

Руководство пользователя по эксплуатации Raman data library 2.0



Содержание

| | |
|--|-----------|
| 1 Об этом документе..... | 3 |
| 1.1 Назначение документа..... | 3 |
| 1.2 Символы техники безопасности..... | 3 |
| 1.3 Техника безопасности..... | 3 |
| 1.4 Глоссарий..... | 3 |
| 1.5 Документация..... | 5 |
| 1.6 Зарегистрированные товарные знаки..... | 5 |
| 2 Описание изделия | 6 |
| 2.1 Установка | 6 |
| 2.2 Настройки безопасности (только исполнение cGxP) | 7 |
| 2.3 Управление пользователями (только исполнение cGxP) | 8 |
| 3 Управление программой..... | 12 |
| 3.1 Вход в систему (только для версии cGxP) | 12 |
| 3.2 Режимы онлайн и офлайн | 12 |
| 3.3 Пользовательский интерфейс..... | 13 |
| 4 Добавление данных в ПО Raman data library | 16 |
| 4.1 Проекты..... | 16 |
| 4.2 Спектральные источники..... | 17 |
| 4.3 Наборы данных | 20 |
| 4.4 Поля данных..... | 23 |
| 5 Анализ наборов данных..... | 26 |
| 5.1 Viewing Datasets | 26 |
| 5.2 Использование предварительной обработки..... | 33 |
| 5.3 Пики и области | 37 |
| 5.4 Создание представлений панели управления: сетки, тренды, спектры и трехмерные графики | 41 |
| 5.5 Краткий обзор | 47 |
| 6 Управление анализатором Raman Rxn..... | 50 |
| 6.1 Параметры анализатора | 50 |
| 6.2 Управление каналом | 51 |
| 6.3 Калибровка и проверка анализатора Raman Rxn..... | 54 |
| 7 Соответствие требованиям раздела 11 части 21 свода федеральных нормативных актов (CFR) FDA..... | 56 |
| 7.1 Управление пользовательскими учетными записями..... | 56 |
| 7.2 Электронные записи и электронные подписи..... | 56 |
| 7.3 Управление настройками системы | 57 |
| 7.4 Аудиторский след через функцию контроля изменений | 57 |
| 7.5 Работа с журналами событий | 58 |
| 8 Диагностика и устранение неисправностей..... | 61 |
| 8.1 Перезапуск или выключение анализатора..... | 61 |
| 8.2 Спектры не собираются | 61 |
| 9 Поддержка | 62 |
| 9.1 Пункт About..... | 62 |
| 9.2 Контактная информация..... | 62 |
| 10 Информация об авторских правах..... | 63 |
| 10.1 Лицензионное соглашение с конечным пользователем | 63 |

1 Об этом документе

1.1 Назначение документа

В этом документе содержатся инструкции, связанные с общими задачами пользователя для Raman data library, включая навигацию, пояснения полей, обработку данных и многое другое. Инструкции по администрированию, включая установку, управление базой данных и пользователями, а также безопасность, см. в *Руководстве администратора по эксплуатации Raman data library (BA02349C)*.

1.2 Символы техники безопасности

| Структура сообщений | Значение |
|---|---|
| <p>⚠ ПРЕДУПРЕЖДЕНИЕ</p> <p>Причины (последствия) При необходимости, последствия несоблюдения (если применимо) ► Корректирующее действие</p> | Этот символ предупреждает об опасной ситуации. Допущение такой ситуации может привести к серьезным или смертельным травмам. |
| <p>⚠ ОСТОРОЖНО!</p> <p>Причины (последствия) При необходимости, последствия несоблюдения (если применимо) ► Корректирующее действие</p> | Этот символ предупреждает об опасной ситуации. Если не предотвратить опасную ситуацию, она может привести к травмам легкой или средней степени тяжести. |
| <p>ℹ ПРИМЕЧАНИЕ</p> <p>Причина/ситуация При необходимости, последствия несоблюдения (если применимо) Действие/примечание</p> | Данный символ предупреждает о ситуации, которая может привести к повреждению имущества. |

1.3 Техника безопасности

Информация о безопасной эксплуатации анализаторов Raman Rxn и программного обеспечения Raman RunTime приведена в *руководстве по эксплуатации системы Raman RunTime версии 6.5 (BA02180C)*. Перед использованием ПО Raman data library рекомендуется полностью ознакомиться с *руководством по эксплуатации Raman RunTime версии 6.4 (или более новой версии)*.

1.3.1 IT-безопасность

Оператор должен самостоятельно реализовать меры по IT-безопасности, дополнительно защищающие прибор и связанные с ним процессы обмена данными, в соответствии со стандартами безопасности, принятыми на конкретном предприятии.

1.4 Глоссарий

| Термин | Описание |
|--------|--|
| BCA | Точность коррекции фона |
| °C | Градусы Цельсия |
| CFL | Новый формат файла CFL, определенный в "Спецификации универсального формата данных корпорации Galactic Industries", датированной 4 сентября 1997 года. |
| CFR | Кодекс федерального регулирования |
| cGMP | Текущая надлежащая производственная практика |
| cGxP | Надлежащая текущая годная клиническая, лабораторная и/или производственная практика |

| Термин | Описание |
|-----------------------------|--|
| CMMS | Компьютеризированная система управления техническим обслуживанием: компьютерная база данных, содержащая все рабочие заказы на техническое обслуживание и используемая для планирования действий. |
| COTS | Готовое к использованию, настраиваемое решение |
| CTQ | Критически важно для качества |
| GAML | Обобщенный язык разметки для аналитических данных |
| GDP | Надлежащая практика ведения документации |
| GCC | Глобальное управление изменениями |
| IAPP | Политика защиты информационных активов |
| In Situ | На своем первоначальном месте |
| IQ | Квалификация установки |
| LAN | Локальная вычислительная сеть |
| OQ | Эксплуатационная квалификация |
| OS | Операционная система |
| PAT | Технология аналитического контроля процессов |
| ppb | Частей на миллиард |
| ppm | Частей на миллион |
| psig | Фунты на квадратный дюйм (манометрическое) |
| QC | Контроль качества |
| RAM | Оперативная память |
| SPC | Формат файла, определенный разработчиком. |
| URS | Спецификация требований пользователя |
| Авторизованный пользователь | Конечный пользователь, прошедший необходимое обучение и получивший доступ к приложению. |
| Анализ данных | Любой рабочий процесс, целью которого является получение полезной информации из необработанных данных, предоставленных спектрометром. |
| Анализатор Raman Rxn4 | Интегрированная система спектроскопии, предназначенная для размещения волоконно-оптических зондов с целью анализа образцов. |
| ГГц | Гигагерц |
| Графические данные | Ключевые данные, информация, атрибуты, которые могут быть представлены в графическом формате. |
| Гц | Герцы |
| Журнал аудита | Независимая компьютерная запись изменений в электронных документах с указанием времени, оператора, действия, содержания и, при необходимости, причины. |
| ИБП | Источник бесперебойного питания |
| куб. фут/мин | Кубические футы в минуту |
| Критическое требование | Требование, которое, если не выполнено, оказывает негативное влияние на выполнение требований регуляторных органов, целостность данных или безопасность. |
| Некритическое требование | Требование, которое, если не выполнено, не оказывает негативного влияния на выполнение требований регуляторных органов, целостность данных или безопасность. |
| Нм | нанометры |

| Термин | Описание |
|------------------------|--|
| Окончательный отчет | Документ, обобщающий все результаты, полученные в результате выполнения документа проверки. |
| Пароль | Уникальный, личный код, вводимый пользователем в целях идентификации. |
| ПК | Персональный компьютер |
| Спектры | Необработанные данные с рамановского спектрометра после обработки в формате SPC (GRAMS). |
| Фильтр Савицкого-Голея | Цифровой фильтр, который можно применять к набору цифровых точек данных с целью сглаживания данных, то есть повышения точности данных без искажения тенденции сигнала. |
| Электронная подпись | Авторизация электронной записи отдельным лицом в форме цифрового подтверждения, имеющего юридическую силу и эквивалентного собственноручной подписи физического лица. |
| Электронный документ | Любая комбинация записей в цифровом виде, которая создается, изменяется, поддерживается, архивируется, извлекается или распространяется с помощью компьютерной системы и используется для деятельности, регулируемой cGxP. |

1.5 Документация

Все необходимые документы можно получить в следующих источниках:

- На прилагаемом носителе (не для каждого варианта исполнения прибора)
- В мобильном приложении Endress+Hauser: www.endress.com/supporting-tools
- В разделе "Загрузки" веб-сайта Endress+Hauser: www.endress.com/downloads

Настоящий документ является неотъемлемой частью пакета документов, состав которого указан ниже:

| Каталожный номер | Тип документа | Описание |
|------------------|--|---|
| BA02349C | Руководство по эксплуатации ПО Raman data library для администратора | Полный обзор операций, связанных с управлением безопасностью и информационной базой ПО Raman data library. |
| KA01717C | Краткое руководство по эксплуатации ПО Raman data library | Краткое руководство по запуску ПО Raman data library после установки. |
| TI01802C | ПО Raman data library – техническая информация | Пособие по планированию системы анализа данных. Документ содержит все технические данные программного обеспечения. |

1.6 Зарегистрированные товарные знаки

SIMCA®

Зарегистрированный товарный знак компании Sartorius Stedim Biotech.

GRAMS IQ™

Зарегистрированный товарный знак компании Thermo Fisher Scientific.

2 Описание изделия

ПО Raman data library Endress+Hauser – это программное обеспечение, предназначенное для организации, визуализации, анализа и составления отчетов по спектральным данным спектрометров Raman Rxn. ПО Raman data library дополняет встроенное в Endress+Hauser Raman Rxn программное обеспечение Raman RunTime, обеспечивая хранение, организацию и анализ спектров, а также сбор данных с нескольких анализаторов от лабораторного уровня до cGxP.

ПО Raman data library было создано для пользователей, которым необходимо визуализировать спектры рамановской спектроскопии, связывать их с контрольными данными и создавать унивариантные модели пиков. С помощью этого программного обеспечения подготовленные данные можно экспортировать для внешнего многомерного моделирования.

ПО Raman data library включает в себя следующие функции:

- **Организация данных.** Сопоставление спектров с контрольными значениями, подготовка данных перед хемометрическим моделированием, поиск в хранилище данных, обеспечение целостности данных.
- **Анализ данных.** Обеспечение расширенных возможностей визуализации спектров и простого анализа, такого как трендирование пиков и одномерное моделирование.
- **Опция cGxP.** Соответствие отраслевым стандартам прослеживаемости, хранения и архивирования спектральных данных.

ПО Raman data library хранит спектральные данные в защищенной встроенной базе данных SQLite, выполняет расчеты на основе спектральных данных и отображает спектры и связанные с ними метаданные в отчетах и на экране. Эта функциональность позволяет использовать рамановские спектры в качестве эталонных данных для разработки количественных методов и поддерживать требования 21 CFR части 11 в рамках валидированного аналитического решения.

ПО Raman data library может быть реализовано в соответствии с требованиями 21 CFR части 11 при установке с помощью инсталлятора cGxP Setup и квалификации через IQ/OQ с Endress+Hauser, а также PQ с заказчиком. При установке в режиме cGxP программа упрощает сбор, хранение и организацию спектров рамановской спектроскопии, чтобы спектры могли:

- Выступать в качестве данных калибровочного набора для разработки количественных моделей рамановской спектроскопии в рамках валидированного аналитического решения, или
- Выступать в качестве входных данных для проверенных моделей, используемых для прогнозирования свойств процесса или образца.

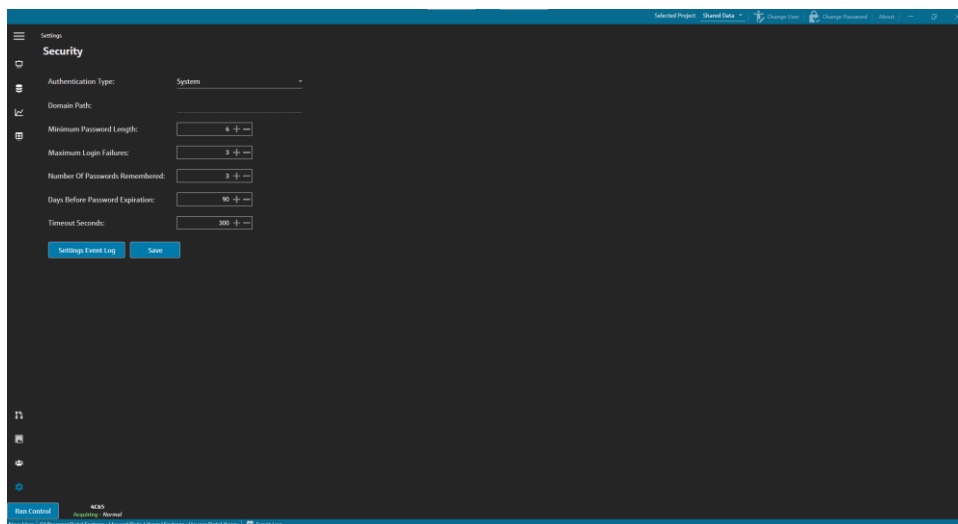
2.1 Установка

ПО Raman data library предназначено для установки на автономную рабочую станцию. ПО Raman data library включает функцию экспорта данных из каждого экземпляра приложения и импорта данных в централизованное хранилище. Инструкции по установке см. в *Руководстве администратора по эксплуатации ПО Raman data library* (BA02349C).

2.2 Настройки безопасности (только исполнение сGxP)

В средах сGxP ПО Raman data library использует аутентификацию пользователей для обеспечения отслеживаемости и регистрации всех событий. В основных средах ПО Raman data library управление пользователями и аутентификация не используются.

В окне "Settings" можно изменять параметры безопасности системы. Чтобы внести изменения в параметры безопасности системы, необходимо войти в систему с правами менеджера системных настроек.

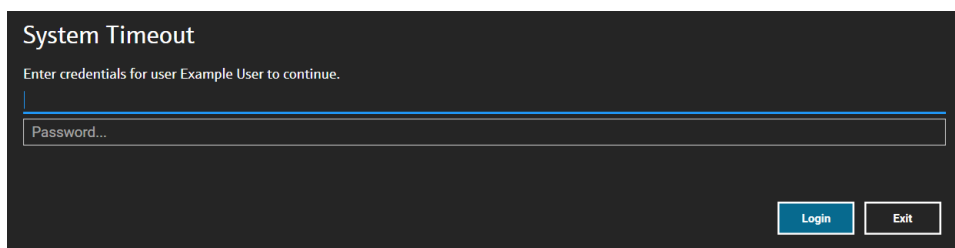


A0055947

Рис. 1. Окно Security

В окне Settings можно выбрать следующие опции:

- **Authentication type.** Тип аутентификации для приложения. Пользователь может выбирать между режимами аутентификации System, Domain и Local.
- **Domain path.** (Только для аутентификации домена) Путь домена.
- **Minimum password length.** Минимальное количество символов для пароля пользователя. Минимально допустимое количество символов – 6.
- **Maximum login failures.** Количество неудачных попыток входа в систему, после которых учетная запись пользователя будет заблокирована.
- **Number of passwords remembered.** Количество уникальных новых паролей, которые необходимо связать с учетной записью пользователя, прежде чем можно будет повторно использовать старый пароль.
- **Days before password expiration.** Период времени (в днях), в течение которого пароль может быть использован, прежде чем система потребует от пользователя сменить его. Вы можете установить срок действия паролей, истекающий через определенное количество дней, или указать, что срок действия паролей не истекает никогда, установив количество дней равным 0.
- **Timeout seconds.** Период времени (в секундах) допустимого бездействия, после которого наступает таймаут системы. После истечения времени таймаута системы пользователям необходимо повторно ввести учетные данные, чтобы продолжить работу с приложением или выйти из него. Если для параметра "Timeout Seconds" установлено значение 0, система не будет завершать сеанс автоматически. Максимальное настраиваемое значение таймаута составляет 3600 секунд (60 минут).



A0055948

Рис. 2. System timeout

- **Save.** Сохраняет настройки безопасности системы.
- **Settings event log.** Отображает журнал событий для настроек.

2.3 Управление пользователями (только исполнение cGxP)

В средах cGxP ПО Raman data library аутентифицирует пользователей для обеспечения отслеживаемости и регистрации всех событий. Базовая версия ПО Raman data library не поддерживает управление пользователями и аутентификацию.

Окно "Users" позволяет менеджерам добавлять, обновлять и удалять учетные записи пользователей. Оно также позволяет менеджерам просматривать события определенного пользователя или все события всех пользователей. Для управления пользователями необходимо войти в учетную запись с правами Менеджера пользователей.

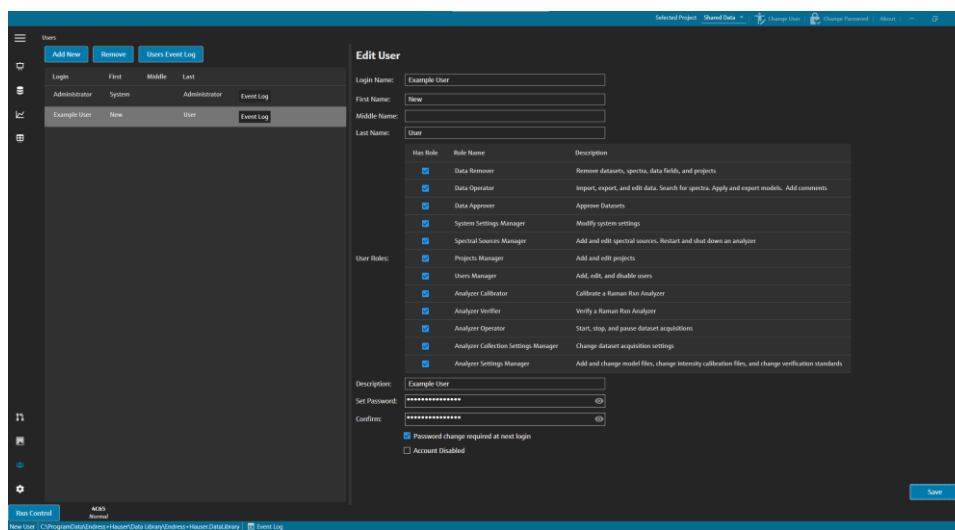


Рис. 3. Окно Users

В окне Users можно выбрать следующие опции:

- **Add New.** Создает нового пользователя.
- **Remove.** Удаляет выбранного пользователя. Для удаления пользователя требуется роль Data Remover.
- **Users Event Log.** Отображает журнал событий для всех пользователей.
- **Event Log.** Отображает журнал событий для указанного пользователя.

2.3.1 Уровни доступа

В рамках функциональности уровней доступа менеджер пользователей может создавать учетные записи с привилегиями, соответствующими организационной структуре, определенной клиентом. Таким образом, фиксированных групп пользователей не существует. Вместо этого доступны многочисленные возможности для настройки привилегий посредством назначения комбинаций уровней доступа.

Уровни доступа могут быть использованы для ограничения функциональности пользователей. Каждому пользователю может быть назначена любая комбинация ролей: от всех ролей до отсутствия ролей.

| Роль | Разрешенные действия |
|---------------------|--|
| Удаление данных | <ul style="list-style-type: none"> ■ Удаление наборов данных ■ Удаление спектров ■ Удаление полей данных ■ Удаление проектов |
| Оператор данных | <ul style="list-style-type: none"> ■ Импорт, экспорт и редактирование данных ■ Поиск спектров ■ Применение и экспорт моделей ■ Добавление комментариев |
| Утверждающий данных | Утверждение наборов данных |

| Роль | Разрешенные действия |
|--|---|
| Менеджер системных настроек | Изменение настроек системы |
| Менеджер спектральных источников | <ul style="list-style-type: none"> ▪ Добавление и редактирование спектральных источников ▪ Перезапуск и выключение анализатора |
| Менеджер проектов | <ul style="list-style-type: none"> ▪ Добавление проектов ▪ Редактирование проектов |
| Менеджер пользователей | <ul style="list-style-type: none"> ▪ Добавление пользовательских учетных записей ▪ Редактирование пользовательских учетных записей ▪ Отключение пользовательских учетных записей |
| Калибровщик анализатора | Калибровка анализатора Raman Rxn |
| Проверяющий анализатора | Проверка анализатора Raman Rxn |
| Оператор анализатора | <ul style="list-style-type: none"> ▪ Начало получения наборов данных ▪ Остановка получения наборов данных ▪ Приостановка получения наборов данных |
| Менеджер настроек сбора данных анализатора | Изменение настроек получения набора данных |
| Менеджер настроек анализатора | <ul style="list-style-type: none"> ▪ Добавление и изменение файлов моделей ▪ Изменение файлов калибровки интенсивности ▪ Изменение стандартов проверки |

Уровни доступа могут быть ограничены одним набором привилегий или объединены в комплекты, соответствующие обязанностям функциональной роли. В следующей таблице приведены примеры наборов ролей, которые могут быть назначены пользователям, руководителям и администраторам.

| Уровень | Примененные роли |
|---------------|--|
| User | <ul style="list-style-type: none"> ▪ Оператор данных ▪ Менеджер спектральных источников ▪ Калибровщик анализатора ▪ Проверяющий анализатора ▪ Оператор анализатора ▪ Менеджер настроек сбора данных анализатора ▪ Менеджер настроек анализатора |
| Supervisor | <ul style="list-style-type: none"> ▪ Удаление данных ▪ Утверждающий данных ▪ Менеджер системных настроек ▪ Менеджер проектов |
| Administrator | <ul style="list-style-type: none"> ▪ Менеджер пользователей |

2.3.2 Создание нового пользователя

Чтобы создать нового пользователя, выполните следующие действия:

1. В окне "Users" нажмите **Add New**.

Создайте новые учетные записи пользователей ПО Raman data library для всех новых пользователей системы. Хотя ПО Raman data library позволяет переименовывать пользователей, используйте эту функцию только для обновления имени пользователя в случае изменения имени. Не переименовывайте учетную запись пользователя, чтобы переназначить ее новому лицу.

Отобразится новая панель Edit User.

| 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 |

Рис. 4. Панель Edit User

2. Введите свойства пользователя:

- **Login name.** Имя, используемое для входа в систему. Каждое имя пользователя должно быть уникальным и содержать от 1 до 100 символов.
- **First name.** Имя пользователя. Длина может составлять от 0 до 100 символов.
- **Middle name.** Отчество пользователя. Длина может составлять от 0 до 100 символов.
- **Last name.** Фамилия пользователя. Длина может составлять от 0 до 100 символов.
- **User roles.** Роли, которые предоставлены пользователю в ПО Raman data library. Роли пользователей можно добавлять или удалять, устанавливая или снимая флажок **Include** для каждой роли. См. *Роли пользователей* →
- **Description.** Описание пользователя.

3. Введите действительный пароль в полях **Set Password** и **Confirm Password**.

Пароль должен соответствовать следующим минимальным требованиям:

- содержать хотя бы один специальный символ;
- содержать комбинацию заглавных и строчных букв;
- длина пароля должна соответствовать минимальной длине, установленной в окне "Settings".

4. (Необязательно) Выберите опцию **Password change required at next login** при добавлении нового пользователя.

5. Нажмите кнопку **Save**.

2.3.3 Деактивация пользователя

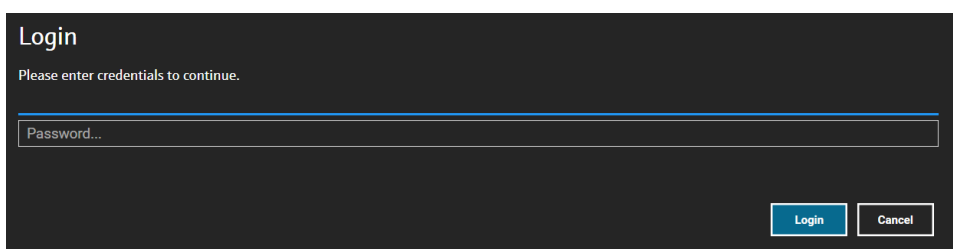
Неактивные учетные записи пользователей ПО Raman data library можно отключить, но они должны всегда сохраняться в системе для истории и аудиторского контроля. Деактивированный пользователь не может войти в систему.

Чтобы деактивировать пользователя, выполните следующие действия

1. В окне "Users" выберите учетную запись пользователя, которую необходимо деактивировать.
2. Выберите **Account Disabled**.
3. Нажмите кнопку **Save**.

2.3.4 Смена пользователя

Нажмите **Change User** на верхней ленточной панели инструментов, чтобы переключиться на другого пользователя. Для переключения на другого пользователя необходимо правильно ввести учетные данные пользователя.



A0055965

Рисунок 5. Вход пользователя

2.3.5 Смена пароля

Нажмите **Change Password** на верхней ленточной панели инструментов, чтобы изменить пароль текущего пользователя. Пользователю необходимо ввести старый пароль, новый пароль, а затем подтвердить новый пароль.

Пароль должен соответствовать минимальным требованиям к паролю. Пароль должен содержать хотя бы один специальный символ, состоять из заглавных и строчных букв и соответствовать минимальной длине пароля, которая задается в окне "Settings".



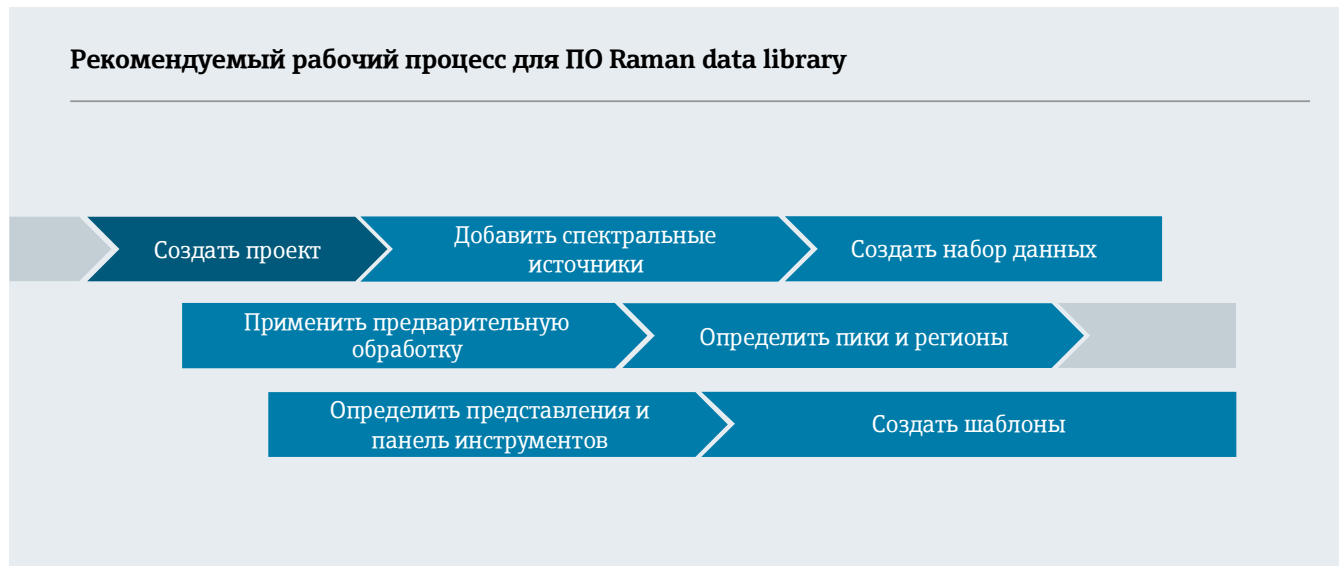
A0055966

Рис. 6. Диалоговое окно "Change Password"

Этот пункт меню недоступен, если режим аутентификации установлен на Local Windows или Domain. В этих режимах аутентификации смена пароля обрабатывается выбранным сервером аутентификации.

3 Управление программой

ПО Raman Data Library содержит возможности и функции, которые могут помочь в построении рабочего процесса для анализа спектральных данных. Ниже показан предлагаемый рабочий процесс. После завершения одной части рабочего процесса, например импорта данных или применения предварительной обработки, программное обеспечение открывает следующий шаг в обработке данных.



Это руководство следует логике рабочего процесса: от добавления данных в ПО Raman data library до создания проектов, применения предобработки и анализа данных.

После установки ПО Raman data library следует ознакомиться с интерфейсом программы, чтобы разработать оптимальный рабочий процесс анализа данных. Инструкции по быстрому началу работы см. в *Краткой инструкции по эксплуатации ПО Raman data library (KA01717C)*.

3.1 Вход в систему (только для версии cGxP)

В исполнении cGxP ПО Raman data library для открытия Raman data library необходимо выполнить вход в систему.

Имя пользователя и пароль являются обязательными полями. Имя пользователя не чувствительно к регистру. Например, имя пользователя "Jane" эквивалентно имени "jane".

В качестве меры предосторожности, если пользователь совершает настраиваемое количество неудачных попыток входа в систему, он автоматически блокируется. Для повторной активации заблокированного пользователя необходимо связаться с администратором.

3.2 Режимы онлайн и офлайн

ПО Raman data library можно использовать в двух различных режимах:

- **Online.** Оперативные данные с анализатора Raman поступают в программное обеспечение для моделирования, обеспечивая анализ состава в режиме реального времени.
- **Offline.** Наборы данных импортируются и могут анализироваться независимо от процесса в реальном времени. В режиме офлайн также можно создавать шаблоны на основе известных аналитов, создавая модели и шаблоны наборов данных для использования и сравнения с данными в режиме реального времени.

Использование данных двух режимов позволяет понимать ситуацию и действовать в соответствии со спектрами Raman, полученными в технологических средах в режиме реального времени.

3.3 Пользовательский интерфейс










При первом запуске ПО Raman data library отображается пустая информационная панель со значками меню слева. Левое меню можно развернуть. ПО Raman data library открывает пустую информационную панель до тех пор, пока не будет загружен набор данных и не будут настроены представления.

Чтобы обеспечить ожидаемый пользовательский интерфейс в ПО Raman data library, установите масштаб дисплея Windows на 100%.

3.3.1 Меню

Главное меню

Главное меню в левой части ПО Raman data library обеспечивает навигацию между функциями программы.

| Пункт меню | Навигация |
|---|---|
|  A0055967 | Expand/collapse. Отображение или скрытие пунктов меню. |
|  A0055968 | Dashboard. Создание пользовательских информационных панелей и управление ими. |
|  A0055969 | Datasets. Создание наборов данных и управление ими. |
|  A0055970 | Analyze Dataset. Анализ активного набора данных. Активируется только при наличии активного набора данных. Данный пункт содержит пять подвкладок: <ul style="list-style-type: none"> ▪ Data ▪ Pretreat ▪ Peaks/Regions ▪ Views ▪ Summary |
|  A0055971 | Data Fields. Создание полей данных и управление ими. |
|  A0055972 | Spectral sources. Создание спектральных источников (OPC/SPC) и управление ими. |
|  A0055973 | Projects. Создание проектов и управление ими. |
|  A0055974 | Users. Создание и управление пользователями. Эта функция относится исключительно к установкам ПО Raman data library в исполнении cGxP. |
|  A0055975 | Settings. Управление настройками системы. Эта функция относится исключительно к установкам ПО Raman data library в исполнении cGxP. |

Ленточная панель инструментов

В верхней части ПО Raman data library находится ленточная панель инструментов. С помощью ленточной панели инструментов можно выбрать следующие пункты:




- **Select a project.** Список Selected Project в верхней строке меню позволяет переключаться между проектами. Информацию о проектах см. в разделе *Проекты* → .
- **Change user (только для версии cGxP).** При нажатии данного инструмента можно переключиться на другого пользователя, не прекращая работу программы. Описания по изменению пользователей и паролей см. в разделе *Управление пользователями (только исполнение cGxP)*.
- **Change password (только для версии cGxP).** При нажатии данного инструмента можно изменить пароль.
- **About.** При нажатии данного инструмента отображается версия программного обеспечения, номер версии, идентификатор установки и информация об авторских правах.




Рис. 7. Ленточная панель инструментов

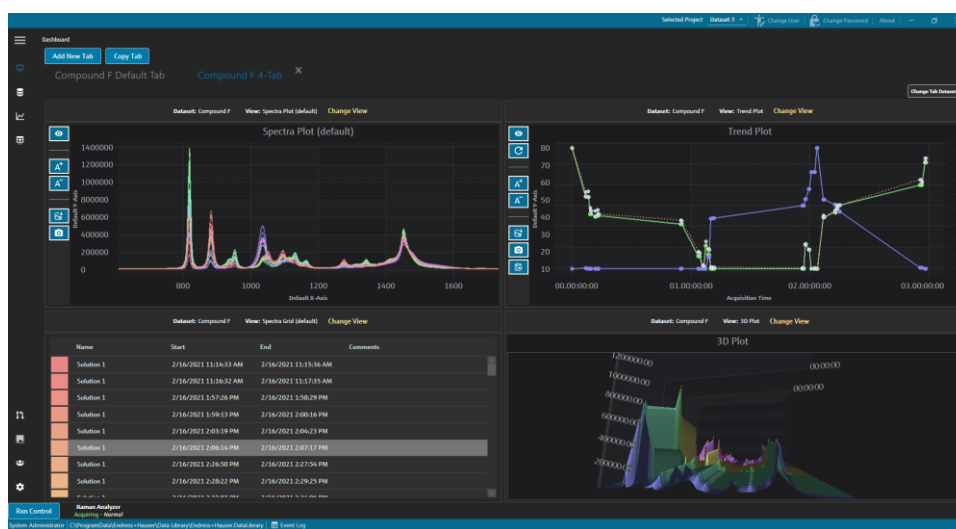
3.3.2 Панель инструментов библиотеки данных

Панель инструментов – это основное представление для рутинного анализа. Он отображает вкладки, которые можно настроить для отображения графиков сохраненных наборов данных. Вкладка панели мониторинга может содержать представления из более чем одного набора данных. Для отображения представлений на панели мониторинга необходимо определить один или несколько наборов данных.

Чтобы использовать панель управления, необходимо сначала выполнить начальную настройку, описанную в начале этой главы и в разделах *Добавление данных в ПО Raman data library* →  и *Анализ наборов данных* → . Инструкции по быстрому началу работы см. в *Кратком руководстве по эксплуатации ПО Raman data library* (KA01717C).

При запуске ПО Raman data library загружаются вкладки панели мониторинга из предыдущего сеанса. Если предыдущая панель управления не была определена, как при первом использовании программного обеспечения, панель управления будет пустой. Ранее сохраненные вкладки панели мониторинга можно перезагрузить, нажав **Launch Dashboard** на вкладке "Summary" окна "Analyze Dataset". Вкладки панели мониторинга автоматически сохраняются при закрытии ПО Raman data library.

Когда панель мониторинга настроена и запущена для нового набора данных, доступны два представления по умолчанию: сетка спектров и график спектров. Дополнительные представления для набора данных определяются в анализе набора данных на вкладке **Views**. См. *Создание представлений панели управления: сетки, тренды, спектры и трехмерные графики* →  для получения подробной информации о том, как определять представления.



A0055976

Рис. 8. Вкладка панели мониторинга с 4 представлениями

На панели управления можно выполнять следующие действия:

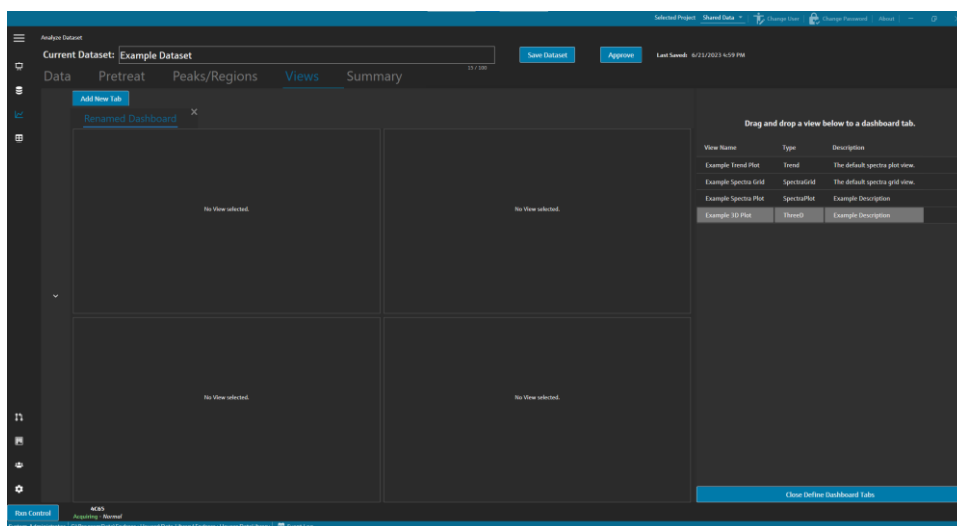
- **Add New Tab.** Добавление новой панели управления. При добавлении новой вкладки панели управления вам будет предложено выбрать количество представлений (от 1 до 4). Вкладка панели мониторинга может содержать представления из более чем одного набора данных.
- **Copy Tab.** Создание новой копии текущей вкладки панели управления.
- **Change View.** Изменение вида набора данных, позволяющее пользователю выбрать другой график или сетку.
- **Change Tab Dataset.** Выбор набора данных и удаление всех представлений из вкладки Dashboard. Выбранный набор данных загружается, что позволяет быстро добавить представления графиков на вкладку Dashboard.
- **X.** Закрытие вкладки панели управления.

Создание новой панели управления

Для этой процедуры необходимо добавить спектральные источники, создать набор данных из этих источников и запустить начальную панель управления из окна "Analyze Dataset". Инструкции см. в разделах *Добавление данных в ПО Raman data library* → 📄 и *Анализ наборов данных* → 📄.

1. На панели управления нажмите **Add New Tab**.
В списке "Add New Tab" отображается выбор количества представлений на новой панели управления.
2. В списке **Add New Tab** выберите количество представлений, отображаемых на новой панели управления (от 1 до 4).

При создании новой панели управления не отображаются никакие графики или сетки.



A0055977

Рис. 9. Пустая вкладка панели управления

Чтобы создать представление, отображающее больше, чем стандартные представления Spectra Plot и Spectra Grid, необходимо добавить дополнительные представления в окне Analyze Dataset.

3. Определите представления, следуя инструкциям в разделе *Создание представлений панели управления: сетки, тренды, спектры и трехмерные графики* → 📄. Вернитесь к панели управления.
4. На новой вкладке панели управления нажмите **Change View**.
Откроется диалоговое окно "Change View".
5. Выберите источник набора данных, затем выберите представление. Нажмите **Change View**.

Новое представление отобразится на панели управления. Чтобы переименовать панель управления, дважды щелкните по названию вкладки.

Чтобы сохранить панель управления, необходимо определить и сохранить ее на вкладке "Views". См. *Создание представлений панели управления: сетки, тренды, спектры и трехмерные графики* → 📄 для получения дополнительной информации.

4 Добавление данных в ПО Raman data library

В этой главе представлены инструкции по созданию потоков данных, спектральных источников и импорту SPC-файлов в наборы данных. Добавление данных в ПО Raman data library может выполняться автоматически или вручную. Автоматическое получение данных настраивается через окно Spectral Sources. Импорт SPC-файлов вручную осуществляется в окне Datasets.

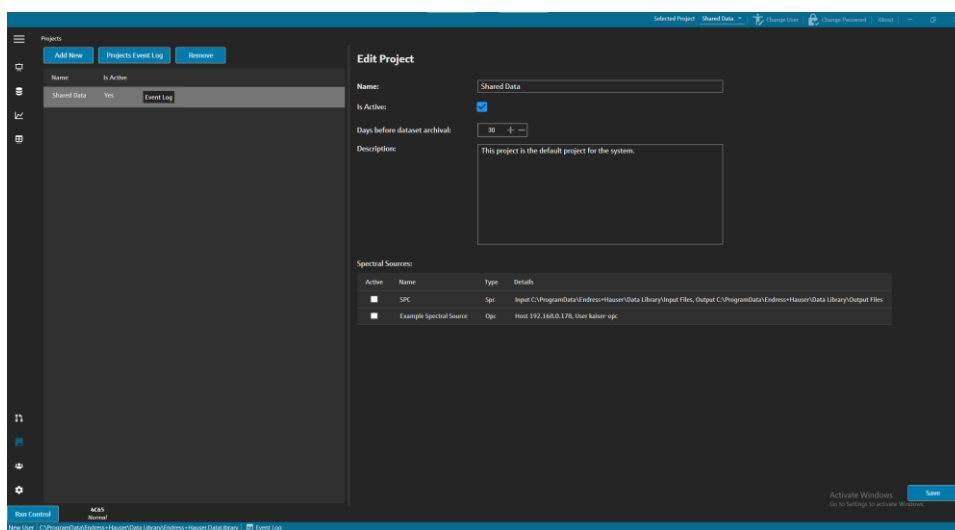
Существует три способа загрузки рамановских спектров в ПО Raman data library:

- Ручной импорт папок, содержащих SPC-файлы
- Автоматический импорт SPC-файлов из отслеживаемой папки
- Автоматический импорт через соединение OPC-стандарта из программы Raman RunTime

4.1 Проекты

Проекты используются для хранения и организации данных. Чтобы импортировать данные в ПО Raman data library, сначала необходимо создать контейнер проекта для данных. В окне Projects можно выполнить следующие действия:

- **Add New.** Добавить новый проект.
- **Projects Event Log.** (только исполнение cGxP) Просмотр журнала событий для всех проектов.
- **Event Log.** (только исполнение cGxP) Просмотр журнала событий конкретного проекта.
- **Remove.** Удаление выбранного проекта. В исполнении cGxP ПО Raman data library для удаления проекта требуется роль Data Remover.
- **Save.** Сохранение выбранного проекта.




A0055978

Рис. 10. Окно проектов

4.1.1 Добавление нового проекта

Чтобы добавить проект, следует выполнить следующие действия:

1. В окне "Projects"  нажмите **Add New**.
Откроется панель Edit Project.
2. Введите следующую информацию:
 - **Name.** Название проекта.
 - **Is Active.** Является ли проект активным или нет. Если флажок в графе "Active" не установлен, проект не отображается в списке Selected Project в строке меню.
 - **Days before dataset archival.** Количество дней, по истечении которых наборы данных будут автоматически архивированы и скрыты в окне "Datasets". Архивированные наборы данных можно просмотреть в окне "Datasets", установив флажок "Show Archived Datasets".

- **Description.** Описание проекта.
- **Spectral sources.** Определяет, какие спектральные источники активны для выбранного проекта. Спектры, поля данных и наборы данных, созданные в одном проекте, нельзя просмотреть в другом проекте. Однако в случае общих проектов данные, хранящиеся в одном проекте, могут быть доступны для использования в других проектах. Это удобно для хранения эталонных спектров или общих полей данных, которые можно легко включать в несколько проектов. Чтобы создать общий проект с данными, выберите все соответствующие источники данных из списка.

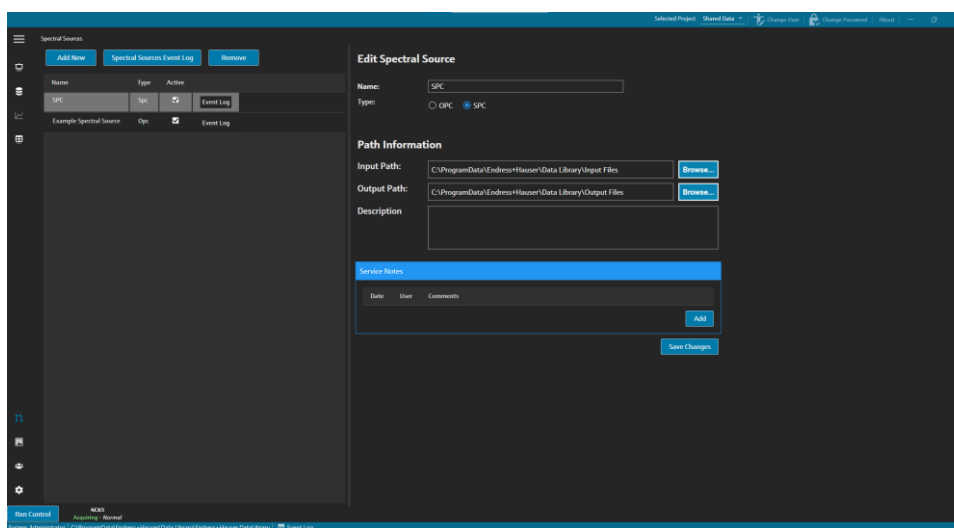
3. Нажмите кнопку **Save**.

4.2 Спектральные источники

Спектральные источники – это источники спектральных данных. Спектральным источником может быть просматриваемая входная папка, содержащая спектральные файлы (.spc) или спектры, передаваемые в режиме реального времени через OPC-соединение с анализатором Raman Rxn. В исполнении cGxP ПО Raman data library для добавления или внесения изменений в спектральные источники требуется роль Spectral Sources Manager.

В окне Spectral Sources можно выбрать следующие опции:

- **Add New.** Создание нового спектрального источника.
- **Spectral Sources Event Log.** Просмотр журнала событий для всех спектральных источников.
- **Event Log.** Просмотр журнала событий для конкретного спектрального источника.
- **Remove.** Удаление выбранного спектрального источника. В исполнении cGxP ПО Raman data library для удаления спектрального источника требуется роль Data Remover.
- **Name.** Отображаемое имя спектрального источника.
- **Type.** Тип спектрального источника: OPC или SPC.



A0055979

Рис. 11. Окно спектральных источников

4.2.1 Добавление спектрального источника OPC

Можно создать спектральный источник OPC, чтобы ПО Raman data library могло установить OPC-соединение клиента унифицированной автоматизации (UA) с OPC-сервером Raman RunTime. OPC-соединение позволяет пользователям просматривать, контролировать и собирать спектры с систем анализаторов Raman Rxn Endress+Hauser. К ПО Raman data library могут быть подключены несколько анализаторов Raman (до 4).

Для OPC-соединения между ПО Raman data library и Raman RunTime требуется версия Raman RunTime 6.4 или более поздняя. Анализаторы Raman Rxn с версией ПО Raman RunTime до 6.4, могут использовать источник спектра SPC, как описано в разделе *Добавление спектрального источника SPC* → .

Если используется спектральный источник OPC, отключите функцию перехода прибора в спящий режим в настройках Windows.

Для добавления спектрального источника OPC

1. В окне спектральных источников нажмите **Add New**.
Отобразится панель редактирования спектрального источника.

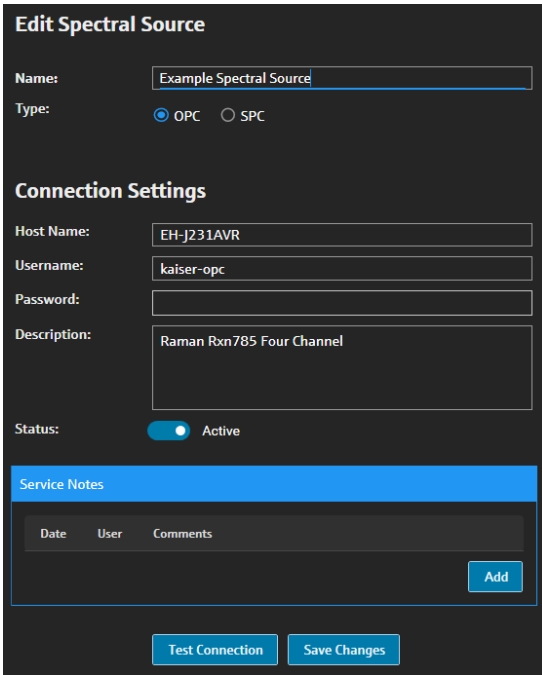


Рис. 12. Редактирование спектрального источника OPC

2. Введите имя спектрального источника.
3. Выберите **OPC**.
4. Введите следующую информацию о настройках соединения:
 - **Host Name.** Имя хоста OPC-сервера Raman RunTime.
 - **Username.** Имя пользователя, используемое для создания OPC-соединения с OPC-сервером Raman RunTime. Имя пользователя по умолчанию – **kaiser-opc**.
 - **Password.** Пароль, используемый для создания OPC-соединения с OPC-сервером Raman RunTime. Пароль по умолчанию – **opc**.
 - **Description.** Опциональное описание спектрального источника OPC.
 - **Status.** Состояние спектрального источника OPC, активное или неактивное.
 - **Service Notes.** Комментарии обслуживающего персонала или пользователей о спектральном источнике OPC. Нажмите **Add**, чтобы добавить новую служебную записку.
5. Нажмите **Test Connection**, чтобы проверить соединение с OPC-сервером Raman RunTime.
Для обеспечения успешного соединения:
 - Перед сохранением спектрального источника OPC выполните тестовое соединение.

- Если тестовое соединение не удалось, убедитесь, что анализатор Raman включен, доступен и подключен к сети, а сетевые порты, указанные в *конфигурации сети Raman Rxn2* и *Raman Rxn4* в *руководстве по эксплуатации Raman RunTime* (BA02180C), настроены в соответствии с требованиями.
- Неудачное соединение может быть вызвано некорректной настройкой разрешения имени хоста в вашей локальной ИТ/ОТ сети. Обратитесь к ИТ-администратору вашей компании.
- В качестве альтернативы стандартным учетным данным OPC можно также использовать учетные данные одной из учетных записей пользователей, настроенных на анализаторе с Raman RunTime, для аутентификации OPC-соединения анализатора.

6. Нажмите кнопку **Save Changes**.

При успешном соединении появляется сообщение, а на нижней ленте появляется панель инструментов Rxn Control, на которой отображается название назначенного спектрального источника и его состояние.

4.2.2 Добавление спектрального источника SPC

Функция спектрального источника SPC автоматически импортирует спектры из анализаторов Raman Rxn, работающих с более ранними версиями Raman RunTime (до 6.4). Это также позволяет использовать ПО Raman data library с предыдущими версиями программного обеспечения Raman от Endress+Hauser. Добавление спектрального источника SPC позволяет ПО Raman data library автоматически считывать и сохранять файлы .spc в базе данных ПО Raman data library и делать их доступными для наборов данных.

Для спектрального источника SPC требуется входной путь, по которому ПО Raman data library следит за новыми файлами и импортирует их, и выходной путь, по которому ПО Raman data library перемещает файлы SPC после их импорта.

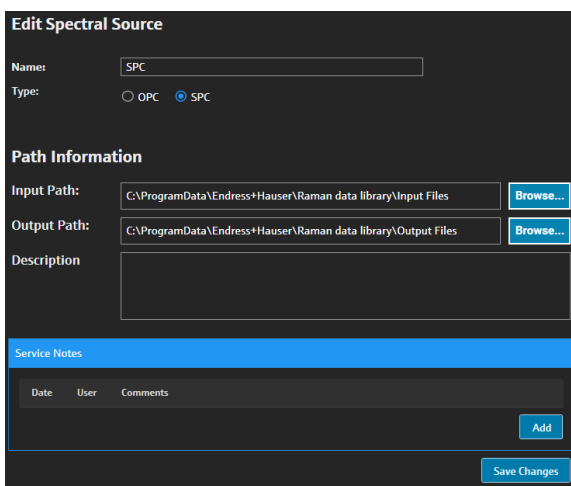
Инструкции по экспорту файлов .spc из Raman RunTime приведены в разделе "*Экспорт сети файлов SPC*" в *руководстве по эксплуатации Raman RunTime* (BA02180C).

Для добавления спектрального источника SPC

1. На компьютере с ПО Raman data library создайте папку(-и) .spc:
 - Для более ранних версий Raman RunTime (до 6.4) создайте одну папку с именем **Output spectra**.
 - Для унаследованных программных решений создайте две папки. Назовите одну папку **Input spectra**, а другую – **Output spectra**. SPC-файлы из предыдущих версий программного обеспечения Raman необходимо направить в папку **Input spectra**.

2. Выберите пункт **Spectral sources** , затем нажмите кнопку **Add New**.

Отобразится панель редактирования спектрального источника.



A0055981

Рис. 13. Редактирование спектрального источника SPC

3. Введите имя спектрального источника.
4. Выберите SPC.
5. В поле **Input Path**:

- Для версий Raman RunTime ранее 6.4: перейдите в сетевую общую папку DataLibraryBatchExport по пути \\имя компьютера или IP-адрес\DataLibraryBatchExport.
 - Для унаследованных программных решений укажите **входной путь** к выходному каталогу унаследованного программного обеспечения.
6. В поле **Output Path (Выходной путь)** перейдите к папке выходных спектров, созданной в Step 1. Это путь к каталогу, используемый для вывода файлов .sps после их считывания в систему.
 7. (Опционально) Введите следующую информацию:
 - **Description.** Описание спектрального источника SPC.
 - **Service Notes.** Комментарии пользователей о спектральном источнике SPC. Нажмите кнопку **Add**, чтобы добавить новое примечание по обслуживанию.
 8. Нажмите кнопку **Save Changes** и ОК в ответ на запрос.

В более ранних версиях Raman RunTime (до 6.4) общая сетевая папка DataLibraryBatchExport содержит вложенные папки и файлы .sps, полученные на анализаторе Raman. После того как файлы .sps будут считаны и добавлены в ПО Raman data library, они перемещаются из данного сетевого каталога в папку выходных спектров, созданную выше. Все файлы .sps сохраняются на анализаторе Raman. Файлы перемещаются только из папки DataLibraryBatchExport.

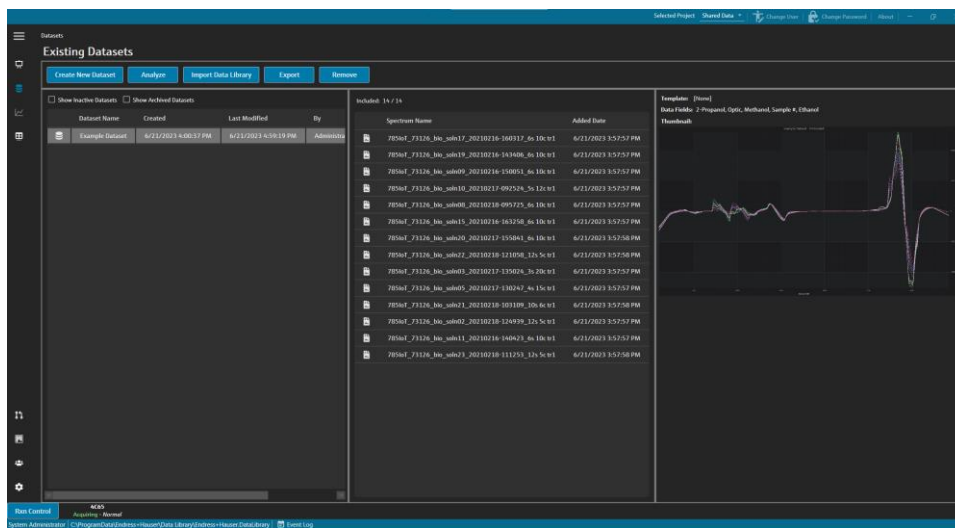
4.3 Наборы данных

Окно "Datasets" используется для создания, просмотра, импорта, экспорта и удаления наборов данных. Сводную информацию о наборах данных можно просмотреть для существующих наборов данных.

В ПО Raman data library набор данных содержит как минимум один спектр. Наборы данных можно объединять для анализа или моделирования в программном обеспечении или для экспорта во внешние программы. Для анализа спектров с использованием набора данных выберите хотя бы 1 спектр.

В окне Datasets можно выбрать следующие опции:

- **Create New Dataset.** Показывает панель **Create Dataset**. В версии cGxP ПО Raman data library для создания новых наборов данных необходимо иметь роль Data Operator.
- **Analyze.** Открывает выбранный набор данных и отображает его в окне "Analyze".
- **Import Data Library.** Импортирует существующий файл набора данных (.dlexport).
- **Export.** Отображает панель экспорта.
- **Remove.** Удаляет выбранный набор данных. Чтобы удалить набор данных, необходимо войти в систему под ролью Data Remover.
- **Show Inactive Datasets.** Отображает наборы данных, помеченные как неактивные.
- **Show Archived Datasets.** Отображает наборы данных, помеченные как архивные. Наборы данных автоматически помечаются как архивные по истечении заданного количества дней. Значение "Days before dataset archival" можно изменить в окне "Projects".



A0055982

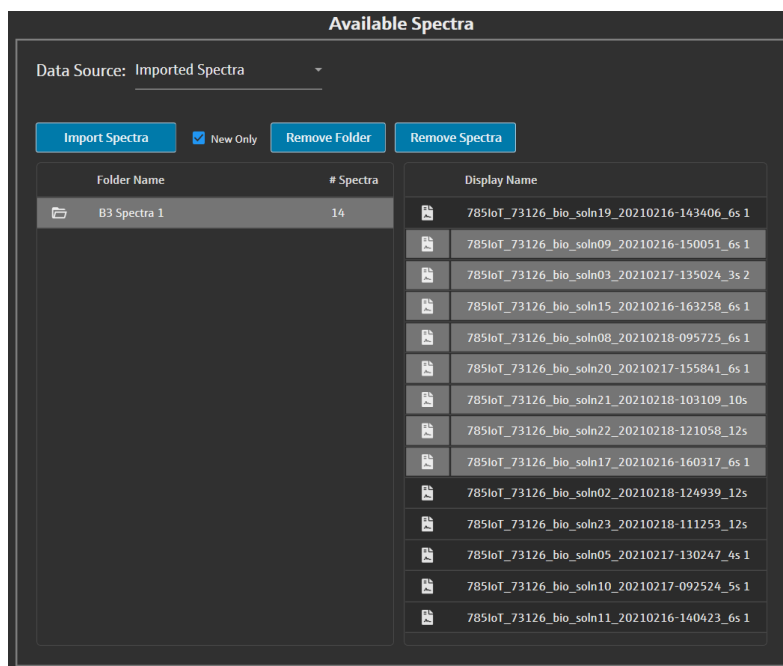
Рис. 14. Существующие наборы данных

4.3.1 Создание набора данных

Вы можете выбрать данные из различных источников, чтобы включить спектры в набор данных. Данные могут быть получены из следующих источников:

- **Imported Spectra.** Этот выбор отображает все доступные папки и спектры, которые были импортированы в ПО Raman data library.
- **Reference Spectra.** Этот выбор отображает все спектры, отмеченные как эталонные.
- **Search.** Этот выбор позволяет пользователям искать спектры, соответствующие определенным критериям. Критерии поиска можно добавлять или удалять по отдельности. Спектры можно искать по полю имени, начальной и конечной дате, а также по любым заданным значениям данных в полях, определенных как доступные для поиска.
- **Existing Datasets.** Этот выбор позволяет пользователям искать спектры, которые существуют в другом наборе данных. Показан сводный вид выбранного набора данных. При нажатии кнопки **Include** ► будут включены все спектры из выбранного набора данных.
- **Folders.** Этот выбор отображает спектры, полученные через OPC-соединение с Raman RunTime, которые хранятся в папках на компьютере с установленным ПО Raman data library.


После выбора доступных спектров используйте **Include** ►, чтобы включить выбранные спектры в новый набор данных. Чтобы удалить спектры из нового набора данных, выберите включенные спектры и нажмите **Remove**.



A0055983

Рис. 15. Источник данных, импортированная панель спектров

Для создания набора данных

1. В главном меню нажмите **Datasets** .
2. Нажмите кнопку **Create New Dataset**.
Откроется окно "Create Dataset".

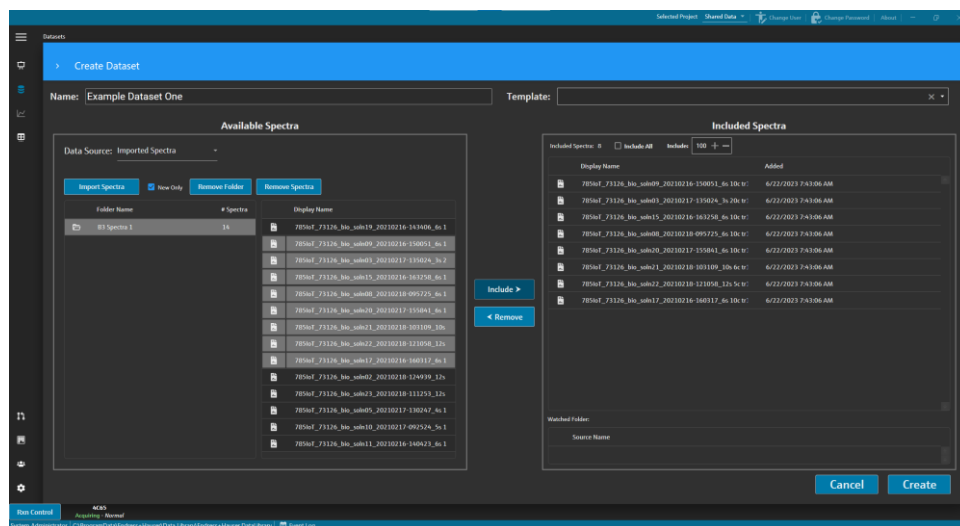


Рис. 16. Окно "Create Dataset"


3. Введите следующую информацию в окне "Create Dataset":
 - **Name.** Имя нового набора данных. Имена наборов данных должны быть уникальными и иметь длину от 1 до 100 символов.
 - **Template.** Шаблон, который будет использоваться при создании набора данных. Шаблоны можно использовать для автоматического применения предварительно выбранных полей данных, предварительной обработки, пиков, регионов, представлений и вкладок панели управления к новому набору данных.
4. В списке "Data Source" выберите:
 - **Import Spectra** для выбора папки, содержащей файлы спектров (.sps).
 - **Reference Spectra** для выбора спектров, отмеченных как эталонные спектры.
 - **Search** для поиска спектров, соответствующих определенным критериям. Спектры можно искать по полю имени, начальной дате, конечной дате или другим значениям данных.
 - **Existing Datasets** для поиска спектров, которые существуют в другом наборе данных. При нажатии кнопки **Include** ► будут включены все спектры из выбранного набора данных.
 - **Folders** для выбора спектров, полученных через OPC-соединение с Raman RunTime, которые хранятся в папках на компьютере с установленным ПО Raman data library. Имена файлов спектров не отображаются в проводнике папок.
5. В окне **Available Spectra** выберите спектры для **включения** или нажмите **Include All** в окне Included Spectra, чтобы импортировать все спектры из папки.
Спектры, включенные в новый набор данных, показаны в пункте **Included Spectra**.
6. В окне **Included Spectra** выберите спектры для **удаления**.
 - Выберите **Include All**, чтобы включить все спектры из выборки в Step 5, или включить только подмножество выборки, в которой программное обеспечение выбирает каждый второй или третий спектр.
 - Нажмите **Remove Folder**, чтобы удалить выбранную папку и все спектры в этой папке. В исполнении cGxP ПО Raman data library для удаления папки требуется роль Data Remover.
 - Нажмите **Remove Spectra**, чтобы удалить выбранные спектры из набора данных. В исполнении cGxP ПО Raman data library для удаления спектра требуется роль Data Remover.
7. Нажмите **Create**.
Рабочий процесс ПО Raman data library создает новый набор данных и переходит к следующему этапу в окне Analyze.
8. Нажмите кнопку **Save Dataset**.

4.3.2 Сохранение набора данных

Наборы данных не сохраняются автоматически в ПО Raman data library, за исключением случаев, когда сбор данных для набора инициируется непосредственно в Raman data library. Важно выработать привычку регулярно сохранять наборы данных.

Наборы данных можно сохранять через окно "Analyze Dataset". Если ПО Raman data library будет закрыто до сохранения набора данных, все изменения будут потеряны.

Как сохранить набор данных

1. В главном меню нажмите **Analyze Dataset** .
2. Нажмите кнопку **Save Dataset**.

Первое сохранение набора данных может занять несколько минут. Последующие сохранения происходят быстрее. После сохранения набора данных поле **Last Saved** обновляется и отображает дату и время последнего сохранения.

4.3.3 Утверждение набора данных

Одобрённые наборы данных доступны *только для чтения* и не могут быть изменены. Окно "Analyze Dataset" позволяет одобрить или отозвать одобрение набора данных.

Как одобрить или отозвать одобрение набора данных

- В окне "Analyze Dataset" нажмите **Approve**, чтобы отметить набор данных как одобренный.
- Нажмите **Unapprove**, чтобы отменить одобрение набора данных.

4.4 Поля данных

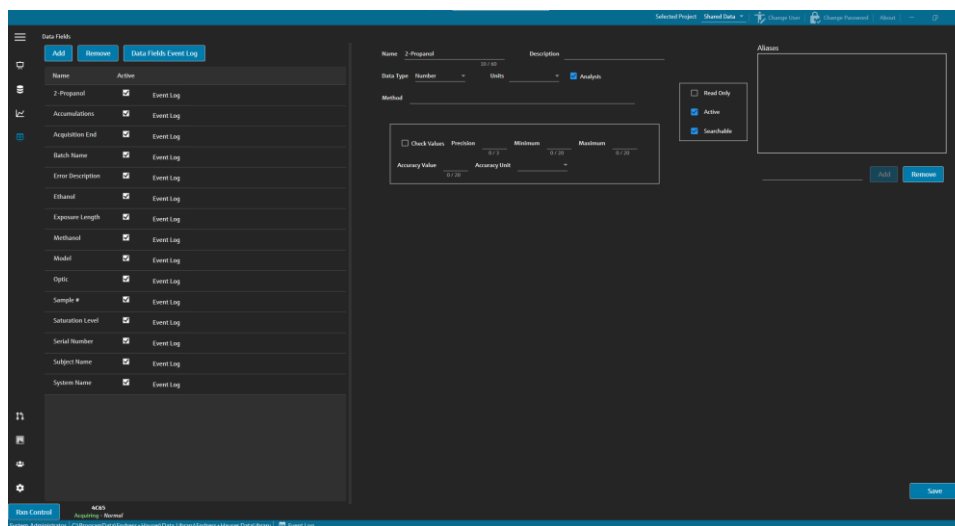
Поля данных представляют собой качественную и количественную информацию, привязанную к спектру. Для количественного анализа пользователь может указать точность, единицы измерения, основную методику и другую информацию, связанную со спектром.

ПО Raman data library собирает предварительно заданную информацию о полях данных из журнала SPC или источников данных OPC. Отображаемые в списке полей данных единицы измерения и значения могут отличаться в зависимости от способа получения спектров. При импорте данных через OPC из Raman RunTime версии 6.4 и выше большинство стандартных полей данных заполняется автоматически. Чтобы снизить вероятность ошибок при импорте, к полям данных можно добавлять псевдонимы.

В окне "Data Fields" можно добавлять, обновлять и удалять поля данных. В версии cGxP ПО Raman data library для внесения изменений в поля данных необходимо выполнить вход с ролью "Data Fields Manager".

В окне "Data Fields" можно выбрать следующие опции:

- **Add**. Создает новое поле данных.
- **Remove**. Удаляет выбранное поле данных. В исполнении cGxP ПО Raman data library для удаления поля данных требуется роль Data Remover.
- **Data Fields Event Log**. (только исполнение cGxP) Отображает журнал событий для всех полей данных.
- **Event Log**. (только исполнение cGxP) Отображает журнал событий для определенного поля данных.
- **Save**. Сохраняет выбранное поле данных.



A0055985

Рис. 17. Окно Data Fields

Свойства поля данных

| Свойство | Значение |
|-------------|--|
| Name | Наименование поля данных. |
| Description | Описание поля данных. |
| Aliases | Для снижения вероятности ошибок со стороны пользователя можно добавлять псевдонимы для распространенных вариантов написания и обозначений. Например, значения <i>Concentration</i> , <i>concentration</i> и <i>Conc.</i> могут быть настроены как эквивалентные одному названию поля данных. Добавление псевдонима помогает избежать распространенных ошибок при импорте данных и автоматизирует присвоение меток на всех этапах рабочего процесса. Псевдонимы используются при импорте данных для сопоставления с заголовком столбца в Excel. Здесь можно добавить или удалить псевдоним. |
| Data Type | Тип значения данных, которое можно ввести для поля данных: <ul style="list-style-type: none"> ▪ Логический ▪ Число ▪ Дата ▪ Текст |
| Units | Единицы измерения, используемые для типа данных. |
| Analysis | Поля данных, помеченные как "Analysis", можно использовать в операциях анализа. |
| Method | Описательное поле для указания метода получения. |
| Read Only | Значения данных в полях данных, помеченных как "Read Only", изменять нельзя. |
| Active | Поля данных, помеченные как "Active", отображаются в окне "Analysis". |
| Searchable | Поля данных, помеченные как "Searchable", доступны для поиска. |

| Свойство | Значение |
|----------------|---|
| Check Values | Поля данных, помеченные как "Check Values", автоматически исключают значения данных, если они не соответствуют установленным требованиям, указанным в полях "Precision", "Minimum", "Maximum" и "Accuracy Value". |
| Precision | Это значение обозначает необходимое количество цифр после десятичной точки. |
| Minimum | Нижний предел значений. |
| Maximum | Верхний предел значений. |
| Accuracy Value | Описательное поле, указывающее значение точности. |
| Accuracy Unit | Описательное поле, указывающее единицу точности. |

Как добавить поле данных

1. В окне полей данных нажмите **Add**.
2. Введите свойства поля данных. См. таблицу свойств поля данных выше.
3. Нажмите кнопку **Save**.

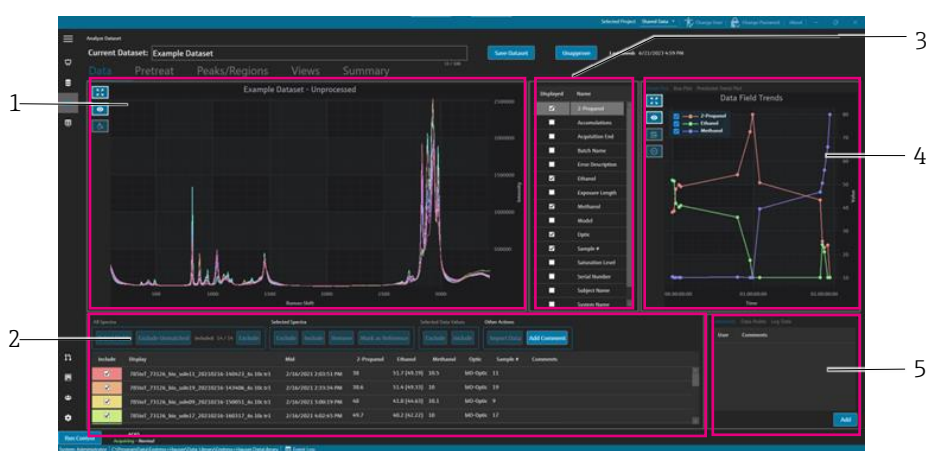
5 Анализ наборов данных

Окно "Analyze Dataset" используется для выполнения операций, вычислений и анализа наборов данных. Окно анализа набора данных состоит из 5 основных вкладок:

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

5.1 Viewing Datasets

Вкладка данных используется для анализа спектральных данных. Плитки на вкладке данных можно настроить для отображения определенных данных, изменить их размер или скрыть, перетащив левую границу плитки вправо до упора.



A0055987




Рис. 18. Вкладка "Data"

| # | Description |
|---|---|
| 1 | Spectra plot. Отображение необработанных спектров, включенных в набор данных. Цвета чередуются по всему спектру радуги (розовый, оранжевый, желтый...фиолетовый, розовый). |
| 2 | Spectra grid. Перечисление спектров и связанных с ними значений данных для отображаемых полей данных. Предоставление возможности включения или исключения спектров и значений данных, а также импорта справочных данных. |
| 3 | Data fields list. Позволяет переключать отображение полей данных. При включении они доступны для анализа и отображаются в сетке спектров. |
| 4 | Data fields plot. Отображает поля данных в виде тренд-графика, коробчатой диаграммы или прогнозируемого тренда. |
| 5 | Other info area. Позволяет добавлять комментарии к спектрам, просматривать информацию журнала и данные точек. |

5.1.1 График спектров

На вкладке данных отображается график спектральных данных. На графике спектров показаны все включенные спектры в необработанном виде.

Навигация по графику спектров

| Элемент навигации | Навигация |
|--|---|
| — | Щелкните и нарисуйте рамку внутри графика спектров, чтобы увеличить определенную область. Чтобы вернуться назад, дважды щелкните левой кнопкой мыши по графику. |
|  A0055988 | Zoom Extents. Масштабирует данные до полного объема. Эта кнопка отображается на большинстве графиков. |
|  A0055989 | Toggle Legend. Показывает или скрывает условные обозначения. Эта кнопка отображается на большинстве графиков. |
|  A0055990 | Style Spectrum. Изменяет цвет выбранного спектра. |

Изменение имени эталонного спектра

Вы можете переименовать конкретный спектр, например, если известно, что первый собранный спектр представляет собой 100% анализируемого вещества.

1. В панели сетки спектров выберите нужный спектр.
2. Щелкните правой кнопкой мыши, затем выберите **Mark as Reference** или нажмите кнопку **Mark as Reference**.
Появится диалоговое окно Spectrum Rename Required.
3. Введите соответствующее имя для эталонных спектров и нажмите "ОК".
4. Переключите отображение условных обозначений графика спектров и убедитесь, что эталонный спектр был переименован.
5. Нажмите кнопку **Save Dataset**.


Чтобы вернуть исходное имя спектра, нажмите **Select Fields**, затем выберите **Name**, затем **Close**. Исходное название спектра появится в списке. Имена для отображения можно редактировать, однако исходное имя, полученное из программного обеспечения сбора данных, изменить невозможно.

Изменение цвета отображения спектра


Вы можете изменить цвет конкретного спектра, например, если необходимо, чтобы эталонный спектр визуально отличался от других спектров.

1. В панели сетки спектров выберите нужный спектр.
2. Нажмите **Style Spectrum** , затем выберите нужный цвет.
Теперь спектр отображается в выбранном стиле цвета.
3. Нажмите кнопку **Save Dataset**.

5.1.2 Выбор поля данных

Справа от панели графика спектра перечислены поля данных. Определенные поля данных можно отображать или удалять с экрана, устанавливая или снимая флажок в столбце **Displayed**. Если поле данных отмечено как Displayed, его можно использовать в анализе, и оно включается в экспорт данных. Отображаемые поля данных являются компонентом шаблона. См. *Создание шаблонов* →  для получения дополнительной информации.

Чтобы выбрать поля данных в списке полей данных, выберите **Displayed** рядом с полем, которое вы хотите отобразить. Выбранные поля теперь отображаются в сетке спектров. Первый выбор из списка полей данных может отобразиться с задержкой. Последующие поля данных отображаются быстро.

Список полей данных можно редактировать. Для получения дополнительной информации см. *Поля данных* → .

Как выбрать поля данных в сетке спектров

1. Нажмите **Select Fields** в сетке спектров.
Откроется окно выбора поля.
2. Выберите нужные поля. Стандартные поля из Raman RunTime включают:
 - Name
 - Display name
 - Start date time
 - End date time
 - Midpoint date time
 - Error
3. Щелкните **Close**.

Выбранные поля теперь отображаются в сетке спектров.





5.1.3 График тренда поля данных

Справа от списка полей данных отображается график трендов данных. График трендов поля данных отображает значения данных спектра во времени.



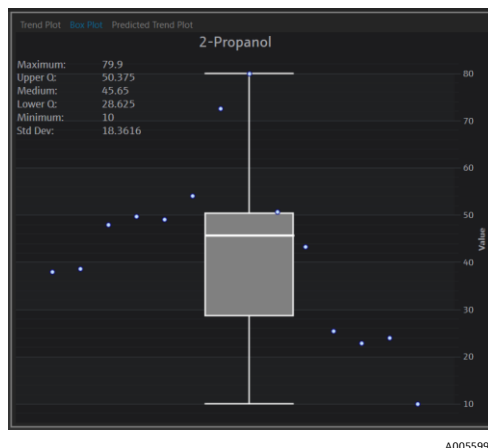
Рис. 19. График трендов поля данных

На панели трендов поля данных можно выполнять следующие действия:

| Элемент навигации | Навигация |
|---|--|
|  A0055988 | Zoom Extents. Масштабирует данные до полного объема. Эта кнопка отображается на большинстве графиков. |
|  A0055989 | Toggle Legend. Показывает или скрывает условные обозначения. Эта кнопка отображается на большинстве графиков. |
|  A0055992 | Copy Plot Data to Clipboard. Копирует данные текущего графика тренда в буфер обмена. |
|  A0055993 | Exclude Points. Исключает выбранные значения данных. |

5.1.4 Коробчатая диаграмма

Вкладка Box Plot отображает коробчатую диаграмму для выбранного поля данных. Отображаются максимальное значение, верхний квартиль, медиана, нижний квартиль, минимальное значение и стандартное отклонение для выбранного поля данных. Коробчатая диаграмма может быть полезна при анализе несеквенционных выборок данных.

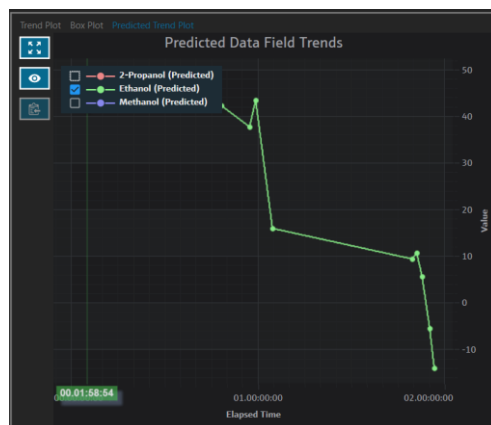


A0055994

Рис. 20. Коробчатая диаграмма

5.1.5 График прогнозируемых трендов поля данных

На вкладке "Predicted Trend Plot" отображаются прогнозируемые значения данных спектра с течением времени.



A0055995

Рис. 21. График прогнозируемых трендов поля данных

5.1.6 Сетка спектров

В нижней части вкладки "Data" сетка спектров отображает спектры и связанные с ними значения данных для отображаемых полей.

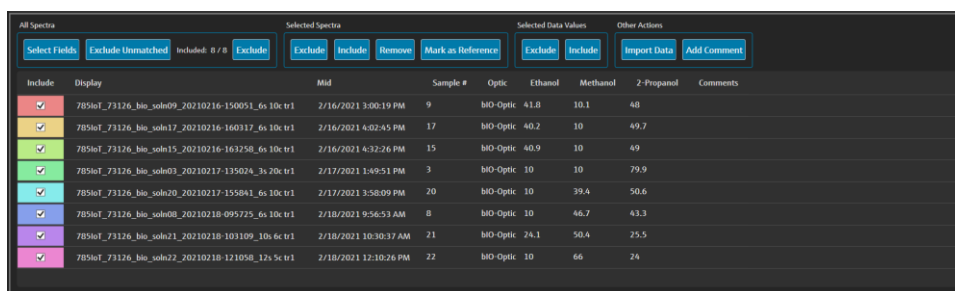


Рис. 22. Сетка спектров

В панели сетки спектров можно выбрать спектры и поля для включения. Функциональность сетки спектров приведена ниже.

| Элемент сетки спектров | Функции отображения |
|---------------------------|--|
| Все спектры | <ul style="list-style-type: none"> ▪ Select Fields. Выберите, какие поля отображать в сетке: имя, отображаемое имя, дата и время начала, дата и время окончания, дата и время середины, а также ошибка. Для длительных измерений может быть полезно просматривать как начальную точку, так и середину. ▪ Exclude Unmatched. Исключение всех спектров, в которых отсутствует хотя бы одно значение для выбранных полей данных. ▪ Exclude/Include. Исключение или включение всех спектров. |
| Избранные спектры | <ul style="list-style-type: none"> ▪ Exclude. Исключение спектров, выбранных в сетке спектров. ▪ Include. Включение спектров, выбранных в сетке спектров. ▪ Remove. Удаление спектров, выбранных в сетке спектров. ▪ Mark as Reference. Устанавливает первый выбранный в сетке спектров спектр в качестве эталонного. Пользователю необходимо ввести новое отображаемое имя для спектра. |
| Выбранные значения данных | <ul style="list-style-type: none"> ▪ Exclude. Исключает выбранные значения данных. ▪ Include. Включает выбранные значения данных. |
| Другие действия | <ul style="list-style-type: none"> ▪ Import Data. Выбор файла Excel для импорта данных. Открывает окно импорта данных. ▪ Add Comment. Добавление комментария к набору данных. Пользователю предлагается выбрать дату начала и дату окончания. Комментарий добавляется для всех спектров в этом диапазоне. Комментарии к набору данных относятся только к тому набору данных, в который они добавлены. Комментарии к набору данных не отображаются в других наборах данных. |

Как исключить данные из сетки или графика спектров

Вы можете исключить спектры из сетки и графика, например, если во время эксперимента лазер был заблокирован или получены некорректные данные.

1. На графике спектров увеличьте масштаб, чтобы просмотреть только некорректные данные.
2. Наведите курсор на одну из линий спектра на графике и щелкните, чтобы выбрать ее. Спектр теперь также выделен в сетке спектров.
3. Удерживайте клавишу Shift, чтобы выделить все спектры выше выбранного.
4. Нажмите **Exclude** в поле "Selected Spectra".
5. Нажмите кнопку **Save Dataset**.

Возможно, вам потребуется исключить несколько других спектров, если при первом выделении были пропущены некоторые из них. При уменьшении масштаба на графике спектров вы должны увидеть, что все некорректные спектры теперь исключены.

Чтобы импортировать данные, выполните следующие действия:

Вы можете импортировать поля данных и их значения из существующей электронной таблицы Excel.

1. В сетке спектров нажмите **Import Data**.
Откроется окно "Select a file to import".
2. Перейдите к электронной таблице и нажмите **Open**.
После перехода к электронной таблице откроется окно импорта данных.

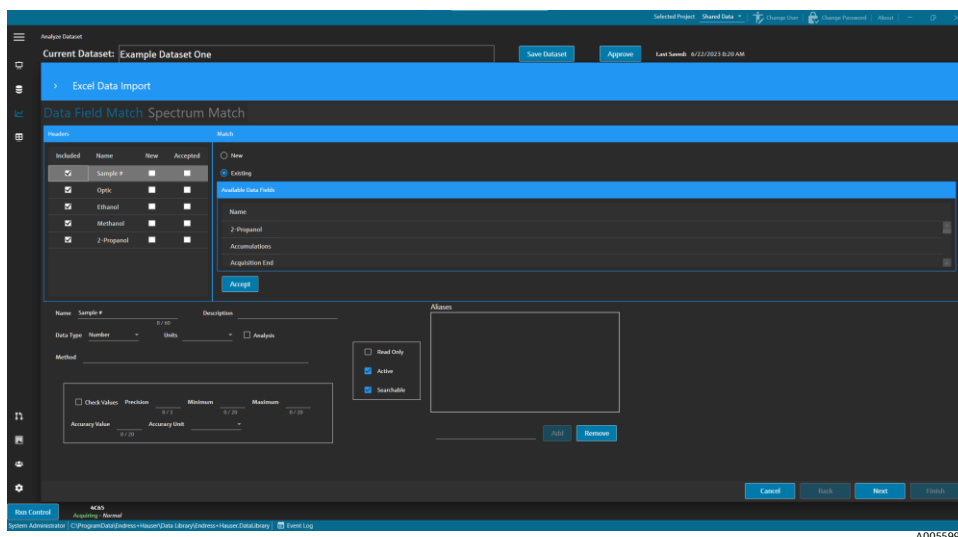


Рис. 23. Импорт данных, сопоставление полей данных

3. На вкладке "Data Field Match" выберите:
 - **Included.** Определяет, импортируется ли поле данных с его значениями.
 - **Match New/Existing.** Позволяет вручную выбрать, следует ли рассматривать выбранное поле как новое или существующее. Если выбрано Existing, пользователь может указать, с каким полем оно должно быть сопоставлено. Если выбрано New, поле можно редактировать так же, как в редакторе полей данных (см. выше).
 - **Accepted.** Поля данных можно пометить как "Accepted" для отслеживания изменений.
4. Определите поле данных. Добавьте описание, единицы измерения, псевдонимы, а также нижние и верхние пределы. Полное описание параметров полей данных см. в таблице, описывающей *параметры полей данных* → .
5. Нажмите **Next**.
6. На вкладке Spectrum Match выберите:
 - **Up/Down Arrows.** Эти стрелки можно использовать для перемещения образцов вверх или вниз для выравнивания со спектрами.
 - **Threshold.** Допустимая разница между временем спектра и ближайшим временем образца (в единицах: часы, минуты или секунды).
 - **Apply Threshold.** Применяет пороговое значение к спектрам.
 - **Include Selected.** Включает выбранные значения данных.
 - **Exclude Selected.** Исключает выбранные значения данных.
 - **Show Only Matched.** Отображает только те спектры, для которых найдены соответствующие значения.

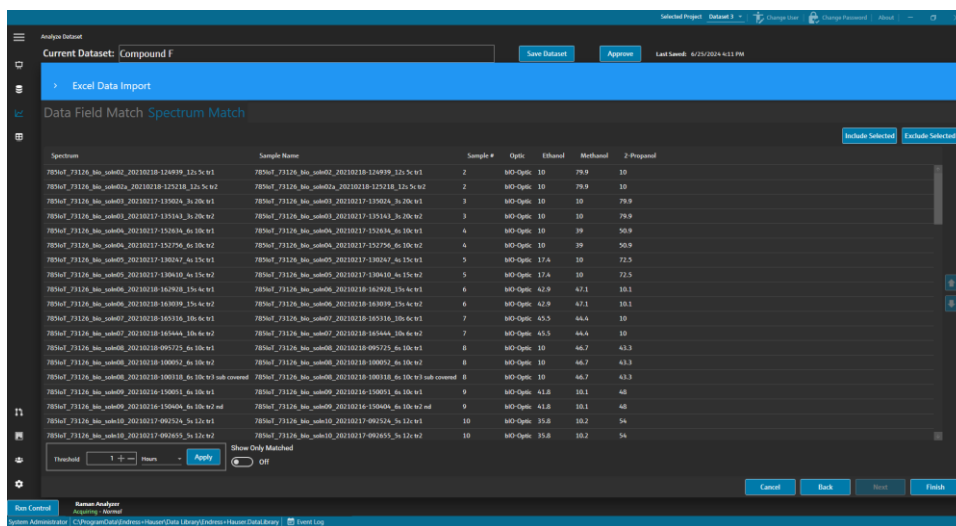


Рис. 24. Импорт данных, сопоставление спектра

- Нажмите кнопку **Finish**. В диалоговом окне продолжения нажмите **OK**.
- Нажмите кнопку **Save dataset**.

5.1.7 Комментарии

Плитка комментариев позволяет добавить комментарий к одному спектру. Эти комментарии не привязаны к конкретному набору данных и отображаются во всех наборах данных, содержащих данный спектр.

Комментарии также можно добавлять для набора данных или для периода времени в наборе данных. Это можно сделать с помощью кнопки **Add Comment** на плитке Spectra Grid. Для получения дополнительной информации см. *Изменение сетки спектров* →

Чтобы добавить комментарий к спектру, выполните следующие действия:

- На плитке "Comments" нажмите **Add**.
Откроется диалоговое окно "Add Comment".
- Введите соответствующий комментарий и нажмите **OK**.
Плитка комментариев и сетка спектров теперь отображают комментарий для выбранного спектра.

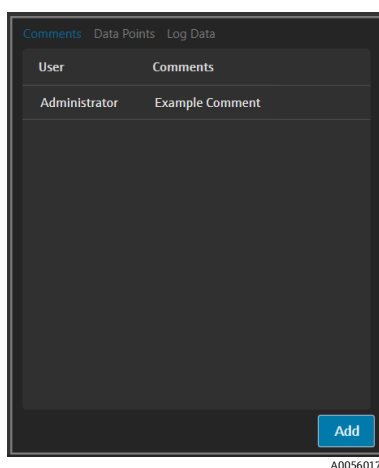


Рис. 25. Комментарии по спектру

5.1.8 Точки данных

На вкладке "Data Points" отображается список точек данных X и Y выбранного спектра.

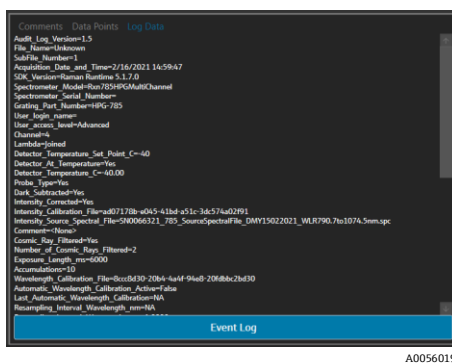
| X | Y |
|-----|---------------|
| 100 | 251218.46875 |
| 101 | 245982.421875 |
| 102 | 240804.015625 |
| 103 | 235678.640625 |
| 104 | 230577.3125 |
| 105 | 225458.1875 |
| 106 | 220286.8125 |
| 107 | 215050.125 |
| 108 | 209759.90625 |
| 109 | 204449.03125 |
| 110 | 199163.703125 |

A0056018

Рис. 26. Список точек данных

5.1.9 Данные журнала

Вкладка "Log Data" используется для просмотра метаданных (журнал аудита .spc) о выбранном спектре. Нажмите **Event Log**, чтобы просмотреть журнал событий для выбранного спектра.

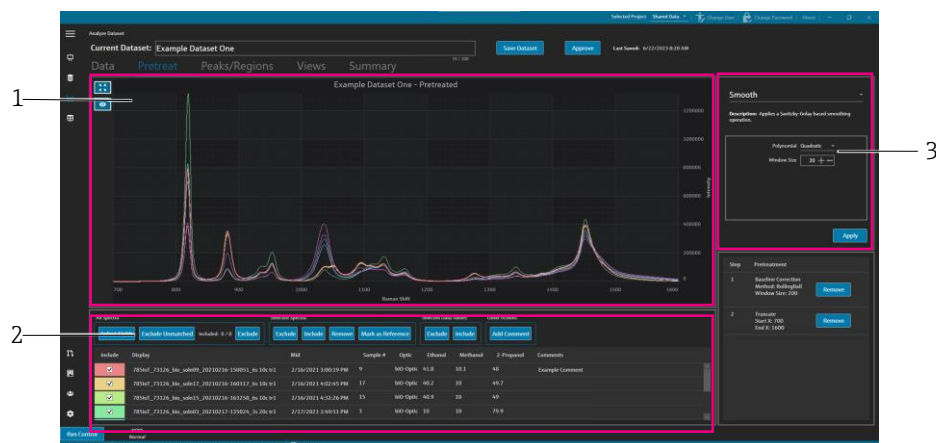


A0056019

Рис. 27. Event Log

5.2 Использование предварительной обработки

Вкладка "Pretreat" используется для применения предварительной обработки к спектрам в наборе данных. Предварительные обработки можно удалять, корректировать и применять повторно в любое время, а изменения отражаются на графике спектра, а также в анализе пиков и областей. Предварительная обработка является компонентом шаблонов →



A0056020

Рис. 28. Вкладка "Pretreat"

| # | Description |
|---|---|
| 1 | Spectra plot. Отображает необработанные спектры до применения предварительной обработки, после чего здесь отображаются только обработанные спектры. |
| 2 | Spectra grid. Перечисление спектров и связанных с ними значений данных для отображаемых полей данных. Предоставление возможности включения или исключения спектров и значений данных, а также импорта справочных данных. Изменение параметров здесь, таких как включение или исключение спектров, отражается на вкладке "Data", а также на последующих этапах рабочего процесса. |
| 3 | Pretreat pane. Здесь выполняется применение или удаление всех предварительных обработок спектров. |


Предварительная обработка применяется в порядке их выбора, что обеспечивает последовательную гибкость. К набору данных могут быть применены следующие предварительные обработки:

- Нажмите **Apply**, чтобы применить выбранную предварительную обработку.
- Нажмите **Remove**, чтобы удалить соответствующую предварительную обработку.

5.2.1 Обрезка спектров

Вы можете обрезать область спектра, чтобы сосредоточиться на конкретных участках. Обрезка позволяет обрезать спектры в выбранном диапазоне оси X.

Как обрезать спектр

1. На вкладке "Pretreat" увеличьте область спектра, на которой хотите сосредоточиться, нажав на график и выделив область с помощью квадрата, или воспользуйтесь инструментом **Zoom** .
2. На панели "Pretreat" выберите **Truncate**.
3. Измените область обрезки, введя значения **Start X** и **End X**. Нажмите кнопку **Apply**.
Предварительная обработка Truncate теперь отображается на панели "Pretreatment". После применения опции "Truncate" она больше не будет доступна в списке предварительных обработок.
4. Нажмите кнопку **Save Dataset**.

Чтобы изменить границы обрезки, удалите текущую предварительную обработку "Truncate" и примените ее заново.

5.2.2 Сглаживание

Предварительная обработка "Smooth" выполняет операцию сглаживания на основе алгоритма Савицкого-Голея.

Чтобы выполнить сглаживание спектра:

1. На панели "Pretreat" выберите **Smooth**.
2. Выберите следующие параметры:
 - **Polynomial–Quadratic или Cubic.** Квадратичные полиномы предпочтительны, если данные в заданном окне сглаживания примерно следуют параболической тенденции. Кубические полиномы можно использовать для точного соответствия локальным точкам данных.
 - **Window size.** Определяет количество соседних точек данных, используемых в процессе сглаживания. Настройте размер окна в зависимости от уровня шума в сигнале и желаемой степени сглаживания. Большие размеры окна обеспечивают более сильное сглаживание, но могут также приводить к задержке или искажению сигнала, тогда как меньшие размеры окна позволяют уловить более мелкие детали, но могут быть чувствительны к шуму.

3. Нажмите кнопку **Apply**.

Предварительная обработка "Smooth" теперь отображается на панели "Pretreatment". После применения опции "Smooth" она больше не будет доступна в списке предварительных обработок.

4. Нажмите кнопку **Save Dataset**.

Чтобы изменить настройки сглаживания, удалите текущую предварительную обработку сглаживания и примените ее повторно.

5.2.3 Применение коррекции базовой линии

Предварительная обработка "Baseline Correction" удаляет фоновый шум из спектров с использованием метода катящегося шара, метода Пирсона или метода производной. Нельзя применять две разные коррекции базовой линии одновременно.

Выбор метода и параметров для коррекции базовой линии должен основываться на конкретных характеристиках спектральных данных и природе искажений базовой линии. Полезно экспериментировать с разными параметрами, чтобы найти оптимальный баланс для точного определения пиков.

При выборе коррекции базовой линии методом Пирсона значения фильтра базовой линии и подгонки определяют интенсивность или степень коррекции базовой линии.

- **Low Fit Values (0-2)**. Эти значения обеспечивают мягкую коррекцию базовой линии. Это может быть полезно, если базовая линия относительно стабильна и требуется сохранить тонкие особенности данных. Однако такая коррекция может быть недостаточной для полного удаления искажений базовой линии, что потенциально может привести к менее точной идентификации пиков.
- **Medium Fit Values (3-4)**. Эти значения обеспечивают баланс между удалением искажений базовой линии и сохранением целостности пиков. Такой диапазон значений часто является хорошей отправной точкой для многих наборов данных, так как помогает улучшить идентификацию пиков без значительных искажений данных.
- **High Fit Values (5)**. Эти значения обеспечивают сильную коррекцию базовой линии, что может быть полезно для данных со значительным дрейфом базовой линии или шумом. Однако агрессивная коррекция может удалить или исказить мелкие пики, что может привести к их пропуску или неточной идентификации.

Чтобы применить коррекцию базовой линии, выполните следующие действия:

1. На панели "Pretreat" выберите **Baseline Correction**.
2. Выберите **Method** и соответствующие настройки:
 - **Derivative**. Вычисляет сглаженную производную Савицкого-Голея для каждого спектра.
 - **Derivative**. Первая или вторая.
 - **Polyomial**. Квадратичный или кубический.
 - **Window size**. Определяет, сколько соседних точек данных учитывается при коррекции базовой линии.
 - **Pearson**. Оценивает базовую линию для каждого спектра путем итеративного удаления полиномов 4-го порядка. Это устраняет искажения базовой линии путем вычитания полиномиальной аппроксимации из исходного спектра.
 - **Fit type**. Типы подгонки, такие как полиномиальная, полиномы Лежандра или Эрмита, определяются следующим образом:
 - **Polynomial**. Аппроксимирует базовую линию с использованием полиномиальной функции, соответствующей спектральным данным.
 - **Legendre**. Использует полиномы Лежандра, которые представляют собой набор ортогональных полиномов, для подгонки базовой линии. Полиномы Лежандра позволяют минимизировать ошибку на заданном интервале.
 - **Hermite**. Использует полиномы Эрмита, которые представляют собой ортогональные полиномы, определяемые весовой функцией, включающей гауссово распределение. Полиномы Эрмита могут применяться, когда данные имеют распределение, близкое к гауссовскому.
 - **Baseline filter (0 to 5)**. Определяет степень коррекции базовой линии, применяемой к спектральным данным.

- **Fit (0 to 5)**. Определяет интенсивность процесса подгонки, применяемого к спектральным данным.
 - **Rolling ball**. Использует круг фиксированного размера, который прокатывается под спектром и плавно удаляет базовую линию во всех точках соприкосновения.
 - **Window size**. Определяет количество соседних точек данных, используемых в процессе сглаживания.
3. Нажмите кнопку **Apply**.
- Предварительная обработка "Baseline Correction" теперь отображается на плитке "Pretreatment". После применения опции "Baseline Correction" она больше не будет доступна в списке предварительных обработок.
4. Нажмите кнопку **Save Dataset**.

Для изменения настроек коррекции базовой линии удалите текущую предварительную обработку "Baseline Correction" и примените её заново.

5.2.4 Нормализация

Предварительная обработка "Normalize" масштабирует спектры до общего диапазона. Нельзя применять нормализацию к спектру повторно.

Чтобы нормализовать спектр, выполните следующие действия:

1. На панели "Pretreat" выберите **Baseline Correction**.
 2. Выберите **Method** и соответствующие настройки:
 - **SNV**. Каждый спектр нормализуется путем вычитания среднего значения и деления на стандартное отклонение.
 - **Range**. Нормализует все значения спектра, приводя их к диапазону от 0 до 1.
 3. Нажмите кнопку **Apply**.
- Предварительная обработка "Normalize" теперь отображается на плитке "Pretreatment". После применения опции "Normalize" она больше не будет доступна в списке предварительных обработок.
4. Нажмите кнопку **Save Dataset**.

Чтобы изменить настройки нормализации, удалите текущую предварительную обработку "Normalize" и примените ее повторно.

5.2.5 Вычитание

Предварительная обработка "Subtract" вычитает один эталонный спектр из всех спектров.

Чтобы вычесть спектр, выполните следующие действия:

1. На панели "Pretreat" выберите **Subtract**.
 2. Выберите спектр для вычитания в списке **Spectrum**. Нажмите кнопку **Apply**.
- Предварительная обработка "Subtract" теперь отображается на плитке "Pretreatment". После применения опции "Subtract" она больше не будет доступна в списке предварительных обработок.
3. Нажмите кнопку **Save Dataset**.

Чтобы изменить настройки вычитания, удалите текущую предварительную обработку "Subtract" и примените ее повторно.

5.2.6 Фильтрация интенсивности

Предварительная обработка "Intensity Filter" исключает спектры, выходящие за пределы выбранного минимального и максимального диапазона оси Y. Этот фильтр полезен, например, в случаях, когда лазер заблокирован или по другим причинам создает непригодные для использования данные в течение определенного времени.

Чтобы отфильтровать спектры по интенсивности, выполните следующие действия:

1. На панели "Pretreat" выберите **Intensity Filter**.
2. Введите минимальный и максимальный диапазон интенсивности в полях **Minimum Y** и **Maximum Y**. Нажмите кнопку **Apply**.

Предварительная обработка "Intensity Filter" теперь отображается на плитке "Pretreatment". После применения опции "Intensity Filter" она больше не будет доступна в списке предварительных обработок.

3. Нажмите кнопку **Save Dataset**.

Чтобы изменить настройки фильтра интенсивности, удалите текущую предварительную обработку "Intensity Filter" и примените ее заново.

5.3 Пики и области


Вкладка "Peaks and Regions" используется для добавления вычислений для определенных диапазонов оси X. Пики и области являются компонентами шаблонов. См. *Создание шаблонов* →  для получения дополнительной информации.



Рис. 29. Вкладка "Peaks and Regions"

| # | Description |
|---|---|
| 1 | Spectra plot. Отображает предварительно обработанные спектры. Плитка графика спектра используется для выбора положений пиков и областей. В этой плитке можно увеличивать или уменьшать масштаб, нарисовав рамку или сделав двойной щелчок. |
| 2 | Peak plots. Отображает результаты анализа пиков. В этой плитке можно переключаться между вкладками "Peak Analysis" (тренды) и "Model plot" (результаты регрессии). |
| 3 | Region plots. Отображает результаты многомерного разрешения кривых (multivariate curve resolution, MCR) или анализа главных компонент (principal component analysis, PCA) при применении анализа области. |
| 4 | Пик и Область. Отображает диалоговое окно для добавления и определения новых пиков и областей. |
| 5 | Peak and Region lists. Перечисление определенных пиков и областей. Вы можете выбирать и редактировать пики и области на этой плитке. |
| 6 | Data Field Trend plot. График трендов поля данных позволяет сравнивать результаты анализа пиков и областей с измеренными данными. 3D plot. Отображает график спектра в 3D. |

5.3.1 Добавление пиков и областей

Окно выбора пика/области показывает визуальное представление пиков и областей в наборе данных.

Чтобы добавить пики, выполните следующие действия:

1. На вкладке Peaks/Regions нажмите **Peak**.

Отобразится всплывающее окно Add Peak.

A0056045

Рис. 30. Всплывающее окно Add Peak

2. Введите **Peak Name**. Это отображаемое имя пика.
3. Выберите тип пика **Peak Type** (высота, площадь или центрирование). Центрирование пика полезно в случаях, когда пики смещаются, а не увеличиваются или уменьшаются в результате химических или физических изменений.
4. Введите диапазон пика в **X1** и **X2**.
5. (Необязательно) Выберите **Data Field** для сопоставления с пиком. Поле данных используется в расчетах моделирования.
6. (Необязательно) Включите переключатель **Model**, если во время экспорта для пика создается модель.
7. Нажмите **Add**, чтобы создать новый пик.
8. Нажмите кнопку **Save Dataset**.

После добавления пика отображается выделенная область графика спектра. Вы можете перемещать, расширять или сжимать пик, перемещая или перетаскивая углы окна пика на графике спектра.

После создания пика просмотрите тренд анализа пика в области графика пиков. Вы можете переместить неиспользуемые окна, чтобы изменить размер графика трендов и получить более полное представление о трендах.



A0056046

Рис. 31. График спектра, показывающий пик и анализ пиков

Чтобы добавить области, выполните следующие действия:

1. На вкладке Peaks/Regions нажмите **< Region**.
Откроется всплывающее окно "Add Region".


The image shows a dark-themed dialog box titled "Add Region". It has four input fields: "Region Name" with the text "Example Region", "X1" with the value "700" and plus/minus buttons, "X2" with the value "1600" and plus/minus buttons, and "Calculation" with a dropdown menu showing "PCA". At the bottom is a blue "Add" button. A small ID "A0056047" is visible at the bottom right of the dialog box.

Рис. 32. Всплывающее окно Add Region

2. Введите следующую информацию:
 - Поле **Region Name** – отображаемое имя области.
 - Поля **X1** и **X2** представляют собой диапазон области.
 - Поле **Calculation** определяет, какой тип расчета выполняется для области (PCA или MCR).
3. Нажмите **Add**, чтобы создать новую область.



5.3.2 Изменение пиков и областей

Чтобы включить дополнительные спектры в анализ пиков, выполните следующие действия:

1. Выберите вкладку **Data** или **Pretreat**.
2. В сетке спектров прокрутите до спектра, который необходимо включить.
Вы можете удерживать клавишу Shift и прокручивать до последнего спектра, чтобы включить все спектры в диапазоне.
3. Нажмите **Include** в поле "Selected Spectra".
4. Выберите вкладку **Peaks/Regions** и нажмите **Refresh Plot** .
Дополнительные спектры включены как в тренды пиков, так и в график спектра.
5. Нажмите кнопку **Save Dataset**.

Исключение спектров из анализа пиков

Данные можно исключить непосредственно из графика тренда. Это удобно для удаления явных отклонений или в случаях отсутствия изменений в эксперименте.

1. Выберите точки данных, которые необходимо исключить, щелкнув и перетащив их по области на графике анализа пиков.
Точки выделены жирным шрифтом, а кнопка исключения активирована.
2. Нажмите **Exclude Points** .
3. Нажмите ОК, чтобы перейти к списку исключенных спектров. Если точки были выбраны на основе нескольких пиковых трендов, то названия спектров могут появляться более одного раза.
4. Нажмите **Refresh Plot** .
Анализ пиков теперь показывает только неисключенные данные.
5. Нажмите кнопку **Save Dataset**.

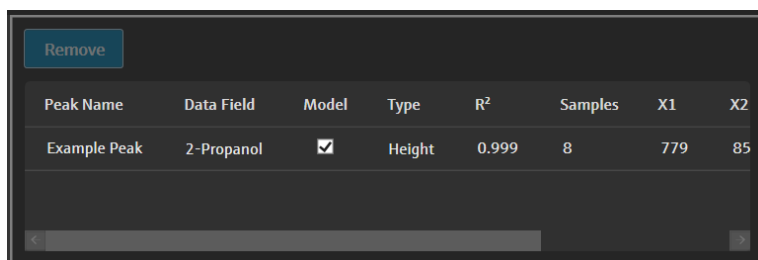
Перемещение и изменение размера пиков и областей

Пики и области можно перемещать и изменять их размер, щелкая и перетаскивая маркеры управления. После изменения размера пика или области анализ пересчитывается.

Изменение или удаление пика или области

Справа от панели пиков и областей отображается список пиков и областей. В этих списках можно просматривать и изменять свойства пика или области. Выберите пик или область и нажмите **Remove**, чтобы удалить выбранный элемент.

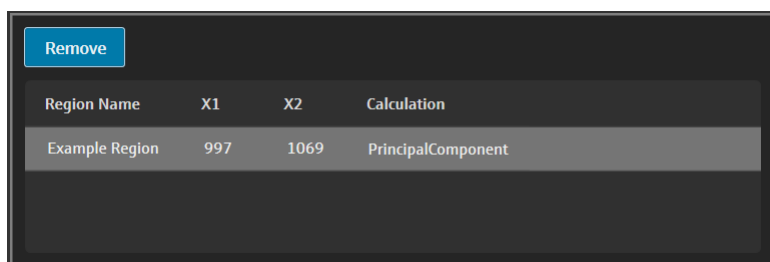
При удалении пика или области необходимо обновить или удалить все представления, использующие тренд, созданный на основе этого пика или области. Невозможность обновить или удалить представление тренда на основе удаленного пика или области приводит к невозможности анализа связанного набора данных. Пользователи, у которых представление сохранено на панели управления, не смогут войти в систему, если пик или область удалены, а соответствующее представление не обновлено или не удалено.



| 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

Рис. 33. Список пиков





| Region Name | X1 | X2 | Calculation |
|----------------|-----|------|--------------------|
| Example Region | 997 | 1069 | PrincipalComponent |

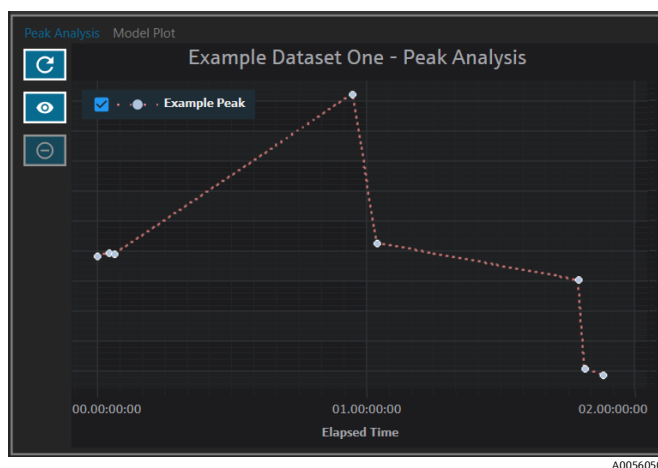
A0056049

Рис. 34. Список областей

5.3.3 Просмотр анализа пиков

На вкладке "Peak Analysis" отображается график тренда для всех добавленных пиков. Пики добавляются со своей собственной осью Y. На вкладке "Peak Analysis" выполните следующие действия:

- Нажмите **Exclude Points** , чтобы удалить определенные точки данных.
- Нажмите **Refresh Plot** , чтобы обновить график после изменения точек данных.





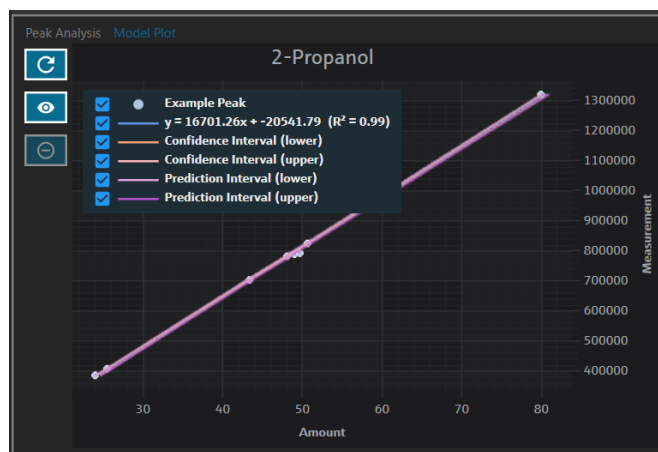
A0056050

Рис. 35. Анализ пиков

5.3.4 Просмотр графика модели

На вкладке "Model Plot" отображается график модели для выбранного пика. На вкладке "Model Plot" выполните следующие действия:

- Нажмите **Exclude Points** , чтобы удалить определенные точки данных.
- Нажмите **Refresh Plot** , чтобы обновить график после изменения точек данных. Если спектры или значения данных исключены из вкладки "Data", используйте команду **Refresh Plot**, чтобы пересчитать график модели.



A0056051

Рис. 36. Вкладка графика модели

5.4 Создание представлений панели управления: сетки, тренды, спектры и трехмерные графики

Вкладка "Views" используется для определения наиболее релевантных графиков для каждого варианта использования. Существует множество вариантов просмотра графиков, даже для простых наборов данных. Каждое представление можно добавить на панель управления как часть коллекции представлений. Вы можете создавать предпочтительные вкладки панели управления, которые отображают от одного до четырех графиков в квадрантах.

Все наборы данных создаются с двумя predetermined представлениями: график спектра и сетка спектра. Пользовательские представления добавляются, изменяются и удаляются через вкладку "Views". Предварительный просмотр выбранного вида отображается в правой части вкладки "Views".

Существует 4 типа просмотра:

- Trend plot
- Spectra plot
- Spectra grid
- 3D plot

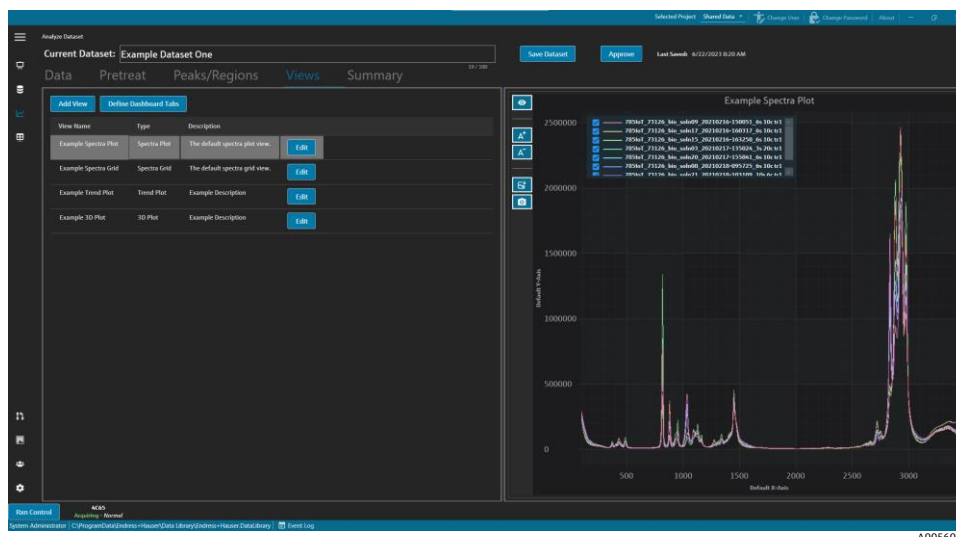


Рис. 37. Вкладка "Views"

На вкладке "Views" также можно нажать опцию **Define Dashboard Tabs**, чтобы открыть окно "Define Dashboard Tabs". См. *Определение панели управления* →

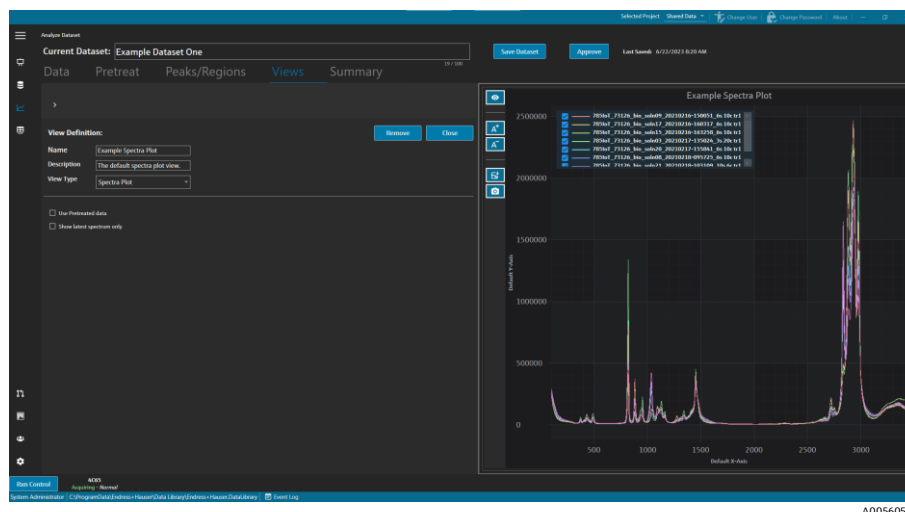
Чтобы удалить представление, выберите его и нажмите **Remove**. При желании представление можно удалить, выбрав его и нажав клавишу Delete на клавиатуре.

5.4.1 Создание или изменение вида графика спектра

Представление графика спектра можно использовать для просмотра спектров набора данных на масштабируемом графике. График спектра – это представление по умолчанию, которое создается для каждого набора данных.

Чтобы изменить представление графика спектра, выполните следующие действия:

1. На вкладке "Views" нажмите **Add View**.
Откроется диалоговое окно "View Definition".
2. Введите следующую информацию:
 - **Name**. Отображаемое имя представления.
 - **Description**. Краткое описание представления.
 - **View Type**. Выберите график спектра.
3. Выберите следующие параметры:
 - **Use Pretreated data**. Выберите, чтобы отобразить предварительно обработанные данные в представлении. Если флажок не установлен, в представлении отображаются необработанные данные.
 - **Show latest spectrum only**. Выберите, чтобы отобразить только спектр с последней датой и временем окончания. Если флажок не установлен, отображаются все спектры.
4. Щелкните **Close**.
5. Нажмите кнопку **Save Dataset**.



A0056052

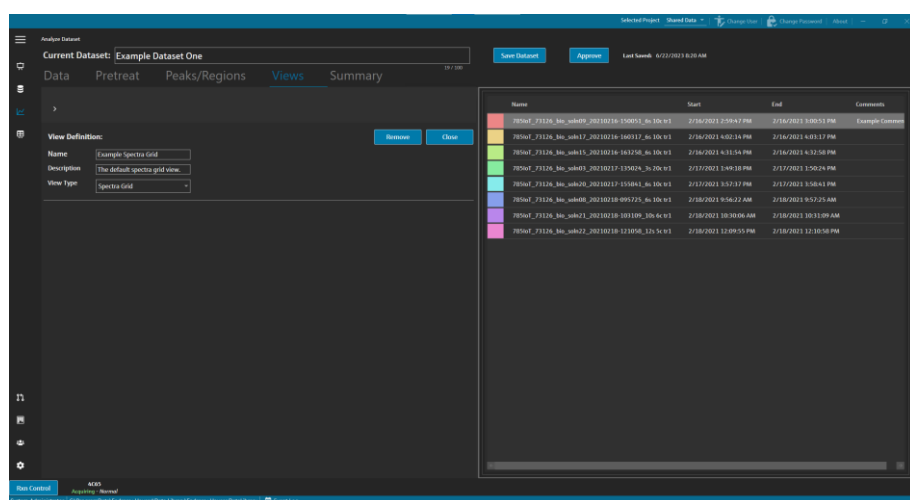
Рис. 38. Представление графика спектра

5.4.2 Изменение сетки спектров

Представление "Spectra Grid" можно использовать для отображения отдельных спектров в виде сетки. Сетка спектра – это представление по умолчанию, которое создается для каждого набора данных.

Чтобы изменить представление сетки спектра, выполните следующие действия:

1. На вкладке "Views" нажмите **Add View**.
Откроется диалоговое окно "View Definition".
2. Выберите сетку спектров и нажмите **Edit**.
3. Введите следующую информацию:
 - **Name**. Отображаемое имя представления.
 - **Description**. Краткое описание представления.
 - **View Type**. Выберите **Spectra Grid**.
4. Щелкните **Close**.
5. Нажмите кнопку **Save Dataset**.



A0056054

Рис. 39. Представление сетки спектра

5.4.3 Создание или изменение вида графика тренда

Для просмотра тренда набора данных можно использовать график тренда. В представлении графика тренда ось X представляет относительное время получения спектров. Ось Y представляет значения данных, прогнозируемые значения данных или показатели пика.

Вы можете выбрать, какие поля данных и пики включить в представление. Если для поля данных, используемого в пике, выбрано значение **Model**, в представлении отображаются прогнозируемые значения.

Чтобы создать и изменить вид графика тренда, выполните следующие действия:

1. На вкладке "Views" нажмите **Add View**.
Откроется диалоговое окно "View Definition".
2. Введите следующую информацию:
 - **Name.** Отображаемое имя представления.
 - **Description.** Краткое описание представления.
 - **View Type.** Тип представления. Выберите **Trend Plot**.
3. Из **Available data fields** выберите поля данных для построения графика. Нажмите **Include** ➤.
4. Из опции **Available peaks** выберите пики для построения графика. Нажмите **Include** ➤.
5. Щелкните **Close**.
6. Нажмите кнопку **Save Dataset**.

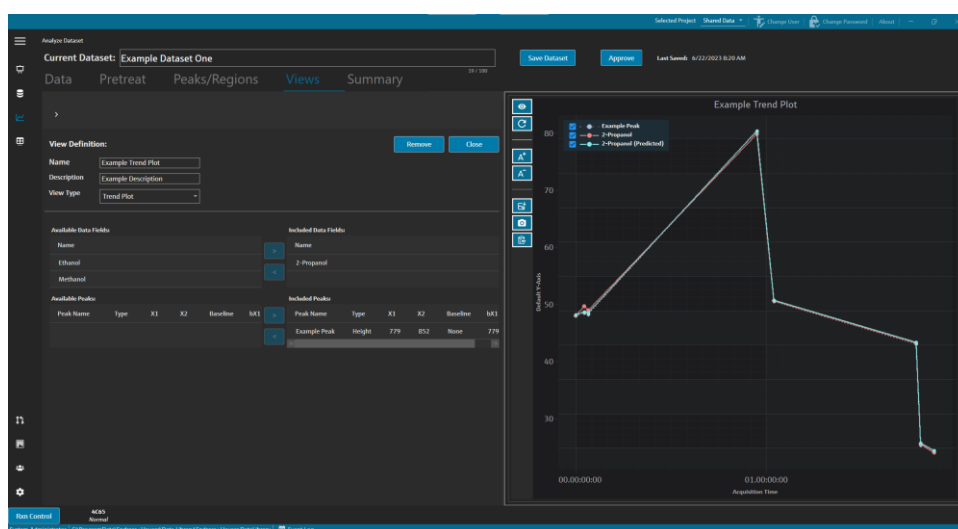


Рис. 40. Представление графика тренда

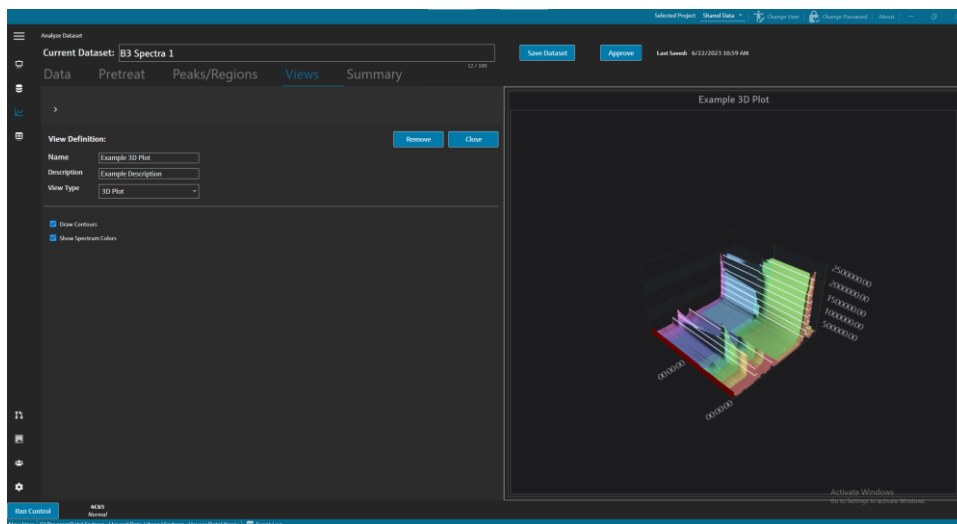
5.4.4 Создание или изменение 3D-графика

В режиме 3D-графика спектры отображаются в виде графика с осями x, y и z. Этот график может предоставить дополнительную информацию о различиях в спектрах с течением времени или при добавлении или удалении переменных.

Чтобы изменить представление графика 3D, выполните следующие действия:

1. На вкладке "Views" нажмите **Add View**.
Откроется диалоговое окно "View Definition".
2. Введите следующую информацию:
 - **Name.** Отображаемое имя представления.
 - **Description.** Краткое описание представления.
 - **View Type.** Выберите 3D-график.
3. Настройте график в соответствии с желаемым представлением:
 - **Draw Contours.** Добавляет контурные линии вдоль длины волны для выделения различий в спектрах.

- **Show Spectrum Colors.** Включает или отключает цвета спектра для визуализации изменений во времени.
 - **Change angle of x, y, and z axes.** Угол обзора можно настроить, щелкнув по графику и перетащив его в нужное положение.
 - **Zoom in or out.** Используйте колесо мыши для увеличения или уменьшения масштаба графика.
4. Щелкните **Close**.
 5. Нажмите кнопку **Save Dataset**.



A0056055

Рис. 41. Представление графика 3D


5.4.5 Добавление временных аннотаций




На вкладке "Views" можно создавать временные аннотации, включая выделенные области, метки, линии и стрелки. Затем вы можете сохранить аннотации с представлением, чтобы обратиться к ним позже или поделиться ими.

На вкладке "Views" можно выполнять следующие действия.

| Элемент навигации | Навигация |
|--|---|
|  A0056085 | Add Temporary Annotation. Добавляет временную аннотацию к представлению. |
|  A0056086 | Save Image File. Сохраняет представление с аннотациями. |
|  A0056087 | Copy Image to Clipboard. Копирует текущий вид с аннотацией в буфер обмена. |
|  A0055992 | Copy Plot Data to Clipboard. Копирует данные текущего графика тренда в буфер обмена. |
|  A0055993 | Remove Temporary Annotation. Удаляет временную аннотацию из представления. |

Чтобы создать временные аннотации, выполните следующие действия:

1. На вкладке "Views" выберите представление, которое вы хотите аннотировать.
2. Нажмите **Add Temporary Annotation** .
3. Выберите **Annotation type**:
 - **Line.** Размещает линию на представлении.

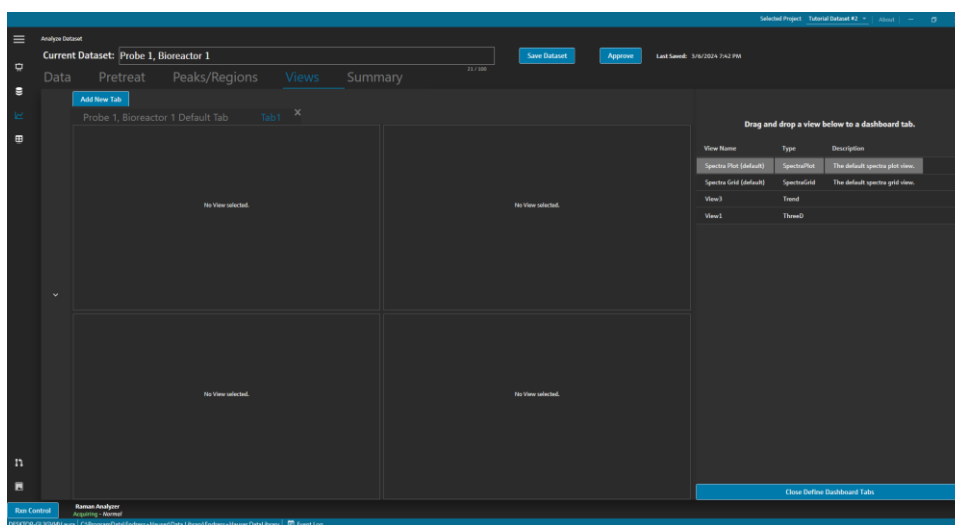
- **Line arrow.** Размещает стрелку на представлении.
 - **Text.** Размещает текст на представлении.
 - **Box.** Помещает выделенный блок на представление.
 - **Horizontal line.** Размещает горизонтальную линию на представлении.
 - **Vertical line.** Размещает вертикальную линию на представлении.
 - **Axis Marker.** Размещает маркер оси на представлении.
4. Нажмите **Add Temporary Annotation**, затем щелкните представление, чтобы разместить маркер.
 5. Сохраните представление, выполнив одно из следующих действий:
 - Нажмите **Save Image File** , чтобы сохранить представление с аннотациями.
 - Нажмите **Copy Image to Clipboard** .
 - Нажмите **Copy Plot Data to Clipboard** .
 6. Нажмите кнопку **Save Dataset**.

5.4.6 Определение панели управления

На вкладке "Views" можно определить и сохранить панель управления. Для этого необходимо сначала создать представления, описанные в предыдущих разделах. По умолчанию вкладка "Views" содержит представление "Spectra Plot" и "Spectra Grid" для каждого набора данных.

Чтобы определить панель управления, выполните следующие действия:

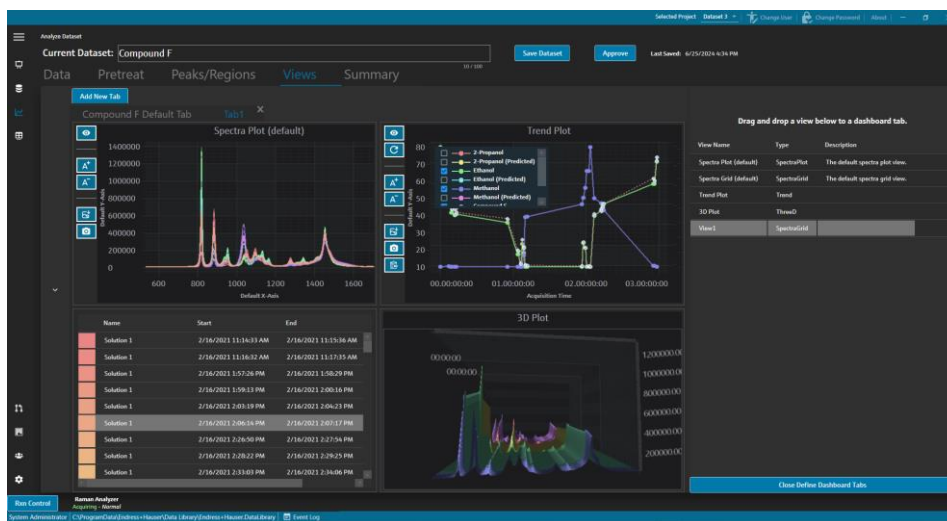
1. На вкладке "Views" нажмите **Define Dashboard Tabs**.
Отображается вкладка по умолчанию для текущего набора данных, на которой показаны график спектра и сетка спектра.
2. Нажмите **Add New Tab**.
Откроется всплывающее окно "Add New Tab".
3. Выберите количество просмотров для отображения:
 - Вкладка с 1 представлением
 - Вкладка с 2 представлениями
 - Вкладка с 3 представлениями
 - Вкладка с 4 представлениями
 Отобразится новая панель управления.



A0055977

Рис. 42. Определение новой панели управления

4. Перетащите нужные представления из списка справа в нужную область панели управления.



A0056056

Рис. 43. Выбранные представления на новой панели

5. Дважды щелкните имя вкладки и переименуйте панель управления по своему усмотрению.
6. Нажмите кнопку **Save Dataset**.
7. Нажмите **Close Define Dashboard Tabs**.

5.5 Краткий обзор

Наборы данных обобщаются и анализ применяется на вкладке "Summary". На вкладке "Summary" также можно сохранять шаблоны, экспортировать файлы моделей ПО Raman data library, а также экспортировать наборы данных для внешнего моделирования.

На вкладке "Summary" можно выполнять следующие действия.

- Просматривать сводную информацию **View summary information** о наборе данных. Сводная информация указывает статус набора данных, состояние его утверждения, общие включенные спектры и применимые поля данных. Также отображаются предварительная обработка, пики, области и снимок графика.
- **Export the dataset**. Нажмите **Export**, чтобы экспортировать текущий набор данных. Дополнительную информацию см. в разделе *Экспорт данных, наборов данных и моделей* → 📄.
- **Launch dashboard tabs**. Нажмите **Launch Dashboard**, чтобы добавить копию панели управления набора данных в окно панели управления. Панель управления определяется на вкладке "Views". См. *Создание представлений панели управления: сетки, тренды, спектры и трехмерные графики* → 📄 для получения дополнительной информации.
- **Create templates** – создание шаблонов из набора данных. См. *Создание шаблонов* → 📄 для получения дополнительной информации.
- **View events** – просмотр событий, связанных с набором данных. Нажмите **Dataset Event Log**, чтобы просмотреть журнал событий для текущего набора данных.

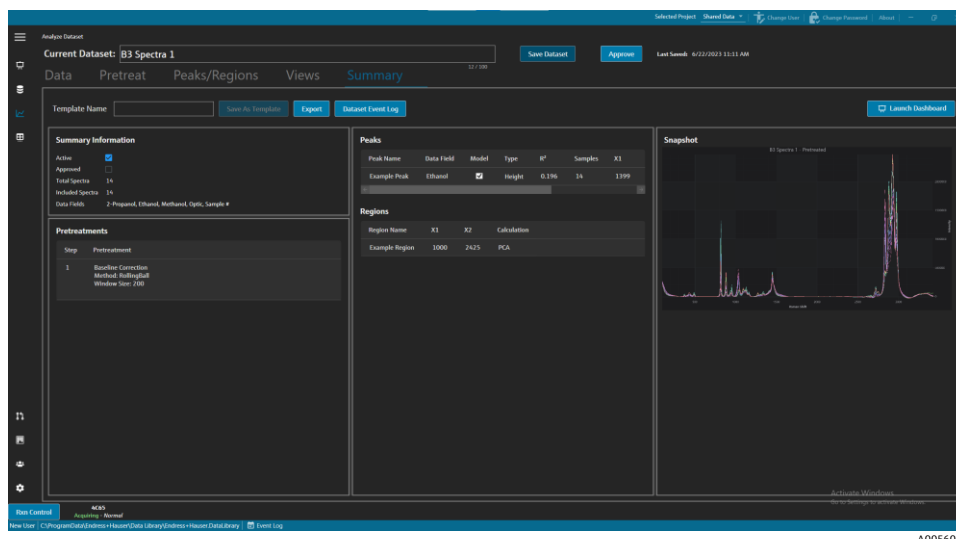


Рис. 44. Вкладка "Summary"

5.5.1 Создание шаблонов

Когда компоненты набора данных можно повторно использовать в других наборах данных, шаблоны упрощают создание наборов данных. Шаблоны хранят все предварительные обработки, анализ и настройки представления и могут применяться к новым наборам данных. Шаблон содержит следующие элементы:

- Отображаемые поля данных
- Предварительная обработка
- Пики
- Области
- Представления
- Вкладки панели управления

Шаблон не содержит данных спектров.

Сохраненные шаблоны можно выбрать в окне "Create Dataset" при создании нового набора данных или в окне "Rxn Control". Если при создании набора данных выбран шаблон, все компоненты шаблона добавляются в новый набор данных.


Чтобы создать шаблон из текущего набора данных, выполните следующие действия:

1. Выберите вкладку **Summary**.
2. Введите имя в поле **Template Name**.
3. Нажмите **Save As Template**.
4. Нажмите кнопку **OK**.

5.5.2 Применение шаблонов

При создании нового набора данных можно применить шаблон.

Чтобы применить шаблон, выполните следующие действия:

1. В окне "Datasets"  нажмите кнопку **Create New Dataset**.
2. Дайте имя набору данных, импортируйте соответствующие спектры и нажмите **Include >**.
3. В поле **Template** выберите шаблон из списка.
4. Нажмите **Create**. Если появится запрос на сохранение несохраненного набора данных, нажмите "OK".

После завершения работы ПО Raman data library переходит к следующему этапу рабочего процесса – окну "Analyze Dataset".

5.5.3 Экспорт данных, наборов данных и моделей

Панель "Экспорт" используется для экспорта наборов данных ПО Raman data library во внешние и внутренние программные системы. Файл экспорта ПО Raman data library (.dlexport) можно использовать для переноса наборов данных между разными экземплярами ПО Raman data library. Для экспорта во внешние программные системы набор данных должен быть одобрен.

Чтобы выполнить экспорт данных, набора данных или модели, выполните следующие действия:

1. В окне **Datasets**  нажмите **Export**.
Отобразится меню "Export".

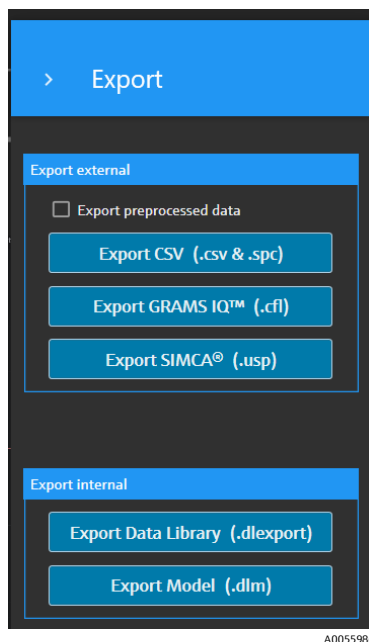


Рис. 45. Меню "Export"

2. Выберите следующие варианты:
 - **Export preprocessed data.** При установленном флажке данные экспортируются без применения предварительной обработки.
 - **Export CSV.** Экспортирует набор данных в виде файла со значениями, разделенными запятыми (.csv), содержащего названия спектров и значения данных для всех включенных полей данных. Также экспортирует архивированную папку, содержащую включенные спектры в формате SPC (.spc).
 - **Export GRAMS IQ™.** Экспортирует набор данных как файл GRAMS IQ™ (.cfl). Также экспортирует включенные спектры в формате SPC (.spc). Для экспорта набора данных в формате GRAMS IQ™ (.cfl) на том же компьютере должна быть установлена действующая версия ПО GRAMS IQ™.
 - **Export SIMCA®.** Экспортирует набор данных в файл формата SIMCA® (.usp). Для выполнения экспорта в этот формат на том же компьютере должна быть установлена действующая версия ПО SIMCA®.
 - **Export Data Library.** Экспортирует набор данных в файл формата Raman data library (.dlexport). Этот тип файла можно импортировать в окно "Datasets".
 - **Export Model.** Экспортирует файл модели (.dlm), созданный с использованием предварительной обработки и пиков набора данных. Этот файл можно экспортировать в Raman RunTime через окно Rxn Control программы Raman data library. Файл модели может использоваться для генерации значений компонентов процесса в RunTime.
3. Перейдите к расположению папки и задайте имя файлу данных.
4. Выберите **Mark Inactive** или **Keep Active** для текущего набора данных.

6 Управление анализатором Raman Rxn

ПО Rxn Control используется для управления анализаторами Raman RunTime Rxn, предназначенными для сбора и моделирования рамановских спектров, и разработан таким образом, чтобы имитировать пользовательский интерфейс Raman RunTime. Для доступа к окну Raman Analyzer необходимо создать подключение к источнику спектров OPC. Инструкции см. в разделе *Добавление источника спектра OPC* →

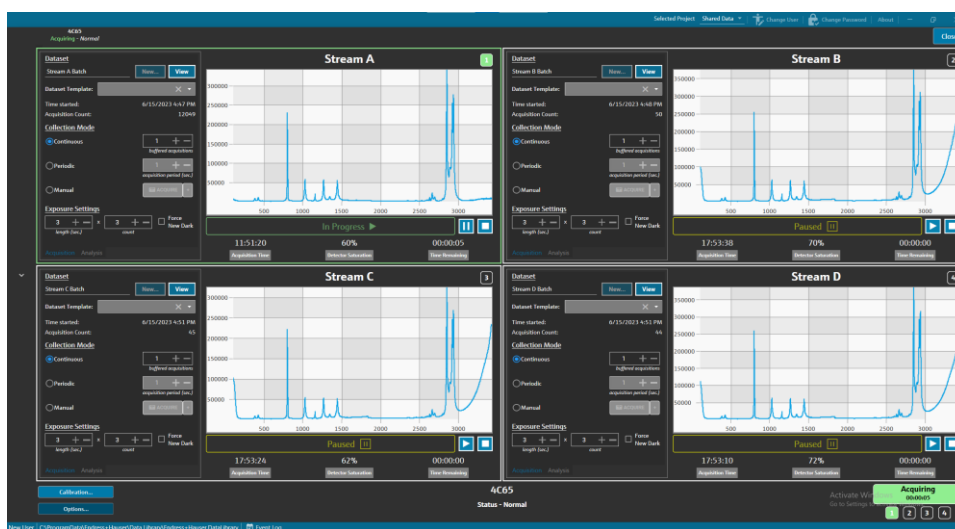
ПРИМЕЧАНИЕ

Информация о безопасной эксплуатации анализаторов Raman Rxn и программного обеспечения Raman RunTime приведена в *руководстве по эксплуатации системы Raman RunTime (BA02180C)*.

- ▶ В зависимости от используемой версии Raman RunTime перед использованием инструмента Rxn Control в ПО Raman data library прочтите соответствующее *руководство по эксплуатации Raman RunTime*.



Рис. 46. Кнопка Rxn Control



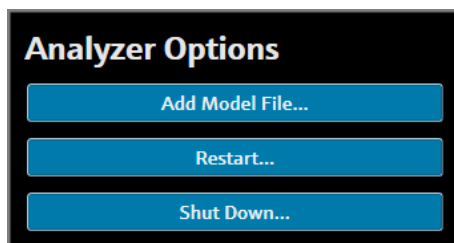
A0056059

Рис. 47. Окно рамановского анализатора

Кнопка **Rxn Control** присутствует только в том случае, если анализатор Raman Rxn подключен к ПО Raman data library. Чтобы подключить анализатор, см. инструкции в разделе *Добавление источника спектров OPC* →

6.1 Параметры анализатора

Меню **Analyzer Options** открывается нажатием **Options** в нижней части окна **Raman Analyzer**.



A0056062

Рис. 48. Параметры анализатора Rxn

6.1.1 Добавление файла модели


Чтобы добавить файл модели, выполните следующие действия:

1. В окне **Rxn Control** нажмите **Options**.

Появится диалоговое окно "Analyzer Options".

2. Нажмите **Add Model File**, чтобы выбрать файл модели для отправки в Raman RunTime.

Добавленные файлы моделей можно использовать для анализа. Их можно включить или отключить, нажав на вкладку **Analysis** в окне зонда. Допустимые типы файлов: .usp, .rusp, .dlm, .rxm, .rxs, .cal, .mat и .unsb. Подробную информацию о поддерживаемых типах моделей Raman RunTime см. в *руководстве по эксплуатации Raman RunTime* (BA02180).

Для получения инструкций по перезапуску или выключению анализатора см. раздел *Перезапуск или выключение анализатора* → .

6.2 Управление каналом

Анализаторы Raman Rxn могут иметь до 4 зондов или каналов измерения в окне Rxn Control. Каждый канал имеет управляющую панель в окне "Raman Analyzer". Используйте панель канала для выбора и просмотра наборов данных, настройки режимов сбора, параметров экспозиции и других функций.

Каждая панель канала содержит настройки, отражающие операции Raman RunTime. Полное описание функций, имеющихся на панели каналов, см. в *Руководстве по эксплуатации Raman RunTime* (BA02180).

6.2.1 Сбор данных канала

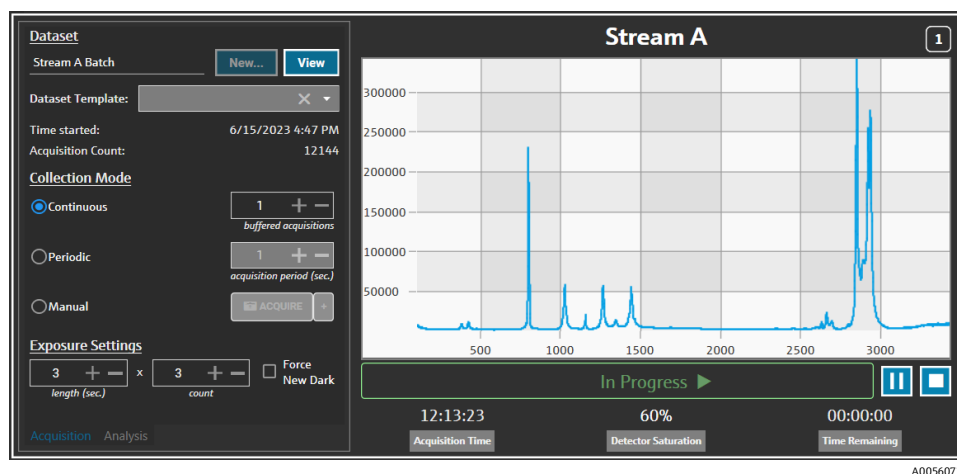

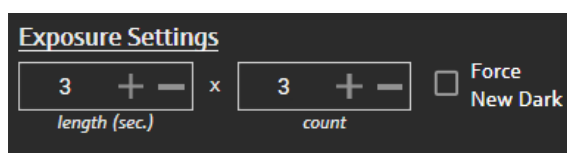


Рис. 49. Управляющая панель канала

На вкладке канала **Acquisition** выберите:

- **New.** Создает новый именованный набор данных.
- **View.** Запускает текущий набор данных в окне панели управления.
- **Dataset template.** Выберите шаблон для применения к новому набору данных. Перед началом обработки партии необходимо выбрать шаблон.
- **Time Started.** Время (в секундах), прошедшее с момента запуска текущего набора данных.
- **Acquisition Count.** Определяет количество измерений для текущего набора данных.
- **Collection Modes.** Режим сбора данных зонда можно изменить, выбрав один из трех вариантов:
 - **Continuous.** Режим непрерывного сбора данных выполняет цикл измерений для каждого активного зонда как можно быстрее. Этот режим рекомендуется при разработке метода, когда требуется частый сбор контрольных образцов, а также для мониторинга и управления при активных моделях. В режиме непрерывного сбора доступна опция буферизированного сбора данных.

- **Periodic.** Режим периодического сбора позволяет получать спектры через определенные интервалы времени и обычно используется во время разработки метода, чтобы синхронизировать спектры с образцами, отбираемыми из реакторов, или другими синхронизированными событиями процесса. Буферизованные сборы данных невозможны в периодическом режиме.
 - **Manual.** Используйте режим ручного сбора для получения спектров, которые запускаются вручную кнопкой  **Acquire**. Названия образцов можно указать для каждого спектра, нажав **+**.
 - **Exposure Settings.** Настройки экспозиции, такие как длительность (в секундах) и количество, можно изменить, нажав кнопки **+** и **-** или введя значение вручную с помощью клавиатуры. Выберите **Force New Dark**, чтобы выполнять новую темную экспозицию после каждого сбора данных.
- Выполнение новой темной экспозиции помогает снизить влияние посторонних сигналов в измерении, вызванных темновым током. Для получения дополнительной информации о функции "Force New Dark" см. *руководство по эксплуатации Raman RunTime (BA02180)*.

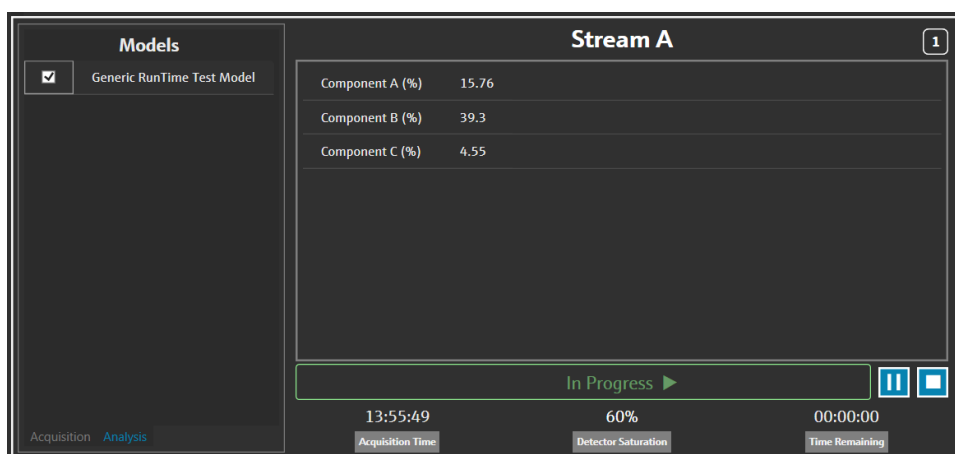


A0056075

Рис. 50. Настройки экспозиции

6.2.2 Применение моделей на вкладке канала "Analysis"

Вкладка канала **Analysis** позволяет выбирать и применять модели в Raman RunTime для получения прогнозов модели во время сбора набора данных.



A0056076


Рис. 51. Вкладка анализа управления каналом

Чтобы выбрать модель, проверьте название файла модели. Отображается следующая информация:

- Прогнозируемые значения отображаются на вкладке "Analysis".
- Прогнозируемые результаты модели Raman RunTime отображаются в квадратных скобках в окне "Analyze", например [8.14].

6.2.3 Регистрация спектров

Чтобы начать сбор данных, нажмите кнопку **Play** . После начала сбора данных кнопка воспроизведения изменится на кнопку паузы.

Нажмите **Stop** , чтобы остановить сбор данных.

6.2.4 Строка состояния канала

Строка состояния канала отображается под графиком спектра. Канал может иметь статус "Not Started", "In Process", "Paused" или "Completed".

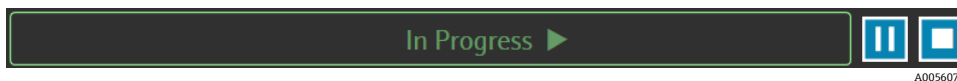


Рис. 52. Строка состояния канала

6.2.5 Индикаторы состояния и действий анализатора

Индикатор состояния анализатора отображается в нижней центральной части окна Rxn Control. Существуют три состояния анализатора: Normal, Warning и Error.

| Статус | Описание |
|-----------------------------|---|
| <small>A0056078</small> | Состояние: нормальное. |
| <small>A0056079</small> | При обнаружении системного предупреждения дисплей изменится на предупреждение желтого цвета. Предупреждения следует подтверждать, но немедленное действие может не требоваться. Нажмите на статус, чтобы просмотреть подробную информацию о предупреждении. |
| <small>A0056080</small> | При обнаружении системной ошибки на дисплее отобразится сообщение об ошибке красного цвета. Ошибки требуют немедленного реагирования. Нажмите на статус, чтобы просмотреть подробную информацию о предупреждении. |

Полный список предупреждений и ошибок системы см. в *Руководстве по эксплуатации Raman RunTime* (BA02180).

6.2.6 Индикатор действия анализатора

Индикатор действия анализатора отображается в нижней правой части окна Rxn Control. Индикатор показывает текущее выполняемое действие. Если действие относится к конкретному каналу, номер затронутого канала будет мигать. В случае возникновения чрезвычайной ситуации красная кнопка остановки на индикаторе отменяет текущий процесс калибровки или проверки.



Рис. 53. Регистрация спектров



Рис. 54. Приостановлено или ожидает ввода пользователя

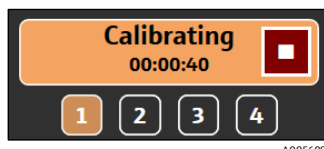


Рис. 55. Калибровка (зонда или внутренней системы)



Рис. 56. Проверка зонда

6.3 Калибровка и проверка анализатора Raman Rxn

Управление анализатором Raman Rxn через ПО Raman data library не позволяет выполнять сбор спектров без прохождения внутренних калибровок и калибровок зонда. Все калибровки обязательны перед началом сбора спектральных данных. Проверка является необязательной, но рекомендуется.

Для получения подробных инструкций по калибровке или проверке анализатора Raman Rxn или зонда обратитесь к соответствующей инструкции по калибровке зонда и руководству по эксплуатации Raman RunTime (BA02.180).

Чтобы провести калибровку и проверку анализатора Rxn, выполните следующие действия:

1. В окне **Raman Analyzer** нажмите **Calibration**.
Откроется диалоговое окно Calibration.
2. Выберите параметры внутренней калибровки:
 - **Calibration Mode.** Режим калибровки для внутренней калибровки (Auto, XAxis или All).
 - **Laser Power.** Мощность лазера в мВт.
 - Нажмите **Calibrate**, чтобы выполнить внутреннюю калибровку.

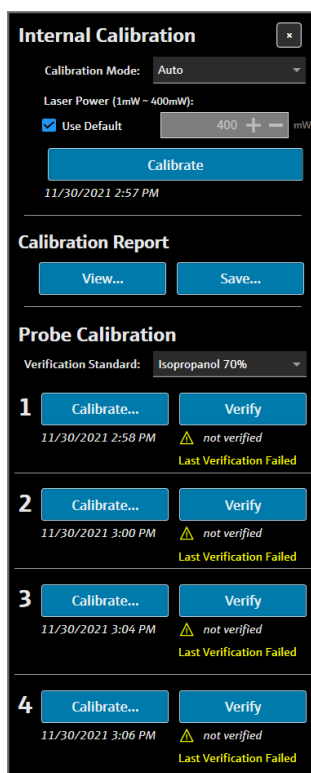


Рис. 57. Диалоговое окно калибровки

3. Выберите параметры отчета о калибровке:
 - Нажмите **View**, чтобы просмотреть файл калибровки (.pdf).
 - Нажмите **Save**, чтобы сохранить копию файла калибровки (.pdf).
4. Выберите параметры калибровки и проверки зонда:
 - **Verification Standard.** Стандартный эталонный образец, используемый для проверки результатов калибровки зонда. Хотя этот шаг не является обязательным для сбора рамановского спектра, он настоятельно рекомендуется.
 - Нажмите **Calibrate** под каналом, чтобы открыть окно калибровки зонда. Следуйте инструкциям по калибровке и нажмите **Load**, чтобы выбрать файл эталона интенсивности, который будет использоваться для калибровки зонда. Нажмите **Save**, чтобы сохранить копию выбранного файла эталона интенсивности.

Использование набора для калибровки и проверки Raman с эталонным стандартом калибровки (Calibration Reference Standard, CRS) в качестве исходного спектрального файла в настоящее время не поддерживается в интерфейсе управления анализатором Rxn в ПО Raman data library.

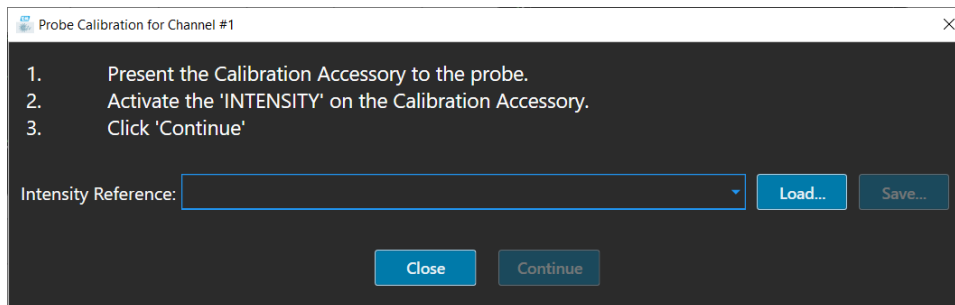


Рис. 58. Окно Probe Calibration, HCA

- Нажмите **Continue**, чтобы начать калибровку зонда. После завершения калибровки зонда дата/ время калибровки обновляются.
 - Нажмите **Verify**, чтобы проверить результаты калибровки зонда.
5. Повторите вышеуказанные шаги для каждого анализатора и зонда.
 6. После завершения калибровки и проверки закройте диалоговое окно калибровки.

7 Соответствие требованиям раздела 11 части 21 свода федеральных нормативных актов (CFR) FDA

Версия cGxP программного обеспечения Raman data library включает функции, позволяющие работать в соответствии с требованиями раздела 11 части 21 CFR FDA, что делает его подходящим для использования в регулируемой среде. Эти функции обеспечивают централизованное выполнение требований раздела 11 части 21 свода федеральных нормативных актов США (CFR), позволяя организовать работу в соответствии с нормативными требованиями. Версия cGxP программного обеспечения Raman data library поддерживает:

- Управление пользовательскими учетными записями
- Электронные записи и электронные подписи
- Управление настройками системы
- Аудиторский след (функция контроля изменений)
- Журналы событий, содержащие информацию о действиях пользователей и отслеживании спектральных данных.

Для обеспечения соответствия Raman data library в исполнении cGxP требованиям раздела 11 части 21 свода федеральных нормативных актов США (CFR) компания Endress+Hauser предоставляет доступ к специальному документу – Анкете по соответствию ПО Raman data library разделу 11 части 21 CFR (артикул 4005768), который поставляется вместе с версией cGxP программного обеспечения Raman data library.

7.1 Управление пользовательскими учетными записями

В разделе 11 части 21 CFR управление пользователями относится к набору средств контроля и процедур, обеспечивающих безопасный и регулируемый доступ к электронным записям и электронным подписям. Одним из основных отличий между базовой версией Raman data library и версией cGxP является управление пользователями. Для поддержки этого функционала в Raman data library версии cGxP интегрировано управление пользователями, аутентификация учетных данных при этом может осуществляться локально, то есть через само программное обеспечение, через учетные записи локальной Windows-станции или посредством интеграции с доменом Active Directory.

При использовании локального режима аутентификации поддерживается возможность применения требований к сложности пароля, блокировка учетной записи после заданного количества неудачных попыток входа в систему, а также автоматический выход по истечении заданного времени бездействия. Если используется аутентификация учетных данных на основе домена, все эти аспекты, за исключением автоматического завершения сеанса по истечении времени бездействия, регулируются политиками домена.

Уникальная идентификация пользователей и контроль доступа реализованы на системном уровне. Права доступа пользователей можно настраивать с использованием заранее определенных и управляемых ролей пользователей. Доступна возможность отключения учетных записей и принудительной смены пароля при следующем входе. Для каждого пользователя ведется индивидуальный аудиторский след в виде журналов событий.

Система управления пользователями в ПО Raman data library разработана таким образом, чтобы обеспечить безопасность электронных записей, контроль доступа и отслеживаемость всех действий пользователей, что способствует надежности и целостности данных в регулируемых отраслях.


Подробную информацию об управлении пользователями см. в разделе *Управление пользователями (только исполнение cGxP)* → .

7.2 Электронные записи и электронные подписи

Электронные записи и электронные подписи являются основными компонентами части 11 раздела 21 CFR, который устанавливает критерии, согласно которым они считаются достоверными, надежными и равнозначными бумажным записям и собственноручным подписям. Электронные подписи в ПО Raman data library связаны с конкретными пользователями и их учетными данными, что делает их юридически обязательными и неоспоримыми.

Для поддержки площадок при внедрении требований части 11 раздела 21 CFR в ПО Raman data library, в частности по вопросам электронных записей и электронных подписей, компанией Endress+Hauser был подготовлен специальный документ – Оценка электронных записей и электронных подписей в Raman data library на соответствие части 11 раздела 21 CFR [Raman data library 21 CFR Part 11 ER/ES Assessment] (артикул 4005770), который поставляется с версией cGxP программного обеспечения.

7.3 Управление настройками системы

Настройки системы в ПО Raman data library относятся к аспектам безопасности, которые играют ключевую роль в обеспечении соответствия требованиям части 11 раздела 21 CFR. Управление системными настройками осуществляется в окне "Security". Подробную информацию об управлении параметрами безопасности см. в разделе *Параметры безопасности (только для версии cGxP)* → .

7.4 Аудиторский след через функцию контроля изменений

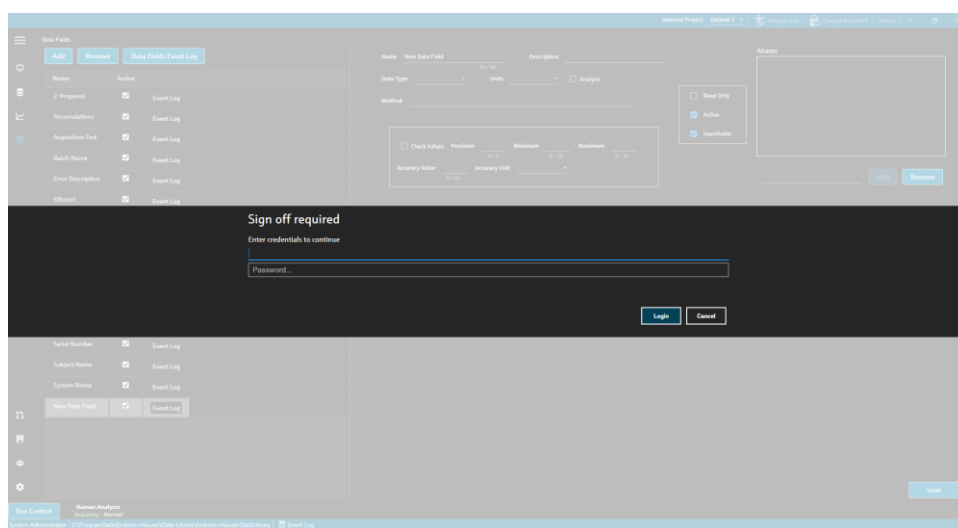
Аудиторский след является важным компонентом соответствия требованиям части 11 раздела 21 CFR, обеспечивая надлежащее управление и документирование любых изменений в электронных записях, системах или процессах.

В версии cGxP ПО Raman data library в рамках управления пользователями реализована функция контроля изменений. Она обеспечивает документирование всех внесенных изменений, включая их причину, дату и время, а также данные о пользователе, который внес и утвердил изменение. Аудиторский след изменений ведется и документируется в различных доступных журналах событий. Кроме того, функция контроля изменений гарантирует, что вносить обновления или изменения могут только пользователи с соответствующими полномочиями.

Определенные действия, такие как удаление или отмена утверждения наборов данных, добавление, редактирование или удаление полей данных, а также удаление проектов или спектральных источников, требуют подтверждения со стороны пользователя перед их выполнением. В соответствующих случаях пользователю необходимо подтвердить действие, используя свои учетные данные, выбрать причину изменения и при необходимости оставить комментарий.

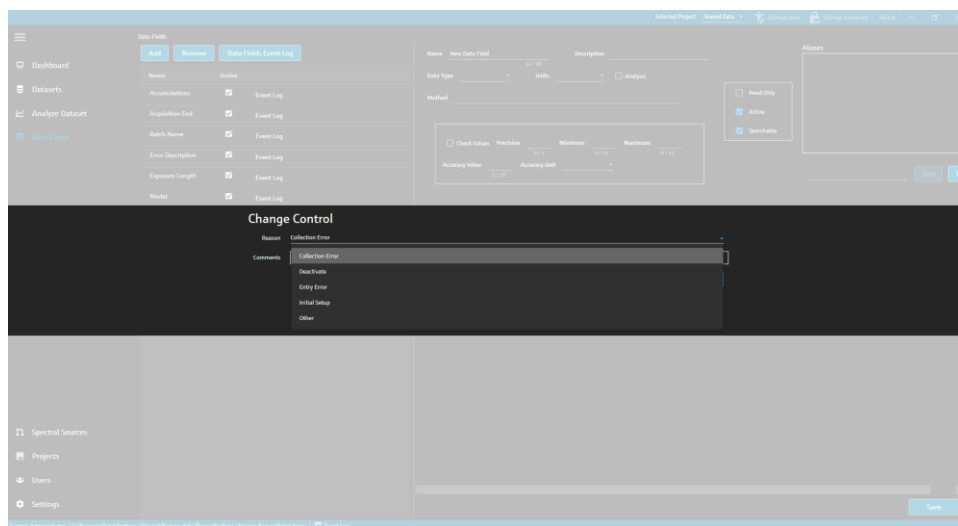
Стандартные причины, доступные для контроля изменений:

- Collection Error
- Deactivate
- Entry Error
- Initial Setup
- Other



A0056145

Рис. 59. Управление изменениями – требуется подпись пользователя



A0056146

Рис. 60. Управление изменениями – предоставление описания и причины изменения

Эти меры контроля изменений помогают поддерживать целостность, надежность и соответствие электронных записей и систем, а также способствуют процессам утверждения и аудита со стороны команды по обеспечению качества.

7.5 Работа с журналами событий

Для обеспечения отслеживаемости и регистрации всех событий в среде cGxP в ПО Raman data library предусмотрены журналы событий, включающие базовый аудиторский след. Они охватывают как глобальные события (все действия), так и журналы, относящиеся к конкретным пользователям или функциям. Журналы событий и аудиторский след являются важными компонентами соответствия требованиям части 11 раздела 21 CFR, обеспечивая целостность и отслеживаемость электронных записей.

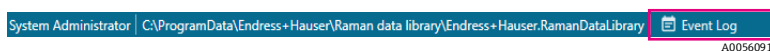
Типы журналов событий, доступные пользователю в ПО Raman data library:

- **Global event log.** Этот журнал доступен на всех экранах ПО Raman data library и расположен на нижней панели задач окна приложения.
- **User event logs.** Отображают события для всех пользователей или конкретного пользователя. Доступ осуществляется через экран "Users".
- **Project and dataset event logs.** Отображают события для всех проектов или конкретного проекта, а также события, связанные с набором данных. Доступ осуществляется через экран "Projects" и экран сводной информации по набору данных.
- **Spectral source event logs.** Отображают журнал событий для конкретных спектральных источников или всех источников.
- **Data field event logs.** Отображают журнал событий для конкретного поля данных или всех полей данных.

Журналы событий можно просматривать и распечатывать в удобном для чтения, неизменяемом и фирменном формате документа. В журнале событий можно выполнять поиск по тексту. Перед открытием другого журнала необходимо закрыть текущий. Журналы событий доступны только для просмотра и могут быть сохранены в форматах *.pdf, *.xlsx и *.docx.

7.5.1 Глобальный журнал событий

Глобальный журнал событий отображает все события, связанные с работой ПО Raman data library. Из-за большого объема зарегистрированных данных загрузка глобального журнала событий может занять некоторое время.



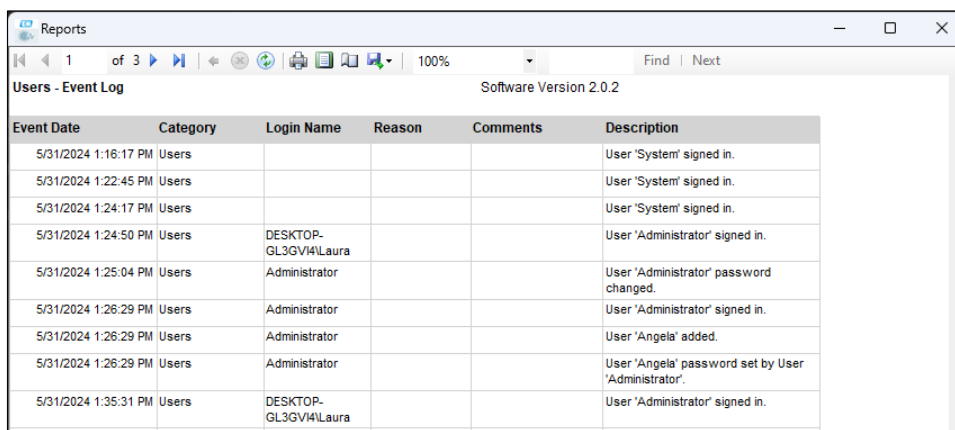
A0056091

Рис. 61. Кнопка глобального журнала событий

7.5.2 Журнал событий пользователя

В окне "Users" можно просматривать журналы событий, содержащие информацию о действиях, связанных с конкретным пользователем или всеми пользователями. В данном журнале фиксируются все изменения, касающиеся пользователей, включая добавление и удаление учетных записей, назначение и снятие ролей, входы в систему и неудачные попытки входа. В окне "Users" доступны следующие журналы событий:

- **Users Event Log.** Отображает журнал событий для всех пользователей.
- **Event Log.** Отображает журнал событий для указанного пользователя.



| 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-GL3GVH4Laura | | | 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-GL3GVH4Laura | | | User 'Administrator' signed in. |

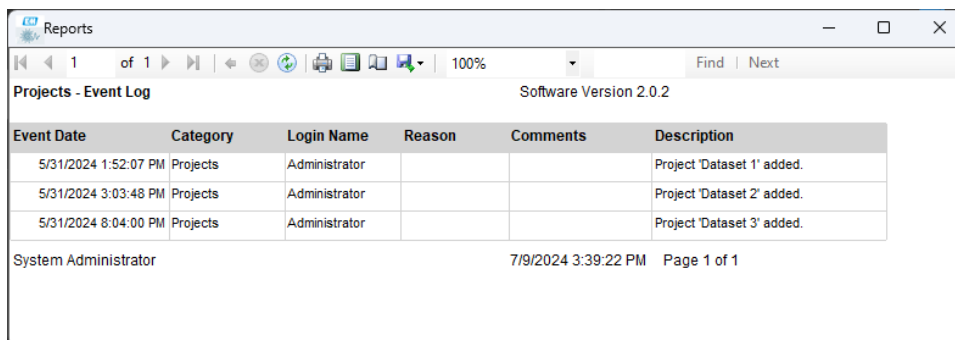
A0056147

Рис. 62. Журнал событий пользователя

7.5.3 Журналы событий проектов и наборов данных

В окне "Projects" можно просматривать журналы событий, содержащие информацию о действиях, связанных с проектами, таких как добавление или удаление наборов данных. В окне "Projects" доступны следующие журналы событий:

- **Projects Event Log.** Просмотр журнала событий для всех проектов.
- **Event Log.** Просмотр журнала событий для конкретного проекта.



| 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

Рис. 63. Журнал событий проекта

7.5.4 Журналы событий спектральных источников

В окне "Spectral Sources" можно просматривать журналы событий, содержащие информацию о действиях, связанных с конкретным спектральным источником или всеми источниками. Этот журнал фиксирует все изменения, связанные со спектральными источниками, такие как добавление новых спектральных источников, запуск или остановка сбора данных в анализаторе Raman Rxn, а также изменение настроек пакетного сбора данных в окне "Raman Analyzer". В окне "Spectral Sources" можно выбрать следующие опции:

- **Spectral Sources Event Log.** Просмотр журнала событий для всех спектральных источников.
- **Event Log.** Просмотр журнала событий для конкретного спектрального источника.

| Event Date | Category | Login Name | Reason | Comments | Description |
|----------------------|------------------|----------------------|--------|----------|--|
| 5/31/2024 1:34:02 PM | Spectral Sources | Administrator | | | Spectral Source 'Runtime 6.5' added. |
| 5/31/2024 1:50:04 PM | Rxn Control | DESKTOP-GL3GVH4Laura | | | The laser power was set to 400 on analyzer 'Raman Analyzer'. |
| 5/31/2024 1:50:49 PM | Spectral Sources | Administrator | | | Spectral Source 'Runtime 6.5' updated. Differences: 'EncryptedPassword' changed. |
| 5/31/2024 2:26:04 PM | Rxn Control | DESKTOP-GL3GVH4Laura | | | The laser power was set to 400 on analyzer 'Raman Analyzer'. |
| 5/31/2024 3:03:06 PM | Spectral Sources | Administrator | | | Spectral Source 'Bioreactor 1-2' added. |
| 6/3/2024 5:16:42 PM | Rxn Control | DESKTOP-GL3GVH4Laura | | | The laser power was set to 400 on analyzer 'Raman Analyzer'. |
| 6/3/2024 5:48:49 PM | Rxn Control | DESKTOP-GL3GVH4Laura | | | The laser power was set to 400 on analyzer 'Raman Analyzer'. |
| 6/3/2024 5:54:17 PM | Rxn Control | DESKTOP-GL3GVH4Laura | | | The laser power was set to 400 on analyzer 'Raman Analyzer'. |
| 6/3/2024 7:16:22 PM | Spectral Sources | Administrator | | | Spectral Source 'Runtime 6.5' updated. Differences: 'EncryptedPassword' changed. |
| 6/6/2024 6:42:46 PM | Rxn Control | DESKTOP-GL3GVH4Laura | | | The laser power was set to 400 on analyzer 'Raman Analyzer'. |

Рис. 64. Журнал событий спектрального источника

7.5.5 Журналы событий полей данных

В окне "Data Fields" можно просматривать журналы событий, содержащие информацию о действиях, связанных с конкретным полем данных или всеми полями данных. Этот журнал фиксирует все изменения, связанные с полями данных, включая добавление новых полей, их удаление и добавление псевдонимов. В окне "Data Fields" можно выбрать следующие опции:

- **Data Fields Event Log.** Просмотр журнала событий для всех полей данных.
- **Event Log.** Просмотр журнала событий для определенного поля данных.

| 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. |

Рис. 65. Журнал событий полей данных

8 Диагностика и устранение неисправностей

8.1 Перезапуск или выключение анализатора

Чтобы перезапустить или выключить анализатор, выполните следующие действия:

1. В окне **Raman Analyzer** нажмите **Options**.
Появится диалоговое окно "Analyzer Options".

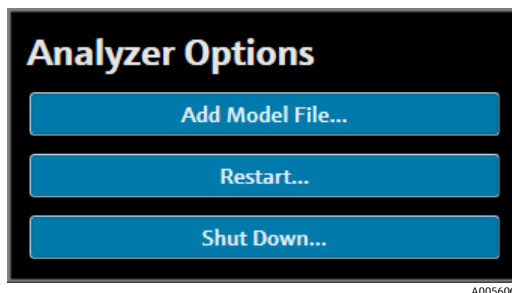


Рис. 66. Параметры анализатора

2. Выберите один вариант из следующих:
 - Нажмите **Restart**, чтобы перезапустить анализатор.
 - Нажмите **Shut Down**, чтобы выключить анализатор.
3. Нажмите **ОК** в диалоговом окне подтверждения.

После выключения или перезагрузки анализатора Raman RunTime необходимо перезапустить службу Windows, чтобы подключить ПО Raman data library к RunTime. Чтобы перезапустить службу Windows, остановите и затем запустите службу **Raman data library** от Endress+Hauser с помощью диспетчера служб в системном трее или перезагрузите компьютер с установленным ПО Raman data library.

8.2 Спектры не собираются

Если спектры получены через окно Raman Analyzer, но не добавляются в набор данных, это указывает на разрыв соединения службы Windows с анализатором Raman RunTime, требующий восстановления подключения.

Служба Windows может отключиться от анализатора Raman RunTime по различным причинам, включая:

- Выключение анализатора на длительные периоды времени
- Изменение сетевых настроек в программном обеспечении Raman RunTime
- Изменение сетевых настроек на компьютере, на котором запущено ПО Raman data library.

Чтобы повторно подключиться к службе Windows, остановите и затем запустите службу **Raman data library** от Endress+Hauser с помощью диспетчера служб в системном трее или перезагрузите компьютер с установленным ПО Raman data library.

9 Поддержка

9.1 Пункт About

Щелкните **About** на верхней ленточной панели, чтобы открыть окно "About Raman Data Library". В этом окне отображаются версия и номер версии программного обеспечения, идентификатор установки, а также информация об авторских правах.

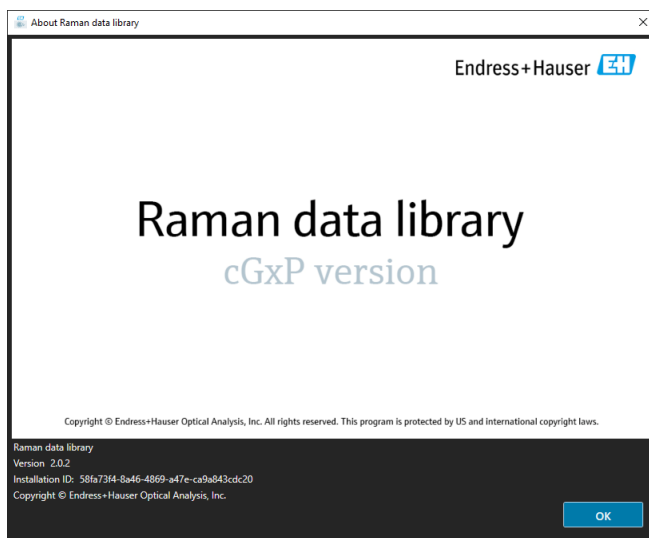


Рис. 67. Окно About

9.2 Контактная информация

Сведения о технических сервисных организациях приведены на веб-сайте нашей компании (<https://endress.com/contact>), где перечислены сервисные каналы, доступные в вашем регионе.

10 Информация об авторских правах

10.1 Лицензионное соглашение с конечным пользователем

КОПИЯ ЛИЦЕНЗИОННОГО СОГЛАШЕНИЯ С КОНЕЧНЫМ ПОЛЬЗОВАТЕЛЕМ ДЛЯ ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ *Raman data library* ВКЛЮЧЕНА В НАСТОЯЩИЙ ДОКУМЕНТ ДЛЯ СПРАВОЧНЫХ ЦЕЛЕЙ.

ВНИМАТЕЛЬНО ПРОЧИТАЙТЕ ДАННОЕ ЛИЦЕНЗИОННОЕ СОГЛАШЕНИЕ ПЕРЕД УСТАНОВКОЙ ИЛИ ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ.

НАЖИМАЯ КНОПКУ "АССЕРТ", УСТАНОВЛИВАЯ ПРОДУКТ ИЛИ ИСПОЛЬЗУЯ ОБОРУДОВАНИЕ, СОДЕРЖАЩЕЕ ДАННЫЙ ПРОДУКТ, ВЫ СОГЛАШАЕТЕСЬ СОБЛЮДАТЬ НАСТОЯЩЕЕ СОГЛАШЕНИЕ. ЕСЛИ ВЫ НЕ СОГЛАСНЫ СО ВСЕМИ УСЛОВИЯМИ ДАННОГО СОГЛАШЕНИЯ, НАЖМИТЕ КНОПКУ "DO NOT АССЕРТ", И ПРОЦЕСС УСТАНОВКИ НЕ БУДЕТ ПРОДОЛЖЕН.

Это лицензионное соглашение с конечным пользователем между вами, конечным пользователем программного обеспечения *Raman data library* ("Лицензиат"), и компанией Endress+Hauser Optical Analysis, Inc. ("Лицензиар" или "Endress+Hauser"), корпорацией из Делавэра, головной офис которой находится по адресу 371 Parkland Plaza, Ann Arbor, Michigan 48103. Устанавливая программное обеспечение *Raman data library*, вы соглашаетесь соблюдать условия настоящего Соглашения.

1.0. Неисключительная лицензия. Лицензиар предоставляет вам неисключительную лицензию на использование *Raman data library*, которая включает пакет компьютерных программ и данных в машиночитаемой форме, а также руководства пользователя, которые вместе составляют "Лицензированную программу", в соответствии со следующими положениями и условиями, которые применяются ко всем версиям Лицензированной программы, установленным вами.

2.0. Объем прав. Лицензиат может:

2.1. Установить Лицензированную программу на один компьютер, который будет использоваться для управления спектрографическим оборудованием, изготовленным Endress+Hauser;

2.2. Использовать и запускать Лицензированную программу на таком компьютере, как определено в пункте 2.1, в целях удовлетворения потребностей конечного пользователя;

2.3. В поддержку вашего авторизованного использования Лицензированной программы хранить машиночитаемые инструкции или данные Лицензированной программы, передавать их и отображать на машинах, связанных с указанным(-и) компьютером(-ами); и

2.4. Создайте одну копию Лицензированной программы в форме машиночитаемого объектного кода только для непроизводственных целей резервного копирования.

3.0. Защита и ограничения прав собственности.

3.1. Лицензированная программа защищена авторским правом. Авторские права принадлежат Endress+Hauser. Лицензированная программа лицензируется, а не продается для использования Лицензиатом. Лицензированная программа предоставляется по лицензии, а не продается, для использования Лицензиатом.

3.2. Вы не будете обладать никакими правами, правами собственности и интересами в отношении Лицензированной программы и всех ее модификаций и усовершенствований (включая право собственности на все коммерческие тайны и авторские права, относящиеся к ней).

3.3. Данная Лицензированная программа содержит конфиденциальную и/или служебную информацию, которая защищена авторским правом и положениями международных договоров. Все права защищены. Никакая часть Лицензированной программы не может быть скопирована, воспроизведена или переведена на другой язык без письменного разрешения Лицензиара. Любое несанкционированное использование, разглашение, передача, отчуждение или воспроизведение данной конфиденциальной информации будет преследоваться в соответствии с действующим законодательством.

3.4. Вы не имеете права использовать, копировать, модифицировать или распространять Лицензированную программу (в электронном виде или иным образом), а также любую копию, адаптацию, транскрипцию или объединенную ее часть, за исключением случаев, прямо разрешенных Лицензиаром. Лицензиат не имеет права осуществлять обратную сборку, обратную компиляцию или иным образом переводить Лицензированную программу. Ваши права не подлежат передаче, сдаче в аренду, уступке или субаренде, за исключением передачи Лицензированной программы в полном объеме следующему лицу: (1) правопреемнику всего бизнеса Лицензиата, который принимает на себя обязательства по настоящему Соглашению, или (2) иной стороне, одобренной Лицензиаром, которая заключает новый договор на условиях данного Соглашения и оплачивает административный сбор, покрывающий связанные с этим расходы. Лицензиат не вправе устанавливать Лицензированную программу на любую другую компьютерную систему или использовать ее в ином месте без предварительного получения явного разрешения Лицензиара. В случае использования, копирования, модификации Лицензированной программы, либо передачи любой копии, адаптации, транскрипции или объединенной части Лицензированной программы третьим лицам любым способом, не предусмотренным явным разрешением Лицензиара, ваша лицензия будет автоматически прекращена.

3.5. Настоящим Лицензиат предоставляет Лицензиару право посещать помещения Лицензиата в течение обычных рабочих часов для проведения проверки Лицензированной программы любым разумным способом с целью удостоверения соблюдения Лицензиатом условий настоящего соглашения.

3.6. Вы признаете, что в случае нарушения Лицензиатом любого из вышеуказанных положений Лицензиар не будет иметь надлежащих средств правовой защиты в виде денежной компенсации или возмещения убытков. Лицензиар имеет право на получение судебного запрета в отношении такого нарушения от любого компетентного суда по первому требованию. Право Лицензиара на получение судебного запрета не ограничивает его право на обращение за иными средствами правовой защиты.

4.0. Ограниченная гарантия и ограничение ответственности.

4.1. Лицензиар предпринял все необходимые меры для обеспечения точности и надежности Лицензированной программы в ваших интересах. Данная гарантия непосредственно обусловлена вашим соблюдением операционных процедур, а также процедур безопасности и управления данными, указанных в материалах, входящих в состав Лицензированной программы.

4.2. В той мере, в какой это не запрещено законом, ни при каких обстоятельствах компания Endress+Hauser не несет ответственности за причинение вреда здоровью или любые случайные, особые, косвенные или последующие убытки, включая, помимо прочего, убытки от утраты прибыли, потери данных, прерывание бизнеса или любые другие коммерческие убытки или потери, возникшие в результате использования или невозможности использования программного обеспечения Endress+Hauser, независимо от причин, теории юридической ответственности (договор, деликт или иное) и даже если компания Endress+Hauser была предупреждена о возможности возникновения таких убытков. В некоторых юрисдикциях не допускается ограничение ответственности за причинение вреда здоровью или случайный или косвенный ущерб, поэтому данное ограничение может не относиться к вам. Ни при каких обстоятельствах общая ответственность компании Endress+Hauser перед вами за все убытки (за исключением случаев, когда этого требует применимое законодательство в случаях, связанных с причинением вреда здоровью) не может превышать общую сумму всех лицензионных сборов, уплаченных Лицензиару по настоящему Соглашению). Вышеуказанные ограничения будут применяться даже в том случае, если вышеуказанное средство правовой защиты не достигнет своей основной цели.

4.3. Лицензиар не несет ответственности за ошибки или упущения в Лицензированном программном обеспечении и оставляет за собой право вносить изменения и улучшения в любой из продуктов, описанных здесь, по любой причине без дополнительного уведомления.

4.4. За исключением случаев, прямо предусмотренных настоящим Соглашением, Лицензиар отказывается от любых и всех обещаний, представлений и гарантий в отношении Лицензированного программного обеспечения, включая его состояние, соответствие каким-либо описаниям или характеристикам, а также его товарную пригодность или пригодность для конкретных целей. Информация, предоставленная вместе с Лицензированным программным обеспечением, не является и не должна рассматриваться как заявления или гарантии относительно описанной Лицензированной программы.

4.5. Совокупная ответственность Лицензиара перед вами по всем искам, связанным с Лицензированным программным обеспечением и настоящим Соглашением, включая любые основания для иска, вытекающие из договора, деликта или строгой ответственности, не должна превышать общую сумму всех лицензионных сборов, уплаченных Лицензиару по настоящему Соглашению. Данное ограничение ответственности применяется независимо от того, были ли нарушены или оказались неэффективными другие положения настоящего Соглашения. Лицензиар не несет ответственности за потерю данных или документации, при этом подразумевается, что Лицензиат несет ответственность за предприятие разумных мер предосторожности при резервном копировании.

4.6. Лицензированное программное обеспечение предоставляется "как есть", и вы принимаете на себя весь риск, связанный с его качеством и работоспособностью.

4.7. У вас могут быть дополнительные права в соответствии с определенными законами, *например*, законами о защите прав потребителей, которые не допускают исключения подразумеваемых гарантий или исключения или ограничения определенных убытков. Если такие законы применяются, эти исключения и ограничения могут на вас не распространяться.

5.0. Прочие условия.

5.1. Настоящее Соглашение регулируется и толкуется в соответствии с законодательством штата Мичиган, Соединенные Штаты Америки, за исключением положений о коллизионных нормах штата Мичиган.

5.2. Никакие изменения настоящего Соглашения не имеют обязательной силы, если они не оформлены в письменной форме и не подписаны уполномоченным представителем стороны, против которой направлено требование об обеспечении соблюдения изменений.

5.3. Любые уведомления, требуемые или разрешенные в соответствии с настоящим Соглашением, должны быть оформлены в письменном виде и доставлены лично или отправлены заказной или зарегистрированной почтой с уведомлением о вручении и с оплатой почтовых расходов.

5.4. В случае, если любой из условий настоящего Соглашения окажется недействительным или будет объявлен таковым судом или другим компетентным органом, это условие или условия считаются недействительными и исключаются из Соглашения, однако все остальные условия сохраняют свою силу и остаются в действии.

5.5. НАСТОЯЩЕЕ СОГЛАШЕНИЕ ЯВЛЯЕТСЯ ПОЛНЫМ И ИСКЛЮЧИТЕЛЬНЫМ ИЗЛОЖЕНИЕМ ОБЯЗАТЕЛЬСТВ И ОТВЕТСТВЕННОСТИ ЛИЦЕНЗИАРА ПЕРЕД ЛИЦЕНЗИАТОМ И ЗАМЕНЯЕТ ЛЮБЫЕ ДРУГИЕ ПРЕДЛОЖЕНИЯ, ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ИЛИ ИНЫЕ СООБЩЕНИЯ ЛИЦЕНЗИАРА ИЛИ ОТ ИМЕНИ ЛИЦЕНЗИАРА, ОТНОСЯЩИЕСЯ К ПРЕДМЕТУ НАСТОЯЩЕГО СОГЛАШЕНИЯ.

6.0 Документация

Этот документ предназначен для использования только уполномоченными сотрудниками и представителями компании Endress+Hauser Optical Analysis, Inc. Ни одна часть данного документа не может быть воспроизведена или передана в любой форме и любыми способами, электронными или механическими, включая фотокопирование, запись или системы хранения и поиска информации, для каких-либо целей, кроме личного использования покупателем, без прямого письменного разрешения компании Endress+Hauser Optical Analysis, Inc. В соответствии с законодательством копирование включает перевод на другой язык.

Информация, содержащаяся в настоящем документе, считается точной на момент его составления. Endress+Hauser Optical Analysis, Inc. оставляет за собой право изменять содержащуюся в нем информацию без предварительного уведомления.

www.addresses.endress.com
