

Instruções de operação para usuários Raman Data Library 2.0



Sumário

1 Sobre este documento.....	3
1.1 Função do documento	3
1.2 Símbolos de segurança.....	3
1.3 Segurança.....	3
1.4 Glossário	3
1.5 Documentação	5
1.6 Marcas registradas	5
2 Descrição do produto	6
2.1 Instalação	6
2.2 Configurações de segurança (somente na versão cGxP)	7
2.3 Gestão de usuários (somente na versão cGxP)	8
3 Operação do software	12
3.1 Login (somente na versão cGxP)	12
3.2 Modos online e offline	12
3.3 Interface do usuário	12
4 Adicionar dados ao Raman data library	16
4.1 Projects	16
4.2 Fontes espectrais	17
4.3 Conjuntos de dados	20
4.4 Campos de dados	23
5 Análise de conjuntos de dados.....	25
5.1 Visualização de conjuntos de dados	25
5.2 Uso de pré-tratamentos.....	32
5.3 Picos e regiões	36
5.4 Criação de telas no painel: grades, tendências, espectros e gráficos 3D	40
5.5 Resumo	46
6 Controle de analisadores Raman Rxn.....	49
6.1 Opções do analisador	49
6.2 Controle de canais.....	50
6.3 Calibração e verificação do analisador Raman Rxn.....	53
7 Conformidade FDA 21 CFR Parte 11.	55
7.1 Gestão de usuários	55
7.2 Registros eletrônicos e assinaturas eletrônicas.....	55
7.3 Gestão das configurações do sistema.....	55
7.4 Trilha de auditoria através da função de controle de alterações.....	56
7.5 Trabalho com registros de eventos	57
8 Diagnóstico e localização de falhas..	60
8.1 Reiniciar ou desligar o analisador	60
8.2 Os espectros não estão sendo coletados	60
9 Suporte.....	61
9.1 Sobre	61
9.2 Informações de contato	61
10 Informações de Copyright	62
10.1 Contrato de licença do usuário final.....	62

1 Sobre este documento

1.1 Função do documento

Este documento fornece instruções relacionadas a tarefas gerais do usuário para a biblioteca de dados Raman, incluindo navegação, explicação de campos, manipulação de dados, entre outros. Para instruções administrativas, incluindo instalação, gestão do banco de dados, gestão de usuários e segurança, consulte as *Instruções de operação para administradores do Raman data library* (BA02349C).

1.2 Símbolos de segurança

Estrutura das informações	Significado
<p>⚠ AVISO</p> <p>Causas (/consequências) Se necessário, consequências de não-conformidade (se aplicável) ▶ Ação corretiva</p>	Este símbolo te alerta para uma situação perigosa. Se esta situação perigosa não for evitada, podem ocorrer ferimentos sérios ou fatais.
<p>⚠ ATENÇÃO</p> <p>Causas (/consequências) Se necessário, consequências de não-conformidade (se aplicável) ▶ Ação corretiva</p>	Este símbolo te alerta para uma situação perigosa. Se essa situação não for evitada, podem ocorrer ferimentos de menor grau ou mais graves.
<p>ℹ NOTA</p> <p>Causa/situação Se necessário, consequências de não-conformidade (se aplicável) ▶ Ação/observação</p>	Este símbolo alerta quanto a situações que podem resultar em dano à propriedade.

1.3 Segurança

Para informações sobre a operação segura dos analisadores Raman Rxn e do software Raman RunTime, consulte as *Instruções de Operação do Raman RunTime v6.5* (BA02180C). Recomenda-se que as *Instruções de operação do Raman RunTime v6.4* (ou mais recente) sejam lidas na íntegra antes de usar o Raman Data Library.

1.3.1 Segurança de TI

As medidas de segurança de TI, que fornecem proteção adicional para o equipamento e transferência de dados associada, devem ser implementadas pelos operadores de acordo com suas normas de segurança.

1.4 Glossário

Termo	Descrição
Analisador Raman Rxn4	Um sistema integrado de espectroscopia projetado para acomodar sondas de fibra óptica para fins de análise de amostras.
Análise de dados	Qualquer processo de trabalho com o objetivo de obter informações úteis a partir dos dados brutos fornecidos pelo espectrômetro.
Assinatura eletrônica	Autorização do registro eletrônico por um indivíduo na forma de confirmação digital que é legalmente vinculativa e equivalente à assinatura manuscrita do indivíduo.
BCA	Background Correction Accuracy - Precisão da correção de fundo
°C	Graus Celsius
CFL	O novo formato de arquivo CFL definido na "Especificação de formato de dados. universal da Galactic Industries Corp.", datada de 4 de setembro de 1997

Termo	Descrição
Cfm	Cubic feet per minute - pés cúbicos por minuto
CFR	Code of federal regulation - Código de regulamentação federal
cGMP	Current good manufacturing practices - Boas práticas de fabricação atuais
cGxP	Current good clinical, laboratory, and/or manufacturing practices - Boas práticas clínicas, laboratoriais e/ou de
CMMS	Computerized maintenance management system - Sistema de gestão de manutenção computadorizado: um banco de dados baseado em computador que contém todas as ordens de serviço de manutenção e é utilizado para programar atividades.
COTS	Configurable off-the-shelf - Configurável pronto para uso
CTQ	Critical to quality - Crítico para a qualidade
Dados gráficos	Dados-chave, informações e atributos que podem ser representados em um formato gráfico.
Filtro Savitzky-Golay	Um filtro digital que pode ser aplicado a um conjunto de pontos de dados digitais com a finalidade de suavizar os dados, ou seja, aumentar a precisão dos dados sem distorcer a tendência do sinal.
GAML	Generalized analytical markup language - Linguagem de marcação analítica generalizada
GCC	Global change control - Controle global de mudanças
GDP	Good documentation practices - Boas práticas de documentação
GHz	Gigahertz
Hz	Hertz
IAPP	Information asset protection policy - Política de proteção de ativos de informações
In Situ	Em seu local original
IQ	Qualificação da instalação
LAN	Local Area Network - rede de área local
Nm	nanômetros
OQ	Qualificação da operação
OS	Sistema operacional
PAT	Process analytical technology - tecnologia analítica de processos
PC	Computador pessoal
ppb	Partes por bilhão
ppm	Partes por milhão
psig	Libras por polegada quadrada manométricas
QC	Controle de qualidade
RAM	Memória de acesso aleatório
Registro eletrônico	Qualquer combinação de registros representados em formato digital que sejam criados, modificados, mantidos, arquivados, recuperados ou distribuídos por um sistema de computador e usados para uma atividade regulamentada de cGxP.
Relatório final	Um documento que resume todos os resultados derivados da execução de um documento de validação.
Requisitos cruciais	Um requisito que, se não for atendido, tem um impacto adverso em algum dos requisitos de agências reguladoras, na integridade dos dados ou na segurança.
Requisitos não cruciais	Um requisito que, se não for atendido, não tem um impacto adverso em algum dos requisitos de agências reguladoras, na integridade dos dados ou na segurança.
Senha	O código exclusivo e privado inserido pelo usuário para fins de identificação.
SPC	Formato de arquivo definido pelo desenvolvedor.

Termo	Descrição
Spectra	Os dados brutos do espectrômetro Raman após o processamento no formato SPC (GRAMS).
Trilha de auditoria	Registro independente, gerado por computador, de alterações em registros eletrônicos, indicando horário, operador, ação, conteúdo e, se necessário, motivo.
UPS	Uninterruptable power supply - Fonte de alimentação ininterrupta
URS	User requirements specification - Especificação dos requisitos do usuário
Usuário autorizado	Usuário final que concluiu o treinamento necessário e recebeu acesso à aplicação.

1.5 Documentação

Toda a documentação está disponível:

- No dispositivo de mídia fornecido (não incluído no escopo de entrega para todas as versões do equipamento)
- No aplicativo para celular da Endress+Hauser: www.endress.com/supporting-tools
- Na área de Downloads do site da Endress+Hauser: www.endress.com/downloads

Esse documento é uma parte integrante do pacote de documentos, o qual inclui:

Código da peça	Tipo de documento	Descrição
BA02349C	Instruções de operação para administradores do Raman Data Library	Uma visão geral completa das operações relacionadas à gestão da segurança e do banco de dados do Raman Data Library.
KA01717C	Resumo das instruções de operação do Raman Data Library	Um guia de início rápido para operação do Raman Data Library após a instalação.
TI01802C	Informações técnicas do Raman Data Library	Auxílio ao planejamento do seu sistema de análise de dados. O documento contém todos os dados técnicos para o software.

1.6 Marcas registradas

SIMCA®

Marca registrada da Sartorius Stedim Biotech.

GRAMS IQ™

Marca registrada da Thermo Fisher Scientific.

2 Descrição do produto

O Raman Data Library da Endress+Hauser é um software projetado para organizar, visualizar, analisar e gerar relatórios sobre dados espectrais Raman Rxn. O Raman Data Library complementa o Raman RunTime integrado no Raman Rxn da Endress+Hauser, fornecendo armazenamento, organização e análise de espectros e coleta de dados de múltiplos analisadores do laboratório para o cGxP.

O Raman Data Library foi criado para usuários que precisam visualizar espectros Raman, associá-los a dados de referência e criar modelos de pico univariados. Com esse software, os dados preparados podem ser exportados para modelagem multivariada externa.

Recursos do Raman Data Library:

- **Organização de dados.** Combina espectros com valores de referência, prepara de dados antes da modelagem quimiométrica, oferece a função de pesquisa no armazenamento de dados e garante a integridade dos dados.
- **Análise de dados.** Oferece visualização aprimorada de espectros e análise simples, como tendências de pico e modelagem univariada.
- **Opção cGxP.** Atende às normas da indústria para rastreabilidade, armazenamento e arquivamento de dados espectrais.

O Raman Data Library armazena dados espectrais em um banco de dados SQLite integrado seguro, realiza cálculos nos dados espectrais e exibe dados espectrais e seus metadados associados em relatórios e na tela. Essa funcionalidade permite que os espectros Raman atuem como dados de referência para o desenvolvimento de métodos Raman quantitativos e atendam às necessidades da FDA 21 CFR Parte 11 como parte de uma solução analítica validada.

O Raman Data Library pode ser implementado para estar em conformidade com a 21 CFR Parte 11 quando instalado com o instalador cGxP Setup e qualificada via IQ/OQ com a Endress+Hauser, e PQ com o cliente. Quando instalado no modo cGxP, o programa facilita a coleta, armazenamento e organização dos espectros Raman, de modo que os espectros possam:

- Atuar como conjunto de dados de calibração para o desenvolvimento de modelos Raman quantitativos como parte de uma solução analítica validada, ou
- Atuar como entrada de dados em modelos validados usados para previsões de propriedades de processos ou amostras

2.1 Instalação

O Raman Data Library foi projetado para ser instalado em uma estação de trabalho autônoma. O Raman Data Library contém funcionalidades para exportar dados de cada instância da aplicação e importar os dados para um local centralizado. Consulte as instruções de instalação nas *Instruções de operação para administradores do Raman data library* (BA02349C).

2.2 Configurações de segurança (somente na versão cGxP)

Em ambientes cGxP, o Raman Data Library utiliza a autenticação de usuário para garantir a rastreabilidade e registro de todos os eventos. Nos ambientes centrais do Raman Data Library, o gerenciamento e autenticação de usuários não são utilizados.

Na janela Settings, você pode modificar as configurações de segurança do sistema. Para fazer alterações nas configurações de segurança do sistema, você deve estar logado com a função System Settings Manager.

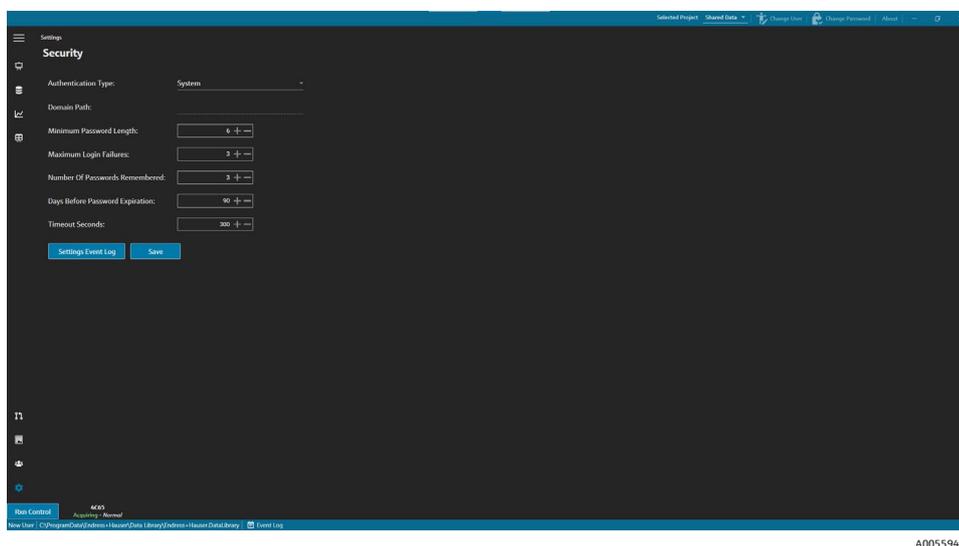


Figura 1. Janela Security

A partir da janela Settings, você pode selecionar:

- **Authentication type.** O tipo de autenticação para a aplicação. O usuário pode escolher entre os modos de autenticação System, Domain e Local.
- **Domain path.** (Somente autenticação tipo Domain) O caminho do domínio.
- **Minimum password length.** Número mínimo de caracteres para a senha do usuário. O número mínimo de caracteres permitido é 6.
- **Maximum login failures.** O número permitido de tentativas de login malsucedidas antes que uma conta de usuário seja bloqueada.
- **Number of passwords remembered.** O número de novas senhas únicas que devem ser associadas a uma conta de usuário antes que uma senha antiga possa ser reutilizada.
- **Days before password expiration.** O período de tempo (em dias) que uma senha pode ser usada antes que o sistema exija que o usuário a altere. Você pode definir que as senhas expirem após um determinado número de dias ou pode especificar que as senhas nunca expirem ao definir o número de dias como 0.
- **Timeout seconds.** O período de tempo (em segundos) de inatividade permitido antes que ocorra um timeout do sistema. Após um timeout do sistema, os usuários precisam inserir novamente as credenciais para continuar ou sair do programa. Se Timeout Seconds for definido como 0, o timeout do sistema será desativado. O valor máximo de tempo limite configurável é de 3600 segundos (60 minutos).

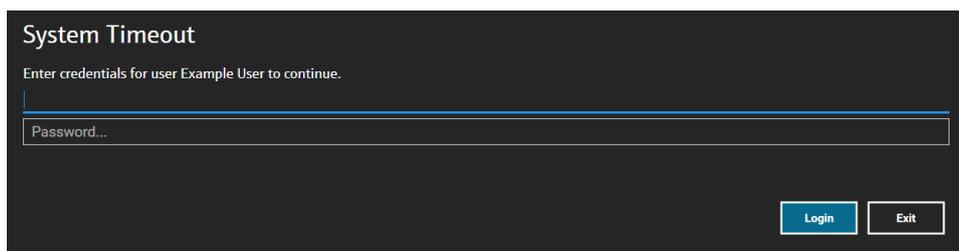


Figura 2. Tempo limite do sistema

- **Save.** Salva as configurações de segurança do sistema.
- **Settings event log.** Exibe o registro de eventos das configurações.

2.3 Gestão de usuários (somente na versão cGxP)

Em ambientes cGxP, o Raman Data Library autentica usuários para garantir a rastreabilidade e registro de todos os eventos. A versão básica do Raman Data Library não oferece gerenciamento e autenticação de usuários.

A janela Users permite que os administradores adicionem, atualizem e excluam contas de usuários. Ela também permite que administradores visualizem eventos de um usuário específico ou todos os eventos de todos os usuários. Para gerenciar usuários, você deve estar logado em uma conta com a função Users Manager.

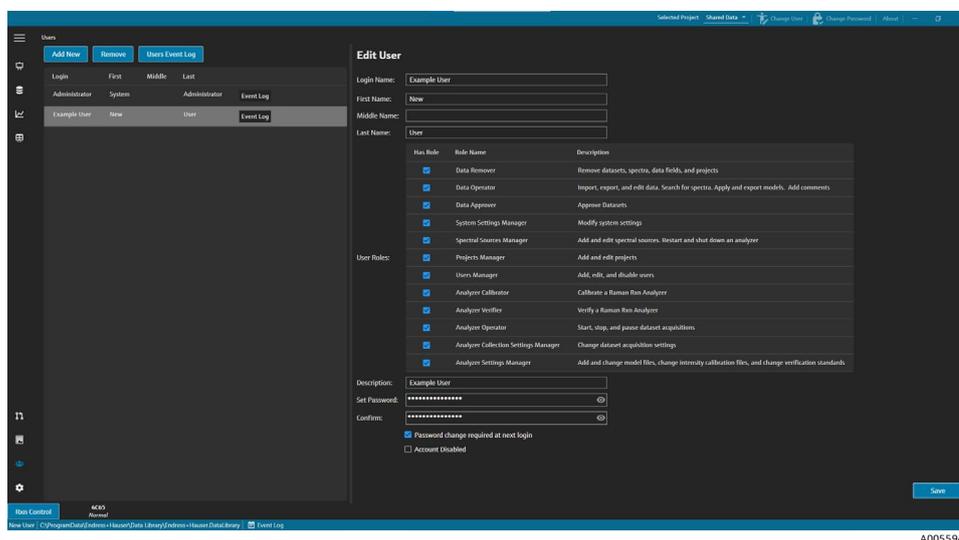


Figura 3. Janela Users

A partir da janela Users, você pode selecionar:

- **Add New.** Cria um novo usuário.
- **Remove.** Remove o usuário selecionado. A função Data Remover é necessária para remover um usuário.
- **Users Event Log.** Exibe o registro de eventos para todos os usuários.
- **Event Log.** Exibe o registro de eventos para o usuário especificado.

2.3.1 Funções do usuário

Na funcionalidade de funções de usuário, um administrador de usuários pode criar usuários com privilégios que seguem a estrutura organizacional determinada pelo cliente. Dessa forma, não há grupos de usuários fixos. Em vez disso, há diversas opções para estruturar os privilégios através da atribuição de uma combinação de funções de usuário.

As funções de usuário podem ser utilizadas para limitar a funcionalidade do usuário. Qualquer combinação de funções pode ser atribuída a um determinado usuário, desde todas as funções até nenhuma função.

Função	Ações permitidas
Data Remover	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Remover conjuntos de dados ▪ Remover espectros ▪ Remover campos de dados ▪ Remover projetos
Data Operator	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Importar, exportar e editar dados ▪ Pesquisar espectros ▪ Aplicar e exportar modelos ▪ Adicionar comentários
Data Approver	Aprovar conjuntos de dados
System Settings Manager	Modificar as configurações do sistema
Spectral Sources Manager	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Adicionar e editar fontes espectrais ▪ Reiniciar e desligar um analisador

Função	Ações permitidas
Projects Manager	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Adicionar projetos ▪ Editar projetos
Users Manager	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Adicionar usuários ▪ Editar usuários ▪ Desativar usuários
Analyzer Calibrator	Calibrar um analisador Raman Rxn
Analyzer Verifier	Verificar um analisador Raman Rxn
Analyzer Operator	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Iniciar aquisições de conjuntos de dados ▪ Parar aquisições de conjuntos de dados ▪ Pausar aquisições de conjuntos de dados
Analyzer Collection Settings Manager	Alterar as configurações de aquisição do conjunto de dados
Analyzer Settings Manager	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Adicionar e alterar arquivos de modelo ▪ Alterar arquivos de calibração de intensidade ▪ Alterar padrões de verificação

As funções de usuário podem ser restritas a um conjunto de privilégios ou combinadas em conjuntos relacionados às responsabilidades da função de usuário. A tabela a seguir apresenta exemplos de conjuntos de funções que podem ser atribuídos a usuários, supervisores e administradores.

Nível do usuário	Funções aplicadas
Usuário	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Data Operator ▪ Spectral Sources Manager ▪ Analyzer Calibrator ▪ Analyzer Verifier ▪ Analyzer Operator ▪ Analyzer Collection Settings Manager ▪ Analyzer Settings Manager
Supervisor	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Data Remover ▪ Data Approver ▪ System Settings Manager ▪ Projects Manager
Administrador	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Users Manager

2.3.2 Criar um novo usuário

Para criar um novo usuário

1. Na janela User, clique em **Add New**.

Crie novas contas de usuário do Raman Data Library para todos os novos usuários do sistema. Embora o Raman Data Library possa renomear usuários, use essa funcionalidade apenas para atualizar o nome de um usuário devido a uma mudança de nome. Não renomeie uma conta de usuário para transferir essa conta para outra pessoa.

Um novo painel Edit User é exibido.

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 Rm Analyzer
<input checked="" type="checkbox"/>	Analyzer Verifier	Verify a Raman Rm 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. Painel Edit User

2. Insira as propriedades do usuário:
 - **Login name.** O nome usado para fazer login no sistema. Cada nome de login deve ser único e ter de 1 a 100 caracteres.
 - **First name.** Primeiro nome do usuário. Ele pode ter de 0 a 100 caracteres de comprimento.
 - **Middle name.** Nome do meio do usuário. Ele pode ter de 0 a 100 caracteres de comprimento.
 - **Last name.** Sobrenome do usuário. Ele pode ter de 0 a 100 caracteres de comprimento.
 - **User roles.** As funções concedidas aos usuários no Raman Data Library. As funções de usuário podem ser adicionadas ou removidas marcando ou desmarcando a caixa de seleção **Include** para cada função. Consulte *Funções do usuário* →
 - **Description.** Uma descrição do usuário.
3. Insira uma senha válida nas caixas **Set Password** e **Confirm Password**.
As senhas devem atender aos seguintes requisitos mínimos:
 - Deve conter pelo menos um caractere especial
 - Deve conter uma combinação de letras maiúsculas e minúsculas
 - Deve atender ao comprimento mínimo da senha, definido na janela Settings
4. (Opcional) Selecione **Password change required at next login** (alteração de senha exigida no próximo login) ao adicionar um novo usuário.
5. Clique em **Save**.

2.3.3 Desativar um usuário

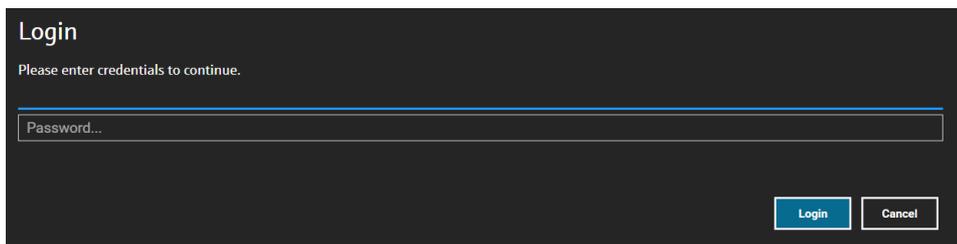
As contas de usuário inativas do Raman Data Library podem ser desativadas, mas sempre devem ser mantidas no Raman Data Library para fins de histórico e trilha de auditoria. Um usuário desativado não pode fazer login.

Para desativar um usuário

1. Na janela Users, selecione a conta de usuário a ser desativada.
2. Selecione **Account Disabled**.
3. Clique em **Save**.

2.3.4 Alterando o usuário

Clique em **Change User** na faixa de opções superior para trocar para um usuário diferente. As credenciais do usuário devem ser inseridas corretamente para mudar para um usuário diferente.



A0055965

Figura 5. Login do usuário

2.3.5 Alteração da senha

Clique em **Change Password** na faixa de opções superior para alterar a senha do usuário atual. O programa exige que o usuário digite a senha antiga, a nova senha e então confirme a nova senha.

As senhas devem atender aos requisitos mínimos. Uma senha deve conter pelo menos um caractere especial, uma mistura de letras maiúsculas e minúsculas e atender ao comprimento mínimo da senha, que é definido na janela Settings.



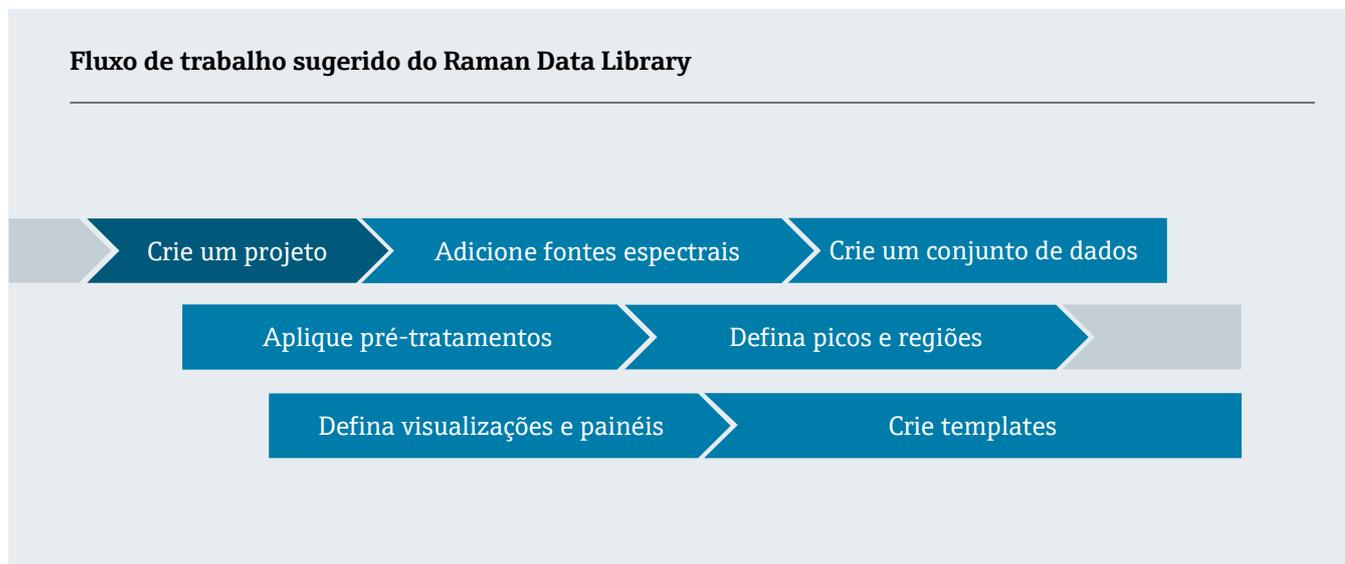
A0055966

Figura 6. Caixa de diálogo Change Password

Esse item de menu não está disponível se o modo de autenticação estiver definido como Local Windows ou Domain. Com esses modos de autenticação, as alterações de senha são controladas pelo servidor de autenticação selecionado.

3 Operação do software

O Raman Data Library tem recursos e funções que podem ajudar a criar um fluxo de trabalho para análise de dados espectrais. Um fluxo de trabalho sugerido é mostrado abaixo. Depois de concluir uma parte do fluxo de trabalho, como a importação de dados ou a aplicação de pré-tratamentos, o software abre a próxima etapa do processamento dos dados.



Este manual foi elaborado para seguir esse fluxo de trabalho, desde a adição de dados ao Raman data library até a criação de projetos, uso de pré-tratamentos e análise de dados.

Depois de instalar o Raman data library, você deve se familiarizar com a interface do software para desenvolver um fluxo de trabalho de análise de dados que atenda às suas necessidades. Consulte o *Resumo das instruções de operação do Raman Data Library (KA01717C)* para instruções de início rápido.

3.1 Login (somente na versão cGxP)

Na versão cGxP do Raman data library, é necessário fazer login para abrir o programa.

O nome de login e a senha são campos obrigatórios. O nome de login não diferencia maiúsculas de minúsculas. Por exemplo, o nome de login "Jane" é equivalente ao nome "jane"

Como medida de segurança, se um usuário fizer um número configurável de tentativas malsucedidas de login, ele será automaticamente bloqueado. É preciso entrar em contato com um administrador para reativar um usuário bloqueado.

3.2 Modos online e offline

O Raman Data Library pode ser utilizado com dois modos diferentes:

- **Online.** Os dados em tempo real de um analisador Raman são transmitidos para o software de modelagem, oferecendo uma análise de composição em tempo real.
- **Offline.** Os conjuntos de dados são importados e podem ser analisados independentemente dos processos em tempo real. No modo offline, você também pode criar templates a partir de analitos conhecidos, criando templates de modelos e conjuntos de dados para usar e comparar com dados em tempo real.

O uso desses dois modos permite que você compreenda e atue sobre os espectros Raman coletados em ambientes de processo em tempo real.

3.3 Interface do usuário

Ao iniciar o Raman Data Library pela primeira vez, um painel em branco é exibido com ícones de menu do lado esquerdo. O menu à esquerda pode ser expandido. O Raman Data Library abre com um painel em branco até que um conjunto de dados seja carregado e as visualizações sejam configuradas.

Para garantir a experiência esperada da interface do usuário no Raman Data Library, configure a escala de exibição do Windows para 100%.

3.3.1 Menus

Menu principal

O menu principal no lado esquerdo do Raman Data Library permite a navegação entre as funções do software.

Item de menu	Navegação
 A0055967	Expand/collapse. Exibir ou ocultar os itens de menu.
 A0055968	Dashboard. Criar e gerenciar painéis de usuários.
 A0055969	Datasets. Criar e gerenciar conjuntos de dados.
 A0055970	Analyze Dataset. Analisar o conjunto de dados ativo. Habilitado somente quando há um conjunto de dados ativo. Esse item contém cinco abas: <ul style="list-style-type: none"> ▪ Dados ▪ Pré-tratamento ▪ Picos/Regiões ▪ Telas ▪ Resumo
 A0055971	Data Fields. Criar e gerenciar campos de dados.
 A0055972	Spectral sources. Criar e gerenciar fontes espectrais (OPC/SPC).
 A0055973	Projects. Criar e gerenciar projetos.
 A0055974	Users. Criar e gerenciar usuários. Este recurso está disponível somente na versão cGxP do Raman Data Library.
 A0055975	Settings. Gerenciar as configurações do sistema. Este recurso está disponível somente na versão cGxP do Raman Data Library.

Faixa de opções

A parte superior do Raman Data Library contém uma faixa de opções. A partir da faixa de opções, você pode:

- **Selecionar um projeto.** A lista Selected Project na barra de menu superior permite que você navegue entre os projetos. Para informações sobre projetos, consulte *Projetos* → .
- **Alterar o usuário (somente na versão cGxP).** Ao clicar na ferramenta "Change user", é possível trocar para um usuário diferente e manter o programa em execução. Para descrições sobre como alterar usuários e senhas, consulte *Gestão de usuários (somente na versão cGxP)*.
- **Alterar a senha (somente na versão cGxP).** Ao clicar na ferramenta "Change password", você pode alterar sua senha.
- **About.** Clicar nessa ferramenta exibe a versão do software, número da versão, ID de instalação e informações de direitos autorais.



Figura 7. Faixa de opções

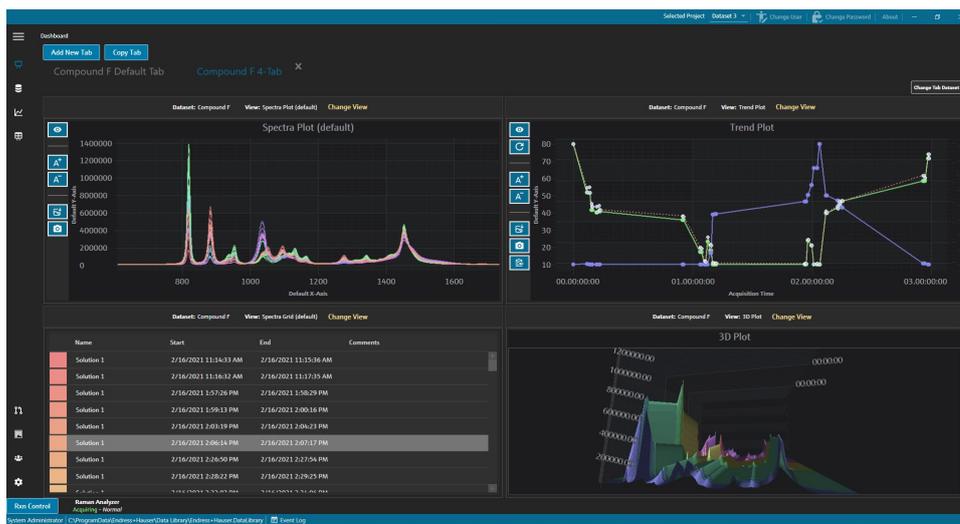
3.3.2 Painel da biblioteca de dados

O painel (dashboard) é a tela principal para a análise de rotina. Ele exibe abas que podem ser configuradas para mostrar gráficos de conjuntos de dados salvos. Uma aba do painel pode conter telas de mais de um conjunto de dados. Um ou mais conjuntos de dados devem ser definidos para exibir as telas no painel.

Para usar o painel, você deve primeiro seguir uma configuração inicial apresentada no início deste capítulo e descrita em *Adicionar dados ao Raman data library* →  e *Análise de conjuntos de dados* → . Você também pode consultar o *Resumo das instruções de operação do Raman Data Library (KA01717C)* para um guia de início rápido.

Quando o Raman data library é iniciado, as abas do painel da sessão anterior são carregadas. Se nenhum painel anterior tiver sido definido, como durante o primeiro uso do software, o painel estará em branco. As abas do painel salvas anteriormente podem ser recarregadas clicando em **Launch Dashboard** na aba Summary da janela Analyze Dataset. As abas do painel são salvas automaticamente quando o Raman data library é fechado.

Quando o painel é configurado e iniciado para um novo conjunto de dados, ele fornece duas exibições padrão: a grade de espectros e o gráfico de espectros. As telas adicionais para um conjunto de dados são definidas dentro da análise do conjunto de dados, na aba **Views**. Consulte *Criação de telas no painel: grades, tendências, espectros e gráficos 3D* →  para mais detalhes sobre como definir as telas.



A0055976

Figura 8. Aba do painel com 4 telas

No painel, você pode:

- **Add New Tab.** Adiciona um novo painel. Ao adicionar uma nova aba ao painel, você será solicitado a selecionar o número de telas (1 a 4). Uma aba do painel pode conter telas de mais de um conjunto de dados.
- **Copy Tab.** Cria uma nova cópia da aba atual do painel.
- **Change View.** Altera a exibição do conjunto de dados, permitindo que o usuário selecione um gráfico ou grade diferente.
- **Change Tab Dataset.** Seleciona um conjunto de dados e remove todas as telas de uma aba do painel. O conjunto de dados selecionado é carregado para que as visualizações de seus gráficos possam ser rapidamente adicionadas à aba.
- **X.** Fecha uma aba do painel.

Criar um novo painel

Esse procedimento exige que você tenha adicionado fontes espectrais, criado um conjunto de dados a partir dessas fontes e aberto um painel inicial na janela Analyze Dataset. Consulte *Adicionar dados ao Raman data library* →  e *Análise de conjuntos de dados* →  para instruções.

1. No Dashboard, clique em **Add New Tab**.
A lista Add New Tab exibe uma seleção do número de telas no novo painel.
2. Na lista **Add New Tab**, selecione o número de telas que o novo painel exibe (1 a 4).
Quando um novo painel é criado, nenhuma tela de gráficos ou grades é exibida.

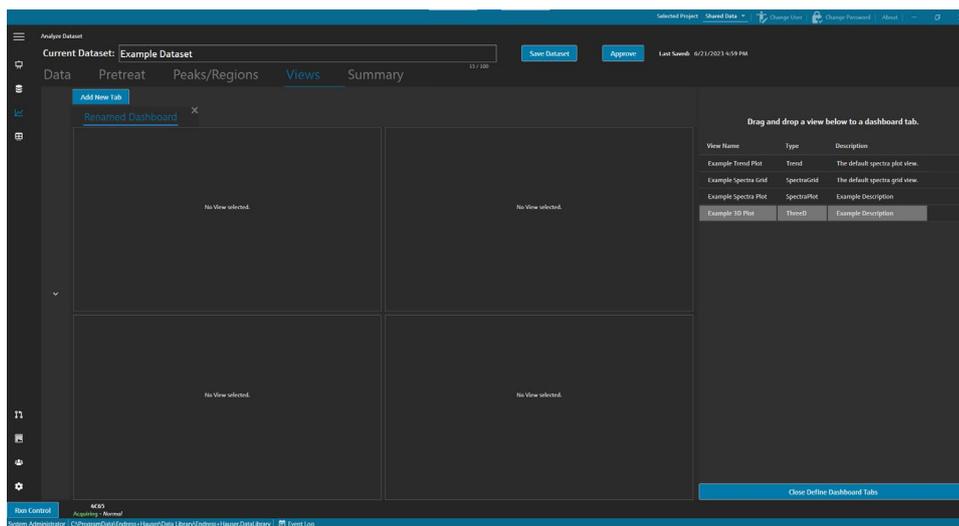


Figura 9. Aba vazia no painel

Para criar uma visualização que mostre mais do que as telas padrão Spectra Plot e Spectra Grid, você precisa adicionar telas na janela Analyze Dataset.

3. Configure as telas seguindo as instruções em *Criação de telas no painel: grades, tendências, espectros e gráficos 3D* → . Retorne para o painel (dashboard).
4. Na nova aba do painel, clique em **Change View**.
A caixa de diálogo Change View é exibida.
5. Selecione a fonte do conjunto de dados e, em seguida, selecione a tela. Clique em **Change View**.

A nova tela é exibida no painel. Para renomear um painel, clique duas vezes no nome da aba do painel.

Para salvar um painel, você deve defini-lo e salvá-lo na aba Views. Consulte *Criação de telas no painel: grades, tendências, espectros e gráficos 3D* → para mais informações.

4 Adicionar dados ao Raman data library

Este capítulo fornece instruções sobre a criação de fluxos de dados, fontes espectrais e importação de arquivos SPC para conjuntos de dados. A inclusão de dados ao Raman data library pode ser automática ou manual. O fornecimento automático de dados é configurado na janela Spectral sources. As importações manuais de arquivos SPC são feitas por meio da janela Datasets.

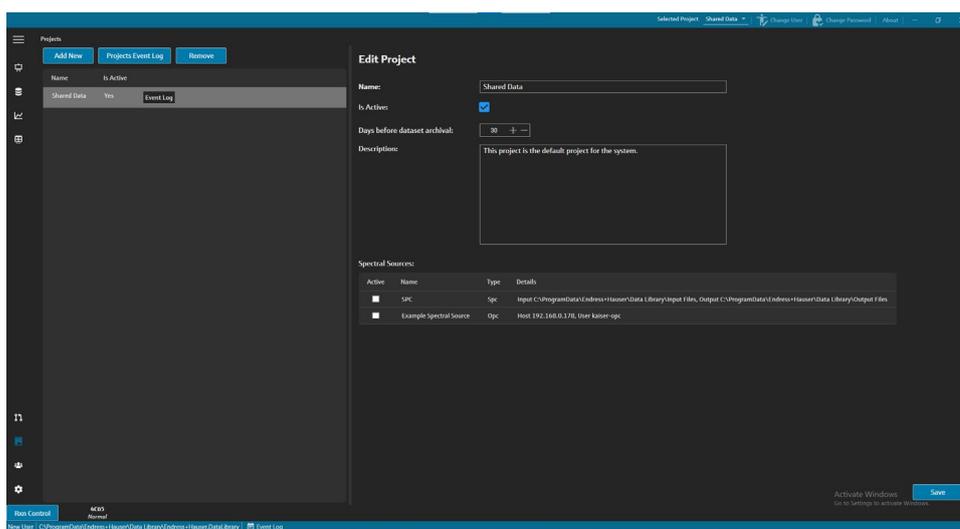
Há 3 maneiras de trazer os espectros Raman para o Raman data library:

- Importar manualmente as pastas que contêm arquivos SPC
- Importação automática de arquivos SPC a partir de uma pasta monitorada
- Importação automática de uma conexão OPC para o Raman RunTime

4.1 Projects

Os projetos contêm e organizam dados. Para importar dados para o Raman data library, você deve primeiro criar um projeto para conter os dados. Na janela Projects, você pode:

- **Add New.** Adicionar um novo projeto.
- **Projects Event Log.** (somente versão cGxP) Exibir um registro de eventos para todos os projetos.
- **Event Log.** (somente versão cGxP) Exibir o registro de eventos de um projeto específico.
- **Remove.** Remover o projeto selecionado. Na versão cGxP do Raman data library, a função Data Remove é necessária para remover um projeto.
- **Save.** Salvar um projeto selecionado.



A0055978

Figura 10. Janela Projects

4.1.1 Adicionar um novo projeto

Para adicionar um projeto

1. Na janela Projects , clique em **Add New**.
O painel Edit Project é exibido.
2. Insira as seguintes informações:
 - **Name.** Nome do projeto.
 - **Is Active.** Se o projeto está ativo ou não. Se a caixa de seleção Is Active estiver desmarcada, o projeto não aparecerá na lista Selected Project na barra de menu.
 - **Days before dataset archival.** O número de dias antes que os conjuntos de dados sejam automaticamente arquivados e fiquem ocultos na janela Datasets. Os conjuntos de dados arquivados podem ser visualizados na janela Datasets se a caixa de seleção Show Archived Datasets for marcada.

- **Description.** Descrição do projeto.
- **Spectral sources.** Determina quais fontes espectrais estão ativas para o projeto selecionado. Espectros, campos de dados e conjuntos de dados criados em um projeto não podem ser visualizados em outro projeto. No entanto, com projetos de dados compartilhados, os dados armazenados em um projeto podem ser compartilhados com outros projetos. Isso é útil para armazenar espectros de referência ou campos de dados comuns para que eles possam ser facilmente incluídos em múltiplos projetos. Para criar um projeto de dados compartilhados, selecione na lista todas as fontes de dados que se aplicam ao projeto.

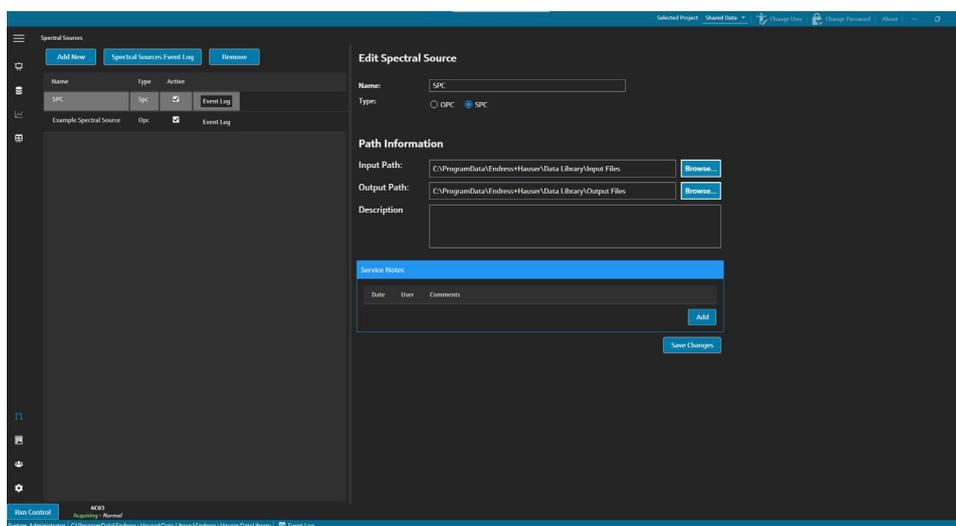
3. Clique em **Save**.

4.2 Fontes espectrais

Fontes espectrais são fontes de dados espectrais. Uma fonte espectral pode ser uma pasta de entrada observada contendo arquivos espectroscópicos (.spc) ou espectros transferidos em tempo real por meio de uma conexão OPC com um analisador Raman Rxn. Na versão cGxP do Raman Data Library, a função Spectral Sources Manager é necessária para adicionar ou efetuar alterações às fontes espectrais.

Na janela Spectral Sources, você pode selecionar:

- **Add New.** Crie uma nova fonte espectral.
- **Spectral Sources Event Log.** Visualize o registro de eventos de todas as fontes espectrais.
- **Event Log.** Visualize o registro de eventos para uma fonte espectral específica.
- **Remove.** Remova a fonte espectral selecionada. Na versão cGxP do Raman data library, a função Data Remover é necessária para remover uma fonte espectral.
- **Name.** O nome de exibição da fonte espectral.
- **Type.** O tipo da fonte espectral, OPC ou SPC.



A0055979

Figura 11. Janela de fontes espectrais

4.2.1 Adicionar uma fonte espectral OPC

Uma fonte espectral OPC pode ser criada para permitir que o Raman Data Library faça uma conexão de cliente de automação unificada (UA) OPC com um servidor OPC do Raman RunTime. A conexão OPC permite que os usuários visualizem, controlem e coletem espectros de sistemas analisadores Raman Rxn da Endress+Hauser. Múltiplos analisadores Raman (até 4) podem ser conectados ao Raman Data Library.

O Raman RunTime v6.4, no mínimo, é necessário para uma conexão OPC entre o Raman Data Library e o Raman RunTime. Os analisadores Raman Rxn que executam versões do Raman RunTime inferiores à v6.4 podem usar uma fonte espectral SPC, conforme descrito em [Adicionar uma fonte espectral SPC](#) →

Quando uma fonte espectral OPC for usada, desative o recurso de suspensão do computador nas configurações do Windows.

Para adicionar uma fonte espectral OPC

1. Na janela Spectral sources, clique em **Add New**.
O painel Edit Spectral source é exibido.

Edit Spectral Source

Name:

Type: OPC SPC

Connection Settings

Host Name:

Username:

Password:

Description:

Status: Active

Service Notes

Date	User	Comments
------	------	----------

A0055980

Figura 12. Editar fonte espectral OPC

2. Insira um nome para a fonte espectral.
3. Selecione **OPC**.
4. Insira as seguintes informações para configuração da conexão:
 - **Host Name.** O nome do host do servidor OPC do Raman RunTime.
 - **Username.** O nome de usuário usado para criar a conexão OPC com o servidor OPC do Raman RunTime. O nome de usuário padrão é **kaiser-opc**.
 - **Password.** A senha usada para criar a conexão OPC com o servidor OPC do Raman RunTime. A senha padrão é **opc**.
 - **Description.** Uma descrição opcional da fonte espectral OPC.
 - **Status.** Um status da fonte espectral OPC: Active ou Inactive.
 - **Service Notes.** Comentários da equipe de serviço ou do usuário sobre a fonte espectral OPC. Clique em **Add** para adicionar uma nova nota de serviço.
5. Clique em **Test Connection** para verificar a conexão com o servidor OPC do Raman RunTime.

Para garantir uma conexão bem-sucedida:

- Realize um teste de conexão antes de salvar uma fonte espectral OPC.
 - Se a conexão de teste não for bem-sucedida, certifique-se de que o analisador Raman está ligado, disponível e conectado à rede, e se as portas de rede definidas na *configuração de rede do Raman Rxn2 e Raman Rxn4 nas Instruções de Operação do Raman RunTime (BA02180C)* estão configuradas conforme necessário.
 - Uma conexão malsucedida pode ocorrer simplesmente porque a resolução do host name não está configurada corretamente em sua rede local de TI/TO. Entre em contato com seu administrador de TI local.
 - Como alternativa às credenciais OPC padrão, também é possível usar as credenciais de uma das contas de usuário configuradas no analisador Raman RunTime para autenticar a conexão OPC do analisador.
6. Clique em **Save Changes**.

Se a conexão for bem-sucedida, uma mensagem é exibida e a barra de ferramentas Rxn Control aparece na faixa de opções inferior, mostrando o nome da fonte espectral atribuída e seu status.

4.2.2 Adicionar uma fonte espectral SPC

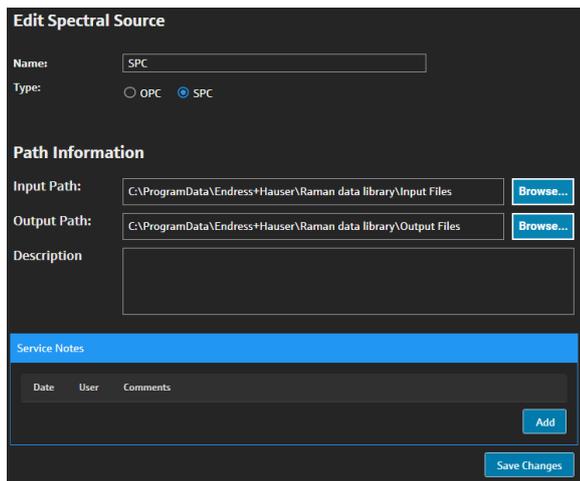
O recurso de fonte espectral SPC importa automaticamente os espectros dos analisadores Raman Rxn que executam versões do Raman RunTime inferiores à v6.4. Isso também permite o uso do Raman data library com as soluções de software Raman legadas da Endress+Hauser. Adicionar uma fonte espectral SPC permite que o Raman Data Library leia e armazene automaticamente arquivos .spc no banco de dados da biblioteca de dados Raman e os disponibilize para conjuntos de dados.

A fonte espectral SPC requer um caminho de entrada, no qual o Raman Data Library procura por novos arquivos e os importa, e um caminho de saída, para o qual o Raman Data Library move os arquivos SPC depois de importados.

Consulte *Exportação da rede de arquivos SPC* nas *Instruções de Operação do Raman RunTime* (BA02180C) para instruções sobre como exportar arquivos .spc do Raman RunTime.

Para adicionar uma fonte espectral SPC

- No computador do Raman Data Library, crie a(s) pasta(s) .spc:
 - Para versões do Raman RunTime inferiores à v6.4, crie uma pasta chamada **Output spectra**.
 - Para soluções de software legadas, crie duas pastas. Uma com o nome **Input spectra** e a outra **Output spectra**. Os arquivos SPC de soluções de software Raman legadas precisam ser direcionados para a pasta **Input spectra**.
- Clique em **Spectral sources**  e então em **Add New**.
O painel Edit Spectral source é exibido.



A0055981

Figura 13. Editar fonte espectral SPC

- Insira um nome para a fonte espectral.
- Selecione SPC.
- Em **Input Path**:
 - Para versões do Raman RunTime inferiores à v6.4, navegue até a pasta compartilhada DataLibraryBatchExport da rede no caminho `\\nome do computador ou endereço IP\DataLibraryBatchExport`.
 - Para soluções de software legadas, aponte o **Input path** para o diretório de saída do software legado.
- Em **Output Path**, navegue até a pasta de saída de espectros criada na Step 1. Esse é o caminho do diretório usado para a geração de arquivos .spc depois de terem sido lidos no sistema.
- (Opcional) Insira as seguintes informações:
 - Description**. Uma descrição da fonte espectral SPC.
 - Service Notes**. Comentários do usuário sobre a fonte espectral SPC. Clique no botão **Add** para adicionar uma nova nota de serviço.
- Clique em **Save Changes** e em OK no prompt.

Nas versões do Raman RunTime inferiores à v6.4, a pasta DataLibraryBatchExport compartilhada na rede contém subpastas e arquivos .spc adquiridos no analisador Raman. Depois que os arquivos .spc tiverem sido lidos e adicionados à biblioteca de dados Raman, os arquivos serão movidos desse diretório de rede para a pasta Output spectra criada acima. Todos os arquivos .spc são mantidos no analisador Raman. Os arquivos são movidos apenas da pasta DataLibraryBatchExport.

4.3 Conjuntos de dados

A janela Datasets é usada para criar, visualizar, importar, exportar e remover conjuntos de dados. As informações de resumo do conjunto de dados podem ser visualizadas para conjuntos de dados existentes.

No Raman data library, um conjunto de dados contém no mínimo um espectro. Os conjuntos de dados podem ser combinados para análise ou modelagem dentro do software ou para exportação para programas externos. Para analisar espectros usando um conjunto de dados, selecione pelo menos 1 espectro.

Na janela Datasets, você pode selecionar:

- **Create New Dataset.** Exibe o painel **Create Dataset**. Na versão cGxP do Raman data library, você deve ter a função Data Operator para criar novos conjuntos de dados.
- **Analyze.** Abre o conjunto de dados selecionado e exibe o conjunto de dados na janela Analyze.
- **Import Data Library.** Importa um arquivo de conjunto de dados existente (.dlexport).
- **Export.** Exibe o painel Export.
- **Remove.** Remove o conjunto de dados selecionado. Para remover um conjunto de dados, você deve estar logado com a função Data Remover.
- **Show Inactive Datasets.** Exibe os conjuntos de dados que foram marcados como inativos.
- **Show Archived Datasets.** Exibe os conjuntos de dados que foram marcados como arquivados. Os conjuntos de dados são marcados automaticamente como arquivados após um número configurável de dias. "Days before dataset archival" pode ser alterado na janela Projects.

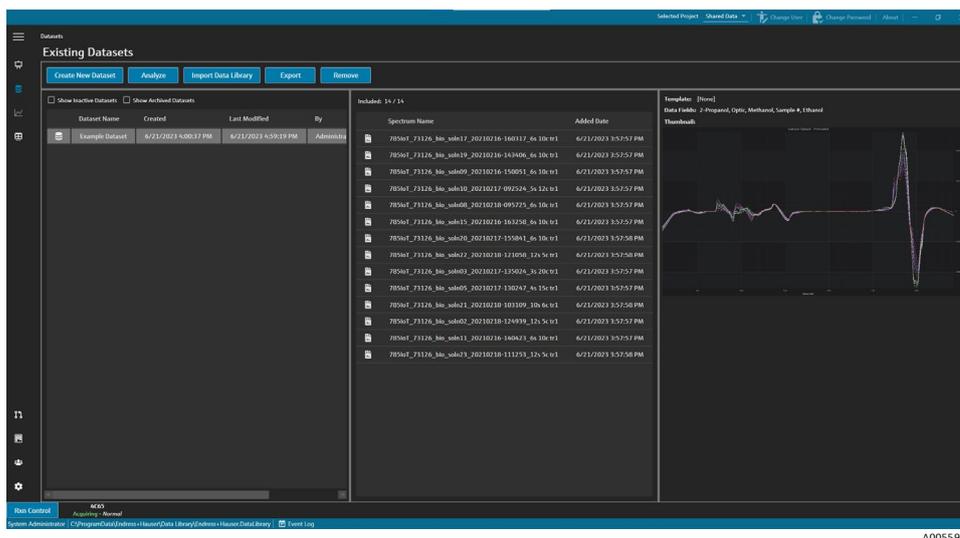


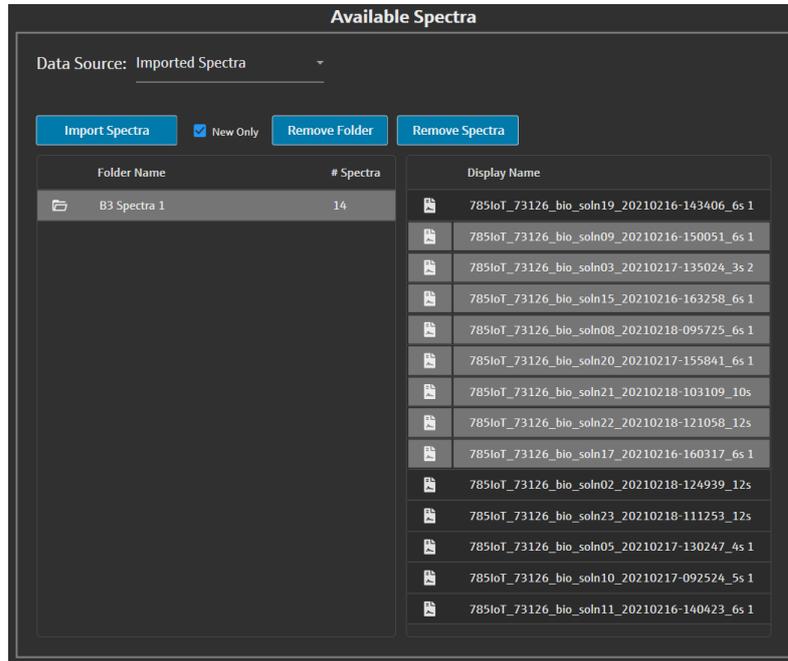
Figura 14. Conjuntos de dados existentes

4.3.1 Criação de um conjunto de dados

Você pode selecionar dados de diversas fontes para selecionar espectros a serem incluídos em um conjunto de dados. Os dados podem ser obtidos de:

- **Imported Spectra.** Essa seleção exibe todas as pastas e espectros disponíveis que foram importados para o Raman data library.
- **Reference Spectra.** Essa seleção exibe todos os espectros marcados como um espectro de referência.
- **Search.** Essa seleção permite que os usuários pesquisem espectros que atendam a critérios definidos. Os critérios de pesquisa podem ser adicionados ou removidos individualmente. Os espectros podem ser buscados por um campo de nome, data de início, data de término ou qualquer valor de dados definido para campos de dados definidos como pesquisáveis.
- **Existing Datasets.** Essa seleção permite que os usuários pesquisem espectros que existem em outro conjunto de dados. Uma exibição resumida do conjunto de dados selecionado é mostrada. Ao clicar em **Include** ►, todos os espectros do conjunto de dados selecionado são incluídos.
- **Pastas.** Essa seleção lista os espectros coletados através de uma conexão OPC com o Raman RunTime, que são armazenados em pastas localizadas no computador do Raman data library.

Depois que os espectros disponíveis forem selecionados, use **Include** ➤ para incluir os espectros selecionados no novo conjunto de dados. Para remover espectros de um novo conjunto de dados, selecione os espectros incluídos e clique em **Remove**.

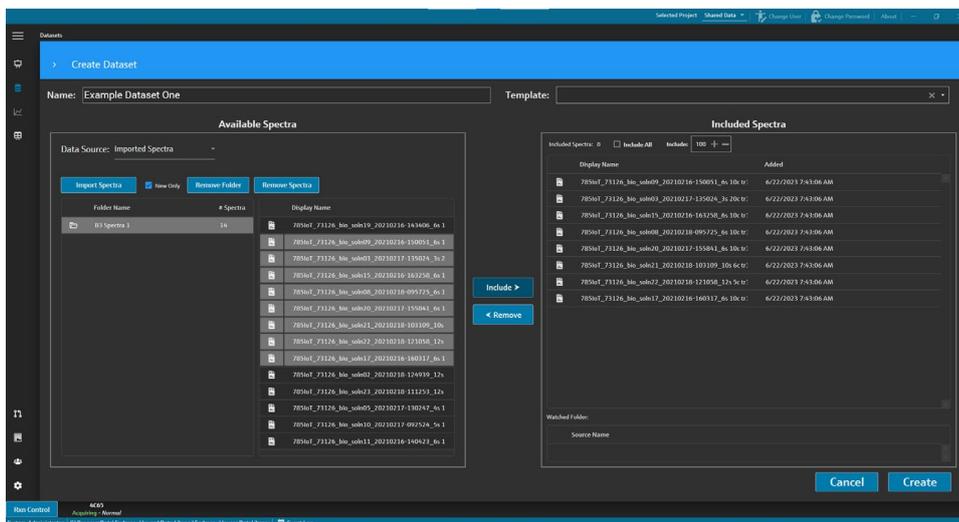


A0055983

Figura 15. Fonte de dados, painel de espectros importados

Para criar um conjunto de dados

1. No menu principal, clique em **Datasets** .
2. Clique em **Create New Dataset**.
A janela Create Dataset é exibida.



A0055984

Figura 16. Janela Create Dataset

3. Insira as seguintes informações na janela Create Dataset:
 - **Name.** Nome do novo conjunto de dados. Os nomes dos conjuntos de dados devem ser únicos e ter um comprimento de 1 a 100 caracteres.
 - **Template.** O modelo a ser usado ao criar o conjunto de dados. Os templates podem ser usados para aplicar automaticamente campos de dados pré-selecionados, pré-tratamentos, picos, regiões, telas e abas do painel a um novo conjunto de dados.

4. Na lista Data Source, selecione:
 - **Import Spectra** para selecionar uma pasta que contenha arquivos de espectros (.spc).
 - **Reference Spectra** para selecionar espectros marcados como um espectro de referência.
 - **Search** para pesquisar espectros que atendam a critérios definidos. Os espectros podem ser buscados por um campo de nome, data de início, data de término ou outros valores de dados.
 - **Existing Datasets** para pesquisar espectros que existem em outro conjunto de dados. Ao clicar em **Include** ►, todos os espectros do conjunto de dados selecionado são incluídos.
 - **Folders** para selecionar espectros coletados através de uma conexão OPC com o Raman RunTime, que são armazenados em pastas localizadas no computador do Raman data library. Os nomes dos arquivos de espectros não são exibidos no navegador de pastas.
5. Na janela **Available Spectra**, selecione os espectros a serem incluídos (**include**) ou clique em **Include All** na janela Included Spectra para importar todos os espectros da pasta.

Os espectros incluídos no novo conjunto de dados são mostrados em **Included Spectra**.
6. Na janela **Included Spectra**, selecione os espectros a serem removidos (**remove**).
 - Selecione **Include All** para incluir todos os espectros da Step 5 ou incluir apenas um subconjunto da seleção, no qual o software seleciona cada segundo ou terceiro espectro.
 - Clique em **Remove Folder** para remover a pasta selecionada e todos os espectros dentro dessa pasta. Na versão cGxP do Raman data library, a função Data Remover é necessária para remover uma pasta.
 - Clique em **Remove Spectra** para remover os espectros selecionados do conjunto de dados. Na versão cGxP do Raman data library, a função Data Remover é necessária para remover espectros.
7. Clique em **Create**.

O fluxo de trabalho do Raman data library cria o novo conjunto de dados e continua conforme o fluxo de trabalho para a janela Analyze.
8. Clique em **Save Dataset**.

4.3.2 Salvar um conjunto de dados

Os conjuntos de dados não são salvos automaticamente no Raman data library, exceto quando a coleta de um conjunto de dados é iniciada dentro do Raman data library. É importante adquirir o hábito de salvar regularmente os conjuntos de dados.

Os conjuntos de dados podem ser salvos através da janela Analyze Dataset. Se o Raman data library for fechado antes de o conjunto de dados ser salvo, todas as alterações serão perdidas.

Para salvar um conjunto de dados

1. No menu principal, clique em **Analyze Dataset** .
2. Clique em **Save Dataset**.

A primeira vez que um conjunto de dados é salvo pode levar alguns minutos. Os salvamentos posteriores são mais rápidos. Depois que um conjunto de dados é salvo, o campo **Last Saved** é atualizado para mostrar a data e a hora do último salvamento.

4.3.3 Aprovação de um conjunto de dados

Os conjuntos de dados aprovados são *somente leitura* e não podem ser modificados. A janela Analyze Dataset permite que você aprove ou revogue a aprovação de um conjunto de dados.

Para aprovar ou revogar a aprovação de um conjunto de dados

- Na janela Analyze Dataset, clique em **Approve** para marcar o conjunto de dados como aprovado.
- Clique em **Unapprove** para revogar a aprovação do conjunto de dados.

4.4 Campos de dados

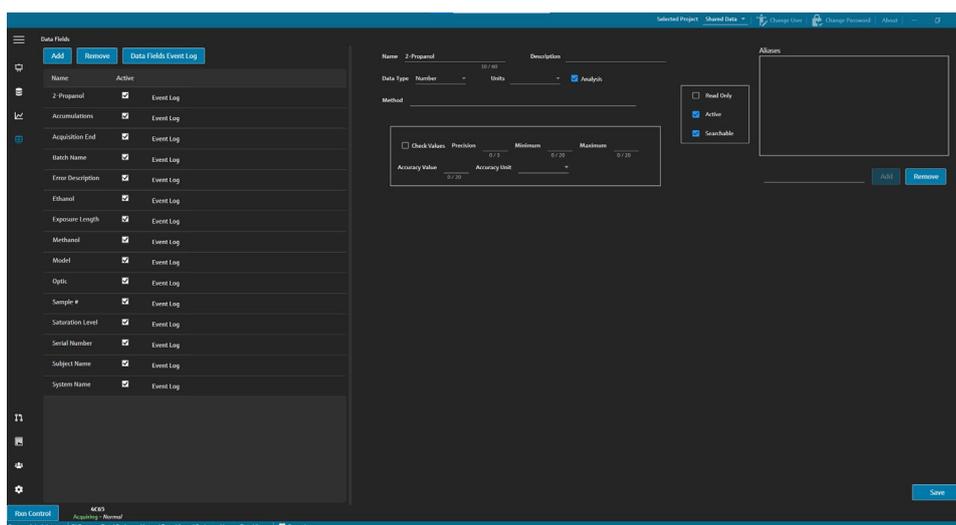
Os campos de dados são informações qualitativas e quantitativas vinculadas a um espectro. Para análises quantitativas, o usuário pode especificar precisão, unidades, detalhes do método primário e outras informações relacionadas ao espectro.

O Raman data library reúne informações de campos de dados predefinidos do registro SPC ou de fontes de dados OPC. As unidades e valores de dados exibidos na lista data fields podem variar dependendo de como os espectros são obtidos. A importação de dados por meio do OPC do Raman RunTime v6.4+ preenche automaticamente a maioria dos campos de dados padrão. Apelidos podem ser adicionados aos campos de dados para reduzir erros do usuário durante as importações.

Na janela Data Fields, você pode adicionar, atualizar e excluir campos de dados. Na versão cGxP do Raman data library, é necessário estar logado com a função Data Fields Manager para fazer alterações nos campos de dados.

Na janela Data Fields, você pode selecionar:

- **Add.** Cria um novo campo de dados.
- **Remove.** Remove o campo de dados selecionado. Na versão cGxP do Raman data library, a função Data Remove é necessária para remover um campo de dados.
- **Data Fields Event Log.** (somente versão cGxP) Exibe o registro de eventos para todos os campos de dados.
- **Event Log.** (somente versão cGxP) Exibe o registro de eventos para um campo de dados específico.
- **Save.** Salva o campo de dados selecionado.



AO055985

Figura 17. Janela Data Fields

Propriedades do campo de dados

Propriedade	Significado
Name	Nome do campo de dados.
Description	Descrição do campo de dados.
Aliases	Apelidos (aliases) para variações comuns de ortografia e rotulagem podem ser adicionados para reduzir erros do usuário. Por exemplo, <i>Concentration</i> , <i>concentration</i> , e <i>Conc.</i> podem ser definidos como iguais ao mesmo nome de campo de dados. A adição de um apelido evita erros comuns de coleta provenientes da importação de dados e automatiza a etiquetagem em todo o fluxo de trabalho. Os apelidos são usados na importação de dados para correspondência com um cabeçalho de coluna no Excel. Um apelido pode ser adicionado ou removido aqui.

Propriedade	Significado
Data Type	O tipo de valor de dados que pode ser inserido no campo de dados: <ul style="list-style-type: none"> ▪ Booleano ▪ Número ▪ Data ▪ Texto
Units	As unidades usadas para o tipo de dados.
Analysis	Os campos de dados marcados como "Analysis" podem ser usados em operações de análise.
Method	Um campo descritivo para indicar o método de aquisição.
Read Only	Os campos de dados marcados como "Read Only" não podem ter os valores de seus dados alterados.
Active	Os campos de dados marcados como "Active" aparecem na janela Analysis.
Searchable	Campos de dados marcados como "Searchable" podem ser pesquisados.
Check Values	Os campos de dados marcados como "Check Values" excluem automaticamente os valores dos dados se eles não atenderem aos requisitos definidos indicados nos campos Precision, Minimum, Maximum e Accuracy Value.
Precision	Esse valor designa o número necessário de dígitos após o ponto decimal.
Minimum	O limite mais baixo para os valores.
Maximum	O limite mais alto para os valores.
Accuracy Value	Campo descritivo que indica o valor da precisão.
Accuracy Unit	Campo descritivo que indica a unidade da precisão.

Adicionar um campo de dados

1. Na janela data fields, clique em **Add**.
2. Digite as propriedades do campo de dados. Consulte a tabela de propriedades do campo de dados acima.
3. Clique em **Save**.

5.1.1 Gráfico de espectros

Na aba Data, um gráfico de dados espectrais é exibido. O gráfico de espectros mostra todos os espectros incluídos em sua forma não processada.

Navegação pelo gráfico de espectros

Item de navegação	Navegação
—	Clique e arraste uma caixa dentro do gráfico de espectros para aumentar o zoom em uma área específica. Para diminuir o zoom, clique duas vezes com o botão esquerdo do mouse no gráfico.
 A0055988	Extensão do zoom. Aplica o zoom para toda a extensão dos dados. Esse botão é exibido na maioria dos gráficos.
 A0055989	Alternar legenda. Exibe ou oculta a legenda. Esse botão é exibido na maioria dos gráficos.
 A0055990	Estilo do espectro. Altera a cor do espectro selecionado.

Mudar o nome de um espectro de referência

Você pode renomear um espectro específico, por exemplo, se souber que o primeiro espectro coletado é 100% de um analito.

1. No quadro da grade de espectros, selecione os espectros.
2. Clique com o botão direito do mouse e selecione **Mark as Reference** ou clique no botão **Mark as Reference**. A caixa de diálogo para renomear o espectro é exibida.
3. Digite um nome relevante para os espectros de referência e clique em OK.
4. Clique no botão para visualizar a legenda do gráfico de espectros e confirme se o espectro de referência foi renomeado.
5. Clique em **Save Dataset**.

Para reverter o nome de um espectro para o original, clique em **Select Fields**, selecione **Name** e **Close**. O nome original do espectro aparece na lista. Os nomes de exibição podem ser editados, mas o nome original do software de coleta não.

Alterar a cor de exibição do espectro

Você pode modificar a cor de um espectro específico, por exemplo, se desejar que o espectro de referência tenha um contraste visual em relação a outros espectros.

1. No quadro da grade de espectros, selecione o espectro.
2. Clique em **Style Spectrum**  e selecione a cor desejada. O espectro agora é exibido na cor estilizada.
3. Clique em **Save Dataset**.

5.1.2 Seleção do campo de dados

À direita do painel do gráfico de espectros, os campos de dados são listados. Campos de dados específicos podem ser exibidos ou removidos da exibição marcando ou desmarcando a coluna **Displayed**. Se um campo de dados estiver marcado como Displayed, ele poderá ser usado na análise e será incluído na exportação de dados. Os campos de dados exibidos são um componente de um template. Consulte *Criação de templates* →  para mais informações.

Para selecionar campos de dados na lista Data fields, selecione **Displayed** ao lado do campo que deseja exibir. Os campos selecionados agora são exibidos na grade de espectros. A primeira seleção da lista de campos de dados pode demorar um pouco para ser exibida. Os campos de dados subsequentes são exibidos mais rapidamente.

A lista de campos de dados pode ser editada. Consulte *Campos de dados* →  para mais informações.

Selecionar campos de dados na grade de espectros

1. Clique em **Select Fields** na grade de espectros.
A janela de seleção de campos é exibida.
2. Selecione os campos desejados. Os campos padrão do Raman RunTime incluem:
 - Nome
 - Nome de exibição
 - Data/hora de início
 - Data/hora de término
 - Data/hora do ponto médio
 - Erro
3. Clique em **Close**.

Os campos selecionados agora são exibidos na grade de espectros.

5.1.3 Gráfico de tendência do campo de dados

À direita da lista de campos de dados, é exibido um gráfico de tendências dos dados. O gráfico de tendências do campo de dados mostra os valores dos dados do espectro ao longo do tempo.



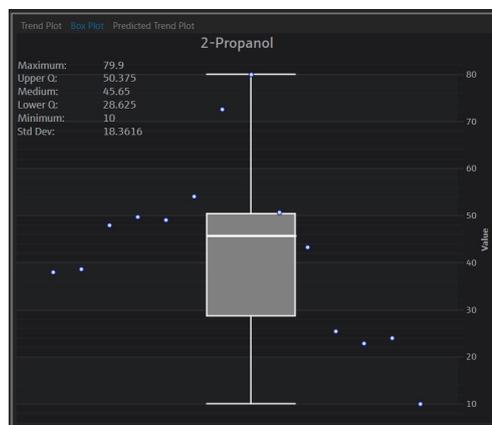
Figura 19. Gráfico de tendências do campo de dados

No painel de tendências do campo de dados, você pode:

Item de navegação	Navegação
 A0055988	Extensão do zoom. Aplica o zoom para toda a extensão dos dados. Esse botão é exibido na maioria dos gráficos.
 A0055989	Alternar legenda. Exibe ou oculta a legenda. Esse botão é exibido na maioria dos gráficos.
 A0055992	Copiar dados do gráfico para a área de transferência. Copia os dados do gráfico de tendência atual para a área de transferência.
 A0055993	Excluir pontos. Exclui os valores de dados selecionados.

5.1.4 Gráfico boxplot

A aba Box Plot exibe o gráfico boxplot para o campo de dados selecionado. São mostrados o máximo, o quartil superior, a mediana, o quartil inferior, o mínimo e o desvio padrão do campo de dados. O gráfico boxplot pode ser útil ao analisar amostras de dados não sequenciais.

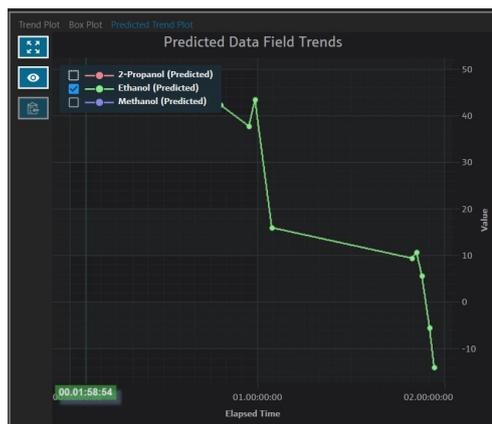


A0055994

Figura 20. Gráfico boxplot

5.1.5 Gráfico de previsão de tendências do campo de dados

A aba Predicted Trend Plot exibe os valores dos dados do espectro previstos ao longo do tempo.



A0055995

Figura 21. Gráfico de previsão de tendências do campo de dados

5.1.6 Grade de espectros

Na parte inferior da aba Data, a grade de espectros exibe espectros e seus valores de dados associados para os campos exibidos.

All Spectra		Selected Spectra		Selected Data Values				Other Actions	
<input type="button" value="Select Fields"/> <input type="button" value="Exclude Dimmatched"/> Included: 0 / 8 <input type="button" value="Exclude"/> <input type="button" value="Include"/> <input type="button" value="Remove"/> <input type="button" value="Mark as Reference"/>				<input type="button" value="Exclude"/> <input type="button" value="Include"/> <input type="button" value="Import Data"/> <input type="button" value="Add Comment"/>					
Include	Display	Mid	Sample #	Optic	Ethanol	Methanol	2-Propanol	Comments	
<input checked="" type="checkbox"/>	785lnT_73126_bio_soln09_20210216-150051_6s 10c tr1	2/16/2021 3:00:19 PM	9	bio-Optic	41.8	10.1	48		
<input checked="" type="checkbox"/>	785lnT_73126_bio_soln17_20210216-160317_6s 10c tr1	2/16/2021 4:02:45 PM	17	bio-Optic	40.2	10	49.7		
<input checked="" type="checkbox"/>	785lnT_73126_bio_soln15_20210216-163258_6s 10c tr1	2/16/2021 4:32:26 PM	15	bio-Optic	40.9	10	49		
<input checked="" type="checkbox"/>	785lnT_73126_bio_soln03_20210217-135024_3s 20c tr1	2/17/2021 1:49:51 PM	3	bio-Optic	10	10	79.9		
<input checked="" type="checkbox"/>	785lnT_73126_bio_soln20_20210217-155841_6s 10c tr1	2/17/2021 3:58:09 PM	20	bio-Optic	10	39.4	50.6		
<input checked="" type="checkbox"/>	785lnT_73126_bio_soln08_20210218-095725_6s 10c tr1	2/18/2021 9:56:53 AM	8	bio-Optic	10	46.7	43.3		
<input checked="" type="checkbox"/>	785lnT_73126_bio_soln21_20210218-103109_10s 6c tr1	2/18/2021 10:30:37 AM	21	bio-Optic	24.1	50.4	25.5		
<input checked="" type="checkbox"/>	785lnT_73126_bio_soln22_20210218-121058_12s 5c tr1	2/18/2021 12:10:26 PM	22	bio-Optic	10	66	24		

A0055996

Figura 22. Grade de espectros

No painel da grade de espectros, é possível selecionar espectros e campos a serem incluídos. A funcionalidade da grade de espectros é a seguinte.

Item da grade de espectros	Funcionalidade de exibição
Todos os espectros	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Select Fields. Selecione os campos a serem exibidos na grade: name (nome), display name (nome de exibição), start date time (data/hora de início), end date time (data/hora de término), midpoint date time (data/hora do ponto médio), e error (erro). Para aquisições longas, pode ser útil visualizar o ponto inicial e o ponto médio. ▪ Exclude Unmatched. Excluir todos os espectros que não tenham pelo menos um valor de dado para os campos de dados selecionados. ▪ Exclude/Include. Excluir ou incluir todos os espectros.
Espectros selecionados	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Exclude. Excluir os espectros selecionados na grade de espectros. ▪ Include. Incluir os espectros selecionados na grade de espectros. ▪ Remove. Remover os espectros selecionados na grade de espectros. ▪ Mark as Reference. Marca o primeiro espectro selecionado na grade de espectros como um espectro de referência. O usuário deve inserir um novo nome de exibição para o espectro.
Valores de dados selecionados	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Exclude. Excluir os valores de dados selecionados. ▪ Include. Incluir os valores de dados selecionados.
Outras ações	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Import Data. Selecione um arquivo Excel para importação de dados. Abre a janela Import Data. ▪ Add Comment. Adicionar um comentário ao conjunto de dados. É solicitado ao usuário que selecione uma data de início e uma data de término. O comentário é adicionado a todos os espectros nesse intervalo. Os comentários do conjunto de dados são específicos apenas para o conjunto de dados no qual foram adicionados. Os comentários do conjunto de dados não são mostrados em outros conjuntos de dados.

Para excluir dados da grade ou do gráfico de espectros

É possível excluir espectros da grade e do gráfico se, por exemplo, o laser estiver bloqueado durante uma parte do experimento ou se, de alguma outra forma, forem produzidos dados inutilizáveis.

1. No gráfico de espectros, aumente o zoom para visualizar apenas os dados inúteis.
2. Passe o mouse sobre uma linha de espectro no gráfico e clique para selecioná-la.
O espectro agora também está destacado na grade de espectros.
3. Use a tecla shift para destacar todos os espectros acima do selecionado.
4. Clique em **Exclude** com a caixa Selected Spectra.
5. Clique em **Save Dataset**.

Talvez seja necessário excluir outros espectros se você não tiver destacado todos eles na primeira tentativa. A redução do zoom no gráfico de espectros deve mostrar que todos os espectros indesejados foram excluídos.

Importação de dados

É possível importar campos de dados e valores de uma planilha Excel existente.

1. Na grade de espectros, clique em **Import Data**.
A janela para selecionar um arquivo para importar é exibida.
2. Navegue até a planilha e clique em **Open**.
Depois de navegar até a planilha, a janela de importação de dados é exibida.

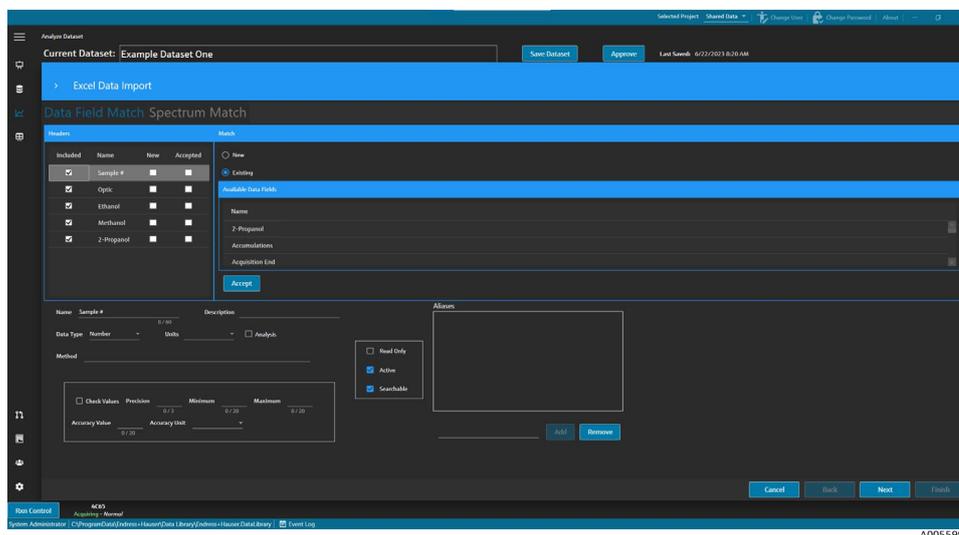


Figura 23. Importar dados, Data Field Match

3. Na aba Data Field Match, selecione:
 - **Included.** Determina se o campo de dados com seus valores é importado.
 - **Match New/Existing.** Escolha manualmente se o campo selecionado será tratado como novo ou existente. Se for existente, o usuário pode escolher com qual campo ele será associado. Se for novo, o usuário poderá editar o campo da mesma forma que o Data Field Editor (veja acima).
 - **Accepted.** Os campos de dados podem ser marcados como Accepted (Aceito) para manter o controle das edições.
4. Defina o campo de dados. Adicione uma descrição, unidades, apelidos e limites mais alto e mais baixo. Consulte a tabela que descreve os *parâmetros do campo de dados* → para uma descrição completa dos parâmetros do campo de dados.
5. Clique em **Next**.
6. Na aba Spectrum Match, selecione:
 - **Setas para cima/para baixo.** Essas setas podem ser usadas para deslocar as amostras para cima ou para baixo para que fiquem alinhadas com os espectros.
 - **Threshold.** Diferença permitida entre o horário do espectro e o horário da amostra mais próxima (com unidades de horas, minutos ou segundos).
 - **Apply Threshold.** Aplica o valor do limite aos espectros.
 - **Include Selected.** Incluir os valores de dados selecionados.
 - **Exclude Selected.** Excluir os valores de dados selecionados.
 - **Show Only Matched.** Mostrar apenas os espectros que têm valores correspondentes.

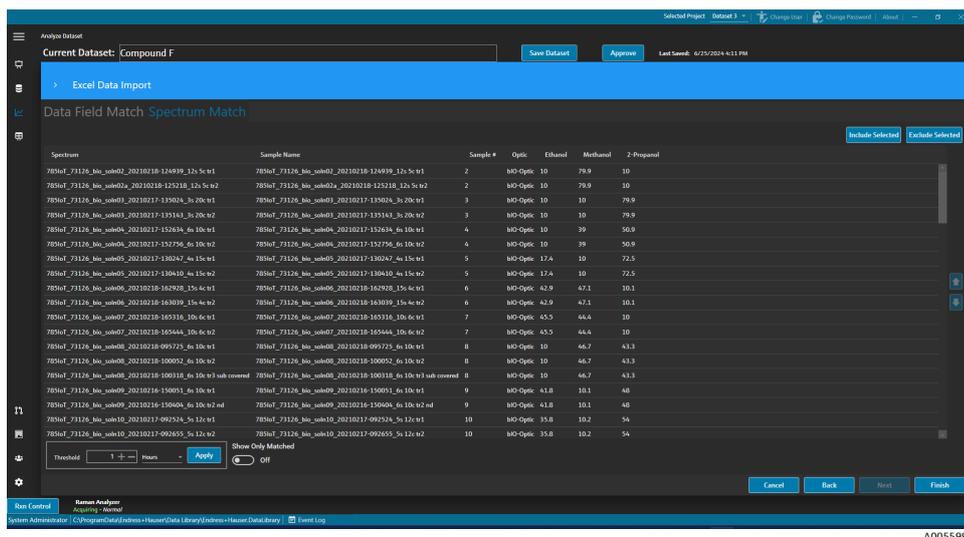


Figura 24. Importar dados, Spectrum Match

7. Clique em **Finish**. Na próxima caixa de diálogo, clique em **OK**.
8. Clique em **Save Dataset**.

5.1.7 Comentários

O quadro Comments permite que você adicione comentários a um espectro. Esses comentários não são específicos do conjunto de dados e podem ser visualizados em todos os conjuntos de dados que fazem referência ao espectro.

Os comentários também podem ser adicionados a um conjunto de dados ou a um período de tempo em um conjunto de dados. Isso é feito com o botão **Add Comment** no quadro da grade de espectros. Consulte *Alteração de uma grade de espectros* → para mais informações.

Para adicionar um comentário a um espectro

1. No quadro Comments, clique em **Add**.
A caixa de diálogo Add Comment é exibida.
2. Insira um comentário relevante e clique em **OK**.

O quadro de comentários e a grade de espectros agora exibem o comentário para o espectro selecionado.

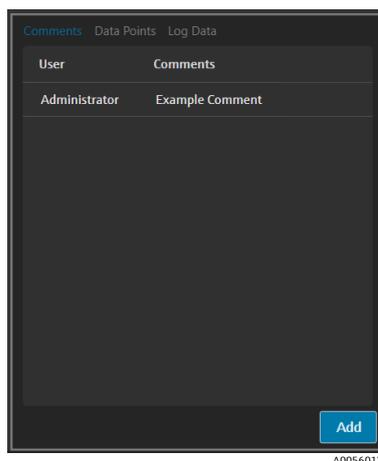


Figura 25. Comentários do espectro

5.1.8 Pontos de dados

A aba Data Points exibe uma lista de pontos de dados X e Y do espectro selecionado.

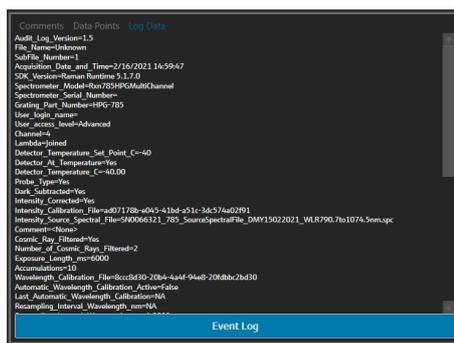
X	Y
100	251218.46875
101	245982.421875
102	240804.015625
103	235678.640625
104	230577.3125
105	225458.1875
106	220286.8125
107	215050.125
108	209759.90625
109	204449.03125
110	199163.703125

A0056018

Figura 26. Lista de pontos de dados

5.1.9 Dados de registro

A aba Log Data é usada para visualizar metadados (um registro de auditoria .spc) sobre o espectro selecionado. Clique em **Event Log** para visualizar o registro de eventos do espectro selecionado.

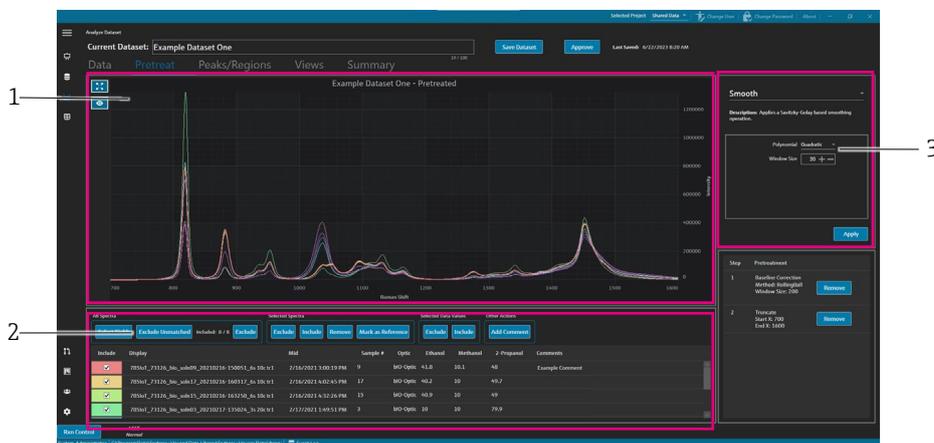


A0056019

Figura 27. Registro de eventos

5.2 Uso de pré-tratamentos

A aba Pretreat é usada para aplicar pré-tratamentos aos espectros no conjunto de dados. Os pré-tratamentos podem ser removidos, ajustados e reaplicados a qualquer momento, e as alterações são refletidas no gráfico de espectros e na análise de picos e regiões. Os pré-tratamentos são um componente dos *templates* →



A0056020

Figura 28. Aba Pretreat

#	Descrição
1	Gráfico de espectros. Exibe espectros não processados até que um pré-tratamento seja aplicado. Depois disso, apenas os espectros pré-tratados são exibidos aqui.
2	Grade de espectros. Lista os espectros e valores de dados associados para os campos de dados exibidos. Oferece opções para incluir ou excluir espectros e valores de dados, além de importar dados de referência. A alteração de opções aqui, como a inclusão ou exclusão de espectros, é refletida na aba Data e nas próximas abas do fluxo de trabalho.
3	Painel de pré-tratamento. É aqui que todos os pré-tratamentos espectrais são aplicados ou removidos.

Os pré-tratamentos são aplicados na ordem em que são selecionados para permitir uma flexibilidade sequencial. Os seguintes pré-tratamentos podem ser aplicados a um conjunto de dados:

- Clique em **Apply** para aplicar o pré-tratamento selecionado.
- Clique em **Remove** para remover o pré-tratamento associado.

5.2.1 Truncar

Você pode truncar uma área de um espectro para focar em regiões específicas do espectro. O truncamento corta o espectro na região selecionada do eixo x.

Para truncar um espectro

1. Na aba de pré-tratamento, aumente o zoom na área do espectro na qual deseja se concentrar clicando no gráfico e desenhando um quadrado sobre a área, ou clicando em **Zoom** .
2. No painel Pretreat, selecione **Truncate**.
3. Modifique a região a ser cortada inserindo os valores **Start X** e **End X**. Clique em **Apply**.
O pré-tratamento Truncate agora está listado no painel de pré-tratamento. Depois que o Truncate é aplicado, ele não fica mais disponível na lista de pré-tratamentos.
4. Clique em **Save Dataset**.

Para alterar os limites de truncamento, remova qualquer pré-tratamento de truncamento atual e aplique novamente.

5.2.2 Suavização

O pré-tratamento Smooth aplica uma operação de suavização baseada em Savitzky-Golay.

Para suavizar um espectro

1. No painel Pretreat, selecione **Smooth**.
2. Selecione o seguinte:
 - **Polynomial–Quadratic ou Cubic.** Os polinômios quadráticos podem ser a melhor escolha quando os dados em uma determinada janela de suavização seguem aproximadamente uma tendência parabólica. Os polinômios cúbicos podem ser usados para se adequar aos pontos de dados locais.
 - **Window size.** Determina quantos pontos de dados vizinhos são considerados durante o processo de suavização. Ajuste o tamanho da janela com base no nível de ruído no sinal e no nível desejado de suavização. Tamanhos maiores de janela proporcionam mais suavização, mas também podem introduzir mais defasagem ou distorção no sinal, enquanto tamanhos menores de janela capturam detalhes mais precisos, mas podem ser mais afetados por ruídos.
3. Clique em **Apply**.
O pré-tratamento Smooth agora está listado no painel de pré-tratamento. Depois que o Smooth é aplicado, ele não fica mais disponível na lista de pré-tratamentos.
4. Clique em **Save Dataset**.

Para alterar as configurações de suavização, remova qualquer pré-tratamento Smooth atual e aplique novamente.

5.2.3 Aplicação da correção da linha de base

O pré-tratamento Baseline Correction remove o ruído de fundo dos espectros usando o método rolling ball, Pearson ou derivado. Não é possível aplicar duas correções de linha de base diferentes.

A escolha dos valores do método para as correções da linha de base deve ser baseada nas características específicas de seus dados espectrais e na natureza das distorções da linha de base. Pode ser útil fazer experimentos com valores diferentes para encontrar o equilíbrio ideal para a identificação precisa do pico.

Ao escolher a correção da linha de base de Pearson, os valores do filtro de linha de base e do ajuste determinam a intensidade ou o grau de correção da linha de base.

- **Valores de ajuste (fit) baixos (0-2).** Esses valores aplicam uma correção suave da linha de base. Isso pode ser vantajoso se a linha de base for relativamente estável e se você desejar preservar características sutis nos dados. No entanto, a correção pode não remover adequadamente todas as distorções da linha de base, o que pode levar a uma identificação menos precisa dos picos.
- **Valores de ajuste (fit) médios (3-4).** Esses valores equilibram a remoção das distorções da linha de base e a preservação da integridade dos picos. Esse costuma ser um bom ponto de partida para muitos conjuntos de dados, pois pode melhorar a identificação de picos sem distorcer excessivamente os dados.
- **Valores de ajuste (fit) altos (5).** Esses valores aplicam uma forte correção de linha de base, que pode ser útil para dados com ruído ou desvio significativos da linha de base. No entanto, a correção agressiva pode remover ou distorcer picos menores, o que pode levar a picos perdidos ou identificados de forma imprecisa.

Aplicar a correção da linha de base

1. No painel Pretreat, selecione **Baseline Correction**.
2. Selecione o **Method** e as configurações relacionadas:
 - **Derivative.** Calcula uma derivada Savitzky-Golay suavizada para cada espectro.
 - **Derivative.** Primeira ou segunda.
 - **Polynomial.** Quadrático ou cúbico.
 - **Window size.** Determina quantos pontos de dados vizinhos são considerados durante a correção da linha de base.
 - **Pearson.** Estima a linha de base para cada espectro por meio da remoção iterativa de polinômios de 4ª ordem. Isso remove as distorções da linha de base ao subtrair o ajuste polinomial do espectro original.
 - **Tipo de ajuste.** Os tipos de ajuste polinomial, Legendre ou Hermite são definidos da seguinte forma:
 - **Polynomial.** Ajusta uma função polinomial aos dados espectrais para modelar a linha de base.
 - **Legendre.** Usa polinômios de Legendre, que são um conjunto de polinômios ortogonais, para ajustar a linha de base. Os polinômios de Legendre podem minimizar um erro em um intervalo específico.
 - **Hermite.** Usa polinômios de Hermite, que são polinômios ortogonais definidos por uma função de ponderação que envolve uma distribuição Gaussiana. Os polinômios de Hermite podem ser usados quando os dados têm uma distribuição do tipo Gaussiana.
 - **Baseline filter (0 a 5).** Determina o grau de correção da linha de base aplicado aos dados espectrais.
 - **Fit (0 a 5).** Determina a intensidade do processo de ajuste aplicado aos dados espectrais.
 - **Rolling ball.** Rola um círculo de tamanho fixo sob um espectro e o remove suavemente de todos os pontos de contato.
 - **Window size.** Determina quantos pontos de dados vizinhos são considerados durante o processo de suavização.
3. Clique em **Apply**.

O pré-tratamento Baseline Correction agora está listado no quadro de pré-tratamento. Depois que a Baseline Correction é aplicada, ela não fica mais disponível na lista de pré-tratamentos.
4. Clique em **Save Dataset**.

Para alterar as configurações de correção da linha de base, remova qualquer pré-tratamento Baseline Correction atual e aplique novamente.

5.2.4 Normalização

O pré-tratamento Normalize dimensiona os espectros para uma faixa comum. Não é possível normalizar um espectro duas vezes.

Para normalizar um espectro

1. No painel Pretreat, selecione **Baseline Correction**.
2. Selecione o **Method** e as configurações relacionadas:
 - **SNV**. Cada espectro é normalizado removendo sua média e dividindo por seu desvio padrão.
 - **Range**. Normaliza todos os valores em um espectro para que estejam no intervalo de 0 a 1.
3. Clique em **Apply**.

O pré-tratamento Normalize agora está listado no painel de pré-tratamento. Depois que o Normalize é aplicado, ele não fica mais disponível na lista de pré-tratamentos.
4. Clique em **Save Dataset**.

Para alterar as configurações de normalização, remova qualquer pré-tratamento Normalize atual e aplique novamente.

5.2.5 Subtração

O pré-tratamento Subtract subtrai um único espectro de referência de todos os espectros.

Para subtrair um espectro

1. No painel Pretreat, selecione **Subtract**.
2. Selecione o espectro a ser subtraído na lista **Spectrum**. Clique em **Apply**.

O pré-tratamento Subtract agora está listado no painel de pré-tratamento. Depois que o Subtract é aplicado, ele não fica mais disponível na lista de pré-tratamentos.
3. Clique em **Save Dataset**.

Para alterar as configurações de subtração, remova qualquer pré-tratamento Subtract atual e aplique novamente.

5.2.6 Intensidade de filtragem

O pré-tratamento Intensity Filter exclui os espectros fora da faixa mínima e máxima do eixo y selecionado. Esse filtro é útil se, por exemplo, o laser estiver bloqueado ou produzir dados inutilizáveis por um período de tempo.

Para filtrar a intensidade

1. No painel Pretreat, selecione **Intensity Filter**.
2. Insira uma faixa de intensidade mínima e máxima nos campos **Minimum Y** e **Maximum Y**. Clique em **Apply**.

O pré-tratamento Intensity Filter agora está listado no painel de pré-tratamento. Depois que o Intensity Filter é aplicado, ele não fica mais disponível na lista de pré-tratamentos.
3. Clique em **Save Dataset**.

Para alterar as configurações do filtro de intensidade, remova qualquer pré-tratamento Intensity Filter atual e aplique novamente.

5.3 Picos e regiões

A aba Peaks and Regions pode ser usada para adicionar cálculos para intervalos específicos do eixo x em um conjunto de dados. Peaks and Regions é um componente dos templates. Consulte *Criação de templates* →  para mais informações.

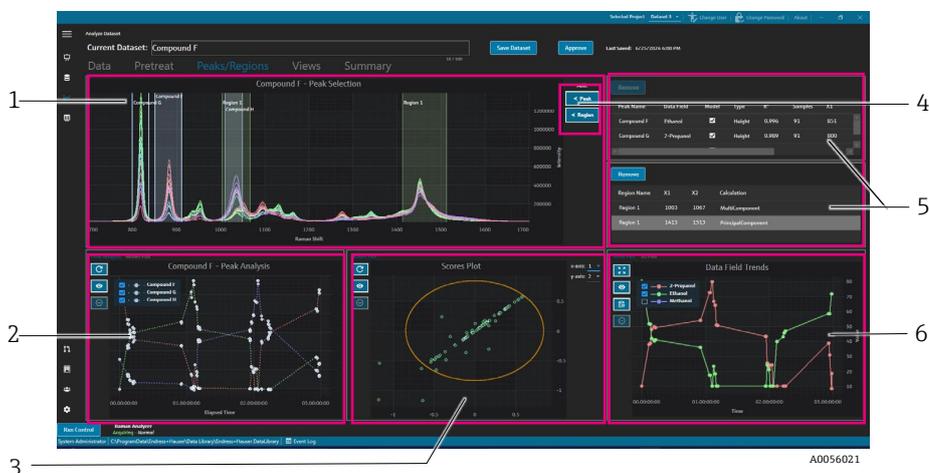


Figura 29. Aba Peaks and regions

#	Descrição
1	Gráfico de espectros. Exibe espectros pré-tratados. O quadro do gráfico de espectros é usado para selecionar posições de picos e regiões. Nesse quadro, você só pode aumentar ou diminuir o zoom desenhando uma caixa ou clicando duas vezes.
2	Gráficos de pico. Exibe os resultados da análise de pico. Nesse quadro, você pode alternar entre Peak Analysis (tendências) e Model plot (resultados de regressão).
3	Gráficos de região. Exibe os resultados da resolução multivariada de curvas (MCR) ou da análise de componentes principais (PCA) quando a análise de região é aplicada.
4	◀ Peak e ◀ Region. Exibe uma caixa de diálogo para adicionar e definir novos picos e regiões.
5	Listas de picos e regiões. Lista os picos e regiões definidos. Você pode selecionar e editar picos e regiões nesse painel.
6	Gráfico de tendência do campo de dados. O gráfico Data Field Trend permite que você compare os resultados de picos e regiões com os dados medidos. Gráfico 3D. Exibe o gráfico de espectros em 3D.

5.3.1 Adicionar picos e regiões

A janela de seleção de picos/regiões mostra uma representação visual dos picos e regiões em um conjunto de dados.

Para adicionar picos

1. Na aba Peaks/Regions, clique em **Peak**.

A janela pop-up Add Peak é exibida.

A0056045

Figura 30. Janela pop-up Add Peak

2. Insira o **Peak Name**. Esse é o nome de exibição do pico.
3. Selecione o **Peak Type** (altura, área ou central). O pico central é útil quando os picos se deslocam em vez de crescer ou diminuir devido a uma mudança química ou física.
4. Insira a faixa do pico em **X1** e **X2**.
5. (Opcional) Selecione um **Data Field** para mapear para o pico. O campo de dados é usado no cálculo de modelagem.
6. (Opcional) Ative **Model** se um modelo for criado para o pico durante a exportação.
7. Clique em **Add** para criar um novo pico.
8. Clique em **Save Dataset**.

Depois que o pico é adicionado, uma área destacada do gráfico de espectros é exibida. Você pode mover, expandir ou reduzir o pico movendo ou arrastando os cantos da janela de pico no gráfico de espectros.

Após criar um pico, visualize a tendência da análise de pico na área do gráfico de pico. Você pode mover as janelas não utilizadas para redimensionar o gráfico de tendências e obter uma visualização maior das tendências.



A0056046

Figura 31. Gráfico de espectros mostrando o pico e a análise de picos

Para adicionar regiões

1. Na aba Peaks/Regions, clique em **◀ Region**.

A janela pop-up Add Region é exibida.

A0056047

Figura 32. Janela pop-up Add Region

2. Insira as seguintes informações:
 - O campo **Region Name** é o nome de exibição da região.
 - Os campos **X1** e **X2** são a faixa da região.
 - O campo **Calculation** determina que tipo de cálculo é feito para a região (PCA ou MCR).
3. Clique em **Add** para criar uma nova região.

5.3.2 Alterar picos e regiões

Para incluir espectros adicionais na análise de picos

1. Selecione a aba **Data** ou **Pretreat**.
2. Na grade de espectros, navegue até o espectro a ser incluído.
Você pode manter pressionada a tecla shift e descer até o último espectro para incluir todos os espectros em uma faixa.
3. Clique em **Include** na caixa Selected Spectra.
4. Selecione a aba **Peaks/Regions** e clique em **Refresh Plot** .
Mais espectros são incluídos tanto nas tendências de pico quanto no gráfico espectral.
5. Clique em **Save Dataset**.

Para excluir espectros da análise de picos

Os dados podem ser excluídos diretamente do gráfico de tendência. Isso é útil para excluir valores obviamente discrepantes ou quando não há alteração em um experimento.

1. Selecione os pontos de dados a serem excluídos clicando e arrastando sobre a área no gráfico Peak Analysis.
Os pontos aparecem em negrito e o botão de exclusão é ativado.
2. Clique em **Exclude Points** .
3. Clique em OK para acessar a lista de espectros excluídos. Se os pontos foram selecionados em múltiplas tendências de pico, os nomes dos espectros podem aparecer mais de uma vez.
4. Clique em **Refresh Plot** .
A análise de picos agora mostra apenas os dados não excluídos.
5. Clique em **Save Dataset**.

Para mover e redimensionar picos e regiões

Os picos e regiões podem ser movidos e redimensionados clicando e arrastando os pontos de controle. Depois que um pico ou região é redimensionado, a análise é recalculada.

Para modificar ou remover um pico ou região

À direita do painel de picos e regiões, os picos e as regiões são listados. Você pode visualizar e modificar as propriedades de um pico ou região nessas listas. Selecione um pico ou região e clique em **Remove** para excluir o pico ou a região selecionada.

Ao remover um pico ou região, todas as telas que usam uma tendência gerada a partir desse pico ou região devem ser removidas ou atualizadas para um novo pico ou região. Se você não atualizar ou remover uma tela de tendência com base em um pico ou região removidos, o software será incapaz de analisar o conjunto de dados associado. Os usuários com uma tela salva em seu painel não poderão fazer login se um pico ou região for removido e a tela associada não for atualizada ou removida.

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 regiões

5.3.3 Visualização da análise de picos

A aba Peak Analysis exibe um gráfico de tendência para todos os picos adicionados. Os picos são adicionados com seu próprio eixo y. Na aba Peak Analysis, você pode:

- Clicar em **Exclude Points**  para remover pontos de dados específicos.
- Clicar em **Refresh Plot**  para atualizar o gráfico após modificar pontos de dados.



A0056050

Figura 35. Análise de picos

5.3.4 Exibindo o gráfico do modelo

A aba Model Plot exibe o gráfico do modelo para o pico selecionado. Na aba Model Plot, você pode:

- Clicar em **Excluir Pontos**  para remover pontos de dados específicos.
- Clicar em **Refresh Plot**  para atualizar o gráfico após modificar pontos de dados. Quando os espectros ou valores de dados forem excluídos da aba Data, use **Refresh Plot** para recalcular o gráfico do modelo.



Figura 36. Aba Model plot

5.4 Criação de telas no painel: grades, tendências, espectros e gráficos 3D

A aba Views é usada para definir os gráficos mais relevantes para cada caso. Há muitas opções para visualizar gráficos, mesmo para conjuntos de dados simples. Cada tela pode ser adicionada a um painel como parte de uma coleção de telas. Você pode criar abas preferidas do painel que exibem de um a quatro gráficos em quadrantes.

Todos os conjuntos de dados são criados com duas telas predefinidas: grade de espectros e gráfico de espectros. As telas personalizadas são adicionadas, modificadas e removidas por meio da aba Views. Uma visualização da tela selecionada é mostrada no lado direito da aba Views.

Há 4 tipos de telas:

- Gráfico de tendência
- Gráfico de espectros
- Grade de espectros
- Gráfico 3D

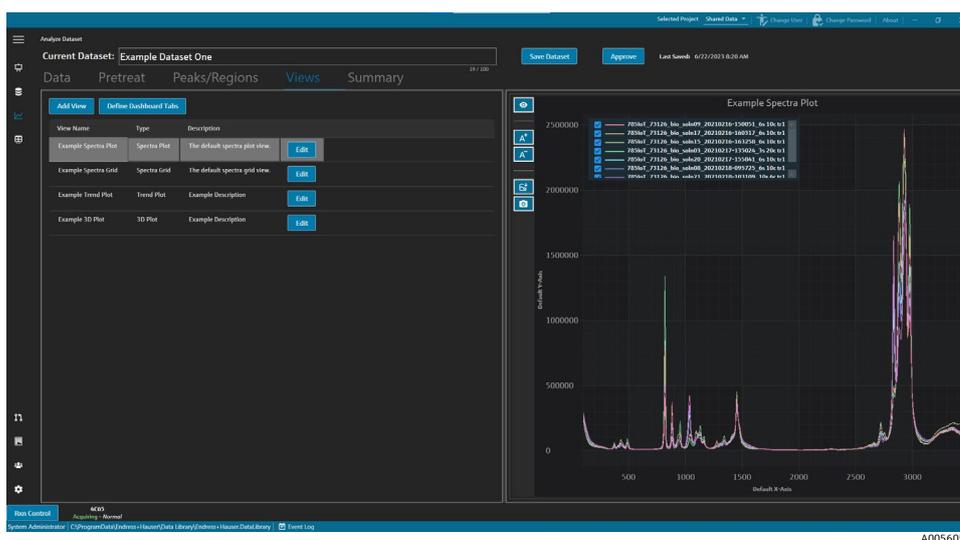


Figura 37. Abas Views

Na aba Views, você também pode clicar em **Define Dashboard Tabs** para abrir a janela de definição das abas do painel. Consulte *Definição de um painel* → .

Para remover uma tela, selecione a tela e clique em **Remove**. Opcionalmente, uma tela pode ser removida ao selecioná-la e pressionar delete no teclado.

5.4.1 Criar ou modificar uma tela de gráfico de espectros

A tela do gráfico de espectros pode ser usada para visualizar os espectros do conjunto de dados em um gráfico com função de zoom. O gráfico de espectros é uma tela padrão gerada para cada conjunto de dados.

Para modificar uma tela de gráfico de espectros

1. Na aba Views, clique em **Add View**.
A caixa de diálogo View Definition é exibida.
2. Insira as seguintes informações:
 - **Name.** O nome de exibição da tela.
 - **Description.** Uma breve descrição da tela.
 - **View Type.** Selecione spectra plot.
3. Selecione o seguinte:
 - **Use Pretreated data.** Selecione para mostrar dados pré-tratados na tela. Se desmarcada, os dados brutos (não pré-tratados) serão exibidos na tela.
 - **Show latest spectrum only.** Selecione para mostrar apenas o espectro com a última data/hora de término. Se desmarcada, todos os espectros serão mostrados.
4. Clique em **Close**.
5. Clique em **Save Dataset**.

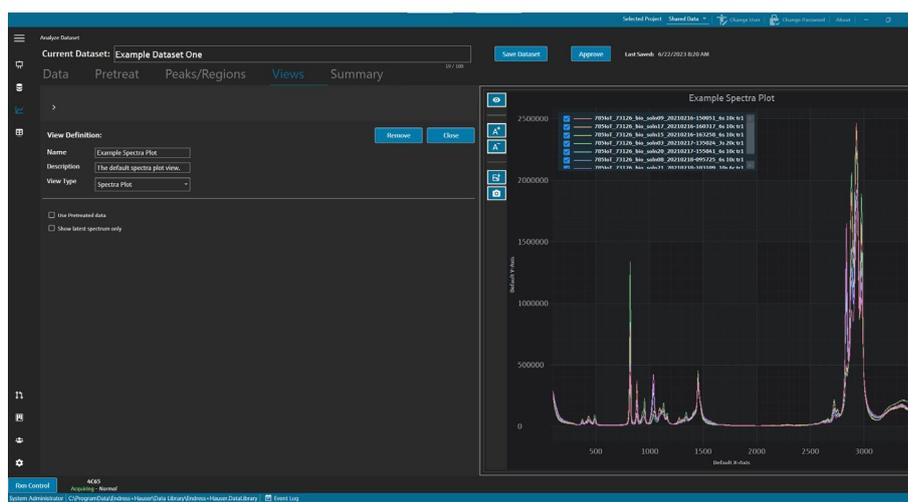


Figura 38. Tela do gráfico de espectros

5.4.2 Alteração de uma grade de espectros

A tela da grade de espectros pode ser usada para mostrar espectros individuais em forma de grade. A grade de espectros é uma tela padrão gerada para cada conjunto de dados.

Para modificar uma tela de grade de espectros

1. Na aba Views, clique em **Add View**.
A caixa de diálogo View Definition é exibida.
2. Selecione a grade de espectros e clique em **Edit**.
3. Insira as seguintes informações:
 - **Name.** O nome de exibição da tela.
 - **Description.** Uma breve descrição da tela.
 - **View Type.** Selecione **Spectra Grid**.
4. Clique em **Close**.
5. Clique em **Save Dataset**.

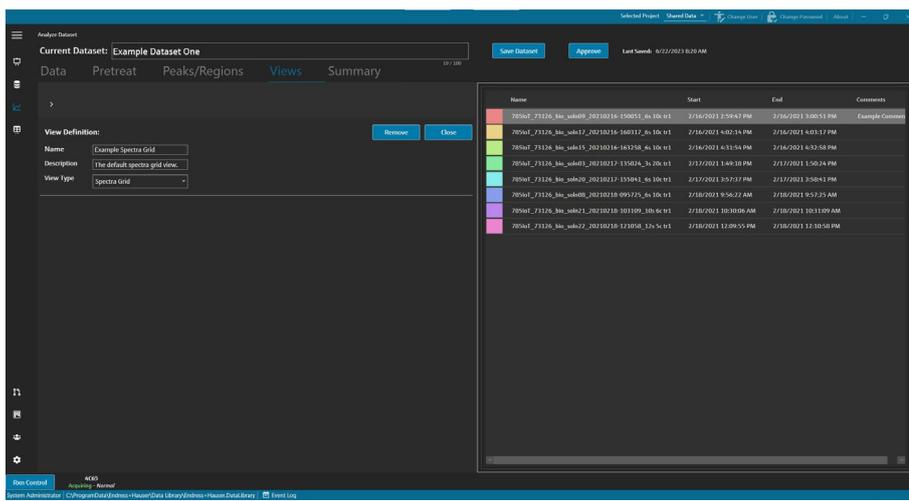


Figura 39. Tela da grade de espectros

5.4.3 Criar ou modificar uma tela de gráfico de tendência

Uma tela de gráfico de tendência pode ser usada para visualizar as tendências do conjunto de dados. Na tela do gráfico de tendências, o eixo x representa o tempo de aquisição relativo dos espectros. O eixo y representa os valores de dados, os valores de dados previstos ou as métricas de pico.

Você pode escolher quais campos de dados e picos devem ser incluídos na exibição. Quando **Model** é selecionado para um campo de dados usado em um pico, os valores previstos são mostrados na tela.

Criar e modificar uma tela de gráfico de tendência

1. Na aba Views, clique em **Add View**.
A caixa de diálogo View Definition é exibida.
2. Insira as seguintes informações:
 - **Name.** O nome de exibição da tela.
 - **Description.** Uma breve descrição da tela.
 - **View Type.** O tipo de tela. Selecione **Trend Plot**.
3. Em **Available data fields**, selecione os campos de dados para gerar o gráfico. Clique em **Include** ➤.
4. Em **Available peaks**, selecione os picos para gerar o gráfico. Clique em **Include** ➤.
5. Clique em **Close**.
6. Clique em **Save Dataset**.

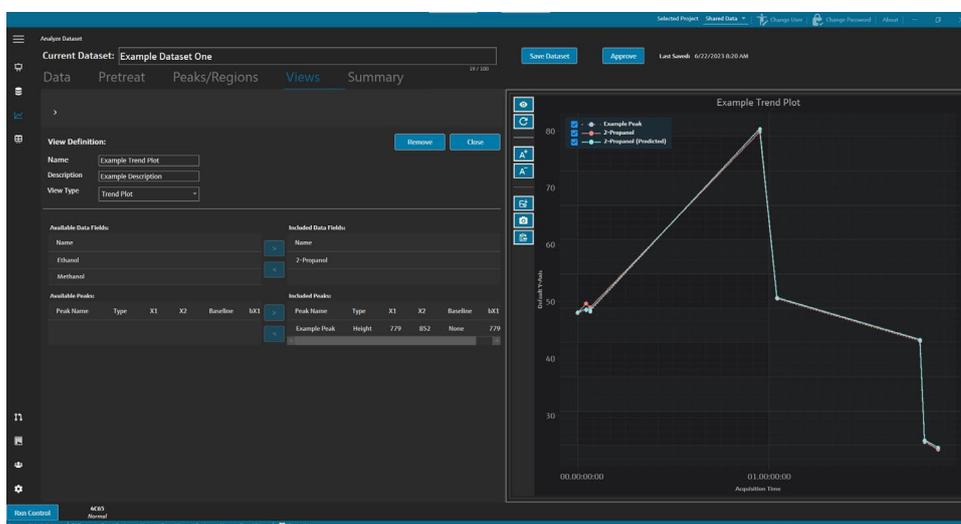


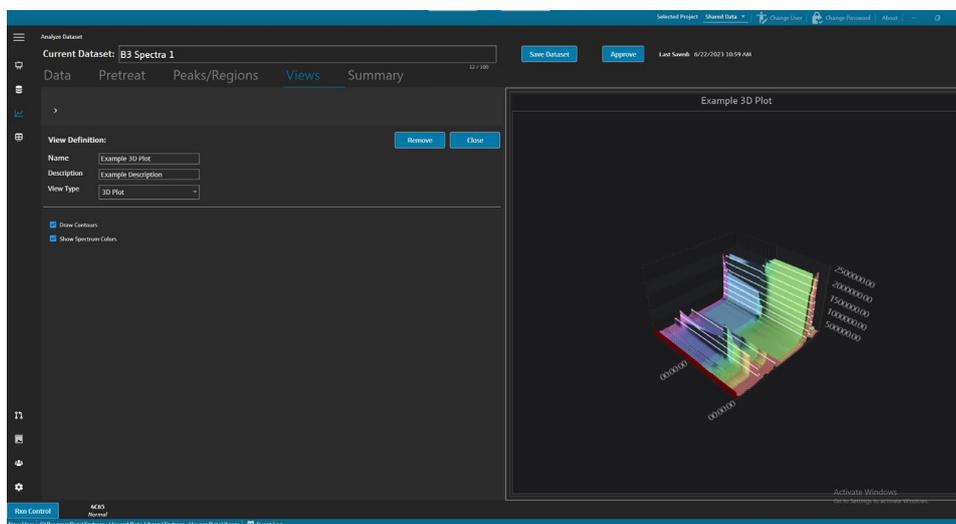
Figura 40. Tela do gráfico de tendência

5.4.4 Criar ou modificar um gráfico 3D

A tela de gráfico 3D mostra os espectros em um gráfico com eixos x, y e z. Esse gráfico pode fornecer informações adicionais sobre as diferenças nos espectros ao longo do tempo ou à medida que as variáveis são adicionadas ou removidas.

Para modificar uma tela de gráfico 3D

1. Na aba Views, clique em **Add View**.
A caixa de diálogo View Definition é exibida.
2. Insira as seguintes informações:
 - **Name**. O nome de exibição da tela.
 - **Description**. Uma breve descrição da tela.
 - **View Type**. Selecione 3D plot.
3. Ajuste o gráfico para a exibição desejada:
 - **Draw Contours**. Desenha linhas de contorno ao longo de um comprimento de onda para destacar diferenças nos espectros.
 - **Show Spectrum Colors**. Ativa ou desativa as cores do espectro para destacar as alterações espectrais ao longo do tempo.
 - **Alterar o ângulo dos eixos x, y e z**. O ângulo de visualização pode ser ajustado clicando no gráfico e arrastando-o para a posição desejada.
 - **Aumentar ou diminuir o zoom**. O botão de rolagem do mouse aumenta e diminui o zoom do gráfico.
4. Clique em **Close**.
5. Clique em **Save Dataset**.



A0056055

Figura 41. Tela do gráfico 3D

5.4.5 Adicionar anotações temporárias

Na aba Views, você pode criar anotações temporárias, incluindo áreas destacadas, etiquetas, linhas e setas. Então, você pode salvar as anotações com a tela para consultá-las posteriormente ou compartilhá-las.

Na aba Views, você pode:

Item de navegação	Navegação
 A0056085	Adicionar uma anotação temporária. Adiciona uma anotação temporária à tela.
 A0056086	Salvar arquivo de imagem. Salva a tela com as anotações.
 A0056087	Copiar imagem para a área de transferência. Copia a tela atual com anotações para a área de transferência.
 A0055992	Copiar dados do gráfico para a área de transferência. Copia os dados do gráfico de tendência atual para a área de transferência.
 A0055993	Remover anotação temporária. Remove uma anotação temporária da tela.

Para criar anotações temporárias

- Na aba Views, selecione a tela em que deseja acrescentar uma anotação.
- Clique em **Add Temporary Annotation** .
- Selecione o **Annotation type**:
 - **Line.** Acrescenta uma linha na tela.
 - **Line arrow.** Acrescenta uma linha com seta na tela.
 - **Text.** Acrescenta texto na tela.
 - **Box.** Acrescenta uma caixa de destaque na tela.
 - **Horizontal line.** Acrescenta uma linha horizontal na tela.
 - **Vertical line.** Acrescenta uma linha vertical na tela.
 - **Axis Marker.** Acrescenta um marcador de eixo na tela.
- Clique em **Add Temporary Annotation** e então clique na tela para posicionar o marcador.
- Salve a tela seguindo um dos seguintes procedimentos:
 - Clique em **Save Image File**  para salvar a tela com as anotações.
 - Clique em **Copy Image to Clipboard** .
 - Clique em **Copy Plot Data to Clipboard** .
- Clique em **Save Dataset**.

5.4.6 Definição de um painel

Na aba Views, você pode definir e salvar um painel. Para isso, primeiro é necessário criar as telas descritas nas seções anteriores. Por padrão, a aba Views contém uma tela com um gráfico de espectros e uma grade de espectros para cada conjunto de dados.

Para definir um painel

1. Na aba Views, clique em **Define Dashboard Tabs**.

Uma aba padrão para o conjunto de dados atual é exibida, mostrando o gráfico de espectros e a grade de espectros.

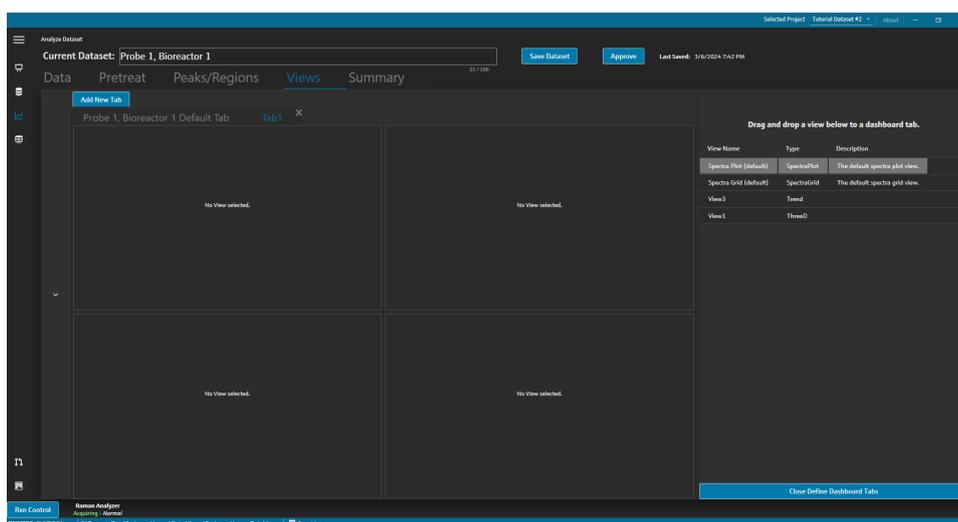
2. Clique em **Add New Tab**.

A janela pop-up Add New Tab é exibida.

3. Selecione o número de telas a serem exibidas:

- Aba com 1 tela
- Aba com 2 telas
- Aba com 3 telas
- Aba com 4 telas

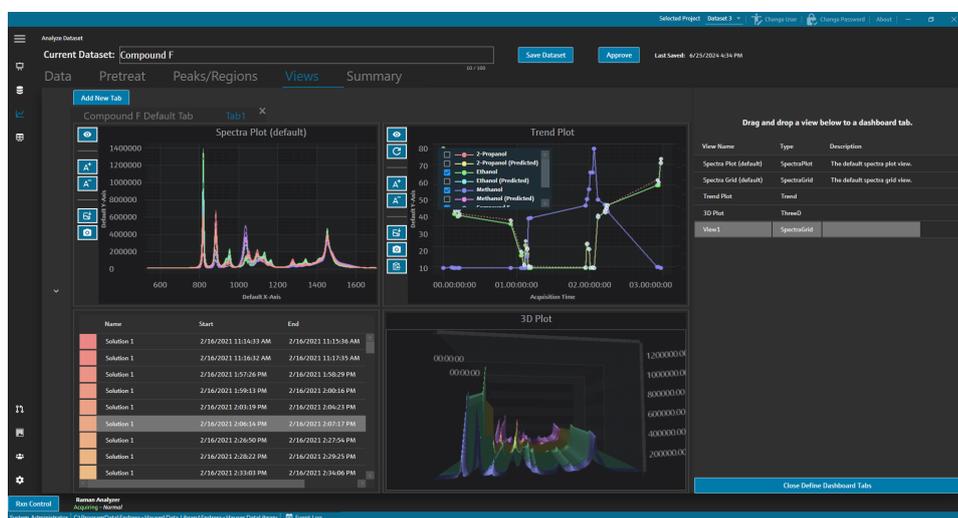
Um novo painel é exibido.



A0055977

Figura 42. Definição de um novo painel

4. Arraste e solte as telas desejadas da lista à direita para a área desejada do painel.



A0056056

Figura 43. Telas selecionadas em um novo painel

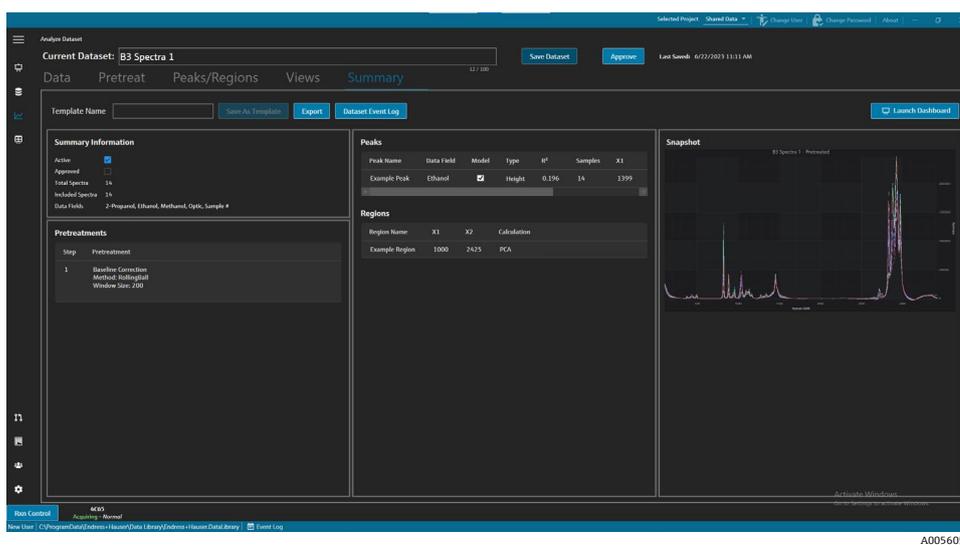
5. Clique duas vezes no nome da aba e renomeie o painel conforme desejado.
6. Clique em **Save Dataset**.
7. Clique em **Close Define Dashboard Tabs**.

5.5 Resumo

Os conjuntos de dados são resumidos e a análise é aplicada na aba Summary. É também na aba Summary que os templates são salvos, que os arquivos de modelo do Raman data library são exportados e que os conjuntos de dados podem ser exportados para modelagem externa.

Na aba Summary, você pode:

- **Visualizar informações resumidas** sobre o conjunto de dados. As informações em Summary information indicam o status do conjunto de dados, seu estado de aprovação, o total de espectros incluídos e os campos de dados aplicáveis. Pré-tratamentos, picos, regiões e uma fotografia do gráfico também são exibidos.
- **Exportar o conjunto de dados.** Clique em **Export** para exportar o conjunto de dados atual. Consulte *Exportação de dados, conjuntos de dados e modelos* →  para mais informações.
- **Iniciar abas do painel.** Clique em **Launch Dashboard** para adicionar uma cópia do painel do conjunto de dados à janela Dashboard. O painel é definido na aba Views. Consulte *Criação de telas no painel: grades, tendências, espectros e gráficos 3D* →  para mais informações.
- **Criar templates** a partir do conjunto de dados. Consulte *Criação de templates* →  para mais informações.
- **Visualizar eventos** relacionados ao conjunto de dados. Clique em **Dataset Event Log** para visualizar o registro de eventos do conjunto de dados atual.



A0056057

Figura 44. Aba Summary

5.5.1 Criação de templates

Quando os componentes de um conjunto de dados podem ser reutilizados em outros conjuntos de dados, os templates simplificam a criação do conjunto de dados. Os templates armazenam todas as configurações de pré-tratamento, análise e visualização e podem ser aplicados a novos conjuntos de dados. Um template contém o seguinte:

- Exibição dos campos de dados
- Pré-tratamentos
- Picos
- Regiões
- Telas
- Abas do painel

Um template não contém dados de espectros.

Os templates salvos podem ser selecionados na janela Create Dataset ao criar um novo conjunto de dados ou na janela Rxn Control. Se um template for selecionado durante a criação do conjunto de dados, todos os componentes do template serão adicionados ao novo conjunto de dados.

Para criar um template a partir do conjunto de dados atual

1. Selecione a aba **Summary**.
2. Insira um nome no campo **Template Name**.
3. Clique em **Save As Template**.
4. Clique em **OK**.

5.5.2 Aplicar templates

Ao criar um novo conjunto de dados, você pode aplicar um template.

Para aplicar um template

1. NA janela Datasets , clique em **Create New Dataset**.
2. Nomeie o conjunto de dados, importe os espectros correspondentes e clique em **Include >**.
3. No campo **Template**, selecione o template na lista.
4. Clique em **Create**. Se aparecer um prompt para salvar um conjunto de dados não salvo, clique em OK.

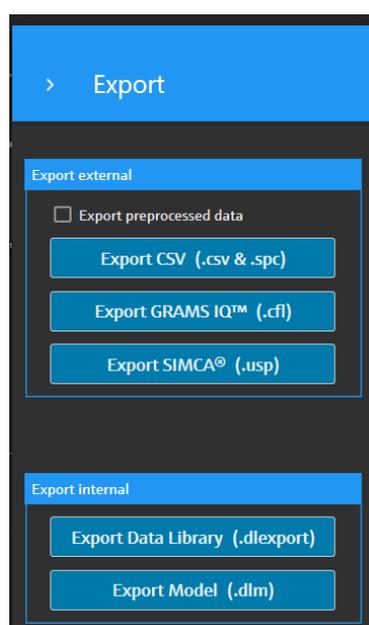
Quando concluído, o Raman data library continua conforme o fluxo de trabalho para a janela Analyze Dataset.

5.5.3 Exportação de dados, conjuntos de dados e modelos

O painel Export é usado para exportar conjuntos de dados do Raman data library para sistemas de software externos e internos. Um arquivo de exportação do Raman data library (.dlexport) pode ser usado para mover conjuntos de dados de uma instância do Raman data library para outra. Para exportar para sistemas de software externos, o conjunto de dados deve ser aprovado.

Para exportar dados, um conjunto de dados ou um modelo

1. Na janela **Datasets** , clique em **Export**.
O menu Export é exibido.



A0055986

Figura 45. Menu Export

2. Selecione as opções a seguir:

- **Export preprocessed data.** Quando marcada, os dados são exportados sem a aplicação de pré-tratamentos.
 - **Export CSV.** Exporta o conjunto de dados como um arquivo de valores separados por vírgula (.csv - comma separated values) contendo nomes de espectros e valores de dados para todos os campos de dados incluídos. Também exporta uma pasta compactada contendo os espectros incluídos no formato SPC (.spc).
 - **Export GRAMS IQ™.** Exporta o conjunto de dados como arquivo GRAMS IQ™ (.cfl). Também exporta os espectros incluídos no formato SPC (.spc). É necessária uma instalação válida do GRAMS IQ™ no mesmo computador que o Raman data library para que seja possível exportar como um arquivo GRAMS IQ™ (.cfl).
 - **Export SIMCA®.** Exporta o conjunto de dados como um arquivo SIMCA® (.usp). É necessária uma instalação válida do SIMCA® no mesmo computador que o Raman data library para que seja possível exportar como um arquivo SIMCA® (.usp).
 - **Export Data Library.** Exporta o conjunto de dados como um arquivo da biblioteca de dados Raman (.dllexport). Esse tipo de arquivo pode ser importado na janela Datasets.
 - **Export Model.** Exporta um arquivo de modelo (.dlm) que é criado usando os pré-tratamentos e picos do conjunto de dados. Esse arquivo pode ser exportado para o Raman RunTime usando a janela Rxn Control no Raman data library. O arquivo de modelo pode ser usado para gerar valores de processo de componentes no RunTime.
3. Navegue até o local da pasta e nomeie o arquivo de dados.
 4. Selecione **Mark Inactive** ou **Keep Active** para o conjunto de dados atual.

6 Controle de analisadores Raman Rxn

O Rxn Control é usado para gerenciar os analisadores Raman RunTime Rxn para coleta e modelagem de espectros Raman e foi projetado para imitar a interface de usuário do Raman RunTime. Para acessar a janela Raman Analyzer, é necessário criar uma conexão de fonte espectral OPC. Consulte *Adicionar uma fonte espectral OPC* →  para instruções.

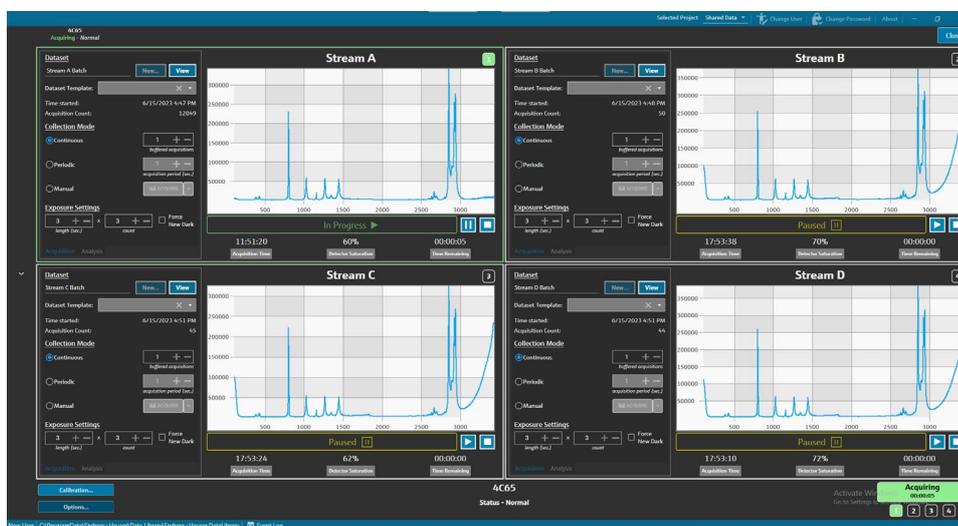
NOTA

Para informações sobre a operação segura dos analisadores Raman Rxn e do software Raman RunTime, consulte as *Instruções de Operação do Raman RunTime (BA02180C)*.

- ▶ Dependendo da versão do Raman RunTime que estiver usando, leia as *Instruções de Operação do Raman RunTime* correspondentes antes de usar o Raman data library Rxn Control.



Figura 46. Botão Rxn Control



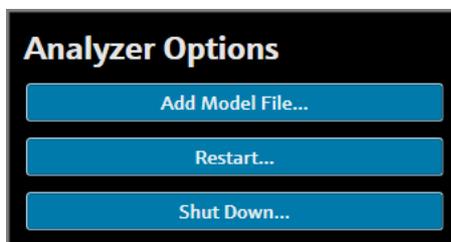
A0056059

Figura 47. Janela Raman Analyzer

O botão **Rxn Control** só está presente quando um analisador Raman Rxn está conectado ao Raman data library. Para conectar um analisador, consulte as instruções em *Adicionar uma fonte espectral OPC* → .

6.1 Opções do analisador

O menu **Analyzer Options** é acessado clicando em **Options** na parte inferior da janela **Raman Analyzer**.



A0056062

Figura 48. Opções do analisador Rxn

6.1.1 Adicionar um arquivo de modelo

Para adicionar um arquivo de modelo:

1. Na janela **Rxn Control**, clique em **Options**.
A caixa de diálogo **Analyzer Options** é exibida.

2. Clique em **Add Model File** para selecionar um arquivo de modelo a ser enviado ao Raman RunTime.

Os arquivos de modelo adicionados podem ser usados para análise. Eles são ativados ou desativados ao clicar na aba **Analysis** em na janela de uma sonda. Os tipos de arquivos válidos incluem: Arquivos .usp, .rusp, .dlm, .pxm, .pxs, .cal, .mat, e .unsb. Para detalhes sobre os tipos de modelos compatíveis com o Raman RunTime, consulte as *Instruções de Operação do Raman RunTime* (BA02180).

Para instruções sobre como reiniciar ou desligar o analisador, consulte *Reiniciar ou desligar o analisador* → .

6.2 Controle de canais

Os analisadores Raman Rxn podem ter até 4 sondas, ou canais de medição, na janela Rxn Control. Cada canal possui um painel de controle na janela Raman Analyzer. Use o painel de canais para selecionar e visualizar conjuntos de dados, definir modos de coleta, definir configurações de exposição, entre outros.

Cada painel de canal contém configurações que refletem as operações do Raman RunTime. Para descrições completas da funcionalidade encontrada em um painel de canal, consulte as *Instruções de operação do Raman RunTime* (BA02180).

6.2.1 Aquisição de canais

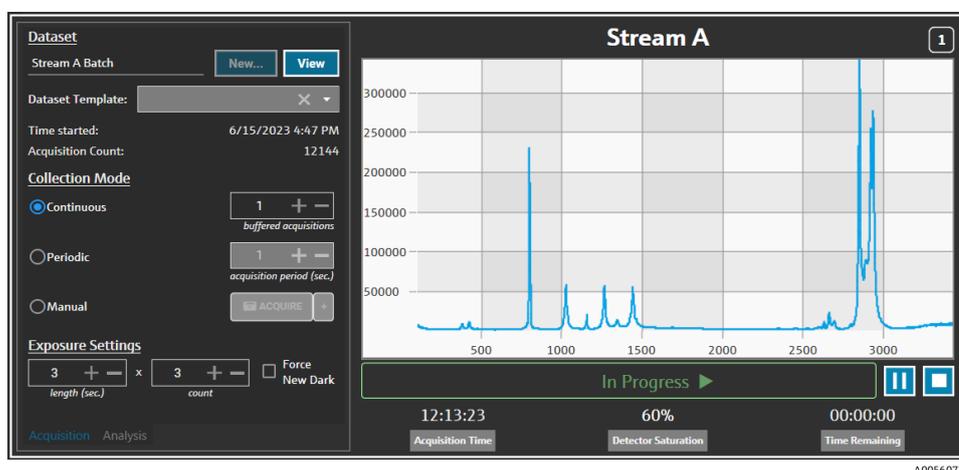


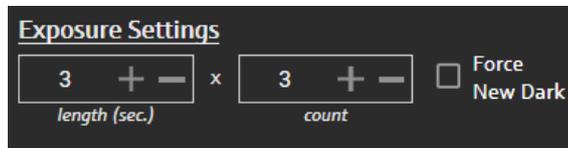
Figura 49. Painel Channel control

Na aba **Acquisition** do canal, selecione:

- **New.** Cria um novo conjunto de dados nomeado.
- **View.** Inicia o conjunto de dados atual na janela Dashboard.
- **Dataset template.** Selecione um template para aplicar ao novo conjunto de dados. Um template deve ser selecionado antes que um lote seja iniciado.
- **Time Started.** O tempo (em segundos) decorrido desde que o conjunto de dados atual foi iniciado.
- **Acquisition Count.** O número de aquisições para o conjunto de dados atual.
- **Collection Modes.** O modo de coleta da sonda pode ser alterado ao selecionar uma das três opções:
 - **Continuous.** O modo de coleta contínua percorre cada sonda ativa o mais rápido possível. Essa configuração é recomendada para o desenvolvimento de métodos ao coletar amostras de referência frequentes e para monitoramento e controle quando os modelos estão ativos. O modo contínuo inclui uma opção de aquisição com buffer.
 - **Periodic.** O modo de coleta periódica adquire espectros em intervalos especificados e é normalmente usado durante o desenvolvimento do método para permitir que os espectros sejam sincronizados com as amostras que estão sendo obtidas dos reatores ou com outros eventos de processo cronometrados. As aquisições com buffer não são uma opção no modo periódico.
 - **Manual.** Use o modo de coleta manual para adquirir espectros que são acionados manualmente pelo botão  **Acquire**. Os nomes das amostras podem ser especificados para cada espectro clicando em +.

- Exposure Settings.** As configurações de exposição de duração (segundos) e contagem podem ser alteradas clicando em + e - ou digitando manualmente um valor com o teclado. Selecione **Force New Dark** para forçar uma nova exposição escura após cada aquisição.

A coleta de uma nova exposição escura pode atenuar as contribuições não relacionadas à amostra na medição devido à corrente escura. Para mais informações sobre o Force New Dark, consulte as *Instruções de operação do Raman RunTime (BA02180)*.

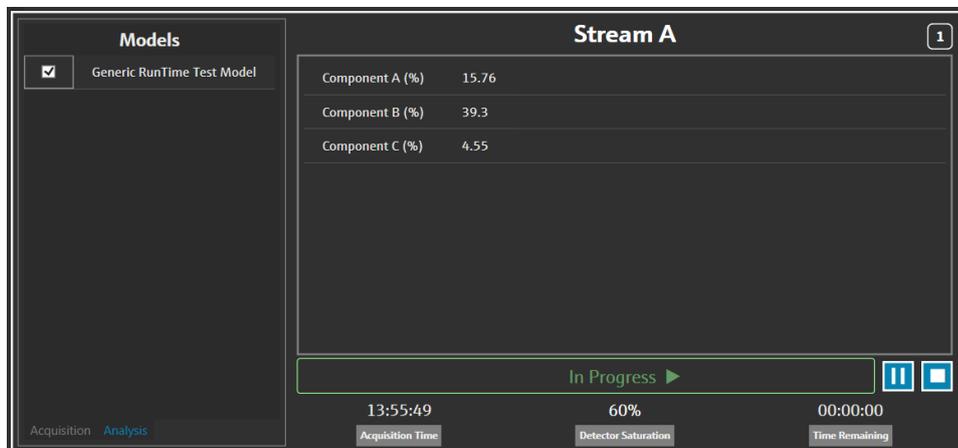


A0056075

Figura 50. Configurações de exposição

6.2.2 Aplicação de modelos na aba de análise do canal

A aba **Analysis** do canal permite selecionar e aplicar modelos no Raman RunTime para receber previsões de modelos durante a aquisição do conjunto de dados.



A0056076

Figura 51. Aba de análise de controle do canal

Para escolher um modelo, marque o nome do arquivo do modelo. As seguintes informações são exibidas:

- Os valores previstos são exibidos na aba Analysis.
- Os resultados previstos do modelo do Raman RunTime são exibidos entre colchetes na janela Analyze, por exemplo [8.14].

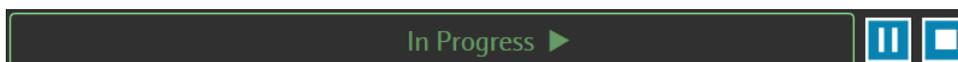
6.2.3 Aquisição de espectros

Para iniciar a aquisição do conjunto de dados, clique em **Play ▶**. Após o início da aquisição do conjunto de dados, o botão play muda para um botão de pausa.

Clique em **Stop ▢** para parar a aquisição do conjunto de dados.

6.2.4 Barra de status do canal

A barra de status do canal é mostrada sob o gráfico do espectro. Um canal pode ter um status Not Started (não iniciado), In Process (em processo), Paused (pausado) ou Completed (concluído).

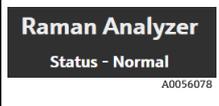


A0056077

Figura 52. Barra de status do canal

6.2.5 Indicadores de status e ações do analisador

O indicador de status do analisador é mostrado na parte inferior central da janela Rxn Control. Há três status para o analisador: Normal, Warning (aviso), e Error (erro).

Status	Descrição
	O status é normal.
	Se for encontrado um aviso do sistema, a exibição muda para um aviso em amarelo. Avisos devem ser aceitos mas uma ação imediata pode não ser necessária. Clique no status para visualizar detalhes do aviso.
	Se for encontrado um erro do sistema, a exibição muda para um erro em vermelho. Os erros exigem ação imediata. Clique no status para visualizar detalhes do aviso.

Consulte as *Instruções de operação do Raman RunTime* (BA02180) para uma lista completa de avisos e erros do sistema.

6.2.6 Indicador de ações do analisador

O indicador de ações do analisador é mostrado na parte inferior direita da janela Rxn Control. O indicador mostra a ação atual que está sendo executada. Se a ação for específica para um canal, o número do canal afetado ficará piscando. Em caso de emergência, o botão stop vermelho no indicador cancela o processo de calibração ou verificação que está ocorrendo no momento.



Figura 53. Adquirindo espectros



Figura 54. Pausado ou aguardando a entrada do usuário



Figura 55. Calibrando (sonda ou interna)



Figura 56. Verificando a sonda

6.3 Calibração e verificação do analisador Raman Rxn

O controle do analisador Raman Rxn por meio do Raman data library não permite que os espectros sejam coletados sem passar pelas calibrações interna e da sonda. Todas as calibrações são necessárias antes da aquisição do espectro. A verificação é opcional, mas recomendada.

Para obter instruções completas sobre a calibração ou verificação de um analisador ou sonda Raman Rxn, consulte as instruções aplicáveis do kit de calibração da sonda e as *Instruções de operação do Raman RunTime* (BA02180).

Para realizar a calibração e verificação do analisador Rxn:

1. Na janela **Raman Analyzer**, clique em **Calibration**.
A caixa de diálogo Calibration é aberta.
2. Selecione as opções de calibração interna:
 - **Calibration Mode.** O modo de calibração para calibração interna (Auto, XAxis (eixo x), ou All (todos)).
 - **Laser Power.** A potência do laser em mW.
 - Clique em **Calibrate** para executar uma calibração interna.



Figura 57. Caixa de diálogo Calibration

3. Selecione as opções para o relatório de calibração:
 - Clique em **View** para visualizar o arquivo de calibração (.pdf).
 - Clique em **Save** para salvar uma cópia do arquivo de calibração (.pdf).
4. Selecione as opções de calibração e verificação da sonda:
 - **Verification Standard.** A amostra de referência padrão usada para verificar os resultados da calibração da sonda. Embora essa etapa não seja exigida para coletar um espectro Raman, ela é altamente recomendada.
 - Clique em **Calibrate** em um canal para abrir a janela de calibração da sonda. Siga as instruções de calibração e clique em **Load** para selecionar um arquivo de referência de intensidade a ser usado para a calibração da sonda. Clique em **Save** para salvar uma cópia do arquivo de referência de intensidade selecionado.

No momento, o uso do kit de calibração e verificação Raman com um arquivo espectral de origem baseado no Padrão de Referência de Calibração (CRS - Calibration Reference Standard) não é suportado pela interface de controle do analisador Rxn do Raman data library.

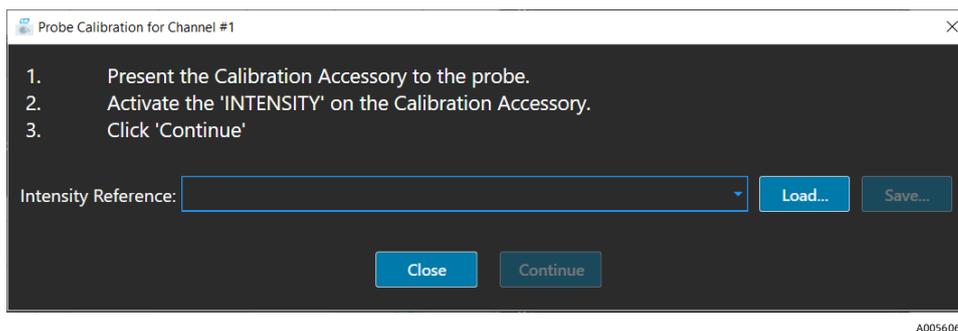


Figura 58. Janela de calibração da sonda, HCA

- Clique em **Continue** para iniciar a calibração da sonda. Após a conclusão da calibração da sonda, a data/hora da calibração é atualizada.
 - Clique em **Verify** para verificar os resultados da calibração da sonda.
5. Repita as etapas acima para cada analisador e sonda.
 6. Quando a calibração e verificação forem concluídas, feche a caixa de diálogo de calibração.

7 Conformidade FDA 21 CFR Parte 11

A versão cGxP do Raman data library apresenta funcionalidades adicionais para conformidade com a norma FDA 21 CFR parte 11. Esses recursos oferecem suporte a uma implementação centralizada dos requisitos do 21 CFR parte 11, permitindo uma configuração do processo regulamentada. A versão cGxP do Raman data library inclui suporte para:

- Gestão de usuários
- Registros eletrônicos e assinaturas eletrônicas
- Gestão das configurações do sistema
- Trilha de auditoria (função de controle de alterações)
- Registros de eventos que incluem rastreabilidade de ações do usuário e rastreabilidade de dados espectrais

Para apoiar as implementações do 21 CFR Parte 11 no Raman data library cGxP, a Endress+Hauser disponibilizou um documento dedicado, o Questionário Raman data library 21 CFR Part 11 (nº 4005768), que é fornecido com a versão cGxP do Raman data library.

7.1 Gestão de usuários

No 21 CFR Parte 11, a gestão de usuários refere-se ao conjunto de controles e procedimentos que garantem o acesso seguro e regulamentado a registros eletrônicos e assinaturas eletrônicas. Uma das principais diferenças entre a versão básica do Raman data library e a versão cGxP é a gestão de usuários. Para dar suporte a isso, o Raman data library cGxP integrou a gestão de usuários, cuja autenticação de credenciais pode ser de natureza local (ou seja, por meio do próprio software), por meio de logins locais em estações de trabalho Windows ou por meio de uma conexão com um domínio do Active Directory.

Quando um modo de autenticação local é utilizado, a capacidade de impor aspectos de complexidade de senha é suportada, bem como o bloqueio após um número definido de falhas de login e o timeout automático. Se a autenticação de credenciais baseada em domínio for utilizada, todos esses aspectos, exceto o timeout do software, serão controlados pelo domínio.

A identificação e controle de acesso únicos para o usuário são implementados nativamente. Os privilégios de acesso do usuário podem ser configurados com funções de usuário definidas e controladas. A função de desativar contas e impor uma alteração de senha no próximo login também está disponível. Uma trilha de auditoria específica do usuário na forma de registros de eventos está presente.

A gestão de usuários dentro do Raman data library é implementada de forma a ajudar a garantir que os registros eletrônicos sejam seguros, o acesso seja controlado e todas as ações do usuário sejam rastreáveis, dando sustentação à confiabilidade e à integridade dos dados em indústrias regulamentadas.

Para mais detalhes sobre a gestão de usuários, consulte *Gestão de usuários (somente na versão cGxP)* → .

7.2 Registros eletrônicos e assinaturas eletrônicas

Os registros eletrônicos e assinaturas eletrônicas são componentes fundamentais do 21 CFR Parte 11, que estabelece os critérios sob os quais eles são considerados confiáveis, fidedignos e equivalentes aos registros em papel e às assinaturas manuscritas. As assinaturas eletrônicas dentro do Raman data library são vinculadas a usuários individuais e suas credenciais, tornando-as legalmente vinculantes e irrevogáveis.

Para ajudar as indústrias com a implementação do 21 CFR Parte 11 no Raman data library e, especificamente, no tópico de registros eletrônicos e assinaturas eletrônicas, a Endress+Hauser disponibilizou um documento dedicado, a Avaliação ER/ES do 21 CFR Parte 11 no Raman data library (nº 4005770), que é entregue com a variante cGxP do software.

7.3 Gestão das configurações do sistema

As configurações do sistema no Raman data library dizem respeito a aspectos de segurança que desempenham um papel fundamental para ajudar a alcançar a conformidade com o 21 CFR Parte 11. As configurações do sistema são gerenciadas na janela Security. Para detalhes sobre o gerenciamento das configurações de segurança, consulte *Configurações de segurança (somente na versão cGxP)* → .

7.4 Trilha de auditoria através da função de controle de alterações

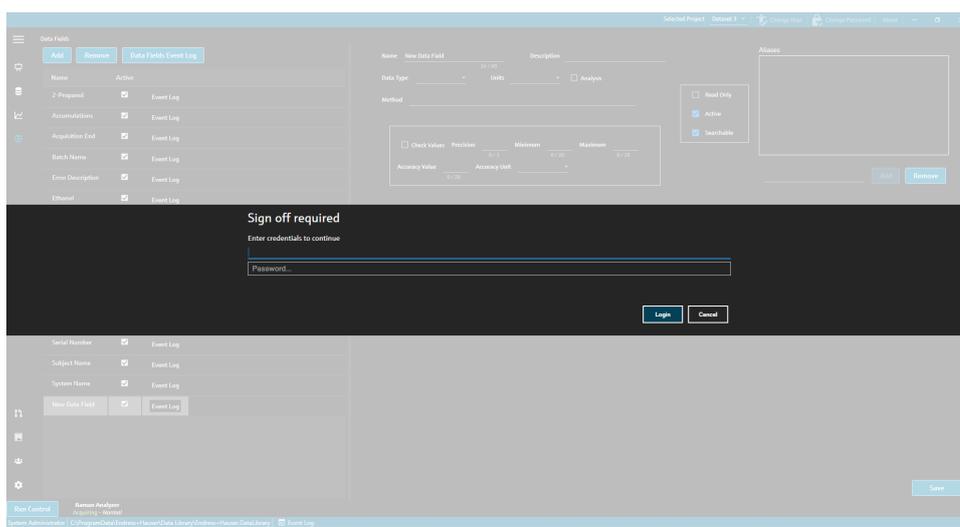
A trilha de auditoria é um componente essencial da conformidade com o 21 CFR Parte 11, garantindo que todas as alterações em registros eletrônicos, sistemas ou processos sejam gerenciadas e documentadas adequadamente.

Na versão cGxP do Raman data library, como um complemento à gestão de usuários, foi implementada uma função de controle de alterações. Isso garante que todas as alterações sejam documentadas, incluindo o motivo da alteração, a data e a hora, e o indivíduo responsável por fazer e aprovar a alteração. Uma trilha de auditoria das alterações é rastreada e documentada nos vários registros de eventos disponíveis. Além disso, a função de controle de alterações garante que somente as pessoas com a devida autorização tenham permissão para fazer atualizações ou modificações.

Certas ações, como remover ou cancelar a aprovação de conjuntos de dados e adicionar, editar ou remover campos de dados e remover projetos ou fontes espectrais, exigem que o usuário assine antes que a ação possa ser implementada. Quando apropriado, o usuário deve assinar com suas credenciais e selecionar um motivo para a alteração com um espaço para quaisquer comentários associados.

Os motivos padrão disponíveis para o controle de alterações são:

- Erro de coleta
- Desativar
- Erro de entrada
- Configuração inicial
- Outros



A0056145

Figura 59. Controle de alterações - é necessária a assinatura do usuário

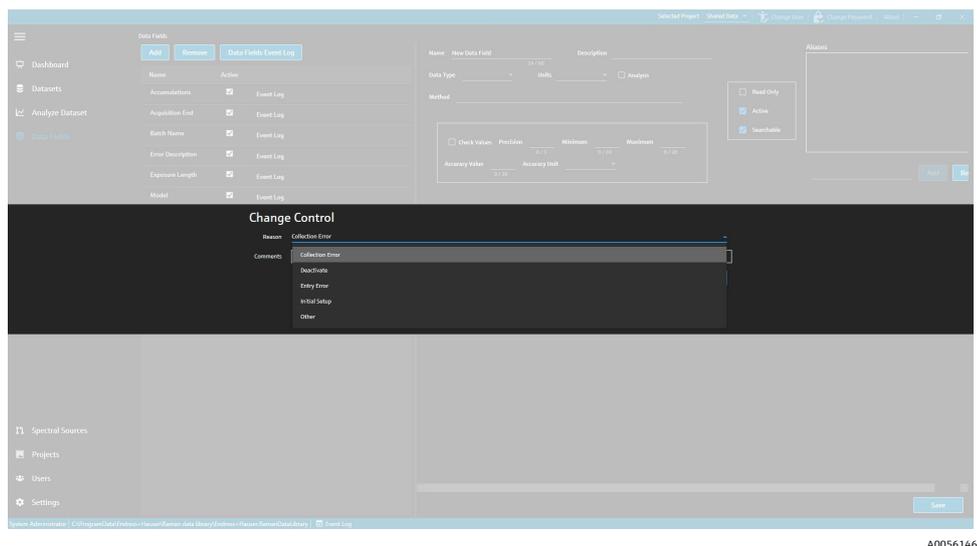


Figura 60. Controle de alterações - fornecimento de uma descrição e motivo da alteração

Essas medidas de controle de alterações ajudam a manter a integridade, confiabilidade e conformidade dos registros eletrônicos e sistemas, além de auxiliar nos processos de aprovação e auditoria por uma equipe de qualidade.

7.5 Trabalho com registros de eventos

Para garantir a rastreabilidade e o registro de todos os eventos em um ambiente cGxP, o Raman data library possui registros de eventos que incluem uma trilha de auditoria básica. Eles variam de globais (todas as ações) a registros de eventos específicos para os usuários ou recursos. Os registros de eventos e as trilhas de auditoria são componentes essenciais da conformidade com o 21 CFR Parte 11, garantindo a integridade e a rastreabilidade dos registros eletrônicos.

Os diversos tipos de registros de eventos em que um usuário pode visualizar eventos no Raman data library são:

- **Registro de eventos global.** Esse registro de eventos pode ser acessado em todas as telas do Raman data library e está na barra de tarefas inferior da janela do aplicativo.
- **Registros de eventos de usuários.** Exibe eventos para todos os usuários ou para um usuário específico. Isso é acessado na tela Users.
- **Registros de eventos de projetos e conjuntos de dados.** Exibe eventos de todos os projetos ou de um projeto específico e lista eventos relacionados a um conjunto de dados. Esses registros são acessados na tela Projects e na tela de resumo do conjunto de dados.
- **Registros de eventos de fontes espectrais.** Exibe o registro de eventos de fontes espectrais específicas ou de todas as fontes espectrais.
- **Registros de eventos dos campos de dados.** Exibe o registro de eventos de um campo de dados específico ou de todos os campos de dados.

Os registros de eventos podem ser visualizados e impressos em um formato de documento exclusivo que pode ser facilmente visualizado e não pode ser alterado. É possível realizar uma pesquisa de texto no registro. Antes de abrir outro registro de eventos, o registro de eventos atual deve ser fechado. Apenas para fins de visualização, os registros de eventos podem ser salvos como *.pdf, *.xlsx e *.docx.

7.5.1 Registro de eventos global

O registro de eventos global exibe todos os eventos em uma implementação do Raman data library. Devido à amplitude das informações registradas, o registro de eventos global pode levar algum tempo para ser carregado.



Figura 61. Botão do registro de eventos global

7.5.2 Registro de eventos do usuário

Na janela Users, é possível visualizar registros de eventos que listam eventos relacionados a um usuário específico ou a todos os usuários. Esse log coleta todas as alterações aos usuários, incluindo a adição ou remoção de usuários, a adição ou remoção de funções para um usuário, logins de usuários e tentativas de login com falha. A partir da janela Users, você pode selecionar os seguintes registros de eventos:

- **Users Event Log.** Exibe o registro de eventos para todos os usuários.
- **Event Log.** Exibe o registro de eventos para o usuário especificado.

The screenshot shows a window titled 'Reports' with a sub-header 'Users - Event Log' and 'Software Version 2.0.2'. The window contains a table with the following data:

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-GL3GV14Laura			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-GL3GV14Laura			User 'Administrator' signed in.

A0056147

Figura 62. Registro de eventos do usuário

7.5.3 Registros de eventos de projetos e conjuntos de dados

Na janela Project, é possível visualizar registros de eventos que listam eventos relacionados a um projeto, como a adição ou remoção de conjuntos de dados. Na janela Projects, você pode selecionar:

- **Projects Event Log.** Visualizar um registro de eventos para todos os projetos.
- **Event Log.** Visualizar o registro de eventos para um projeto específico.

The screenshot shows a window titled 'Reports' with a sub-header 'Projects - Event Log' and 'Software Version 2.0.2'. The window contains a table with the following data:

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. Registro de eventos de projetos

7.5.4 Registros de eventos de fontes espectrais

Na janela Spectral Sources, é possível visualizar registros de eventos que listam eventos relacionados a uma fonte espectral específica, ou todas elas. Esse registro grava todas as alterações nas fontes espectrais, como a adição de novas fontes espectrais, o início ou a interrupção da aquisição em um analisador Raman Rxn ou a alteração das configurações de coleta em batelada na janela Raman Analyzer. Na janela Spectral Sources, você pode selecionar:

- **Spectral Sources Event Log.** Visualize um registro de eventos de todas as fontes espectrais.
- **Event Log.** Visualize o registro de eventos para uma fonte 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-GL3GV14Laura			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-GL3GV14Laura			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-GL3GV14Laura			The laser power was set to 400 on analyzer 'Raman Analyzer'.
6/3/2024 5:48:49 PM	Rxn Control	DESKTOP-GL3GV14Laura			The laser power was set to 400 on analyzer 'Raman Analyzer'.
6/3/2024 5:54:17 PM	Rxn Control	DESKTOP-GL3GV14Laura			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-GL3GV14Laura			The laser power was set to 400 on analyzer 'Raman Analyzer'.

Figura 64. Registro de eventos de fontes espectrais

7.5.5 Registros de eventos dos campos de dados

Na janela Data Fields, é possível visualizar registros de eventos que listam ações relacionadas a um campo de dados específico, ou todos eles. Esse registro coleta todas as alterações nos campos de dados, incluindo a adição de novos campos, a remoção de campos ou a adição de apelidos. Na janela Data Fields, você pode selecionar:

- **Data Fields Event Log.** Visualizar um registro de eventos para todos os campos de dados.
- **Event Log.** Visualizar o registro de eventos para um campo de dados 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.

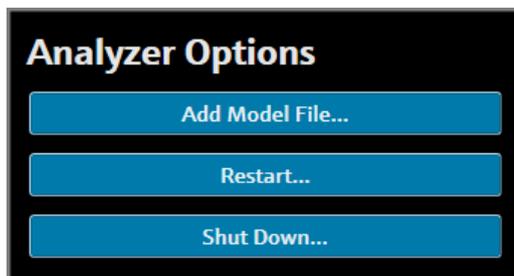
Figura 65. Registro de eventos dos campos de dados

8 Diagnóstico e localização de falhas

8.1 Reiniciar ou desligar o analisador

Para reiniciar ou desligar o analisador:

1. Na janela **Raman Analyzer**, clique em **Options**.
A caixa de diálogo Analyzer Options é exibida.



A0056062

Figura 66. Opções do analisador

2. Escolha uma das seguintes opções:
 - Clique em **Restart** para reiniciar o analisador.
 - Clique em **Shut Down** para desligar o analisador.
3. Clique em **OK** na caixa de diálogo de confirmação.

Depois que um analisador Raman RunTime tiver sido desligado ou reiniciado, reinicie o serviço do Windows para conectar o Raman data library ao RunTime. Para reiniciar o serviço do Windows, interrompa e inicie o serviço do **Raman data library da Endress+Hauser** usando o gerenciador de serviços da bandeja do sistema ou reinicie o computador do Raman data library.

8.2 Os espectros não estão sendo coletados

Se os espectros forem adquiridos usando a janela Raman Analyzer, mas não estiverem sendo adicionados a um conjunto de dados, isso indica que o serviço do Windows foi desconectado do analisador Raman RunTime e a conexão precisa ser restabelecida.

O serviço do Windows pode se desconectar do analisador Raman RunTime por diversos motivos, inclusive:

- Desligamento do analisador por longos períodos de tempo
- Alteração das configurações de rede no software Raman RunTime
- Alteração das configurações de rede no computador que está executando o Raman Data Library.

Para reestabelecer a conexão do serviço do Windows, interrompa e inicie o serviço do **Raman data library da Endress+Hauser** usando o gerenciador de serviços da bandeja do sistema ou reinicie o computador do Raman data library.

9 Suporte

9.1 Sobre

Clique em **About** na faixa de opções superior para abrir a janela About Raman Data Library. Essa janela exibe a versão e o número da versão do software, a ID de instalação e as informações de direitos autorais.

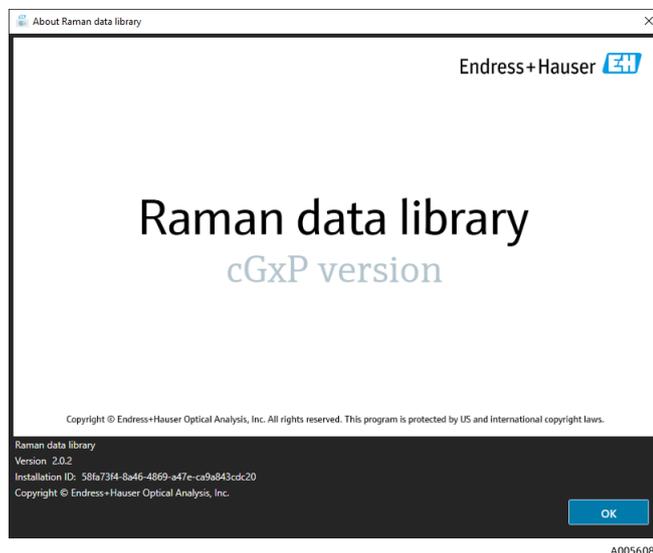


Figura 67. Janela About

9.2 Informações de contato

Para assistência técnica, consulte em nosso site (<https://www.endress.com/contact>) a lista dos canais de venda locais em sua área.

10 Informações de Copyright

10.1 Contrato de licença do usuário final

UMA CÓPIA DO CONTRATO DE LICENÇA DO USUÁRIO FINAL PARA O SOFTWARE *Raman data library* FOI INCLUÍDA NESTE DOCUMENTO PARA FINS DE REFERÊNCIA.

LEIA ATENTAMENTE ESTE CONTRATO DE LICENÇA DO SOFTWARE ANTES DE INSTALAR OU USAR O SOFTWARE.

AO CLICAR NO BOTÃO "ACCEPT", INSTALAR O PRODUTO OU USAR O EQUIPAMENTO QUE CONTÉM ESTE PRODUTO, VOCÊ CONCORDA EM CUMPRIR ESTE CONTRATO. SE VOCÊ NÃO CONCORDAR COM TODOS OS TERMOS DESTES CONTRATO, CLIQUE NO BOTÃO "DO NOT ACCEPT" E O PROCESSO DE INSTALAÇÃO NÃO CONTINUARÁ.

Este é um Contrato de Licença do Usuário Final entre você, o usuário final do software *Raman data library* ("Licenciado"), e a Endress+Hauser Optical Analysis, Inc. ("Licenciador" ou "Endress+Hauser"), uma empresa de Delaware com sede em 371 Parkland Plaza, Ann Arbor, Michigan 48103. Ao instalar o software *Raman Data Library*, você concorda em cumprir os termos e as condições deste Contrato.

1.0. Licença não exclusiva. O Licenciador concede a você uma licença não exclusiva para usar o *Raman data library*, que inclui o pacote de programas de computador e dados em formato legível por máquina e manuais do usuário, que juntos constituem o "Programa Licenciado", sujeito aos seguintes termos e condições, que se aplicam a toda e qualquer versão do Programa Licenciado instalada por você

2.0. Escopo de direitos. O Licenciado pode:

2.1. Instalar o Programa Licenciado em um único computador a ser usado para controlar a instrumentação espectrográfica fabricada pela Endress+Hauser;

2.2. Usar e executar o Programa Licenciado no computador definido em 2.1 para atender às necessidades do usuário final;

2.3. Em relação ao seu uso autorizado do Programa Licenciado, armazenar as instruções ou dados legíveis por máquina do Programa Licenciado, transmiti-los e exibi-los em máquinas associadas ao(s) computador(es) especificado(s); e

2.4. Fazer uma cópia do Programa Licenciado em formato de código objeto legível por máquina, apenas para fins de backup não produtivo.

3.0. Proteção e Restrições de Propriedade.

3.1. O Programa Licenciado é protegido por direitos autorais. Os direitos autorais são de propriedade da Endress+Hauser. O Programa Licenciado é licenciado, e não vendido, para uso pelo Licenciado. O Licenciador não vende nem transfere a titularidade do Programa Licenciado ao Licenciado.

3.2. Você não terá a propriedade de todos os direitos, títulos e interesses relativos ao Programa Licenciado e a todas as modificações e aprimoramentos do mesmo (incluindo a propriedade de todos os segredos comerciais e direitos autorais relativos a eles).

3.3. Este Programa Licenciado contém informações confidenciais e/ou proprietárias que são protegidas por direitos autorais e disposições de tratados internacionais. Todos os direitos são reservados. Nenhuma parte do Programa Licenciado pode ser fotocopiada, reproduzida ou traduzida para outro idioma sem a permissão por escrito do Licenciador. Qualquer uso, divulgação, cessão, transferência ou reprodução não autorizada dessas informações confidenciais será processada com todo o rigor da lei.

3.4. Você não poderá usar, copiar, modificar ou distribuir o Programa Licenciado (eletronicamente ou de outra forma), ou qualquer cópia, adaptação, transcrição ou parte incorporada do mesmo, exceto quando expressamente autorizado pelo Licenciador. O Licenciado não pode desmontar, descompilar ou de qualquer outra forma traduzir o Programa Licenciado. Seus direitos não podem ser transferidos, alugados, cedidos ou sublicenciados, exceto no caso de uma transferência do Programa Licenciado em sua totalidade para (1) um sucessor no interesse de todo o negócio do Licenciado que assuma as obrigações deste Contrato ou (2) qualquer outra parte que seja razoavelmente aceitável para o Licenciador, assine uma versão substituta deste Contrato e pague uma taxa administrativa destinada a cobrir os custos associados. O Licenciado não pode instalar o Programa Licenciado em qualquer outro sistema de computador ou utilizá-lo em qualquer outro local sem a autorização expressa do Licenciador obtida com antecedência. Se você usar, copiar ou modificar o Programa Licenciado ou se transferir a posse de qualquer cópia, adaptação, transcrição ou porção incorporada do Programa Licenciado para qualquer outra parte de qualquer forma não expressamente autorizada pelo Licenciador, sua licença será automaticamente rescindida.

3.5. Você autoriza o Licenciador a entrar nas instalações do Licenciado para inspecionar o Programa Licenciado de qualquer maneira razoável durante o horário comercial regular para verificar a conformidade do Licenciado com os termos deste documento.

3.6. Você reconhece que, em caso de violação pelo Licenciado de qualquer uma das disposições anteriores, o Licenciador não terá um recurso adequado em dinheiro ou danos. O Licenciador terá, portanto, o direito de obter uma liminar contra tal violação de qualquer tribunal de jurisdição competente imediatamente após a solicitação. O direito do Licenciador de obter medidas cautelares não limitará seu direito de buscar outras soluções.

4.0. Garantia Limitada e Limitação de Responsabilidade.

4.1. O Licenciador tomou o cuidado, para seu benefício, de garantir a precisão e a confiabilidade do Programa Licenciado. Esta garantia está expressamente condicionada à observância, por parte do usuário, dos procedimentos operacionais, de segurança e de controle de dados estabelecidos nos materiais incluídos com o Programa Licenciado.

4.2. Na medida em que não seja proibido por lei, em nenhuma hipótese a Endress+Hauser será responsável por danos pessoais ou quaisquer danos incidentais, especiais, indiretos ou consequenciais, incluindo, sem limitação, danos por perda de lucros, perda de dados, interrupção de negócios ou quaisquer outros danos ou perdas comerciais, decorrentes ou relacionados ao uso ou à incapacidade de usar o software da Endress+Hauser, independentemente da causa, independentemente da teoria de responsabilidade (contratual, extracontratual ou outra) e mesmo que a Endress+Hauser tenha sido avisada da possibilidade de tais danos. Algumas jurisdições não permitem a limitação de responsabilidade por danos pessoais, incidentais ou consequenciais, portanto, essa limitação pode não se aplicar a você. Em nenhuma hipótese a responsabilidade total da Endress+Hauser perante o Licenciado por todos os danos (exceto conforme exigido pela lei aplicável em casos envolvendo danos pessoais) excederá o valor total de todas as taxas de licença pagas ao Licenciador nos termos deste instrumento). As limitações anteriores se aplicarão mesmo que o recurso mencionado acima não cumpra seu propósito essencial.

4.3. O Licenciador não assume nenhuma responsabilidade por erros ou omissões no Programa Licenciado e se reserva o direito de fazer alterações e melhorias sem aviso prévio em quaisquer produtos aqui contidos, por qualquer motivo.

4.4. Exceto conforme expressamente estabelecido neste Contrato, o Licenciador se isenta de todas e quaisquer promessas, representações e garantias com relação ao Programa Licenciado, incluindo sua condição, sua conformidade com qualquer representação ou descrição, qualquer negligência e sua comercialização ou adequação para um uso específico. As informações fornecidas com o Programa Licenciado não se destinam a ser, nem devem ser entendidas como, representações ou garantias relativas ao Programa Licenciado descrito.

4.5. A responsabilidade cumulativa do Licenciador perante o Licenciado por todas as reivindicações relacionadas ao Programa Licenciado e a este Contrato, incluindo qualquer causa de ação que possa ser considerada contratual, extracontratual ou de responsabilidade objetiva, não excederá o valor total de todas as taxas de licença pagas ao Licenciador nos termos deste instrumento. Essa limitação de responsabilidade deve ser aplicada independentemente do fato de outras disposições deste Contrato terem sido violadas ou terem se mostrado ineficazes. O Licenciador não terá qualquer responsabilidade pela perda de dados ou documentação, ficando entendido que o Licenciado é responsável por precauções razoáveis de backup.

4.6. O Programa Licenciado é vendido "no estado em que se encontra" e você assume todo o risco quanto à sua qualidade e desempenho.

4.7. Você pode ter direitos adicionais de acordo com determinadas leis, por exemplo leis do consumidor, que não permitem a exclusão de garantias implícitas ou a exclusão ou limitação de determinados danos. Se tais leis forem aplicáveis, estas exclusões e limitações podem não se aplicar a você.

5.0. Disposições Gerais.

5.1. Este Contrato será regido e interpretado de acordo com as leis do Estado de Michigan, Estados Unidos da América, mas excluindo especificamente as regras de escolha da lei do Estado de Michigan.

5.2. Nenhuma modificação deste Contrato será vinculante, a menos que seja feita por escrito e assinada por um representante autorizado da parte contra a qual se busca a aplicação da modificação.

5.3. Todas as notificações exigidas ou permitidas por este Contrato deverão ser feitas por escrito e entregues pessoalmente ou enviadas por correio registrado ou certificado, com aviso de recebimento, com a devida postagem afixada.

5.4. Caso qualquer um dos termos deste Contrato seja ou se torne ou seja declarado inválido ou nulo por qualquer corte ou tribunal de jurisdição competente, esse termo ou termos serão nulos e sem efeito e serão considerados separados deste Contrato, e todos os demais termos deste Contrato permanecerão em pleno vigor e efeito.

5.5. ESTE CONTRATO É A DECLARAÇÃO COMPLETA E EXCLUSIVA DAS OBRIGAÇÕES E RESPONSABILIDADES DO LICENCIADOR PARA COM O LICENCIADO E SUBSTITUI QUALQUER OUTRA PROPOSTA, REPRESENTAÇÃO OU OUTRA COMUNICAÇÃO POR PARTE OU EM NOME DO LICENCIADOR COM RELAÇÃO AO ASSUNTO AQUI TRATADO.

6.0 Documentação.

Este documento destina-se ao uso por funcionários e representantes autorizados da Endress+Hauser Optical Analysis, Inc. Nenhuma parte deste documento pode ser reproduzida ou transmitida de qualquer forma ou por qualquer meio, eletrônico ou mecânico, incluindo fotocópia, gravação ou sistemas de armazenamento e recuperação de informações, para qualquer finalidade que não seja o uso pessoal do comprador, sem a permissão expressa por escrito da Endress+Hauser Optical Analysis, Inc. De acordo com a lei, copiar inclui a tradução para outro idioma.

As informações contidas neste documento são consideradas verdadeiras no momento em que foram escritas. A Endress+Hauser Optical Analysis, Inc. se reserva o direito de alterar as informações contidas neste documento sem aviso prévio.

www.addresses.endress.com
