sustracción del encaje polinómico respecto del espectro original elimina las distorsiones de la línea de base.
 - **Tipo de encaje.** Los tipos de encaje polinómico, de Legendre y de Hermite se definen de la manera siguiente:
 - **Polinómico.** Ajusta una función polinómica a los datos espectrales para modelar la línea de base.
 - **Legendre.** Usa polinomios de Legendre, que constituyen un conjunto de polinomios ortogonales, para ajustarlos a la línea de base. Los polinomios de Legendre pueden minimizar un error en un intervalo específico.
 - **Hermite.** Usa polinomios de Hermite, que son polinomios ortogonales definidos por una función de ponderación en la que se aplica una distribución gaussiana. Los polinomios de Hermite se pueden usar cuando los datos presentan una distribución similar a la gaussiana.
 - **Filtro de la línea de base (de 0 a 5).** Determina el grado de corrección de la línea de base que se aplica a los datos espectrales.
 - **Encaje (de 0 a 5).** Determina la intensidad del proceso de encaje que se aplica a los datos espectrales.
 - **Bola rodante.** Hace rodar un círculo de tamaño fijo por debajo de un espectro y elimina con suavidad todos los puntos de contacto.
 - **Tamaño de la ventana.** Determina cuántos puntos de datos contiguos se tienen en cuenta durante el proceso de suavizado.

3. Haga clic en **Aplicar**.

Ahora el tratamiento previo "Corrección de la línea de base" aparece en la lista de la tesela "Tratamiento previo". Una vez que "Corrección de la línea de base" ya ha sido aplicado, deja de estar disponible en la lista de tratamientos previos.

4. Haga clic en **Guardar conjunto de datos**.

Para cambiar los ajustes de la corrección de la línea de base, elimine todo tratamiento previo de corrección de la línea de base en curso y vuelva a aplicarlo.

5.2.4 Normalización

El tratamiento previo "Normalizar" aplica a los espectros una escala de forma que el rango sea común. Los espectros no se pueden someter a una doble normalización.

Cómo normalizar un espectro

1. En el panel "Tratamiento previo", seleccione **Corrección de la línea de base**.

2. Seleccione el **Método** y los ajustes relacionados:

- **SNV**. Para normalizar cada espectro se le retira la media y se divide entre su desviación estándar.
- **Rango**. Normaliza todos los valores de un espectro de forma que queden en el rango comprendido entre 0 y 1.

3. Haga clic en **Aplicar**.

Ahora el tratamiento previo "Normalizar" aparece en la lista de la tesela "Tratamiento previo". Una vez que "Normalizar" ya ha sido aplicado, deja de estar disponible en la lista de tratamientos previos.

4. Haga clic en **Guardar conjunto de datos**.

Para cambiar los ajustes de la normalización, elimine todo tratamiento previo de normalización en curso y vuelva a aplicarlo.

5.2.5 Sustracción

El tratamiento previo "Sustraer" resta un único espectro de referencia de todos los espectros.

Cómo sustraer un espectro

1. En el panel "Tratamiento previo", seleccione **Sustraer**.

2. Seleccione en la lista **Espectro** el espectro que se tiene que sustraer. Haga clic en **Aplicar**.

Ahora el tratamiento previo "Sustraer" aparece en la lista de la tesela "Tratamiento previo". Una vez que "Sustraer" ya ha sido aplicado, deja de estar disponible en la lista de tratamientos previos.

3. Haga clic en **Guardar conjunto de datos**.

Para cambiar los ajustes de la sustracción, elimine todo tratamiento previo de sustracción en curso y vuelva a aplicarlo.

5.2.6 Filtrado de intensidad

El tratamiento previo "Filtro de intensidad" excluye los espectros que se encuentran fuera del rango seleccionado mínimo y máximo del eje y. Este filtro resulta de ayuda si, p. ej., durante un periodo el láser se bloquea o produce datos que no son utilizables.

Cómo filtrar la intensidad

1. En el panel "Tratamiento previo", seleccione **Filtro de intensidad**.

2. Introduzca un rango de intensidad mínima y máxima en los campos **Y mínima** e **Y máxima**. Haga clic en **Aplicar**.

Ahora el tratamiento previo "Filtro de intensidad" aparece en la lista de la tesela "Tratamiento previo". Una vez que "Filtro de intensidad" ya ha sido aplicado, deja de estar disponible en la lista de tratamientos previos.

3. Haga clic en **Guardar conjunto de datos**.

Para cambiar los ajustes del filtro de intensidad, elimine todo tratamiento previo de filtrado de intensidad en curso y vuelva a aplicarlo.

5.3 Picos y regiones

La pestaña "Picos y regiones" se puede usar para añadir cálculos destinados a rangos específicos del eje x en un conjunto de datos. Los picos y las regiones son un componente de las plantillas. Véase *Creación de plantillas* →  para obtener más información.



Figura 29. Pestaña "Picos y regiones"

#	Descripción
1	Gráfico de espectros. Muestra los espectros pretratados. La tesela "Gráfico de espectros" se usa para seleccionar las posiciones de los picos y regiones. En esta tesela, las únicas maneras de aumentar o reducir la ampliación consisten en dibujar un recuadro o hacer doble clic.
2	Gráficos de picos. Muestra los resultados del análisis de picos. Esta tesela permite conmutar entre "Análisis de picos" (tendencias) y el gráfico "Modelo" (resultados de regresión).
3	Gráficos de regiones. Muestra los resultados de la resolución de curva multivariable (MCR) o del análisis de componentes principales (PCA) cuando se aplica el análisis de regiones.
4	◀ Pico y ▶ Región. Muestra un cuadro de diálogo para añadir y definir picos y regiones nuevos.
5	Listas de picos y regiones. Picos y regiones definidos en listas. Esta tesela permite seleccionar y editar los picos y regiones.
6	Gráfico "Tendencia del campo de datos". El gráfico "Tendencia del campo de datos" permite comparar los resultados de los picos y regiones con los datos medidos. Gráfico 3D. Muestra el gráfico de espectros en 3D.

5.3.1 Añadir picos y regiones

La ventana de selección de pico/región muestra una representación visual de los picos y regiones contenidos en un conjunto de datos.

Cómo añadir picos

1. En la pestaña "Picos/regiones", haga clic en **◀ Pico**.
Aparece la ventana emergente "Añadir pico".

Peak Name: Example Peak

Peak Type: Height

X1: 700

X2: 800

Data Field: 2-Propanol

Model: Yes

Add

A0056045

Figura 30. Ventana emergente "Añadir pico"

- Introduzca el **Nombre del pico**. Este es el nombre de visualización del pico.
- Seleccione el **Tipo de pico** (altura, área o centro). El pico de centro resulta útil cuando los picos, más que crecer o reducirse, se desplazan debido a un cambio químico o físico.
- Introduzca el rango del pico en **X1** y **X2**.
- (Opcional) Seleccione un **Campo de datos** para mapearlo respecto al pico. El campo de datos se usa en el cálculo de modelado.
- (Opcional) Active **Modelo** si durante la exportación se crea un modelo para el pico.
- Haga clic en **Añadir** para crear un nuevo pico.
- Haga clic en **Guardar conjunto de datos**.

Una vez añadido el pico, se muestra la zona resaltada del gráfico de espectros. El pico se puede mover, expandir o reducir; para ello, mueva o arrastre las esquinas de la ventana del pico en el gráfico de espectros.

Tras crear un pico, la tendencia de análisis del pico se puede visualizar en la zona del gráfico del pico. Puede mover las ventanas que no use para cambiar el tamaño del gráfico de tendencias y obtener una vista más grande de las tendencias.



A0056046

Figura 31. Gráfico de espectros con picos y análisis de picos

Cómo añadir regiones

- En la pestaña "Picos/regiones", haga clic en **← Región**. Aparece la ventana emergente "Añadir región".

Figura 32. Ventana emergente "Añadir región"

2. Introduzca la información siguiente:
 - El campo **Nombre de la región** es el nombre de visualización de la región.
 - Los campos **X1** y **X2** son el rango de la región.
 - El campo **Cálculo** determina el tipo de cálculo que se lleva a cabo para la región (PCA o MCR).
3. Haga clic en **Añadir** para crear una nueva región.

5.3.2 Modificación de los picos y regiones

Cómo incluir espectros adicionales en el análisis de picos

1. Seleccione la pestaña **Datos** o **Tratamiento previo**.
2. En la tabla de espectros, desplácese hasta el espectro que se tenga que incluir.
Puede mantener presionada la tecla de desplazamiento e ir hasta el último espectro para incluir todos los espectros en un rango.
3. Haga clic en **Incluir** dentro del cuadro "Espectros seleccionados".
4. Seleccione la pestaña **Picos/regiones** y haga clic en **Actualizar gráfico** .
Se incluyen más espectros tanto en las tendencias de picos como en el gráfico espectral.
5. Haga clic en **Guardar conjunto de datos**.

Cómo excluir espectros del análisis de picos

Existe la posibilidad de excluir datos directamente del gráfico de tendencias. Resulta útil para omitir espectros claramente atípicos o cuando no hay ningún cambio en un experimento.

1. Seleccione los puntos de datos que desee excluir haciendo clic y arrastrándolos sobre el área del gráfico "Análisis de picos".
Los puntos se muestran resaltados y se activa el botón de exclusión.
2. Haga clic en **Excluir puntos** .
3. Haga clic en "Aceptar" para aprobar la lista de "Espectros excluidos". Si los puntos han sido seleccionados en varias tendencias de pico, es posible que los nombres de espectro aparezcan más de una vez.
4. Haga clic en **Actualizar gráfico** .
Ahora el "Análisis de picos" solo muestra los datos que no se han excluidos.
5. Haga clic en **Guardar conjunto de datos**.

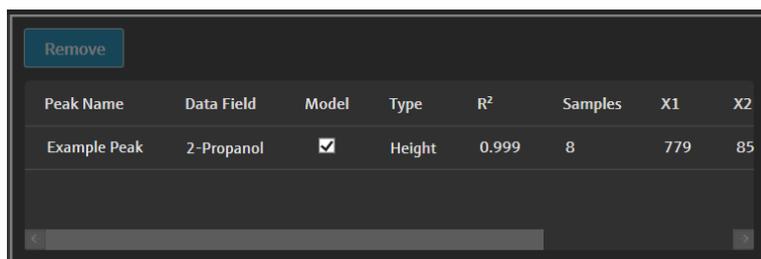
Cómo mover y cambiar el tamaño de los picos y regiones

Los picos y regiones se pueden mover y su tamaño se puede modificar; para ello, basta con hacer clic y arrastrar las empuñaduras. Tras cambiar el tamaño de un pico o región, se recalcula el análisis.

Cómo modificar o eliminar un pico o región

A la derecha del panel de picos y regiones se encuentra una lista de picos y regiones. Esta lista permite visualizar y modificar las propiedades de un pico o región. Seleccione un pico o región y haga clic en **Eliminar** para borrar ese pico o región.

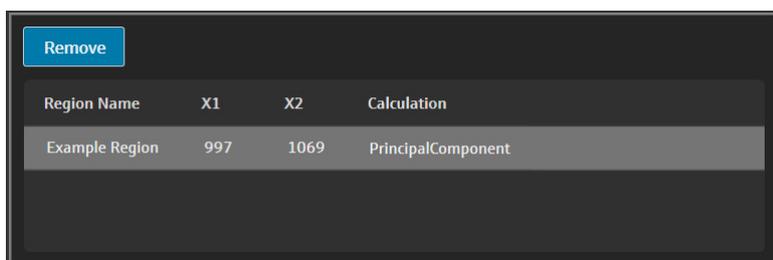
Cuando se elimina un pico o región, todas las vistas que usen una tendencia generada a partir de dicho pico o región se deben eliminar o bien actualizarse con un nuevo pico o región. Si una vista de tendencia basada en un pico o región que se ha eliminado no es actualizada o eliminada, resulta imposible analizar el conjunto de datos asociado. Si se elimina un pico o región y la vista asociada no se actualiza o se elimina, los usuarios que tengan una vista guardada en su tablero de instrumentos no podrán iniciar sesión.



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

A0056048

Figura 33. Lista de picos



Region Name	X1	X2	Calculation
Example Region	997	1069	PrincipalComponent

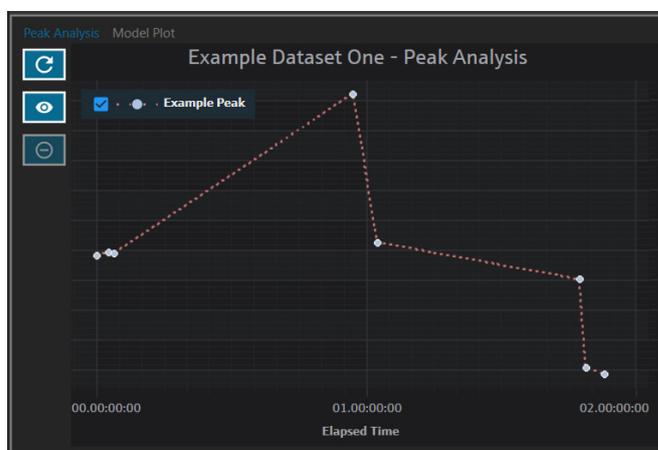
A0056049

Figura 34. Lista de regiones

5.3.3 Visualización del análisis de picos

La pestaña "Análisis de picos" muestra un gráfico de tendencia para todos los picos añadidos. Los picos se añaden con su propio eje y. En la pestaña "Análisis de picos" puede hacer lo siguiente:

- Haga clic en **Excluir puntos**  para eliminar puntos de datos específicos.
- Haga clic en **Actualizar gráfico**  para actualizar el gráfico después de modificar puntos de datos.



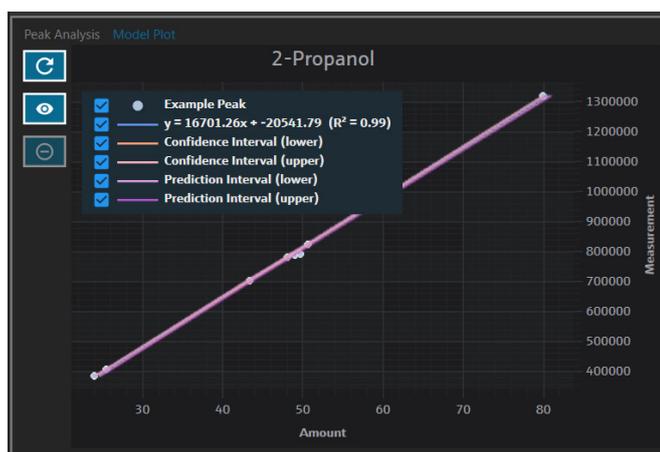
A0056050

Figura 35. Análisis de picos

5.3.4 Visualización del gráfico de modelo

La pestaña "Gráfico de modelo" muestra el gráfico de modelo para el pico seleccionado. En la pestaña "Gráfico de modelo" puede hacer lo siguiente:

- Haga clic en **Excluir puntos**  para eliminar puntos de datos específicos.
- Haga clic en **Actualizar gráfico**  para actualizar el gráfico después de modificar puntos de datos. Cuando se excluyen espectros o valores de datos desde la pestaña "Datos", use **Actualizar gráfico** para recalculer el gráfico de modelo.



A0056051

Figura 36. Pestaña "Gráfico de modelo"

5.4 Creación de vistas de tablero de instrumentos: tablas, tendencias, espectros y gráficos 3D

La pestaña "Vistas" se usa para definir los gráficos más relevantes y para cada caso de uso. Existen muchas opciones para visualizar los gráficos, incluso para conjuntos de datos simples. Toda vista puede ser añadida a un tablero de instrumentos y formar parte de una colección de vistas. Puede crear pestañas de tablero de instrumentos preferidas para mostrar de uno a cuatro gráficos en cuadrantes.

Todos los conjuntos de datos se crean con dos vistas predefinidas: gráfico de espectros y tabla de espectros. Por medio de la pestaña "Vistas" se añaden vistas personalizadas, se modifican y se eliminan. En el lado derecho de la pestaña "Vistas" se muestra una vista previa de la vista seleccionada.

Existen 4 tipos de vistas:

- Gráfico de tendencia
- Gráfico de espectros
- Tabla de espectros
- Gráfico 3D

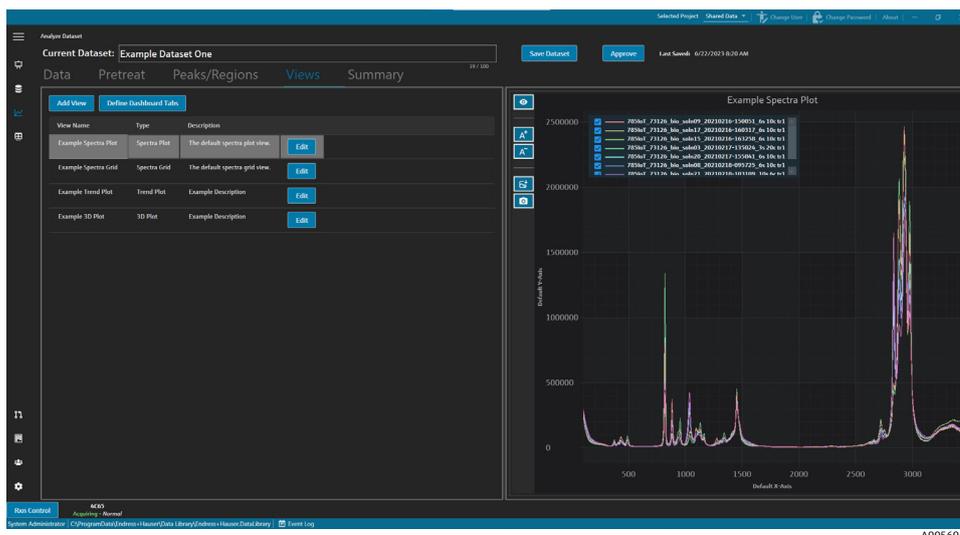


Figura 37. Pestaña "Vistas"

En la pestaña "Vistas" también puede hacer clic en **Definir pestañas de tableros de instrumentos** para abrir la ventana "Definir pestañas de tableros de instrumentos". Véase *Definición de un tablero de instrumentos* →

Para eliminar una vista, seleccione la vista y haga clic en **Eliminar**. Para eliminar una vista también existe la opción de seleccionarla y pulsar el botón "Suprimir" del teclado.

5.4.1 Creación o modificación de una vista de gráfico de espectros

La vista de gráfico de espectros se puede usar para visualizar los espectros de un conjunto de datos en un gráfico ampliable. El gráfico de espectros es una vista predeterminada que se genera para cada conjunto de datos.

Cómo modificar una vista de gráfico de espectros

- En la pestaña "Vistas", haga clic en **Añadir vista**.
Se muestra el cuadro de diálogo "Definición de vista".
- Introduzca la información siguiente:
 - **Nombre.** Nombre de visualización de la vista.
 - **Descripción.** Descripción breve de la vista.
 - **Tipo de vista.** Seleccione el gráfico de espectros.
- Seleccione lo siguiente:
 - **Usar datos pretratados.** Seleccione esta opción para mostrar en la vista datos pretratados. Si la opción está desactivada, se muestran en la vista los datos brutos (sin tratamiento previo).
 - **Mostrar solo el último espectro.** Seleccione esta opción para mostrar solo el espectro que tenga la fecha y hora final más recientes. Si la opción está desactivada, se muestran todos los espectros.
- Haga clic en **Cerrar**.
- Haga clic en **Guardar conjunto de datos**.

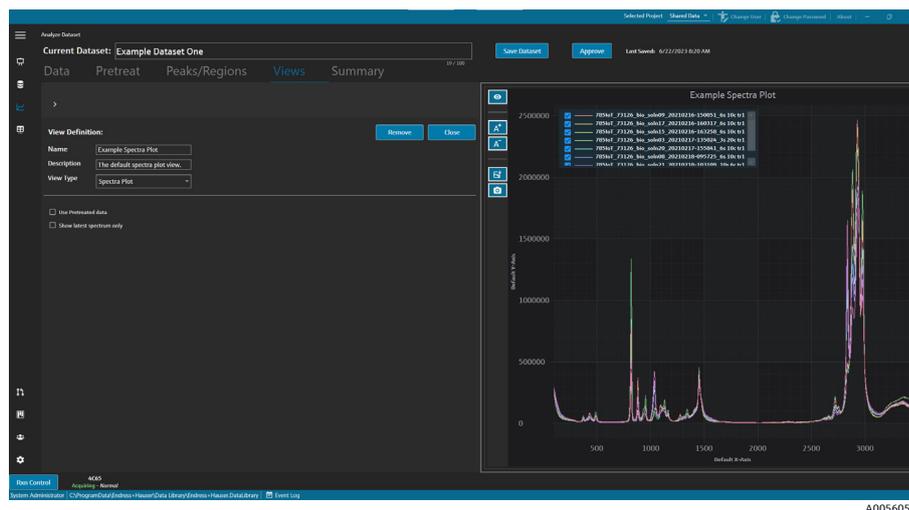


Figura 38. Vista "Gráfico de espectros"

5.4.2 Modificación de una tabla de espectros

La vista "Tabla de espectros" se puede usar para visualizar espectros individuales en una tabla. La tabla de espectros es una vista predeterminada que se genera para cada conjunto de datos.

Cómo modificar una vista de tabla de espectros

1. En la pestaña "Vistas", haga clic en **Añadir vista**.
Se muestra el cuadro de diálogo "Definición de vista".
2. Seleccione la tabla de espectros y haga clic en **Editar**.
3. Introduzca la información siguiente:
 - **Nombre.** Nombre de visualización de la vista.
 - **Descripción.** Descripción breve de la vista.
 - **Tipo de vista.** Seleccione **Tabla de espectros**.
4. Haga clic en **Cerrar**.
5. Haga clic en **Guardar conjunto de datos**.

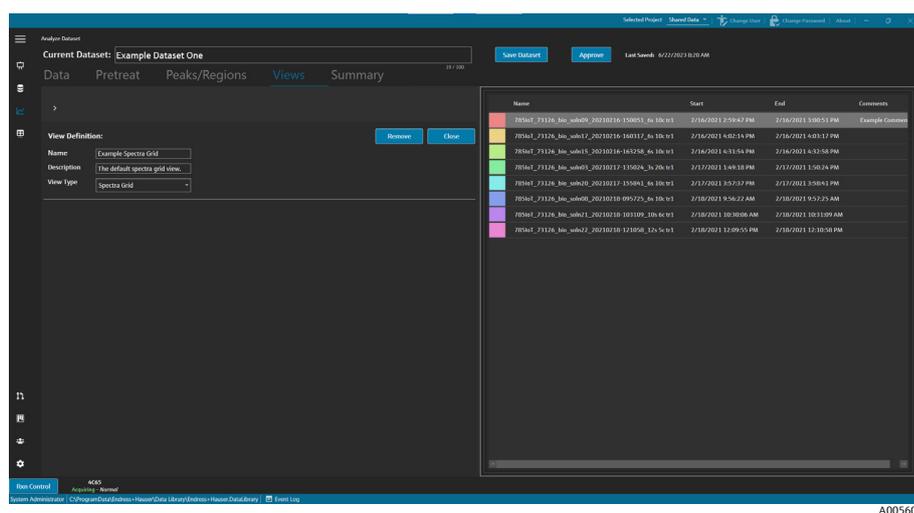


Figura 39. Vista "Tabla de espectros"

5.4.3 Creación o modificación de una vista de tabla de espectros

Los gráficos de tendencia se pueden usar para ver tendencias de los conjuntos de datos. En la vista "Gráfico de tendencia", el eje x representa el tiempo relativo de adquisición de los espectros. El eje y representa los valores de datos, los valores de la predicción de datos o las medidas de los picos.

Puede elegir qué campos de datos y qué picos se deben incluir en la vista. Si se ha seleccionado **Modelo** para un campo de datos que se usa en un pico, los valores de predicción se muestran en la vista.

Cómo crear y modificar una vista de gráfico de tendencia

1. En la pestaña "Vistas", haga clic en **Añadir vista**.
Se muestra el cuadro de diálogo "Definición de vista".
2. Introduzca la información siguiente:
 - **Nombre.** Nombre de visualización de la vista.
 - **Descripción.** Descripción breve de la vista.
 - **Tipo de vista.** El tipo de la vista. Seleccione **Gráfico de tendencia**.
3. En **Campos de datos disponibles**, seleccione los campos de datos que se deben representar en el gráfico. Haga clic en **Incluir** ►.
4. En **Picos disponibles**, seleccione los picos que se deben representar en el gráfico. Haga clic en **Incluir** ►.
5. Haga clic en **Cerrar**.
6. Haga clic en **Guardar conjunto de datos**.

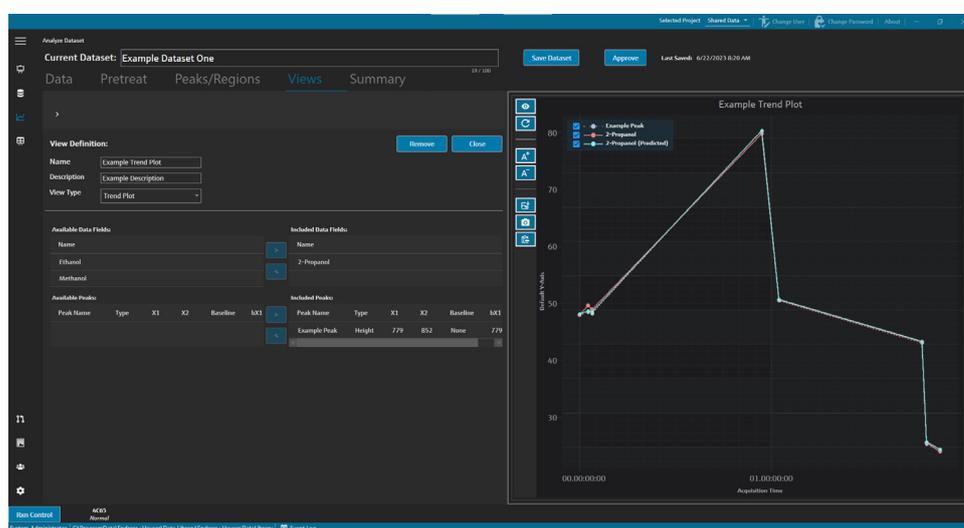


Figura 40. Vista "Gráfico de tendencia"

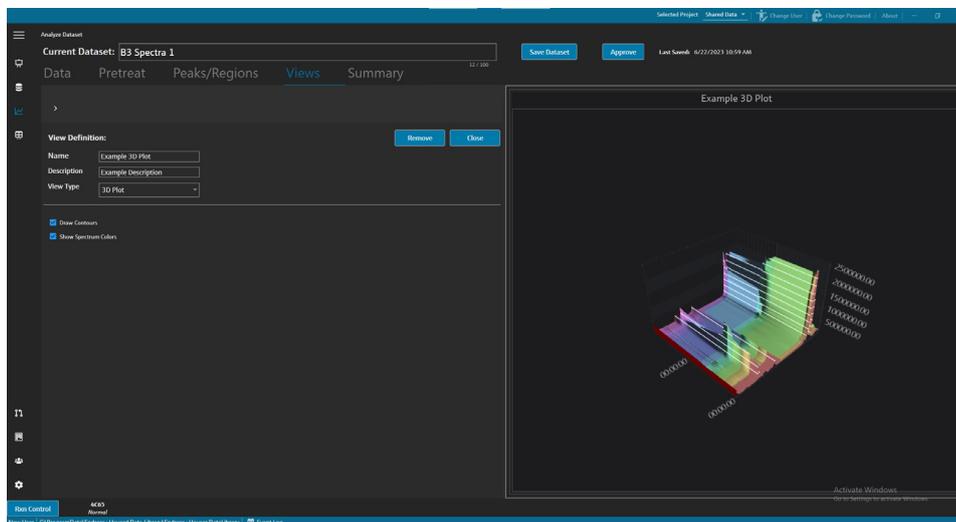
5.4.4 Creación o modificación de un gráfico 3D

Una vista "Gráfico 3D" muestra los espectros en un gráfico con los ejes x, y, z. Este gráfico puede proporcionar información adicional sobre las diferencias entre los espectros a lo largo del tiempo o al añadir o eliminar variables.

Cómo modificar una vista de gráfico 3D

1. En la pestaña "Vistas", haga clic en **Añadir vista**.
Se muestra el cuadro de diálogo "Definición de vista".
2. Introduzca la información siguiente:
 - **Nombre.** Nombre de visualización de la vista.
 - **Descripción.** Descripción breve de la vista.
 - **Tipo de vista.** Seleccione el gráfico 3D.
3. Ajuste el gráfico a la vista que desee:
 - **Dibujar contornos.** Dibuja líneas de contorno a lo largo de una longitud de onda para resaltar las diferencias en los espectros.
 - **Mostrar colores de espectro.** Activa o desactiva el uso de colores en los espectros para resaltar los cambios espectrales a lo largo del tiempo.

- **Cambiar ángulo de los ejes x, y, z.** El ángulo de visualización se puede ajustar haciendo clic en el gráfico y arrastrándolo hasta la posición deseada.
 - **Aumentar o reducir la ampliación.** La rueda del ratón aumenta o reduce la ampliación.
4. Haga clic en **Cerrar**.
 5. Haga clic en **Guardar conjunto de datos**.



A0056055

Figura 41. Vista de gráfico 3D

5.4.5 Adición de anotaciones temporales

La pestaña "Vistas" permite crear anotaciones temporales, incluidas áreas resaltadas, etiquetas, líneas y flechas. Luego puede guardar las anotaciones junto con la vista para consultarlas más adelante o para compartirlas.

En la pestaña "Vistas" se puede hacer lo siguiente:

Elemento de navegación	Navegación
A0056085	Añadir anotación temporal. Añade a la vista una anotación temporal.
A0056086	Guardar fichero de imagen. Guarda la vista con anotaciones.
A0056087	Copiar imagen en el portapapeles. Copia la vista actual con la anotación en el portapapeles.
A0055992	Copiar datos del gráfico en el portapapeles. Copia los datos del gráfico de tendencia actual en el portapapeles.
A0055993	Eliminar anotación temporal. Elimina de la vista una anotación temporal.

Cómo crear anotaciones temporales

1. En la pestaña "Vistas", seleccione la vista en la que desee hacer anotaciones.

2. Haga clic en **Añadir anotación temporal**

3. Seleccione el **Tipo de anotación**:

- **Línea.** Sitúa una línea en la vista.
- **Flecha de línea.** Sitúa una flecha línea en la vista.
- **Texto.** Sitúa texto en la vista.

- **Cuadro.** Sitúa un cuadro resaltado en la vista.
 - **Línea horizontal.** Sitúa una línea horizontal en la vista.
 - **Línea vertical.** Sitúa una línea vertical en la vista.
 - **Marcador de eje.** Sitúa un marcador de eje en la vista.
4. Haga clic en **Añadir anotación temporal** y seguidamente haga clic en la vista para situar el marcador.
 5. Guarde la vista de una de estas maneras:
 - Haga clic en **Guardar fichero de imagen**  para guardar la vista con las anotaciones.
 - Haga clic en **Copiar imagen en el portapapeles** .
 - Haga clic en **Copiar los datos del gráfico en el portapapeles** .
 6. Haga clic en **Guardar conjunto de datos.**

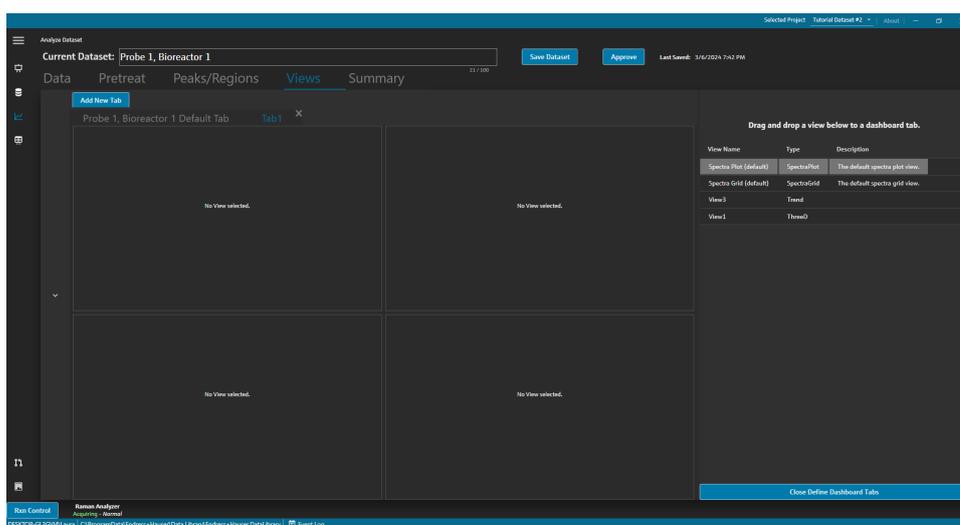
5.4.6 Definición de un tablero de instrumentos

En la pestaña "Vistas" puede definir y guardar un tablero de instrumentos. Para ello, primer debe crear las vistas que se han explicado en las secciones anteriores. La pestaña "Vistas" contiene de manera predeterminada un "Gráfico de espectros" y una "Tabla de espectros" para cada conjunto de datos.

Cómo definir un tablero de instrumentos

1. En la pestaña "Vistas", haga clic en **Definir pestañas de tableros de instrumentos.**
Aparece una pestaña predeterminada para el conjunto de datos actual en la que se muestra el "Gráfico de espectros" y la "Tabla de espectros".
2. Haga clic en **Añadir nueva pestaña.**
Aparece la ventana emergente "Añadir nueva pestaña".
3. Seleccione el número de vistas para mostrar:
 - Pestaña de 1 vista
 - Pestaña de 2 vistas
 - Pestaña de 3 vistas
 - Pestaña de 4 vistas

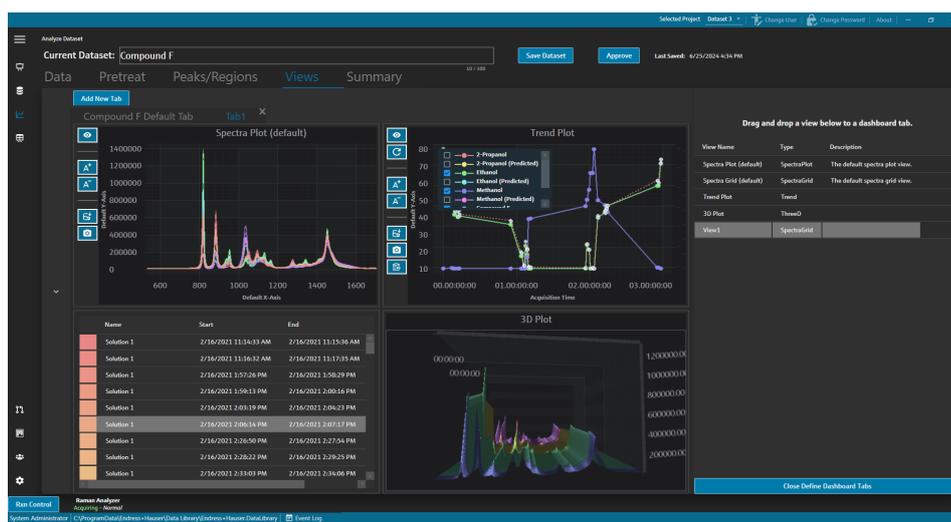
Se muestra un tablero de instrumentos nuevo.



A0055977

Figura 42. Definición de un nuevo tablero de instrumentos

4. Arrastre las vistas deseadas desde la lista de la derecha y suéltelas en la zona deseada del tablero de instrumentos.



A0056056

Figura 43. Vistas seleccionadas en un tablero de instrumentos nuevo

- Haga doble clic en el nombre de la pestaña y cambie el nombre del tablero de instrumentos como desee.
- Haga clic en **Guardar conjunto de datos**.
- Haga clic en **Cerrar la definición de pestañas de tableros de instrumentos**.

5.5 Resumen

En la pestaña "Resumen" se muestra un resumen de los conjuntos de datos y se aplica el análisis. En la pestaña "Resumen" también es donde se guardan las plantillas, donde se exportan los ficheros de modelos de Raman data library y donde los conjuntos de datos se pueden exportar para el modelado externo.

En la pestaña "Resumen" se puede hacer lo siguiente:

- **Ver información resumida** sobre el conjunto de datos. La información resumida indica el estado del conjunto de datos, su estado de homologación, el total de espectros incluidos y los campos de datos aplicables. También se muestran los tratamientos previos, los picos, las regiones y una instantánea del gráfico.
- **Exportar el conjunto de datos**. Haga clic en **Exportar** para exportar el conjunto de datos actual. Consulte *Exportación de datos, conjuntos de datos y modelos* → para obtener más información.
- **Iniciar pestañas de tableros de instrumentos**. Haga clic en **Iniciar tablero de instrumentos** para añadir una copia del tablero de instrumentos del conjunto de datos en la ventana de tablero de instrumentos. El tablero de instrumentos se define en la pestaña "Vistas". Consulte *Creación de vistas de tablero de instrumentos: tablas, tendencias, espectros y gráficos 3D* → para obtener más información.
- **Crear plantillas** desde el conjunto de datos. Consulte *Creación de plantillas* → para obtener más información.
- **Ver eventos** relativos al conjunto de datos. Haga clic en **Registro de eventos del conjunto de datos** para visualizar el registro de eventos del conjunto de datos actual.

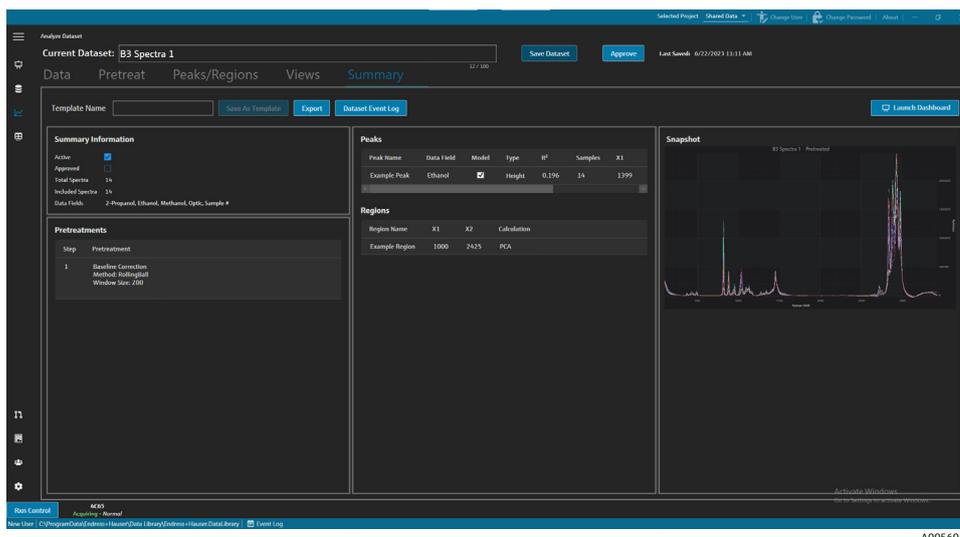


Figura 44. Pestaña "Resumen"

5.5.1 Creación de plantillas

Cuando los componentes de un conjunto de datos se pueden reutilizar en otros conjuntos de datos, las plantillas simplifican la creación de los conjuntos de datos. Las plantillas almacenan todos los ajustes de los tratamientos previos, de los análisis y de las vistas y se pueden aplicar a conjuntos de datos nuevos. Una plantilla contiene los elementos siguientes:

- Campos de datos mostrados
- Tratamientos previos
- Picos
- Regiones
- Vistas
- Pestañas de tableros de instrumentos

Una plantilla no contiene datos de espectros.

Las plantillas guardadas se pueden seleccionar en una ventana "Crear conjunto de datos" cuando se crea un nuevo conjunto de datos o en la ventana "Control de Rxn". Si se selecciona una plantilla durante la creación del conjunto de datos, todos los componentes de la plantilla se añaden al conjunto de datos nuevo.

Cómo crear una plantilla en el conjunto de datos actual

1. Seleccione la pestaña **Resumen**.
2. Escriba un nombre en el campo **Nombre de la plantilla**.
3. Haga clic en **Guardar como plantilla**.
4. Haga clic en **Aceptar**.

5.5.2 Aplicación de plantillas

Cuando se crea un nuevo conjunto de datos, se puede aplicar una plantilla.

Cómo aplicar una plantilla

1. En la ventana "Conjuntos de datos" , haga clic en **Crear nuevo conjunto de datos**.
2. Ponga un nombre al conjunto de datos, importe los espectros correspondientes y haga clic en **Incluir >**.
3. En el campo **Plantilla**, seleccione la plantilla en la lista.
4. Haga clic en **Crear**. Si aparece un mensaje que le invita a guardar un conjunto de datos que todavía no se ha guardado, haga clic en "Aceptar".

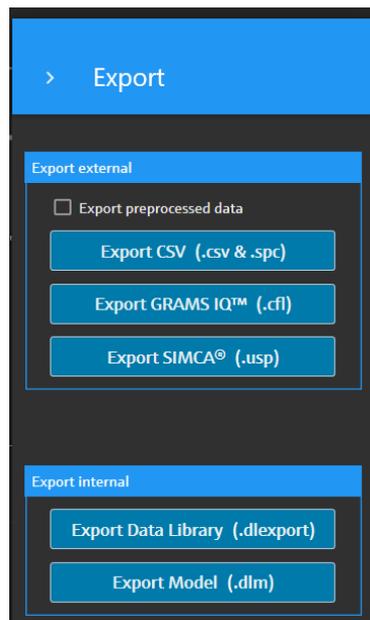
Una vez completada la operación, Raman data library avanza a lo largo del flujo de trabajo hasta la ventana "Analizar conjunto de datos".

5.5.3 Exportación de datos, conjuntos de datos y modelos

El panel "Exportar" se usa para exportar conjuntos de datos de Raman data library a otros sistemas de software externos e internos. Para mover los conjuntos de datos de una instancia de Raman data library a otra se puede usar un fichero de exportación de Raman data library (.dlexport). Para exportarlo a sistemas de software externos, el conjunto de datos debe estar aprobado.

Cómo exportar datos, un conjunto de datos o un modelo

1. En la ventana **Conjuntos de datos** , haga clic en **Exportar**.
Se muestra el menú "Exportar".



A0055986

Figura 45. Menú "Exportar"

2. Seleccione las opciones siguientes:
 - **Exportar datos preprocesados.** Si esta casilla está activada, los datos se exportan sin aplicar tratamientos previos.
 - **Exportar CSV.** Exporta el conjunto de datos en forma de fichero de valores separados por comas (.csv) que contiene los nombres de los espectros y los valores de los datos correspondientes a todos los campos de datos incluidos. También exporta una carpeta comprimida que contiene los espectros incluidos en formato SPC (.spc).
 - **Exportar GRAMS IQ™.** Exporta el conjunto de datos en forma de fichero GRAMS IQ™ (.cfl). También exporta los espectros incluidos en formato SPC (.spc). Para poder llevar a cabo la exportación en forma de fichero GRAMS IQ™ (.cfl) es preciso disponer de una instalación válida de GRAMS IQ™ en el ordenador de Raman data library.
 - **Exportar SIMCA®.** Exporta el conjunto de datos en forma de fichero SIMCA® (.usp). Para poder llevar a cabo la exportación en forma de fichero SIMCA® (.cfl) es preciso disponer de una instalación válida de SIMCA® en el ordenador de Raman data library.
 - **Exportar biblioteca de datos.** Exporta el conjunto de datos en forma de fichero de Raman data library (.dlexport). Este tipo de fichero se puede importar en la ventana "Conjuntos de datos".
 - **Exportar modelo.** Exporta un fichero de modelo (.dlm) que se ha creado usando los tratamientos previos y los picos del conjunto de datos. Este fichero se puede exportar a Raman RunTime usando la ventana "Control de Rxn" de Raman data library. El fichero de modelo se puede usar para generar valores de proceso de componentes en RunTime.
3. Vaya a la ubicación de la carpeta y ponga un nombre al fichero de datos.
4. Seleccione **Marcar inactivo** o **Mantener activo** para el conjunto de datos actual.

6 Control del analizador Raman Rxn

"Control de Rxn" se usa para gestionar los analizadores Raman RunTime Rxn co el objeto de capturar espectros de Raman y modelarlos y está diseñado para reproducir la interfaz de usuario de Raman RunTime. Para acceder a la ventana "Analizador Raman" se debe crear una conexión de fuente espectral OPC. Consulte *Cómo añadir una fuente espectral OPC* →  para obtener instrucciones.

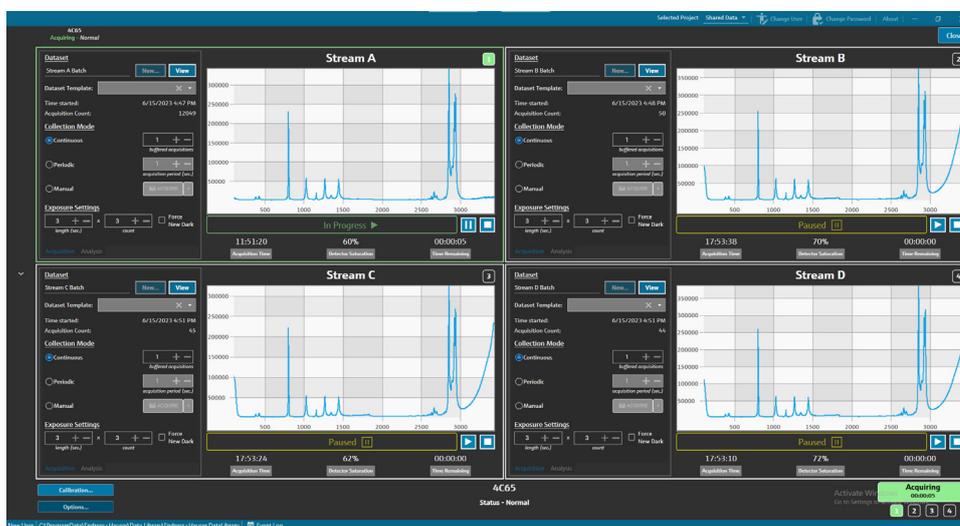
NOTA

Para obtener información sobre el funcionamiento seguro de los analizadores Raman Rxn y del software Raman RunTime, véase el *manual de instrucciones de Raman RunTime (BA02180C)*.

- ▶ Según la versión de Raman RunTime que utilice, lea el correspondiente *manual de instrucciones de Raman RunTime* antes de usar "Control de Rxn" en Raman data library.



Figura 46. Botón "Control de Rxn"



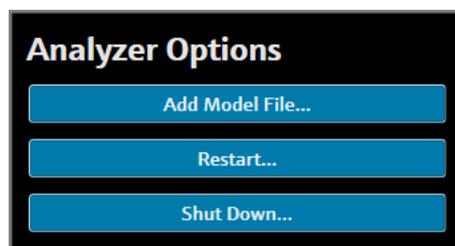
A0056059

Figura 47. Ventana "Analizador Raman"

El botón **Control de Rxn** solo está presente cuando hay un analizador Raman Rxn conectado a Raman data library. Para conectar un analizador, consulte las instrucciones que figuran en *Cómo añadir una fuente espectral OPC* → .

6.1 Opciones del analizador

Para acceder al menú **Opciones del analizador** es preciso hacer clic en **Opciones** en la parte inferior de la ventana **Analizador Raman**.



A0056062

Figura 48. Opciones del analizador Rxn

6.1.1 Adición de un fichero de modelo

Cómo añadir un fichero de modelo:

1. En la ventana **Control de Rxn**, haga clic en **Opciones**.
Aparece el cuadro de diálogo "Opciones del analizador".

2. Haga clic en **Añadir fichero de modelo** para seleccionar un fichero de modelo que desee enviar a Raman RunTime.

Los ficheros de modelo añadidos se pueden usar para llevar a cabo análisis. Se pueden habilitar o deshabilitar haciendo clic en la pestaña **Análisis** de una ventana de sonda. Entre los tipos de fichero válidos se incluyen los siguientes: ficheros .usp, .rusp, .dlm, .pxm, .pxs, .cal, .mat y .unsb. Para obtener detalles sobre los tipos de modelos compatibles con Raman RunTime, consulte el *manual de instrucciones de Raman RunTime* (BA02180).

Para obtener instrucciones sobre cómo reiniciar o apagar el analizador, véase *Cómo reiniciar o apagar el analizador* → .

6.2 Control del canal

Los analizadores Raman Rxn pueden tener hasta 4 sondas, o canales de medición, en la ventana "Control de Rxn". Cada canal cuenta con un panel de control en la ventana "Analizador Raman". Use el panel del canal para seleccionar y visualizar los conjuntos de datos, los modos de captura del conjunto, los ajustes de exposición del conjunto, etc.

Cada panel de canal contiene unos ajustes que reflejan las operaciones de Raman RunTime. Para encontrar una descripción completa de todas las funcionalidades disponibles en un panel de canal, consulte el *manual de instrucciones de Raman RunTime* (BA02180).

6.2.1 Adquisición del canal

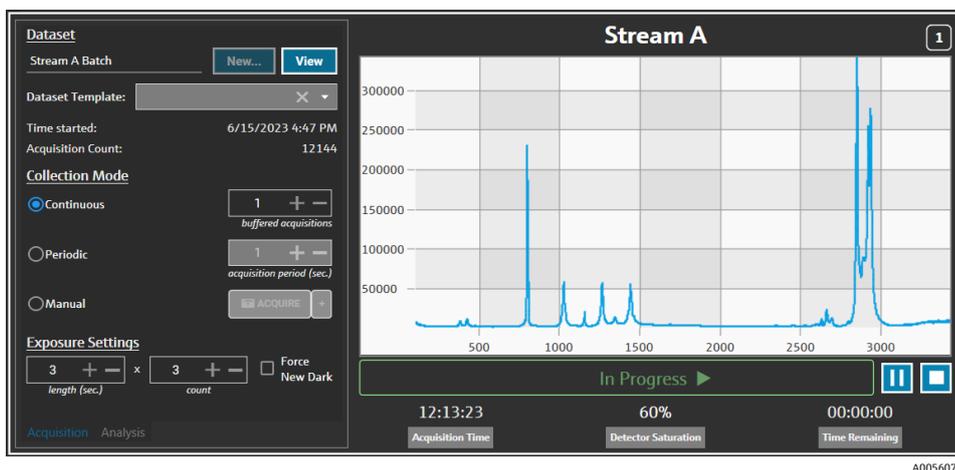


Figura 49. Panel "Control del canal"

En la pestaña **Adquisición** del canal, seleccione:

- **Nuevo.** Crea un nuevo conjunto de datos con nombre.
- **Visualizar.** Inicia el conjunto de datos actual en la ventana "Tablero de instrumentos".
- **Plantilla de conjunto de datos.** Selecciona una plantilla para aplicársela al conjunto de datos nuevo. Se debe seleccionar una plantilla antes de iniciar un lote.
- **Tiempo desde inicio.** Tiempo (en segundos) que ha transcurrido desde que se inició el conjunto de datos actual.
- **Recuento de adquisiciones.** Número de adquisiciones del conjunto de datos actual.
- **Modos de captura.** El modo de captura de la sonda se puede modificar seleccionando una de estas tres opciones:
 - **Continua.** El modo de captura continua conmuta cíclicamente entre todas las sondas activas de la manera más rápida posible. Este ajuste resulta recomendable para desarrollar el método cuando se capturan muestras de referencia con frecuencia, así como para la monitorización y el control cuando los modelos están activos. El modo continuo cuenta con una opción de adquisición con memoria intermedia.
 - **Periódica.** El modo de captura periódica adquiere espectros a intervalos especificados y se suele usar durante el desarrollo del método para permitir que los espectros se sincronicen con las muestras extraídas de los reactores u otros eventos de proceso temporizados. En el caso del modo periódico, las adquisiciones con memoria intermedia no son una opción.
 - **Manual.** Use el modo de captura "Manual" para adquirir espectros cuyo disparo se efectúe manualmente con el botón  **Adquirir**. Se pueden especificar nombres de muestra para cada espectro haciendo clic en +.

- **Ajustes de exposición.** Los ajustes de exposición correspondientes a la longitud (segundos) y el recuento se pueden modificar haciendo clic en + y en – o introduciendo manualmente un valor con el teclado. Seleccione **Forzar nueva oscura** para forzar que se lleve a cabo una nueva exposición oscura después de cada adquisición. Capturar una nueva exposición oscura puede mitigar las contribuciones ajenas a la muestra en la medición por la corriente oscura. Para obtener más información sobre "Forzar nueva oscura", consulte el *manual de instrucciones de Raman RunTime* (BA02180).



Figura 50. Ajustes de exposición

6.2.2 Aplicación de modelos en la pestaña "Análisis" del canal

La pestaña **Análisis** del canal le permite seleccionar y aplicar modelos dentro de Raman RunTime con el fin de recibir predicciones del modelo durante la adquisición del conjunto de datos.

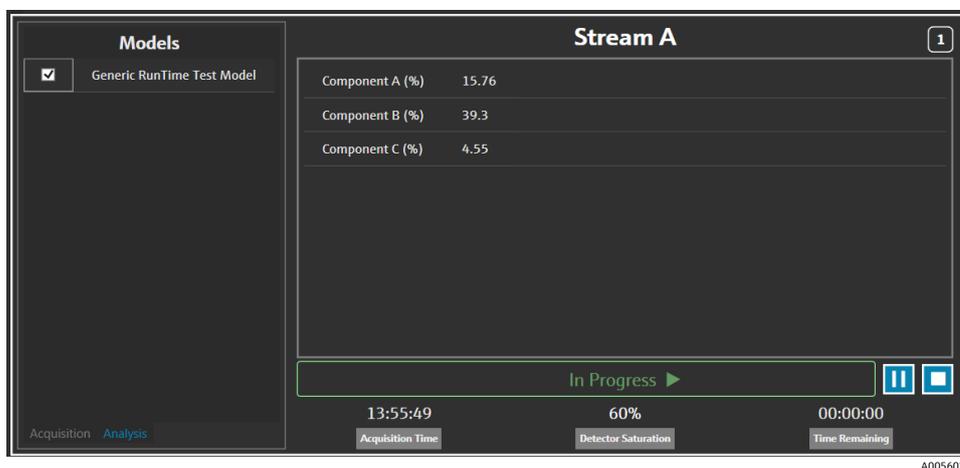


Figura 51. Pestaña "Análisis" de control del canal

Para elegir un modelo, active la casilla correspondiente al nombre del fichero del modelo. Se muestra la información siguiente:

- Los valores de la predicción se muestran en la pestaña "Análisis".
- Los resultados de la predicción del modelo de Raman RunTime se muestran en la ventana "Análisis" entre corchetes, p. ej., [8.14].

6.2.3 Adquisición de espectros

Para iniciar la adquisición de un conjunto de datos, haga clic en **Reproducir** ▶. Una vez iniciada la adquisición del conjunto de datos, el botón de reproducción cambia y se muestra el botón "Pausa".

Haga clic en **Parar** ■ para detener la adquisición del conjunto de datos.

6.2.4 Barra de estado del canal

La barra de estado del canal se muestra debajo del gráfico del espectro. Un canal puede tener los estados siguientes: "No iniciado", "En proceso", "Pausado" y "Completado".



Figura 52. Barra de estado del canal

6.2.5 Indicadores del estado y de las acciones del analizador

El indicador del estado del analizador se muestra en la parte inferior central de la ventana "Control de Rxn". Los estados posibles del analizador son tres: "Normal", "Advertencia" y "Error".

Estado	Descripción
	El estado es normal.
	Si se encuentra una advertencia del sistema, el indicador cambia a "Advertencia" en color amarillo. Es preciso acusar recibo de las advertencias, pero puede no ser necesario aplicar acciones de inmediato. Haga clic en el estado para ver los detalles de la advertencia.
	Si se encuentra un error del sistema, el indicador cambia a "Error" en color rojo. Los errores requieren una acción inmediata. Haga clic en el estado para ver los detalles de la advertencia.

Consulte en el *manual de instrucciones de Raman RunTime* (BA02180) la lista completa de advertencias y errores del sistema.

6.2.6 Indicador de acciones del analizador

El indicador de acciones del analizador se muestra en la parte inferior derecha de la ventana "Control de Rxn". El indicador muestra la acción actual en curso. Si la acción es específica para un canal, el número del canal afectado parpadea. En caso de emergencia, el botón de parada de color rojo situado en el indicador cancela el proceso de calibración o verificación que se encuentre en curso.



Figura 53. Adquisición de espectros



Figura 54. Pausado o a la espera de una entrada del usuario



Figura 55. Calibración (sonda o interna)



Figura 56. Verificación de la sonda

6.3 Calibración y verificación del analizador Raman Rxn

El control del analizador Raman Rxn a través de Raman data library no permite capturar espectros sin superar las calibraciones internas y de la sonda. Es necesario efectuar todas las calibraciones antes de adquirir los espectros. La verificación es opcional, pero resulta recomendable.

Para obtener las instrucciones completas sobre cómo calibrar o verificar un analizador Raman Rxn o una sonda, consulte las instrucciones del kit de calibración de la sonda en cuestión y el *manual de instrucciones de Raman RunTime* (BA02180).

Para calibrar y verificar el analizador Rxn:

1. En la ventana **Analizador Raman**, haga clic en **Calibración**.
Se abre el cuadro de diálogo "Calibración".
2. Seleccione las opciones de "Calibración interna":
 - **Modo de calibración.** Modo de calibración para la calibración interna ("Auto", "EjeX" o "Todo").
 - **Potencia del láser.** Potencia del láser en mW.
 - Haga clic en **Calibrar** para llevar a cabo una calibración interna.



Figura 57. Cuadro de diálogo "Calibración"

3. Seleccione las opciones del "Informe de calibración":
 - Haga clic en **Visualizar** para ver el fichero de calibración (.pdf).
 - Haga clic en **Guardar** para guardar una copia del fichero de calibración (.pdf).
4. Seleccione las opciones de calibración y verificación de la sonda:
 - **Patrón de verificación.** Muestra de referencia estándar empleada para verificar los resultados de la calibración de la sonda. Si bien este paso no es necesario para capturar un espectro de Raman, se recomienda encarecidamente.
 - Haga clic en **Calibrar** bajo un canal; para ello, abra la ventana de calibración. Siga las instrucciones de calibración y haga clic en **Cargar** para seleccionar un fichero de referencia de intensidad con el fin de usarlo para la calibración de la sonda. Haga clic en **Guardar** para guardar una copia del fichero de referencia de intensidad seleccionado.

Actualmente, la interfaz de control del analizador Rxn a través de Raman data library no es compatible con el uso del kit de calibración y verificación Raman con un fichero de fuente espectral basado en un patrón de referencia de calibración (CRS).

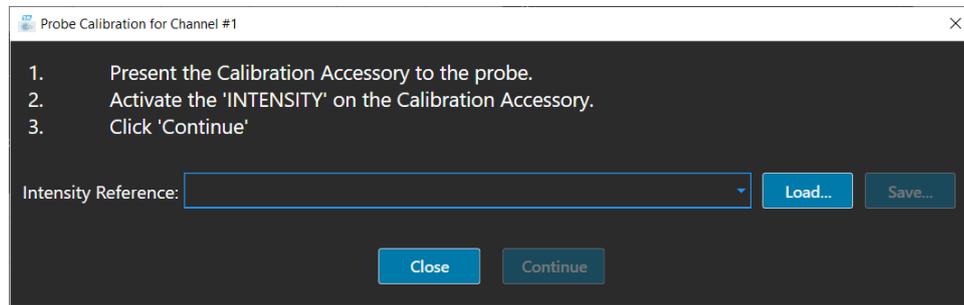


Figura 58. Ventana "Calibración de sonda", HCA

- Haga clic en **Continuar** para iniciar la calibración de la sonda. Una vez completada la calibración de la sonda, la fecha/hora de calibración se actualiza.
 - Haga clic en **Verificar** para verificar los resultados de la calibración de la sonda.
5. Repita los pasos anteriores para cada analizador y para cada sonda.
 6. Una vez completadas la calibración y la verificación, cierre el cuadro de diálogo de calibración.

7 Cumplimiento de la norma FDA 21 CFR, parte 11

La versión cGxP de Raman data library cuenta con funciones adicionales relativas al cumplimiento de la norma FDA 21 CFR, parte 11. Estas funciones son compatibles con la implementación centralizada de los requisitos definidos en la norma 21 CFR, parte 11, lo que hace posible una configuración de proceso regulada. La versión cGxP de Raman data library es compatible con:

- Gestión de usuarios
- Registros electrónicos y firmas electrónicas
- Administración de los ajustes del sistema
- Seguimiento de auditoría (función de control de cambios)
- Registros de eventos que incluyen la trazabilidad de las acciones del usuario y la trazabilidad de los datos espectrales

A modo de ayuda para las implementaciones de Raman data library cGxP según la norma 21 CFR, parte 11, Endress+Hauser ha publicado un documento específico, "Cuestionario sobre Raman data library y la norma 21 CFR, parte 11" (ref. 4005768), que se entrega junto con la versión cGxP de Raman data library.

7.1 Gestión de usuarios

En la norma 21 CFR, parte 11, la gestión de usuarios forma parte del conjunto de controles y procedimientos que garantizan un acceso seguro y regulado a los registros electrónicos y a las firmas electrónicas. Una de las diferencias principales entre la versión básica de Raman data library y la versión cGxP radica en la gestión de los usuarios. A este respecto, la versión cGxP de Raman data library tiene integrado un sistema de gestión de los usuarios cuya autenticación de credenciales puede ser de naturaleza local, es decir, por medio del propio software, a través del inicio de sesión en una estación de trabajo Windows local o mediante la vinculación a un dominio Active Directory.

El uso de un modo de autenticación local es compatible con la obligatoriedad de que las contraseñas presenten un nivel determinado de complejidad, así como con el bloqueo tras un número definido de intentos de inicio de sesión fallidos y con la desconexión automática tras un cierto tiempo de espera. Si se utiliza la autenticación de credenciales basada en dominio, todos estos aspectos (excepto la desconexión del software tras un tiempo de espera) son gobernados en su lugar por el dominio.

El despliegue de la identificación única de los usuarios y del control de acceso es de tipo nativo. Los permisos de acceso de los usuarios se pueden configurar con unos roles de usuario definidos y controlados. También se dispone de la capacidad de deshabilitar cuentas y de forzar un cambio de contraseña en el siguiente inicio de sesión. Cuenta con seguimiento de auditoría específico de usuario en forma de registros de eventos.

La gestión de los usuarios dentro de Raman data library está implementada de manera que ayuda a garantizar que los registros electrónicos sean seguros, que el acceso esté controlado y que todas las acciones de los usuarios tengan trazabilidad, lo que contribuye a la fiabilidad y la integridad de los datos en industrias reguladas.

Para conocer los detalles relativos a la gestión de los usuarios, véase *Gestión de usuarios (solo versión cGxP)* → .

7.2 Registros electrónicos y firmas electrónicas

Los registros electrónicos y las firmas electrónicas son componentes fundamentales de la norma 21 CFR, parte 11, que establece los criterios para considerarlos fidedignos, fiables y equivalentes a los registros en papel y a las firmas manuscritas. En Raman data library, las firmas electrónicas están vinculadas a los usuarios individuales y sus credenciales, lo que las convierte en vinculantes legalmente y no repudiables.

Para ayudar a las plantas con la implementación de Raman data library de conformidad con la norma 21 CFR, parte 11, y específicamente en lo relativo a los registros electrónicos y las firmas electrónicas, Endress+Hauser ha publicado un documento específico, "Evaluación de Raman data library según la norma 21 CFR, parte 11, ER/ES" (ref. 4005770), que se entrega junto con la variante cGxP del software.

7.3 Administración de los ajustes del sistema

Los ajustes del sistema en Raman data library forman parte de los aspectos de seguridad que desempeñan un papel crítico para ayudar a cumplir la norma 21 CFR, parte 11. Los ajustes del sistema se gestionan en la ventana

"Seguridad". Para conocer los detalles relativos a la gestión de los ajustes de seguridad, consulte "Ajustes de seguridad" (solo versión cGxP) → .

7.4 Seguimiento de auditoría mediante la función de control de cambios

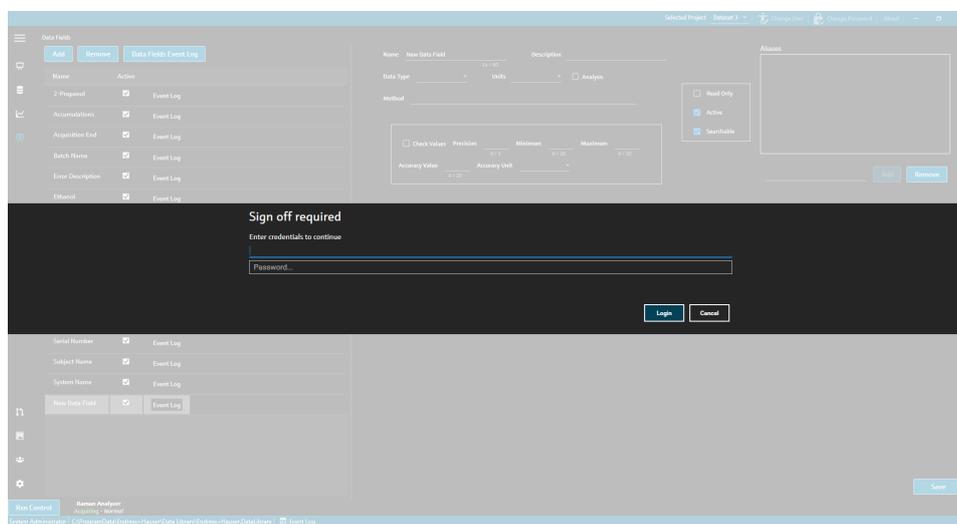
El seguimiento de auditoría es un componente crítico del cumplimiento de la norma 21 CFR, parte 11, pues asegura que todo cambio efectuado en los registros electrónicos, en los sistemas o en los procesos sea gestionado y documentado de manera apropiada.

En la versión cGxP de Raman data library se ha implementado una función de control de cambios vinculada a la gestión de usuarios. De este modo se asegura que todas las modificaciones queden documentadas, incluido el motivo del cambio, la fecha y la hora y la persona responsable de llevar a cabo y aprobar la modificación. El seguimiento de auditoría de los cambios es rastreado y documentado en los diversos registros de eventos disponibles. Además, la función de control de cambios asegura que únicamente las personas que cuenten con la autorización apropiada puedan efectuar actualizaciones o modificaciones.

Ciertas acciones, como eliminar conjuntos de datos o anular su aprobación, así como añadir, editar o eliminar campos de datos, o bien eliminar proyectos o fuentes espectrales, exigen que el usuario apruebe la acción antes de que esta se pueda implementar. En algunos casos se solicita al usuario que dé su aprobación con sus credenciales y seleccione un motivo para el cambio; también se ofrece un espacio para que añada posibles comentarios relacionados.

Los motivos predeterminados disponibles para el control de cambios son:

- Error en la captura
- Desactivar
- Error en entrada
- Ajuste inicial
- Otros



A0056145

Figura 59. Control de cambios; se requiere la firma del usuario

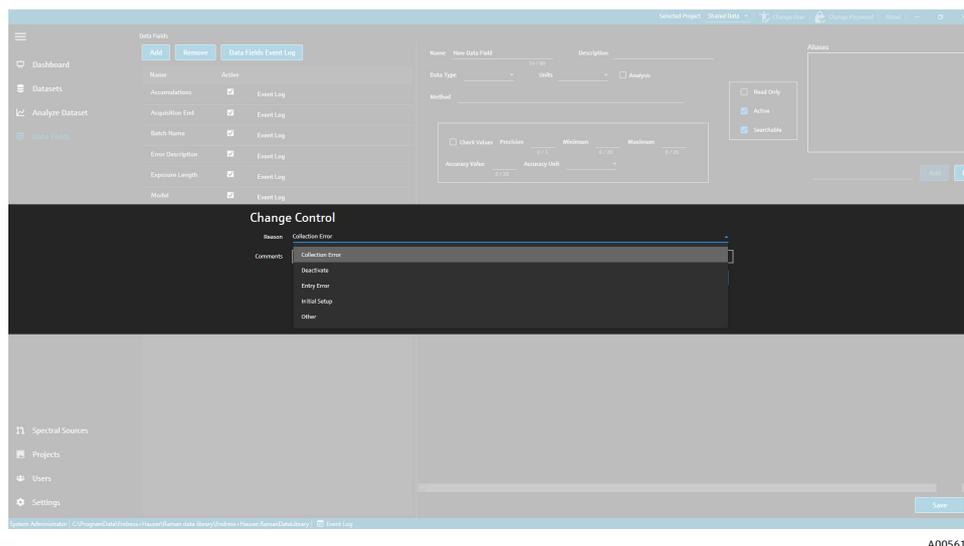


Figura 60. Control de cambios; descripción del cambio y motivo

Estas medidas de control de cambios ayudan a mantener la integridad, la fiabilidad y el cumplimiento de los registros electrónicos y los sistemas y resultan de ayuda en los procesos de aprobación y auditoría por parte del equipo de calidad.

7.5 Cómo trabajar con registros de eventos

A fin de asegurar la trazabilidad y el registro de todos los eventos en un entorno cGxP, Raman data library cuenta con registros de eventos que incluyen un seguimiento de auditoría básico. Estos van desde los registros de eventos globales (todas las acciones) hasta los específicos de usuario o de función. Los registros de eventos y los seguimientos de auditoría son componentes esenciales del cumplimiento de la norma 21 CFR, parte 11, que aseguran la integridad y la trazabilidad de los registros electrónicos.

Los diferentes tipos de registros de eventos en los que un usuario puede visualizar eventos en Raman data library son los siguientes:

- **Registro de eventos global.** Este registro de eventos es accesible desde todas las ventanas de Raman data library y se encuentra en la barra de tareas de la parte inferior de la ventana de la aplicación.
- **Registros de eventos de usuarios.** Muestra eventos para todos los usuarios o para un usuario específico. Se accede desde la pantalla "Usuarios".
- **Registros de eventos de proyectos y de conjuntos de datos.** Muestra eventos para todos los proyectos o para un proyecto específico, así como una lista de eventos relacionados con un conjunto de datos. Estos registros son accesibles desde la pantalla "Proyectos" y desde la pantalla de resumen del conjunto de datos.
- **Registros de eventos de fuentes espectrales.** Muestra el registro de eventos para fuentes espectrales específicas o para todas las fuentes espectrales.
- **Registros de eventos de campos de datos.** Muestra el registro de eventos para un campo de datos específico o para todos los campos de datos.

Los registros de eventos se pueden visualizar e imprimir en un formato de documento fácilmente visible, no modificable y exclusivo. Es compatible con la búsqueda de texto dentro del registro. El registro de eventos actual se debe cerrar antes de abrir otro registro de eventos. Para fines de visualización exclusivamente, los registros de eventos también se pueden guardar como ficheros *.pdf, *.xlsx y *.docx.

7.5.1 Registro de eventos global

El registro de eventos global muestra todos los eventos de una implementación de Raman data library. Debido al volumen de información registrada, el registro de eventos global puede necesitar un cierto tiempo para cargarse.

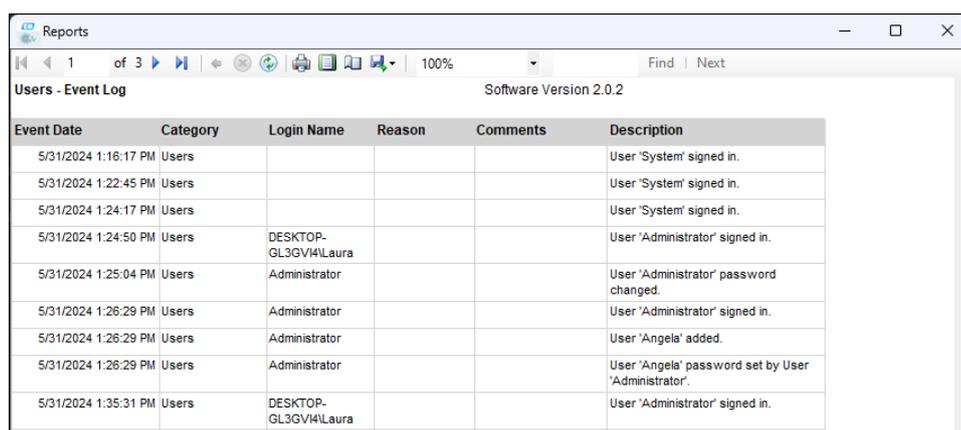


Figura 61. Botón del registro de eventos global

7.5.2 Registro de eventos de usuarios

En la ventana "Usuarios" puede visualizar registros de eventos que contienen listas de los eventos relacionados con un usuario específico o con todos los usuarios. Este registro recoge todas las modificaciones relativas a los usuarios, incluida la adición o eliminación de usuarios, la adición o eliminación de roles determinados para un usuario, los inicios de sesión de los usuarios y los intentos de inicio de sesión fallidos. En la ventana "Usuarios" puede seleccionar los registros de eventos siguientes:

- **Registro de eventos de usuarios.** Muestra el registro de eventos de todos los usuarios.
- **Registro de eventos.** Muestra el registro de eventos del usuario especificado.



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-GL3GVH4\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-GL3GVH4\Laura			User 'Administrator' signed in.

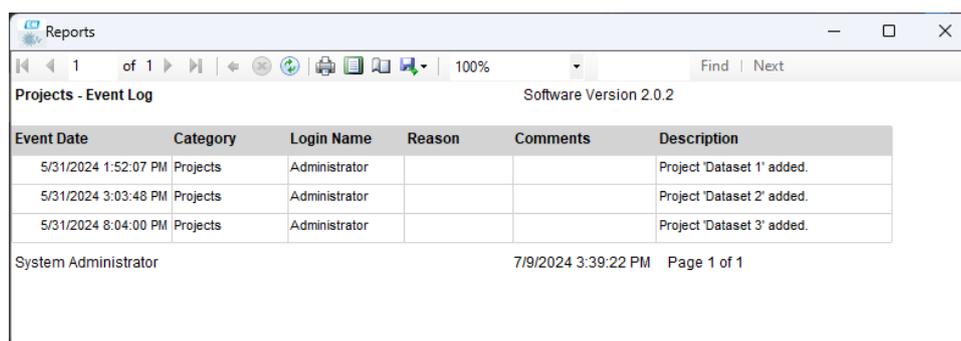
A0056147

Figura 62. Registro de eventos de usuarios

7.5.3 Registros de eventos de proyectos y de conjuntos de datos

En la ventana "Proyecto" puede visualizar registros de eventos que contienen listas de los eventos relacionados con un proyecto específico, como la adición o eliminación de conjuntos de datos. En la ventana "Proyectos" puede seleccionar los elementos siguientes:

- **Registro de eventos de proyectos.** Muestra un registro de eventos para todos los proyectos.
- **Registro de eventos.** Muestra el registro de eventos para un proyecto específico.



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

Figura 63. Registros de eventos de proyectos

7.5.4 Registros de eventos de fuentes espectrales

En la ventana "Fuentes espectrales" puede visualizar registros de eventos que contienen listas de los eventos relacionados con una fuente espectral específica o con todas ellas. En este registro se plasman todos los cambios efectuados en las fuentes espectrales, como añadir nuevas fuentes espectrales, iniciar o detener la adquisición en un analizador Raman Rxn o modificar los ajustes de captura por lotes en la ventana "Analizador Raman". En la ventana "Fuentes espectrales" se pueden seleccionar los elementos siguientes:

- **Registro de eventos de fuentes espectrales.** Muestra un registro de eventos para todas las fuentes espectrales.
- **Registro de eventos.** Muestra el registro de eventos para una fuente espectral específica.

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-GL3GV4\Laura			The laser power was set to 400 on analyzer 'Raman Analyzer'.
5/31/2024 1:50:49 PM	Spectral Sources	Administrator			Spectral Source 'Runtime 6.5' updated. Differences: 'EncryptedPassword' changed.
5/31/2024 2:26:04 PM	Rxn Control	DESKTOP-GL3GV4\Laura			The laser power was set to 400 on analyzer 'Raman Analyzer'.
5/31/2024 3:03:06 PM	Spectral Sources	Administrator			Spectral Source 'Bioreactor 1-2' added.
6/3/2024 5:16:42 PM	Rxn Control	DESKTOP-GL3GV4\Laura			The laser power was set to 400 on analyzer 'Raman Analyzer'.
6/3/2024 5:48:49 PM	Rxn Control	DESKTOP-GL3GV4\Laura			The laser power was set to 400 on analyzer 'Raman Analyzer'.
6/3/2024 5:54:17 PM	Rxn Control	DESKTOP-GL3GV4\Laura			The laser power was set to 400 on analyzer 'Raman Analyzer'.
6/3/2024 7:16:22 PM	Spectral Sources	Administrator			Spectral Source 'Runtime 6.5' updated. Differences: 'EncryptedPassword' changed.
6/6/2024 6:42:46 PM	Rxn Control	DESKTOP-GL3GV4\Laura			The laser power was set to 400 on analyzer 'Raman Analyzer'.

Figura 64. Registro de eventos de fuentes espectrales

7.5.5 Registros de eventos de campos de datos

En la ventana "Campos de datos" puede visualizar registros de eventos que contienen listas de las acciones relacionadas con un campo de datos específico o con todos ellos. Este registro recoge todas las modificaciones relativas a los campos de datos, incluida la adición de nuevos campos, su eliminación o la adición de alias. En la ventana "Campos de datos" se pueden seleccionar los elementos siguientes:

- **Registro de eventos de campos de datos.** Muestra un registro de eventos para todos los campos de datos.
- **Registro de eventos.** Muestra el registro de eventos para un campo de datos específico.

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.

Figura 65. Registro de eventos de campos de datos

8 Diagnóstico y localización y resolución de fallos

8.1 Reinicio o apagado del analizador

Para reiniciar o apagar el analizador:

1. En la ventana **Analizador Raman**, haga clic en **Opciones**.
Aparece el cuadro de diálogo "Opciones del analizador".

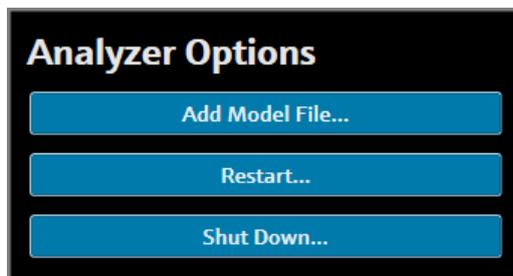


Figura 66. Opciones del analizador

2. Elija una de las siguientes:
 - Haga clic en **Reiniciar** para reiniciar el analizador.
 - Haga clic en **Apagar** para apagar el analizador.
3. Haga clic en **Aceptar** en el cuadro de diálogo de confirmación.

Después de apagar o reiniciar un analizador Raman RunTime, reinicie el servicio de Windows para conectar Raman data library a RunTime. Para reiniciar el servicio de Windows, use el gestor de servicio de bandeja para detener y luego arrancar el servicio **Endress+Hauser Raman data library** o bien reinicie el ordenador de Raman data library.

8.2 No se están capturando espectros

Si los espectros se adquieren usando la ventana "Analizador Raman" pero no se añaden a un juego de datos, es indicativo de que el servicio de Windows se ha desconectado del analizador de Raman RunTime y es necesario restablecer la conexión.

El servicio de Windows se puede desconectar del analizador de Raman RunTime por varios motivos, entre otros:

- El analizador se apaga durante periodos prolongados
- Modificación de los ajustes de red en el software Raman RunTime
- Modificación de los ajustes de red en el ordenador que ejecuta Raman data library.

Para restablecer la conexión del servicio de Windows, use el gestor de servicio de bandeja para detener y luego arrancar el servicio **Endress+Hauser Raman data library** o bien reinicie el ordenador de Raman data library.

9 Apoyo

9.1 Acerca de

Haga clic en **Acerca de**, situado en la cinta superior, para abrir la ventana "Acerca de Raman data library". Esta ventana muestra la versión del software, el número de versión, la ID de instalación y la información de propiedad intelectual.

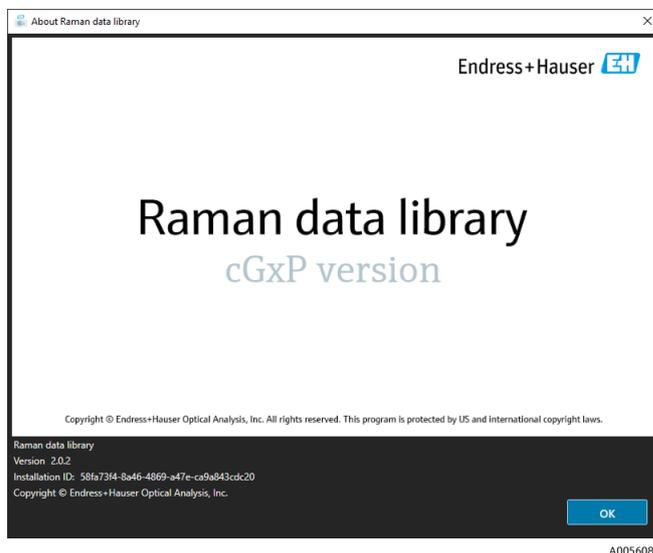


Figura 67. Ventana "Acerca de"

9.2 Información de contacto

Para ponerse en contacto con el servicio técnico, consulte la lista de canales de ventas locales de su zona en nuestro sitio web (<https://endress.com/contact>).

10 Información de copyright

10.1 Contrato de licencia de usuario final

EN EL PRESENTE DOCUMENTO SE INCLUYE UNA COPIA DEL CONTRATO DE LICENCIA DE USUARIO FINAL PARA EL SOFTWARE *Raman data library* PARA FINES DE REFERENCIA.

LEA CON DETENIMIENTO ESTE CONTRATO DE LICENCIA DE USUARIO FINAL ANTES DE INSTALAR O USAR EL SOFTWARE.

HACER CLIC EN EL BOTÓN "ACEPTAR", INSTALAR EL PRODUCTO O USAR LOS EQUIPOS QUE CONTENGAN ESTE PRODUCTO CONSTITUYEN LA ACEPTACIÓN DE LOS TÉRMINOS DE ESTE CONTRATO. SI NO ACEPTA TODOS LOS TÉRMINOS DE ESTE CONTRATO, HAGA CLIC EN EL BOTÓN "NO ACEPTAR" Y EL PROCESO DE INSTALACIÓN NO SEGUIRÁ ADELANTE.

Este contrato de licencia de usuario final tiene lugar entre usted, el usuario final del software *Raman data library* (el "licenciario"), y Endress+Hauser Optical Analysis, Inc. (el "licenciante" o "Endress+Hauser"), una corporación de Delaware que tiene su sede empresarial principal en 371 Parkland Plaza, Ann Arbor, Michigan 48103 (EE. UU.). Con la instalación del software *Raman data library*, usted acepta los términos y condiciones del presente contrato.

1.0. Licencia no exclusiva. El licenciante le otorga a usted una licencia no exclusiva para usar *Raman data library*, que incluye el paquete de programas de ordenador y de datos en formato legible mediante máquina y los manuales de usuario que conjuntamente constituyen el "programa licenciado", siempre y cuando se cumplan los términos y condiciones siguientes, aplicables a todas y cada una de las versiones del programa licenciado que usted instale

2.0. Alcance de los derechos. El licenciario puede:

2.1. Instalar el programa licenciado en un único ordenador con el fin de usarlo para el control de la instrumentación espectrográfica fabricada por Endress+Hauser.

2.2. Usar y ejecutar el programa licenciado en el ordenador definido en 2.1 con el propósito de dar respuesta a las necesidades del usuario final.

2.3. En apoyo del uso autorizado del programa licenciado, guardar las instrucciones o datos legibles mediante máquina del programa licenciado en máquinas asociadas con el ordenador (u ordenadores) especificado, así como transmitir las a través de y mostrarlas en estas. y

2.4. Hacer una copia del programa licenciado en forma de código objeto legible mediante máquina exclusivamente para fines de copia de seguridad no productiva.

3.0. Protección exclusiva y restricciones.

3.1. El programa licenciado tiene derechos de autor. Los derechos de autor son propiedad de Endress+Hauser. El programa licenciado no se vende al licenciario, sino que se otorga a este una licencia de uso. El licenciante no vende al licenciario la titularidad del programa licenciado ni se la transmite.

3.2. Usted no será propietario de ningún derecho, título o interés sobre el programa licenciado ni sobre ninguna de sus modificaciones y mejoras (incluida la propiedad de todos los secretos comerciales y derechos de autor correspondientes).

3.3. Este programa licenciado contiene información confidencial y/o exclusiva que está protegida por derechos de autor y por las disposiciones de tratados internacionales. Todos los derechos están reservados. Prohibido fotocopiar, reproducir o traducir a otro idioma el programa licenciado, ni siquiera parcialmente, sin contar con el permiso por escrito del licenciante. Todo uso, revelación, cesión, transferencia o reproducción no autorizados de esta información confidencial serán perseguidos con todo el peso de la ley.

3.4. Prohibido usar, copiar, modificar o distribuir el programa licenciado (electrónicamente o por otros medios) o cualquier copia, adaptación, transcripción o parte fusionada del mismo, salvo que se cuente con la autorización expresa del licenciante. El licenciario no podrá efectuar operaciones de ensamblaje inverso, compilación inversa o traducción de otro tipo del programa licenciado. Sus derechos no podrán ser transferidos, alquilados, cedidos o sublicenciados, excepto para transferir el programa licenciado en su totalidad a (1) un sucesor del negocio del licenciario en su totalidad que asuma las obligaciones de este contrato o (2) cualquier otra parte que sea razonablemente aceptable para el licenciante, que suscriba una versión sustitutiva de este contrato y que pague una tasa administrativa destinada a cubrir los costes derivados. El licenciario no podrá instalar el programa licenciado en ningún otro sistema de ordenador ni usarlo en ningún otro lugar sin obtener previamente la autorización expresa del licenciante. Si usted usa, copia o modifica el programa licenciado o transfiere la posesión de cualquier copia,

adaptación, transcripción o parte fusionada del programa licenciado a un tercero de una manera que no haya sido autorizada expresamente por el licenciante, su licencia quedará cancelada automáticamente.

3.5. Por la presente usted autoriza al licenciante a entrar en las instalaciones del licenciataro durante el horario comercial habitual con el fin de inspeccionar de manera razonable el programa licenciado para verificar el cumplimiento de los términos del presente contrato por parte del licenciataro.

3.6. Usted reconoce que, en caso de incumplimiento por parte del licenciataro de cualquiera de las disposiciones anteriores, el licenciante no obtendrá un remedio adecuado en forma de dinero o compensación de daños. Por consiguiente, el licenciante tendrá derecho a obtener de inmediato en cuanto lo solicite una medida cautelar contra dicho incumplimiento de cualquier tribunal de jurisdicción competente. El derecho del licenciante a obtener medidas cautelares no limitará su derecho a tomar otras medidas legales.

4.0. Garantía limitada y limitación de la responsabilidad.

4.1. El licenciante se ha encargado de asegurar la precisión y la fiabilidad del programa licenciado en beneficio de usted. Esta garantía está condicionada de forma expresa a su cumplimiento de los procedimientos de manejo, seguridad y control de datos definidos en los materiales incluidos con el programa licenciado.

4.2. En la medida en que no lo prohíba la ley, Endress+Hauser no será responsable en ningún caso de las lesiones personales o daños fortuitos, especiales, indirectos o consecuentes, incluidos sin límites los daños por pérdida de beneficios, pérdida de datos, interrupción del negocio o cualesquiera otros daños comerciales o pérdidas que se deriven de o estén relacionados con el uso que usted haga del software de Endress+Hauser o de su incapacidad para usarlo, sea cual sea la causa, con independencia de la teoría de la responsabilidad que se aplique (contractual, extracontractual o de otro tipo) y aunque se haya notificado a Endress+Hauser la posibilidad de tales daños. Algunas jurisdicciones no permiten limitar la responsabilidad por lesiones personales o por daños incidentales o consecuentes, por lo que es posible que esta limitación no sea aplicable en su caso. La responsabilidad total de Endress+Hauser para con usted por todos los daños no excederá en caso alguno el importe total de todos los derechos de licencia pagados al licenciante en virtud del presente contrato (salvo que lo exija la legislación aplicable en caso de daños personales). Las limitaciones anteriores se aplicarán incluso si el remedio indicado anteriormente no cumple su finalidad esencial.

4.3. El licenciante declina toda responsabilidad por los errores u omisiones que pueda contener el programa licenciado y se reserva el derecho de introducir modificaciones y mejoras sin previo aviso en cualquiera de los productos aquí incluidos por cualquier motivo.

4.4. Salvo lo que se establece expresamente en el presente contrato, el licenciante renuncia a todas y cada una de las promesas, manifestaciones y garantías relativas al programa licenciado, incluido su estado, su conformidad con cualquier manifestación o descripción, posibles negligencias y su comerciabilidad o idoneidad para un uso particular. La información proporcionada con el programa licenciado no pretende ser una representación o garantía relativa al programa licenciado descrito ni debe entenderse como tal.

4.5. La responsabilidad acumulativa del licenciante para con usted por todas las reclamaciones relacionadas con el programa licenciado y el presente contrato, incluida cualquier causa de acción basada en contrato, agravio o responsabilidad estricta, no excederá el importe total de todos los derechos de licencia pagados al licenciante en virtud del presente contrato. Esta limitación de responsabilidad se aplicará con independencia de que otras disposiciones del presente contrato se hayan incumplido o hayan demostrado ser ineficaces. El licenciante no tendrá responsabilidad alguna por la pérdida de datos o documentación, entendiéndose que es responsabilidad del licenciataro la adopción de precauciones razonables en materia de copias de seguridad.

4.6. El programa licenciado se vende "como es" y usted asume todo el riesgo en cuanto a su calidad y prestaciones.

4.7. Ciertas leyes pueden otorgarle a usted derechos adicionales, *p. ej.*, leyes del consumidor que no permitan la exclusión de garantías implícitas o la exclusión o limitación de ciertos daños. Si tales leyes son aplicables, es posible que estas exclusiones y limitaciones no se apliquen en su caso.

5.0. Varios.

5.1. El presente contrato se regirá e interpretará de conformidad con las leyes del Estado de Michigan (Estados Unidos de América), pero excluyendo específicamente las normas de elección de ley del Estado de Michigan.

5.2. Ninguna modificación del presente contrato será vinculante a menos que se plasme por escrito y esté firmada por un representante autorizado de la parte contra la cual se solicita la ejecución de la modificación.

5.3. Toda notificación que el presente contrato requiera o permita se efectuará por escrito y se entregará en persona o se enviará por correo certificado con acuse de recibo y franqueo pagado.

5.4. En caso de que alguno de los términos del presente contrato sea o llegue a ser declarado inválido o nulo por cualquier juzgado o tribunal de una jurisdicción competente, dicho término o términos serán nulos y se considerarán eliminados del presente contrato, mientras que todos los términos restantes seguirán plenamente en vigor y conservarán todo su efecto.

5.5. EL PRESENTE CONTRATO CONSTITUYE LA DECLARACIÓN COMPLETA Y EXCLUSIVA DE LAS OBLIGACIONES Y RESPONSABILIDADES DEL LICENCIANTE PARA CON EL LICENCIATARIO Y SUSTITUYE A CUALQUIER OTRA PROPUESTA, DECLARACIÓN O COMUNICACIÓN DE OTRO TIPO RELATIVA AL OBJETO DEL PRESENTE CONTRATO EFECTUADA POR EL LICENCIANTE O EN SU NOMBRE.

6.0 Documentación.

Este documento está destinado al uso por parte de los empleados y representantes autorizados de Endress+Hauser Optical Analysis, Inc. Ninguna parte de este documento puede ser reproducida o transmitida de ninguna forma o por ningún medio, electrónico o mecánico, incluidas las fotocopias, grabaciones o sistemas de almacenamiento y recuperación de información, para ningún propósito que no sea el uso personal por parte del comprador, sin el permiso expreso por escrito de of Endress+Hauser Optical Analysis, Inc. Según la ley, la copia incluye la traducción a otro idioma.

La información contenida en este documento se considera exacta en el momento de su redacción. Endress+Hauser Optical Analysis, Inc. se reserva el derecho de modificar la información que contiene sin previo aviso.

www.addresses.endress.com
