

用户操作手册

Raman data library 2.0



目录



1 文档信息	3	5.2 使用预处理.....	30
1.1 文档功能	3	5.3 峰值和区域.....	33
1.2 安全图标	3	5.4 创建面板视图: 网格、趋势、光谱和 3D 图	37
1.3 安全	3	5.5 摘要.....	43
1.4 术语表.....	3	6 Rxn 拉曼光谱分析仪控制	46
1.5 文档资料	5	6.1 分析仪选项.....	46
1.6 注册商标	5	6.2 通道控制.....	47
2 产品描述	6	6.3 Rxn 拉曼光谱分析仪校准和验证	50
2.1 安装	6	7 符合 FDA 21 CFR Part 11 法规要求....	52
2.2 安全性设置 (仅 cGxP 版本)	6	7.1 用户管理.....	52
2.3 用户管理 (仅针对 cGxP 版本)	7	7.2 电子记录和电子签名	52
3 软件操作	11	7.3 管理系统设置.....	52
3.1 登陆 (仅针对 cGxP 版本)	11	7.4 通过变更控制功能进行审计跟踪.....	52
3.2 在线和离线模式	11	7.5 使用事件日志	54
3.3 用户界面	11	8 诊断和故障排除	57
4 向 Raman data library 添加数据	15	8.1 重启或关闭分析仪.....	57
4.1 项目	15	8.2 未能收集光谱.....	57
4.2 光谱数据源.....	16	9 技术支持	58
4.3 数据集.....	18	9.1 关于.....	58
4.4 数据字段	21	9.2 联系方式.....	58
5 分析数据集.....	24	10 版权信息	59
5.1 查看数据集	24	10.1 最终用户许可协议.....	59

1 文档信息

1.1 文档功能

本文档提供与 Raman data library 的一般用户任务相关的说明，包括导航、现场解释、数据操作等。有关包括安装、数据库和用户管理以及安全性在内的管理说明，请参阅 *Raman data library 管理员《操作手册》* (BA02349C)。

1.2 安全图标

信息结构	含义
<p> 警告</p> <p>原因 (/后果) 疏忽安全信息的后果 (适用时) ▶ 补救措施</p>	危险状况警示图标。若未能避免这种危险状况，可能导致人员死亡或严重伤害。
<p> 小心</p> <p>原因 (/后果) 疏忽安全信息的后果 (适用时) ▶ 补救措施</p>	危险状况警示图标。若未能避免这种危险状况，可能导致人员轻微或中等伤害。
<p> 注意</p> <p>原因/状况 疏忽安全信息的后果 (适用时) ▶ 补救措施/说明</p>	可能导致财产受损的状况警示图标。

1.3 安全

关于 Rxn 拉曼光谱分析仪和 Raman Runtime 软件的安全操作说明，请参见 *Raman Runtime v6.5《操作手册》* (BA02180C)。建议先完整阅读 *Raman RunTime v6.4* (或更新版本) 《操作手册》，然后再使用 Raman data library。

1.3.1 IT 安全

IT 安全措施为设备和相关数据传输提供额外的保护，必须由操作员亲自遵照安全标准操作。

1.4 术语表

术语	说明
BCA	背景校正精度
°C	摄氏度
Cfm	立方英尺每分钟
CFL	1997 年 9 月 4 日“Galactic Industries Corp.通用数据格式规范”中定义的新 CFL 文件格式
CFR	美国联邦法规
cGMP	现行良好制造规范
cGxP	现行良好临床、实验室和/或制造规范
CMMS	计算机化维护管理系统：一种基于计算机的数据库，包含所有维护工作订单，用于安排活动。
COTS	可配置现成品或技术
CTQ	关键质量特性

术语	说明
GAML	通用分析标记语言
GDP	良好文档管理规范
GCC	全局变更控制
GHz	千兆赫
Hz	赫兹
IAPP	信息资产保护政策
In Situ	在原位
IQ	安装确认
LAN	局域网
Nm	纳米
OQ	运行确认
OS	操作系统
PAT	过程分析技术
PC	个人计算机
ppb	十亿分率
ppm	百万分率
psig	磅/平方英寸（表压）
QC	质量控制
RAM	随机存取存储器
Rxn4 拉曼光谱分析仪	一体式光谱系统，旨在容纳用于样品分析的光纤探头。
Savitzky-Golay 滤波器	一种数字滤波器，可以应用于一组数字数据点，实现数据平滑去噪，即在不扭曲信号趋势的情况下提升数据精度。
SPC	开发人员定义的文件格式。
Spectra	Raman 光谱仪处理成 SPC (GRAMS) 格式后的原始数据。
UPS	不间断电源
URS	用户需求说明
电子记录	由计算机系统创建、修改、维护、存档、检索或分发的数字形式记录的任何组合，用于 cGxP 监管的活动。
电子签名	个人以数字确认的形式授权电子记录，具有法律约束力，相当于个人的手写签名。
非关键要求	如果不满足此要求，不会对任何监管机构要求、数据完整性或安全性产生不利影响。
关键要求	如果不满足此要求，将对任何监管机构要求、数据完整性或安全性产生不利影响。
图形数据	可以用图形格式表示的关键数据、信息和属性。
密码	用户出于识别目的而输入的唯一私有代码。
审计追踪	独立计算机生成的电子变更记录，其中显示时间、操作员、操作、内容以及原因（如需要）。
授权用户	已完成规定培训并被授权访问应用程序的最终用户。
数据分析	从光谱仪提供的原始数据中获取有用信息的任何工作过程。
最终报告	汇总执行验证文档得出的所有结果的文档。

1.5 文档资料

配套文档资料的查询方式:

- 随箱存储介质 (仅限部分设备型号)
- 通过 Endress+Hauser 移动应用程序: www.endress.com/supporting-tools
- 登陆 Endress+Hauser 公司网站的“资料下载”区: www.endress.com/downloads

本文档为全套文档资料的组成部分, 其中包括:

文档资料代号	文档资料类型	说明
BA02349C	Raman data library 管理员《操作手册》	安全性管理和 Raman data library 相关操作的完整介绍。
KA01717C	Raman data library 《简明操作指南》	安装后运行 Raman data library 的快速入门指南。
TI01802C	Raman data library 《技术资料》	数据分析系统的设计规划指南。 本文档包含软件的所有技术参数。

1.6 注册商标

SIMCA®

Sartorius Stedim Biotech 的注册商标。

GRAMS IQ™

Thermo Fisher Scientific 的注册商标。

2 产品描述

Endress+Hauser 的 Raman data library 是用于整理、可视化、分析和报告 Rxn 拉曼光谱数据的软件程序。

Raman data library 通过提供光谱数据存储、整理、分析和多分析仪数据收集功能（从实验室涵盖到 cGxP 法规认证），为 Endress+Hauser Raman Rxn RunTime 嵌入式软件提供补充。

Raman data library 适用于需要可视化拉曼光谱、将拉曼光谱与参考数据相关联并创建单变量峰值模型的用户。该软件可以导出准备好的数据进行外部多变量建模。

Raman data library 的特性：

- **数据整理。** 将光谱数据与参考值相匹配，在进行化学计量学建模之前准备好数据，提供可搜索的数据存储，并确保数据完整性。
- **数据分析。** 提供增强的光谱可视化和简单分析功能，例如峰值趋势和单变量建模。
- **cGxP 选项。** 满足行业标准规定的光谱数据溯源性、存储和归档要求。

Raman data library 将光谱数据存储安全的嵌入式 SQLite 数据库中，对光谱数据进行计算，并在报告和屏幕上显示光谱数据及其相关元数据。该功能允许拉曼光谱用作定量拉曼方法开发的参考数据，能够满足 FDA 21 CFR Part 11 的需求，作为已验证分析解决方案的组成部分。

当与 cGxP 安装程序一起安装并通过 IQ/OQ（由 Endress+Hauser 执行）和 PQ（由用户执行）进行资质验证后，Raman data library 即符合 FDA 21 CFR Part 11 法规要求。当以 cGxP 模式安装时，程序便于用户收集、存储和整理拉曼光谱数据，以便将光谱：

- 纳入已验证分析解决方案，从而作为定量拉曼模型开发的校准集数据，或者
- 作为数据输入至已验证模型，用于预测过程或样本属性

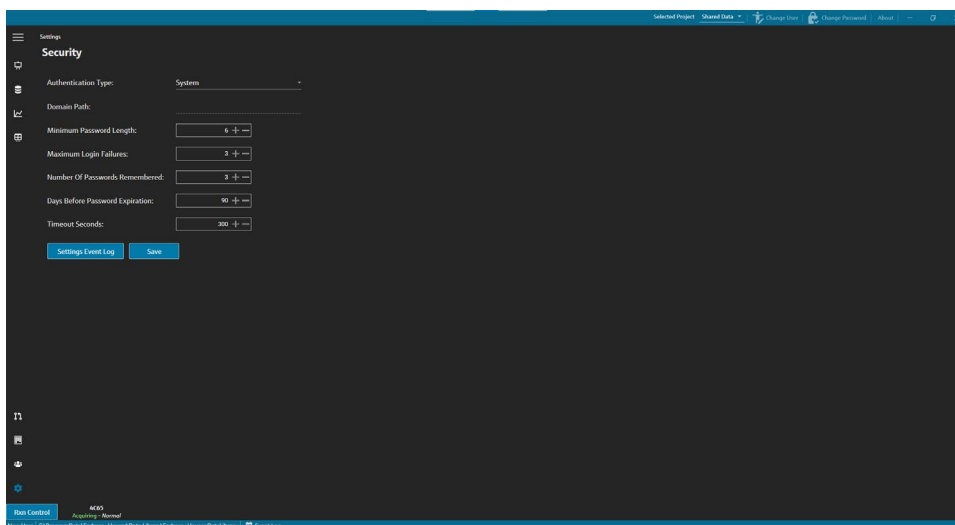
2.1 安装

Raman data library 适合安装在独立工作站上。Raman data library 包含从应用程序的每个实例导出数据并将数据导入集中位置的功能。请参见 *Raman data library 管理员《操作手册》* (BA02349C) 中的安装说明。

2.2 安全性设置 (仅 cGxP 版本)

在 cGxP 环境中，Raman data library 利用用户身份验证来确保所有事件的可追溯性和记录。在 Raman data library 的核心版本中，不使用用户管理和身份验证。

在“Settings”窗口中可以更改系统安全设置。如需更改系统安全设置，必须使用系统设置管理员角色登陆。

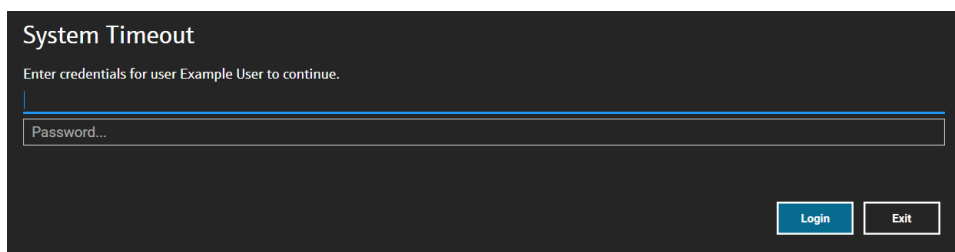


A0055947

图 1. Security 窗口

在“Settings”窗口中，您可以选择：

- **Authentication type**。应用程序的验证类型。用户可以在系统、域和本地身份验证模式之间进行选择。
- **Domain path**。（仅限域身份验证）域路径。
- **Minimum password length**。用户密码的最小字符数。允许的最小字符数为 6 个。
- **Maximum login failures**。锁定用户帐户之前允许的失败登陆尝试次数。
- **Number of passwords remembered**。在重复使用旧密码之前，必须与用户帐户关联的唯一新密码的数量。
- **Days before password expiration**。在系统要求用户更改密码之前可以使用密码的时间段（以天为单位）。您可以将密码设置为在特定天数后过期，也可以通过将天数设置为 0 来指定密码永不过期。
- **Timeout seconds**。系统超时前允许的不活动时间段（秒）。系统超时后，用户需要重新输入凭据以继续或退出应用程序。如果超时秒数设置为 0，则系统超时被禁用。最大可配置超时值为 3600 秒（60 分钟）。



A0055948

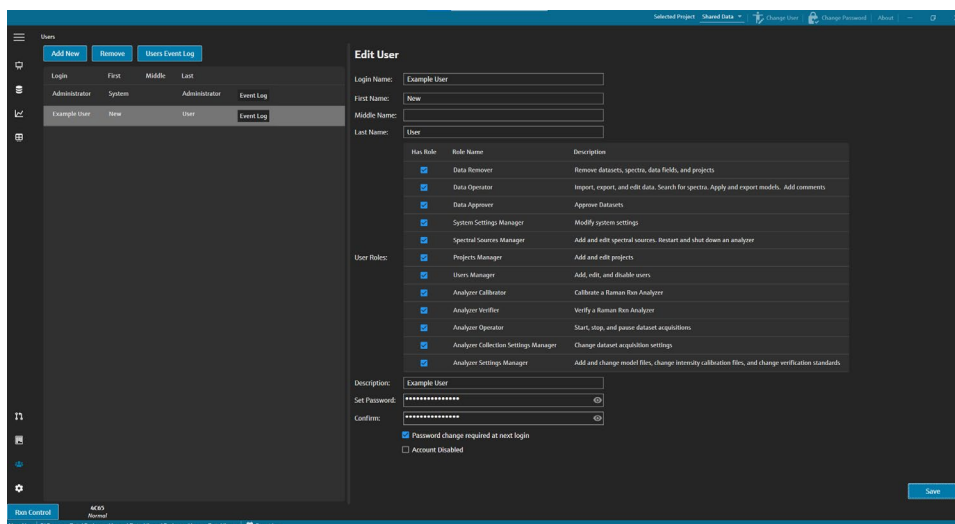
图 2. 系统超时

- **Save**。保存系统安全性设置。
- **Settings event log**。显示设置的事件日志。

2.3 用户管理（仅针对 cGxP 版本）

在 cGxP 环境中，Raman data library 对用户进行身份验证，以确保所有事件的可追溯性和记录。Raman data library 的核心版本不提供用户管理和身份验证。

“Users”窗口允许管理员添加、更新和删除用户帐户。同时允许管理员查看指定用户的事件或所有用户的所有事件。如需管理用户，必须以用户管理员角色登陆帐户。



A0055949

图 3. Users 窗口

在“Users”窗口中，您可以选择：

- **Add New**。创建新用户。
- **Remove**。删除所选用户。删除用户需要 Data Remover 角色。
- **Users Event Log**。显示所有用户的事件日志。
- **Event Log**。显示指定用户的事件日志。

2.3.1 用户角色

在用户角色功能中，用户管理员可以创建具有遵循用户确定的组织结构的权限的用户。因此，不存在固定用户组。而通过分配用户角色组合来构建权限的方式有多种。

用户角色可用于限制用户功能。任何角色组合均可分配给指定用户，从所有角色到无角色。

角色	允许的操作
数据删除员	<ul style="list-style-type: none"> ▪ 删除数据集 ▪ 删除光谱 ▪ 删除数据字段 ▪ 删除项目
数据操作员	<ul style="list-style-type: none"> ▪ 导入、导出和编辑数据 ▪ 搜索光谱 ▪ 应用和导出模型 ▪ 添加注释
数据审批员	审批数据集
系统设置管理员	修改系统设置
光谱数据源管理员	<ul style="list-style-type: none"> ▪ 添加和编辑光谱数据源 ▪ 重启和关闭分析仪
项目管理员	<ul style="list-style-type: none"> ▪ 添加项目 ▪ 编辑项目
用户管理员	<ul style="list-style-type: none"> ▪ 添加用户 ▪ 编辑用户 ▪ 禁用用户
分析仪校准员	校准 Rxn 拉曼光谱分析仪
分析仪验证员	验证 Rxn 拉曼光谱分析仪
分析仪操作员	<ul style="list-style-type: none"> ▪ 开始数据集采集 ▪ 停止数据集采集 ▪ 暂停数据集采集
分析仪数据收集设置管理员	更改数据集采集设置
分析仪设置管理员	<ul style="list-style-type: none"> ▪ 添加和更改模型文件 ▪ 更改强度校准文件 ▪ 更改验证标准

功能角色可以限制为一组权限，也可以组合为与用户职责相关的多组权限。下表列举了可分配给用户、监督员和管理员的角色集示例。

用户等级	应用的角色
用户	<ul style="list-style-type: none"> ▪ 数据操作员 ▪ 光谱数据源管理员 ▪ 分析仪校准员 ▪ 分析仪验证员 ▪ 分析仪操作员 ▪ 分析仪数据收集设置管理员 ▪ 分析仪设置管理员
监督员	<ul style="list-style-type: none"> ▪ 数据删除员 ▪ 数据审批员 ▪ 系统设置管理员 ▪ 项目管理员
管理员	<ul style="list-style-type: none"> ▪ 用户管理员

2.3.2 创建新用户

创建新用户

1. 在用户窗口中点击 **Add New**。

为所有新系统用户创建新的 Raman data library 用户帐户。虽然 Raman data library 可以重命名用户，但由于名称变更，只能使用此功能升级用户名。不得重命名用户帐户以将帐户重新分配给新的个人。

将显示一个新的“Edit User”窗格。

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 Rsn Analyzer
<input checked="" type="checkbox"/>	Analyzer Verifier	Verify a Raman Rsn 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

图 4. Edit User 窗格

2. 输入用户属性:

- **Login Name**。用于登陆系统的名称。每个登陆名必须是唯一的，长度为 1 至 100 个字符。
- **First Name**。用户的名字。允许长度为 0 至 100 个字符。
- **Middle name**。用户的中间名。允许长度为 0 至 100 个字符。
- **Last Name**。用户的姓氏。允许长度为 0 至 100 个字符。
- **User Roles**。用户在 Raman data library 中被授予的角色。通过选中或取消选中每个角色的 **Include** 复选框，可以添加或删除用户角色。参见 [用户角色](#) →。
- **Description**。关于用户的描述。

3. 在 **Set Password** 和 **Confirm Password** 框中输入有效的密码。
密码必须满足以下基本要求：
 - 必须至少包含一个特殊字符
 - 必须同时包含大小写字母
 - 必须满足“Settings”窗口中设置的最小密码长度
4. 添加新用户时选择 **Password change required at next login**（可选）。
5. 点击 **Save**。

2.3.3 禁用用户

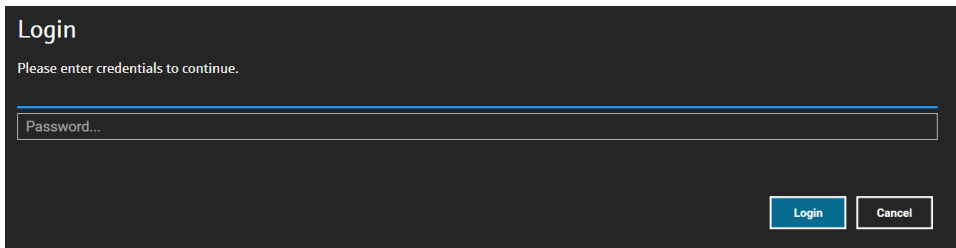
可以禁用非活动 Raman data library 用户帐户，但应始终将其保留在 Raman data library 中，用于历史和审计跟踪目的。被禁用的用户无法登陆。

禁用用户

1. 在“Users”窗口中选择需要禁用的用户帐户。
2. 选择 **Account Disabled**。
3. 点击 **Save**。

2.3.4 更改用户

点击顶部功能区工具栏上的 **Change User** 以切换到其他用户。必须正确输入用户凭据才能切换到其他用户。



A0055965

图 5. 用户登陆

2.3.5 更改密码

点击顶部功能区工具栏上的 **Change Password** 以更改当前用户的密码。用户需要输入旧密码、新密码，然后确认新密码。

密码必须满足最低密码要求。密码必须至少包含一个特殊字符，使用大小写字母组合，并满足在“Settings”窗口上设置的最小密码长度。



A0055966

图 6. Change Password 对话框

如果身份验证模式设置为本地 Windows 或域，则此菜单项不可用。使用这些身份验证模式，密码更改由所选的身份验证服务器处理。

3 软件操作

Raman data library 具备的特性和功能可帮助建立光谱数据分析工作流程。建议工作流程如下所示。一旦完成工作流程的一部分（例如导入数据或执行预处理），软件就会打开下一个数据处理步骤。



本手册旨在遵循这一工作流程，从向 Raman data library 添加数据到创建项目、使用预处理和分析数据。

安装 Raman data library 后，您必须熟悉软件界面，以开发适合您需求的数据分析工作流程。快速启动说明参见 *Raman data library 《简明操作指南》* (KA01717C)。

3.1 登陆（仅针对 cGxP 版本）

在 Raman data library cGxP 版本中，用户必须登陆才能打开 Raman data library。

登陆名和密码均为必填项。登陆名不区分大小写。例如，登陆名“Jane”等同于“jane”。

作为一项安全预防措施，如果用户尝试登陆失败的次数达到设定值，将被自动锁定。想要重新启用被锁定的用户，必须联系管理员处理。

3.2 在线和离线模式

Raman data library 支持以下两种模式：

- **在线模式。**来自 Raman 光谱分析仪的实时数据进入建模软件，提供实时成分分析。
- **离线模式。**导入并分析数据集，不使用实时过程。在离线模式下，还可使用已知分析物建立模板，从而创建出可供使用的模型和数据集模块，并与实时数据进行对比。

通过这两种模式，用户可以理解并执行在实时过程环境中收集的 Raman 光谱。

3.3 用户界面










首次启动 Raman data library 时，将显示带有左侧菜单图标的空白面板。左侧菜单可以展开。除非完成数据集加载和视图配置，否则 Raman data library 将始终打开空白面板。

为确保 Raman data library 提供预期的 UI 体验，请将 Windows 显示比例调节至 100%。

3.3.1 菜单

主菜单

Raman data library 左侧的主菜单能够帮助用户切换导航不同软件功能。

菜单项	导航
 A0055967	Expand/collapse 。显示或隐藏菜单项。
 A0055968	Dashboard 。创建和管理用户面板。
 A0055969	Datasets 。创建和管理数据集。
 A0055970	Analyze Dataset 。分析活动数据集。仅在在有活动数据集时启用。此菜单项包含五个子选项卡： <ul style="list-style-type: none"> Data Pretreat Peaks/Regions Views Summary
 A0055971	Data Fields 。创建和管理数据字段。
 A0055972	Spectral sources 。创建和管理光谱数据源（OPC/SPC）。
 A0055973	Projects 。创建和管理项目。
 A0055974	Users 。创建和管理用户。此功能仅为 Raman data library 的 cGxP 版本提供。
 A0055975	Settings 。管理系统设置。此功能仅为 Raman data library 的 cGxP 版本提供。

功能区/工具栏

Raman data library 顶部包含一个功能区/工具栏。功能区/工具栏中包含以下项目：




- **Selected Project**：通过顶部菜单的 Selected Project 列表，用户可以在不同项目间切换。有关项目的信息，请参见“项目”章节 → 。
- **Change User（仅针对 cGxP 版本）**。点击此工具可切换至其他用户，而不影响程序运行。有关更改用户和密码的说明，请参阅 *用户管理（仅针对 cGxP 版本）*。
- **Change Password（仅针对 cGxP 版本）**。点击此工具可更改用户密码。
- **About**。点击此工具可显示软件版本、版本号、安装 ID 和版权信息。



图 7. 功能区/工具栏

3.3.2 数据库面板

面板是日常分析的主要视图。其显示了可以设置为显示已保存数据集图的选项卡。面板选项卡可以包含来自多个数据集的视图。必须定义一个或多个数据集才能在面板上显示视图。

如需使用面板，您必须首先采取本章开头以及向 *Raman data library* 添加数据 →  和分析数据集 →  中介绍的初始设置操作。快速启动指导参见 *Raman data library* 《简明操作指南》（KA01717C）。

当 Raman data library 启动时，将加载前一个会话中的面板选项卡。如果没有定义以前的面板，如在首次使用软件期间，面板将为空白。通过从“Analyze Dataset”窗口的“Summary”选项卡中点击“Launch Dashboard”，可以重新加载以前保存的面板选项卡。关闭 Raman data library 时，面板选项卡会自动保存。

当为新数据集配置和启动面板时，它提供了两个默认视图：光谱网格和光谱图。数据集的其他视图在分析数据集中的“Views”选项卡下定义。参见 [创建面板视图：网格、趋势、光谱和 3D 图](#)，了解关于如何定义视图的详细信息。

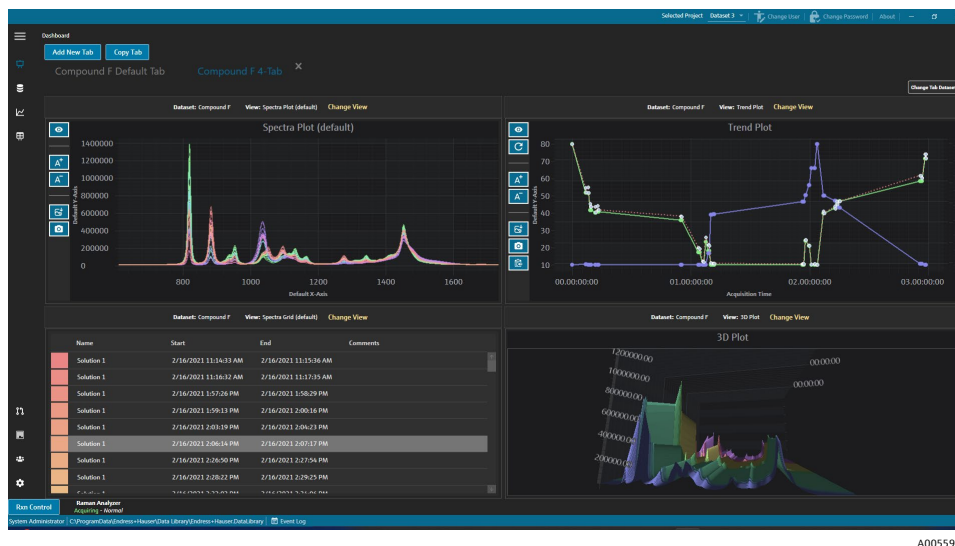


图 8. 四视图面板选项卡

在面板界面，您可以：

- **Add New Tab.** 添加一个新的面板。添加新的面板选项卡时，系统会提示您选择视图数量（1 到 4）。面板选项卡可以包含来自多个数据集的视图。
- **Copy Tab.** 创建当前面板选项卡的新副本。
- **Change View.** 通过允许用户选择不同的绘图或网格来更改数据集的视图。
- **Change Tab Dataset.** 选择一个数据集并从“Dashboard”选项卡中删除所有视图。所选数据集将被加载，以便可以将所选数据集的绘图视图快速添加到“Dashboard”选项卡中。
- **X.** 关闭面板选项卡。

创建一个新的面板

此过程要求您添加光谱源，从这些源创建数据集，并从“Analyze Dataset”窗口启动初始面板。具体说明参见 [向 Raman data library 添加数据](#) 和 [分析数据集](#)。

1. 在面板中点击 **Add New Tab**。
Add New Tab 列表显示了新面板上视图数量的选择。
2. 在 **Add New Tab** 列表中，选择新面板显示的视图数（1 到 4）。
创建新面板时，不会显示绘图或网格视图。

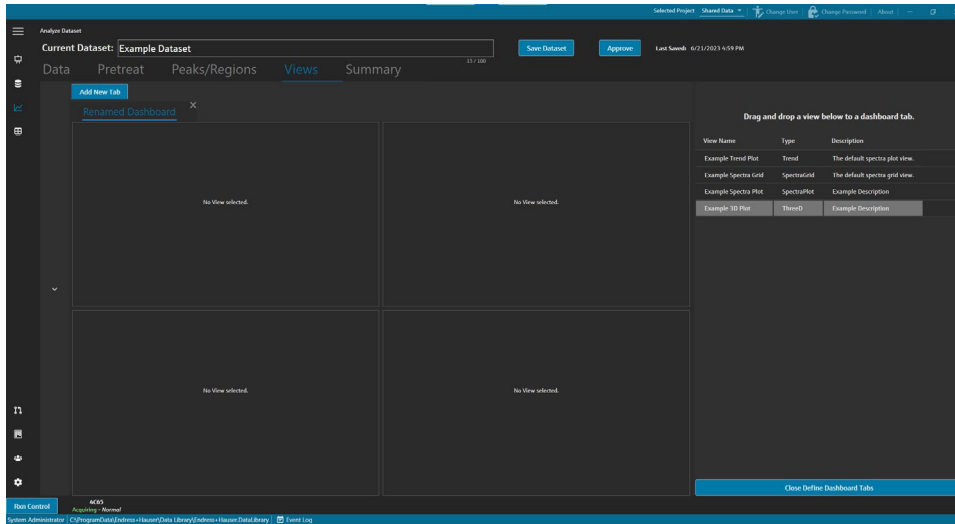


图 9. 空面板选项卡

A0055977

如需创建显示默认光谱图和光谱网格视图之外的视图，您需要在“Analyze Dataset”窗口上添加视图。

- 按照 *创建面板视图* 中的说明定义视图：*网格、趋势、光谱和 3D 图* → 。返回面板。
- 在新面板选项卡中，点击 **Change View**。

显示“Change View”对话框。

- 选择数据集源，然后选择视图。点击 **Change View**。

新视图显示在面板上。如需重命名面板，请双击面板选项卡名称。

如需保存面板，您必须在“Views”选项卡中定义并保存它。详细信息参见 *创建面板视图：网格、趋势、光谱和 3D 图* → 。

4 向 Raman data library 添加数据

本章提供有关创建数据流、光谱源和将 SPC 文件导入数据集的说明。支持自动或手动向 Raman data library 添加数据。通过“Spectral sources”窗口设置自动数据源。SPC 文件的手动导入是通过“Datasets”窗口完成的。

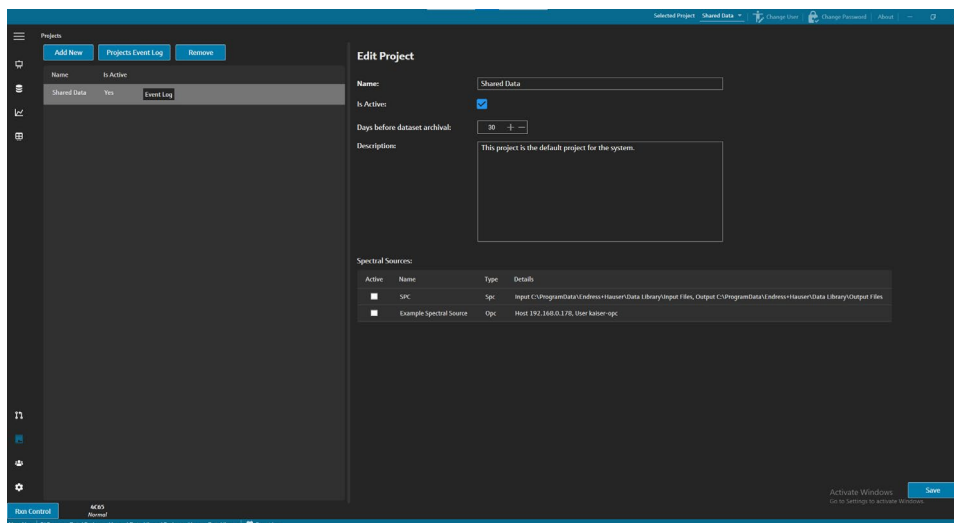
有三种方法可以将 Raman 光谱引入 Raman data library:

- 手动导入包含 SPC 文件的文件夹
- 从关注的文件夹自动导入 SPC 文件
- 从 OPC 连接自动导入到 Raman RunTime

4.1 项目

项目包含并组织数据。如需将数据导入 Raman data library, 您必须首先为数据创建一个项目容器。在“Projects”窗口中, 您可以:

- **Add New.** 添加一个新项目。
- **Projects Event Log.** (仅 cGxP 版本) 查看所有项目的事件日志。
- **Event Log.** (仅 cGxP 版本) 查看特定项目的事件日志。
- **Remove.** 删除所选项目。在 Raman data library 的 cGxP 版本中, 删除项目需要 Data Remover 角色。
- **Save.** 保存一个选中的项目。



A0055978

图 10. 项目窗口

4.1.1 添加一个新项目

添加一个项目

1. 在“Projects”窗口 , 点击 **Add New**。

将显示“Edit Project”窗格。

2. 输入下列信息:

- **Name.** 项目的名称。
- **Is Active.** 项目是否处于活动状态。如果未选中“Is Active”复选框, 则项目不会出现在菜单栏上的“Selected Project”列表中。
- **Days before dataset archival.** 数据集自动存档并隐藏在“Datasets”窗口之前的天数。通过选中“Show Archived Datasets”复选框, 可以在“Datasets”窗口上查看已存档的数据集。
- **Description.** 项目说明。

- **Spectral sources.** 确定选定项目中哪些光谱源处于活动状态。

在一个项目中创建的光谱、数据字段和数据集在另一个项目中将无法查看。但是，使用共享数据项目，存储在一个项目中的数据可以与其他项目共享。这对于存储参考光谱或公共数据字段非常有用，这样它们就可以很容易地包含在多个项目中。如需创建共享数据项目，请从列表中选择应用于该项目的全部数据源。

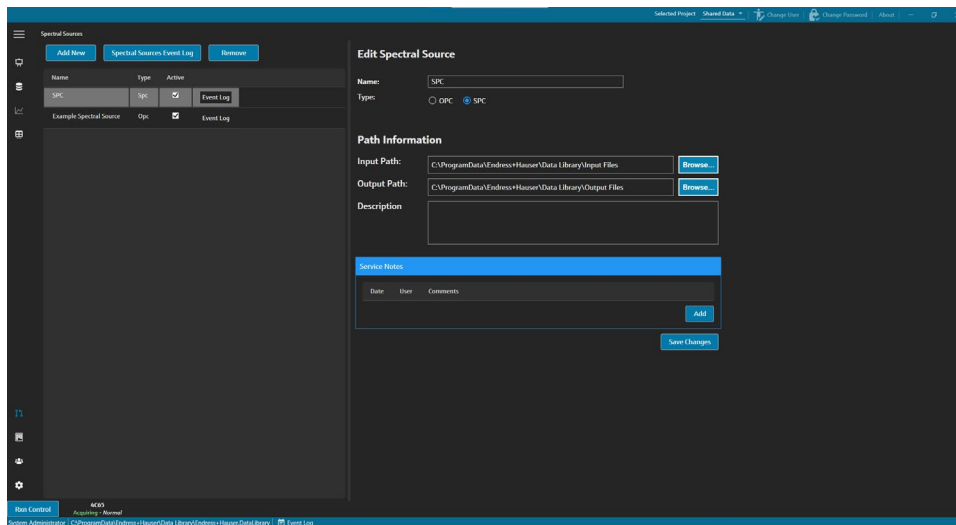
3. 点击 **Save**。

4.2 光谱数据源

光谱数据源即光谱数据的来源。光谱数据源可以是一个被监测的输入文件夹，其中包含光谱文件（.spc），也可以是实时传输的光谱（通过与 Rxn 拉曼光谱分析仪建立 OPC 连接）。在 cGxP 版本的 Raman data library 中，只有光谱数据源管理员角色有权添加或修改光谱数据源。

在“Spectral sources”窗口中，您可以选择：

- **Add New.** 创建一个新光谱源。
- **Spectral Sources Event Log.** 查看所有光谱源的事件日志。
- **Event Log.** 查看一个特定光谱源的事件日志。
- **Remove.** 删除选定的光谱源。在 cGxP 版本的 Raman data library 中，需要 Data Remover 角色来删除光谱源。
- **Name.** 光谱源的显示名称。
- **Type.** 光谱源的类型，OPC 或 SPC。



A0055979

图 11. 光谱数据源窗口

4.2.1 添加 OPC 光谱数据源

可以创建 OPC 光谱数据源，使得 Raman data library 能够与 Raman Runtime OPC 服务器建立 OPC 统一自动化 (UA) 客户端连接。通过 OPC 连接，用户可以查看、控制和收集来自 Endress+Hauser Rxn 拉曼光谱分析仪系统的光谱。Raman data library 可连接多台 Raman 光谱分析仪（最多 4 台）。

如需在 Raman data library 与 Raman RunTime 之间建立 OPC 连接，应使用版本不低于 v6.4 的 Raman RunTime 软件。如果 Rxn 拉曼光谱分析仪上运行的 Raman RunTime 版本低于 v6.4，可使用“添加 SPC 光谱数据源”章节 → 介绍的 SPC 光谱数据源。

使用 OPC 光谱数据源时，需要在 Windows 设置中禁用设备睡眠功能。

添加 OPC 光谱数据源

1. 在“Spectral sources”窗口中点击 **Add New**。

显示 Edit Spectral Source 窗格。

图 12. 编辑光谱数据源

2. 输入一个光谱数据源名称。
3. 选择 **OPC**。
4. 输入以下连接设置信息：
 - **Host Name**。Raman RunTime OPC 服务器的主机名。
 - **Username**：与 Raman Runtime OPC 服务器建立 OPC 连接所需的用户名。缺省用户名为 **kaiser-opc**。
 - **Password**：与 Raman Runtime OPC 服务器建立 OPC 连接所需的密码。缺省密码为 **opc**。
 - **Description**。OPC 光谱数据源的描述信息（选填）。
 - **Status**：OPC 光谱数据源的状态，可以是活动或非活动状态。
 - **Service Notes**：服务人员或用户对 OPC 光谱数据源的注释。点击 **Add** 可添加新注释。
5. 点击 **Test Connection** 检查与 Raman RunTime OPC 服务器的连接。

为了确保成功连接：

- 在保存 OPC 光谱数据源之前执行测试连接。
- 如果测试连接不成功，请确保 Raman 分析仪已通电、可用并已连接至网络，并且 *Raman RunTime* 《操作手册》（BA02180C）的 *Raman Rxn2* 和 *Raman Rxn4* 网络设置章节中定义的网络端口已按要求设置。
- 连接不成功可能只是因为在本本地 IT/OT 网络上没有正确配置主机名解析。请联系本地 IT 管理员。
- 作为默认 OPC 凭据的备选方案，还可使用在 Raman Runtime 分析软件上配置的任一用户帐户凭据验证分析仪 OPC 连接。

6. 点击 **Save Changes**。

如果连接成功，将显示一条信息，且在底部区域出现 Rxn 控制工具栏，显示所分配的光谱数据源名称及其状态。


4.2.2 添加 SPC 光谱数据源

SPC 光谱数据源功能可自动从 Rxn 拉曼光谱分析仪（运行的 Raman Runtime 版本低于 v6.4）导入光谱。这样便也可使用基于 Endress+Hauser 旧版 Raman 软件解决方案的 Raman data library。添加 SPC 光谱数据源后，Raman data library 便能自动读取和存储 Raman data library 中的 .spc 文件，并使它们可用于数据集。

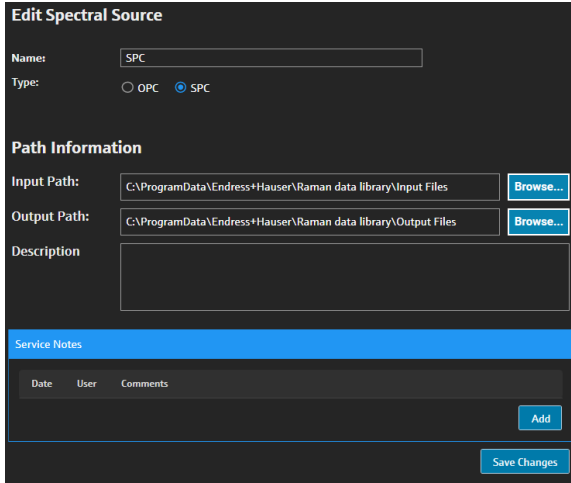
SPC 光谱数据源需要一个输入路径（供 Raman data library 检测并导入新文件）和一个输出路径（供 Raman data library 在导入 SPC 文件后移动这些文件）。

关于从 Raman RunTime 导出 .spc 文件的说明，请参见“SPC 文件网络导出”章节 → Raman RunTime 《操作手册》(BA02180C)。

添加 SPC 光谱数据源

- 在带有 Raman data library 的计算机上创建 .spc 文件夹：
 - 如果所用 Raman Runtime 软件的版本低于 v6.4，则会创建一个名为 **Output spectra** 的文件夹。
 - 对于旧版软件解决方案，将创建两个文件夹。一个文件夹命名为 **Input spectra**，另一个文件夹命名为 **Output spectra**。传统 Raman 软件解决方案中的 SPC 文件需要定向到 **Input spectrum** 文件夹。
- 点击 **Spectral sources** ，然后点击 **Add New**。

显示 Edit Spectral Source 窗格。



A0055981

图 13. 编辑 SPC 光谱数据源

- 输入一个光谱数据源名称。
- 选择 SPC。
- 在 **Input Path** 中：
 - 如果所用 Raman Runtime 软件的版本低于 v6.4，请浏览至网络共享的 DataLibraryBatchExport 文件夹（路径：\\计算机名或 IP 地址\DataLibraryBatchExport）。
 - 对于旧版软件解决方案，将 **Input path** 指向旧版软件的输出目录。
- 在 **Output Path** 中，浏览至 Step1 中创建的 Output spectra 文件夹。这是用于输出 .spc 文件的目录路径（在它们被读入系统后）。
- （选填）输入下列信息：
 - Description**。SPC 光谱数据源的描述信息。
 - Service Notes**：用户对 SPC 光谱数据源的注释。点击 **Add** 按钮可添加新注释。
- 点击 **Save Changes**，并在提示框中点击 OK。

如果所用 Raman Runtime 软件的版本低于 v6.4，网络共享文件夹 DataLibraryBatchExport 将包含子文件夹以及在 Raman 光谱分析仪上获取的 .spc 文件。一旦读取 .spc 文件并添加到 Raman data library 后，文件将从该网络目录直接转移至上面创建的 Output spectra 文件夹。所有 .spc 文件都保留在 Raman 光谱分析仪上。仅从 DataLibraryBatchExport 文件夹中移出文件。

4.3 数据集

“Datasets”窗口用于创建、查看、导入、导出和删除数据集。可以查看现有数据集的数据集摘要信息。

在 Raman data library 中，数据集至少包含一个光谱。数据集可以在软件中组合用于分析或建模，也可以导出到外部程序。如需使用数据集分析光谱，请至少选择 1 个光谱。

在“Datasets”窗口中，您可以选择：

- **Create New Dataset**。显示 **Create Dataset** 窗格。在 Raman data library 的 cGxP 版本中，您必须具有数据操作员角色才能创建新的数据集。
- **Analyze**。打开所选数据集并在“Analyze”窗口上显示该数据集。
- **Import Data Library**。导入现有的数据集文件（.dllexport）。
- **Export**。显示单元导出窗格。
- **Remove**。删除所选数据集。要删除数据集，您必须以数据删除者角色登陆。
- **Show Inactive Datasets**。显示标记为“Inactive”的数据集。
- **Show Archived Datasets**。显示已标记为已存档的数据集数据集在可配置的天数后自动标记为已存档。“Days before dataset archival”可以在“Projects”窗口中更改。

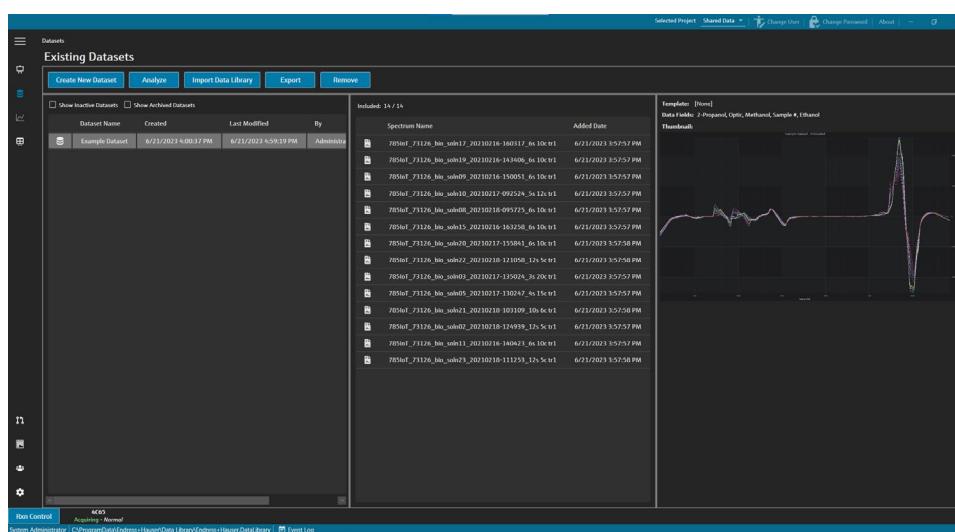


图 14. 现有数据集

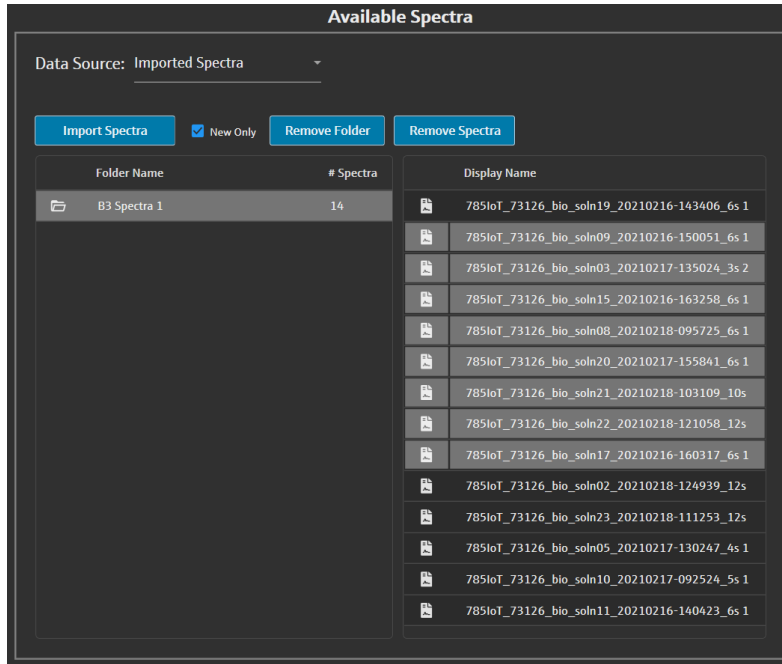
A0055982

4.3.1 创建数据集

您可以从各种来源选择数据，以选择要包含在数据集中的光谱。数据来源于：

- **Imported Spectra**。此选项显示已导入 Raman data library 的所有可用文件夹和光谱。
- **Reference Spectra**。此选项显示标记为参考光谱的所有光谱。
- **Search**。此选项允许用户搜索符合定义条件的光谱。可以单独添加或删除搜索条件。光谱可以通过名称、开始日期、结束日期或定义为可搜索的数据字段的任何定义的数据值来查找。
- **Existing Datasets**。此选项允许用户搜索另一个数据集中存在的光谱。显示所选数据集的摘要视图。当点击 **Include >** 时，包括来自所选数据集的所有光谱。
- **Folders**。此选项列出了通过 OPC 连接到 Raman RunTime 收集的光谱，这些光谱存储在 Raman data library 计算机上的文件夹中。

选择可用光谱后，使用 **Include >** 将所选光谱包含在新数据集中。如需从新数据集中删除光谱，请选择包含的光谱，然后点击 **< Remove**。

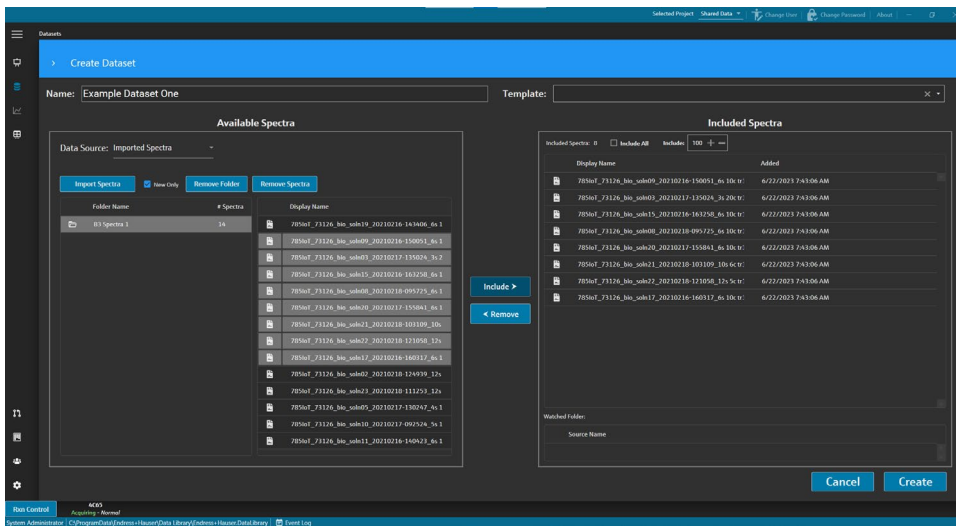


A0055983

图 15. 数据源: 导入光谱窗格

创建数据集

1. 在主菜单上, 点击 **Datasets** .
2. 点击 **Create New Dataset**.
显示 Create Dataset 窗口。



A0055984

图 16. 创建数据集窗口

3. 在“Create Dataset”窗口中输入以下信息:
 - **Name**. 新数据集的名称。数据集名称必须唯一, 长度为 1 到 100 个字符。
 - **Template**. 创建数据集时使用的模板。模板可用于自动将预选的数据字段、预处理、峰值、区域、视图和面板选项卡应用到新数据集。
4. 从数据源列表中选择:
 - **Import Spectra**, 选择包含光谱文件 (.spc) 的文件夹。
 - **Reference Spectra**, 选择标记为参考光谱的光谱。

- **Search**, 搜索符合定义标准的光谱。可以通过名称字段、开始日期、结束日期或其他数据值查找光谱。
 - **Existing Datasets**, 搜索存在于另一个数据集中的光谱。当点击 **Include** ► 时, 包括来自所选数据集的所有光谱。
 - **Folders**, 选择通过 OPC 连接到 Raman RunTime 收集的光谱, 这些光谱存储在 Raman data library 计算机上的文件夹中。光谱文件名不会显示在文件夹浏览器中。
5. 从 **Available Spectra** 窗口中, 选择要 **include** 的光谱, 或在“Included Spectra”窗口中点击 **Include All** 以导入文件夹中的所有光谱。

新数据集中包含的光谱显示在 **Included Spectra** 下。

6. 从 **Included Spectra** 窗口选择光谱以便删除。
- 选择 **Include All** 以包含 Step5 中选择的所有光谱, 或仅包含软件每秒或每三次选择光谱的子集。
 - 点击 **Remove Folder** 以删除选择的文件夹以及其中的的所有光谱。在 Raman data library 的 cGxP 版本中, 删除文件夹需要 Data Remover 角色。
 - 点击 **Remove Spectra** 以从数据集中删除所选光谱。在 Raman data library 的 cGxP 版本中, 删除光谱需要 Data Remover 角色。
7. 点击 **Create**。

Raman data library 工作流创建新数据集, 并沿工作流移动到“Analyze”窗口。


8. 点击 **Save Dataset**。

4.3.2 保存一个数据集

数据集不会自动保存在 Raman data library 中, 除非从 Raman data library 中启动数据集的收集。养成定期保存数据集的习惯很重要。

数据集可以通过“Analyze Dataset”窗口保存。如果在保存数据集之前关闭 Raman data library, 则所有更改都将丢失。

保存数据集

1. 在主菜单中, 点击 **Analyze Dataset** 。
2. 点击 **Save Dataset**。

第一次保存数据集可能需要几分钟的时间。日后可以更快完成保存。后续保存速度更快。数据集保存后, **Last Saved** 字段将更新以显示上次保存的日期和时间。

4.3.3 批准数据集

批准数据集为只读状态并且无法修改。“Analyze Dataset”窗口允许您批准或撤销对数据集的批准。

批准或撤销对数据集的批准

- 在“Analyze Dataset”窗口, 点击 **Approve** 以标记数据集为已批准。
- 点击 **Unapprove** 以撤销数据集批准。

4.4 数据字段

数据字段是标记在光谱上的定性和定量信息。进行定量分析时, 用户可以指定精度、单位、主要方法细节和其它光谱相关信息等。

Raman data library 从 SPC 日志或 OPC 数据源收集预设数据字段信息。数据字段列表中显示的单位和数据值可能因检索光谱的方式而异。通过 OPC 从 Raman RunTime v6.4+ 导入数据会自动填充大多数默认数据字段。可以在数据字段中添加别名, 以减少导入过程中的用户错误。

在“Data Fields”窗口中, 您可以添加、更新和删除数据字段。在 Raman data library 的 cGxP 版本中, 您必须以数据字段管理器角色登陆才能对数据字段进行更改。

在“Data Fields”窗口中，您可以选择：

- **Add**。创建一个新的数据字段。
- **Remove**。删除选定的数据字段。在 Raman data library 的 cGxP 版本中，删除数据字段需要 Data Remover 角色。
- **Data Fields Event Log**。（仅 cGxP 版本）显示所有数据字段的事件日志。
- **Event Log**。（仅 cGxP 版本）显示特定数据字段的事件日志。
- **Save**。保存选定的数据字段。

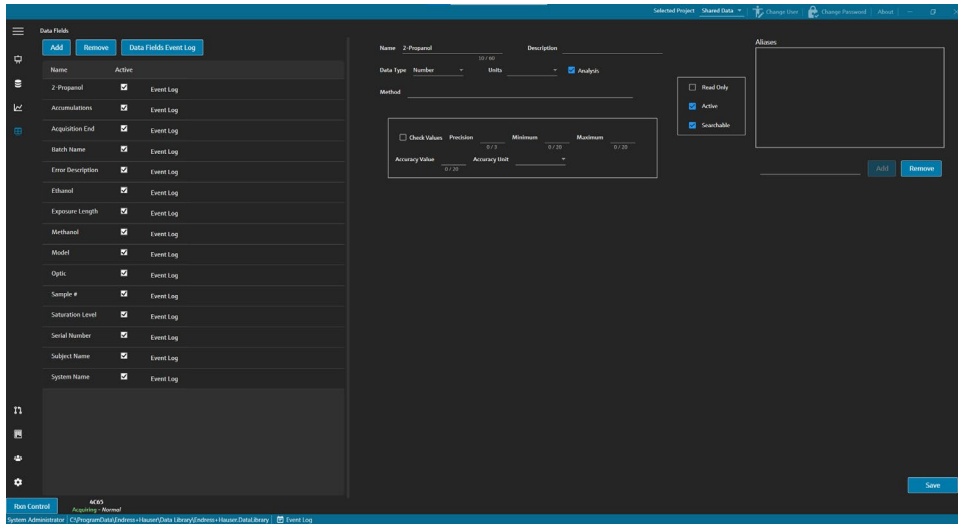


图 17. 数据字段窗口

数据字段属性

属性	含义
Name	数据字段的名称。
Description	数据字段的说明。
Aliases	可以添加拼写和标签中常见变体的别名，以减少用户错误。例如， <i>Concentration</i> 、 <i>concentration</i> 和 <i>Conc.</i> ，可以设置为等于相同的数据字段名称。添加别名可以防止数据导入中的常见收集错误，并在整个工作流程中自动标记。别名用于数据导入，以便与 Excel 中的列标题匹配。可以在此处添加或删除别名。
Data Type	可以为数据字段输入的数据值类型： <ul style="list-style-type: none"> ■ 布尔数 ■ 数字 ■ 日期 ■ 文本
Units	用于数据类型的单位。
Analysis	标记为“Analysis”的数据字段可用于分析操作。
Method	用于指示获取方法的描述性字段。
Read Only	标记为“Read Only”的数据字段不能更改其数据值。

属性	含义
Active	标记为“Active”的数据字段出现在“Analysis”窗口上。
Searchable	可以搜索标记为“Searchable”的数据字段。
Check Values	如果标记为“Check Values”的数据字段不符合“Precision”、“Minimum”、“Maximum”和“Accuracy Value”字段中指示的设定要求，则会自动排除数据值。
Precision	此值指定小数点后所需的位数。
Minimum	数值的下限。
Maximum	数值的上限。
Accuracy Value	指示精度值的描述性字段。
Accuracy Unit	指示精度单位的描述性字段。

添加一个数据字段

1. 在“Data Field”窗口中，点击 **Add**。
2. 输入数据字段的属性。请参阅上面的数据字段属性表。
3. 点击 **Save**。

5 分析数据集

“Analyze Dataset”窗口用于执行数据集的操作、计算和分析。“Analyze Dataset”窗口由 5 个主要选项卡组成：

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

5.1 查看数据集

此数据选项卡用于分析光谱数据。数据选项卡上的图块可以配置为显示特定数据、调整大小或通过将图块的左边框拖动到最右侧来隐藏。




图 18. 数据选项卡



图号	说明
1	Spectra plot. 显示数据集中包含的未处理光谱。颜色在彩虹光谱中循环 (粉红色、橙色、黄色...紫色、粉红色)。
2	Spectra grid. 列出显示的数据字段的光谱和相关数据值。提供用于包含或排除光谱和数据值以及导入参考数据的选项。
3	Data fields list. 切换显示哪些数据字段。启用此选项后，它们可用于分析，并在光谱网格中列出。
4	Data fields plot. 将数据字段显示为趋势图、方框图或预测趋势图。
5	Other info area. 为光谱添加注释，查看日志信息和数据点。

5.1.1 光谱数据图

在数据选项卡上，显示光谱数据图。光谱图显示了所有未经处理的光谱。

导览光谱图

导览项目	导览
—	点击并在光谱图中绘制一个框以放大特定区域。要平移回来，请在图上双击鼠标左键。
	Zoom Extents. 缩放到数据的全部范围。此按钮显示在大多数图表上。

导览项目	导览
 A0055989	Toggle Legend。 显示或隐藏图例。此按钮显示在大多数图表上。
 A0055990	Style Spectrum。 更改选定光谱的颜色。

更改基准光谱名称

例如，如果您知道第一个收集到的光谱是 100%的分析物，您可以重命名特定的光谱。

1. 在光谱网格窗格中，选择光谱。
2. 右击然后选择 **Mark as Reference** 或点击 **Mark as Reference** 按钮。
将显示“Spectrum rename required”对话框。
3. 输入参考光谱的相关名称，然后点击“OK”。
4. 切换光谱图图例，确认参考光谱现在已重命名。
5. 点击 **Save Dataset**。


如需将光谱名称还原为其原始名称，请点击 **Select Fields**，然后选择 **Name**，再选择 **Close**。原始光谱名称出现在列表中。显示名称可以编辑，但采集软件中的原始名称不能编辑。

更改光谱显示颜色


例如，如果您希望参考光谱与其他光谱在视觉上形成对比，则可以修改特定光谱的颜色。

1. 在光谱网格窗格中，选择光谱。
2. 点击 **Style Spectrum** ，然后选择所需颜色。
光谱现在以定义的颜色显示。
3. 点击 **Save Dataset**。

5.1.2 数据字段选择

在光谱图窗格的右侧，列出了数据字段。通过选中或取消选中 **Displayed** 列，可以显示或删除特定的数据字段。如果数据字段标记为“Displayed”，则可用于分析并包含在数据导出中。显示的数据字段是模板的一个组件。更多信息参见 [创建模板](#) → 。

如需在“Data fields”列表中选择数据字段，请选择要显示的字段旁边的 **Displayed**。所选字段现在显示在光谱网格中。数据字段列表中的第一个选择可能会延迟显示。后续数据字段可以快速显示。

数据字段列表可以编辑。更多信息参见 [数据字段](#) → 。

在光谱网格中选择数据字段

1. 在光谱网格中点击 **Select Fields**。
显示字段选择窗口。
2. 选择所需的字段。Raman RunTime 的缺省字段包括：
 - 名称
 - 显示名称
 - 起始日期时间
 - 结束日期时间
 - 中点日期时间
 - 错误
3. 点击 **Close**。

所选字段现在显示在光谱网格中。





5.1.3 数据字段趋势图

在数据字段列表右侧，显示了一个数据趋势图。数据字段趋势图显示了随时间变化的光谱数据值。



图 19. 数据字段趋势图

从数据字段趋势窗格中，您可以：

导览项目	导览
 A0055988	Zoom Extents. 缩放到数据的全部范围。此按钮显示在大多数图表上。
 A0055989	Toggle Legend. 显示或隐藏图例。此按钮显示在大多数图表上。
 A0055992	Copy Plot Data to Clipboard. 将当前趋势图数据复制到剪贴板。
 A0055993	Exclude Points. 排除所选数据值。

5.1.4 方框图

“Box Plot”选项卡显示所选数据字段的方框图显示了数据字段的最大值、上四分位数、中位数、下四分位数和最小值以及标准偏差。在分析非连续数据样本时，方框图可能很有用。

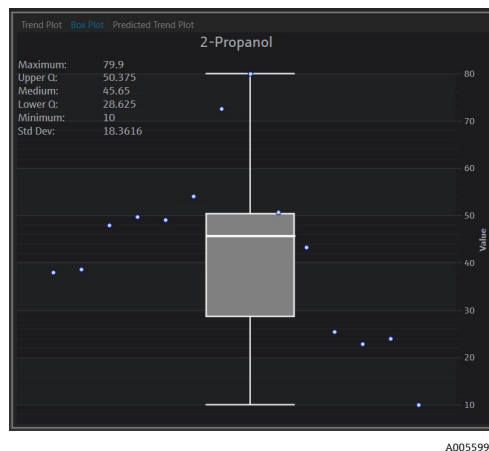


图 20. 方框图

5.1.5 预测数据字段趋势图

预测选项卡显示随时间变化的预测光谱数据值。



图 21. 预测数据字段趋势图

5.1.6 光谱网格

在“Data”选项卡的底部，光谱网格显示光谱及其显示字段的相关数据值

All Spectra		Selected Spectra		Selected Data Values				Other Actions	
Select Fields		Exclude Unmatched		Include: 0 / 0		Exclude		Exclude Include Import Data Add Comment	
Include	Display	Mid	Sample #	Optic	Ethanol	Methanol	2-Propanol	Comments	
<input checked="" type="checkbox"/>	785lot_73126_bio_solm09_20210216-150051_6s 10c tr1	2/16/2021 3:00:19 PM	9	bio-Optic	41.8	10.1	48		
<input checked="" type="checkbox"/>	785lot_73126_bio_solm17_20210216-160317_6s 10c tr1	2/16/2021 4:02:45 PM	17	bio-Optic	40.2	10	49.7		
<input checked="" type="checkbox"/>	785lot_73126_bio_solm15_20210216-163258_6s 10c tr1	2/16/2021 4:32:26 PM	15	bio-Optic	40.9	10	49		
<input checked="" type="checkbox"/>	785lot_73126_bio_solm03_20210217-135024_3s 20c tr1	2/17/2021 1:49:51 PM	3	bio-Optic	10	10	79.9		
<input checked="" type="checkbox"/>	785lot_73126_bio_solm20_20210217-155841_6s 10c tr1	2/17/2021 3:58:09 PM	20	bio-Optic	10	39.4	50.6		
<input checked="" type="checkbox"/>	785lot_73126_bio_solm08_20210218-095725_6s 10c tr1	2/18/2021 9:56:53 AM	8	bio-Optic	10	46.7	43.3		
<input checked="" type="checkbox"/>	785lot_73126_bio_solm21_20210218-103109_10s 6c tr1	2/18/2021 10:30:37 AM	21	bio-Optic	24.1	50.4	25.5		
<input checked="" type="checkbox"/>	785lot_73126_bio_solm22_20210218-121058_12s 5c tr1	2/18/2021 12:10:26 PM	22	bio-Optic	10	66	24		

图 22. 光谱网格

在光谱网格窗格中，您可以选择要包含的光谱和字段。光谱网格功能如下。

光谱网格条目	显示功能
所有光谱	<ul style="list-style-type: none"> Select Fields. 选择要在网格中显示的字段：名称、显示名称、开始日期时间、结束日期时间、中点日期时间和错误。对于长期收购，同时查看起点和中点可能很有用。 Exclude Unmatched. 排除所选数据字段中至少没有一个数据值的所有光谱。 Exclude/Include. 排除或包括所有光谱。
所选光谱	<ul style="list-style-type: none"> Exclude. 排除在光谱网格中选择的光谱。 Include. 包括在光谱网格中选择的光谱。 Remove. 删除在光谱网格中选择的光谱。 Mark as Reference. 将光谱网格中选择的第一个光谱标记为参考光谱。用户需要为光谱输入新的显示名称。
所选数据值	<ul style="list-style-type: none"> Exclude. 排除所选数据值。 Include. 包括所选数据值。
其它操作	<ul style="list-style-type: none"> Import Data. 选择一个 Excel 文件用于数据导入。打开“Import Data”窗口。 Add Comment. 添加一个数据集注释。系统会提示用户选择开始日期和结束日期。该范围内的所有光谱都添加了注释。数据集注释仅特定于添加它们的数据集。数据集注释未显示在其他数据集中。

从光谱网格或图中排除数据

例如，如果激光在实验的一部分被阻挡或产生不可用的数据，您可以从网格中排除光谱并绘制图表。

1. 在光谱图上，放大以仅查看垃圾数据。
2. 将鼠标悬停在图中的一条光谱线上，然后点击以选择它。
光谱现在也在光谱网格中突出显示。
3. 使用 **shift** 键突出显示所选光谱之上的所有光谱。
4. 在“Selected Spectra”框中点击 **Exclude**。
5. 点击 **Save Dataset**。

如果您在第一次尝试中没有全部突出显示，则可能需要排除其他一些光谱。缩小光谱图应显示所有垃圾光谱现在都被排除在外。

导入数据

您可以从现有 Excel 电子表格中导入数据字段和值

1. 在光谱网格中，点击 **Import Data**。
将显示“Select a file to import”窗口。
2. 导航到电子表格并点击 **Open**。
导航到电子表格后，将显示“Import Data”窗口。

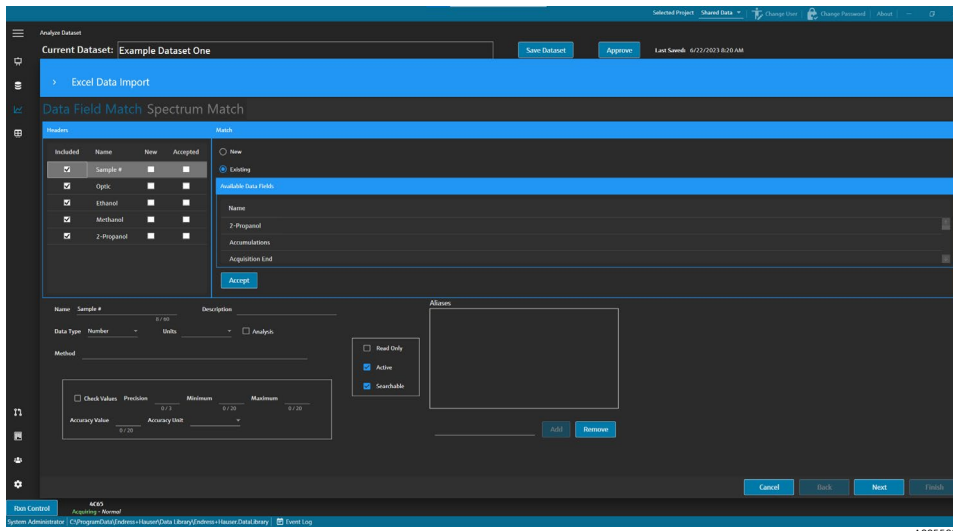


图 23. 导入数据，数据字段匹配

3. 在“Data Field Match”选项卡中，选择：
 - **Included**。确定是否导入具有其值的数据字段。
 - **Match New/Existing**。手动选择将所选字段视为新字段还是现有字段。如果存在，用户可以选择与之匹配的字段。如果是“New”，用户可以按照与数据字段编辑器相同的方式编辑字段（见上文）。
 - **Accepted**。数据字段可以标记为“Accepted”，以跟踪编辑情况。
4. 确定数据字段。添加一个描述、单位、别名以及下限和上限。有关数据字段参数的完整说明，请参阅表格说明 [数据字段属性](#) →
5. 点击 **Next**。
6. 在“Spectrum Match”选项卡中，选择：
 - **Up/Down Arrows**。这些箭头可用于向上或向下推动样本，使其与光谱对齐。
 - **Threshold**。光谱时间和最近采样时间之间的允许差异（单位为小时、分钟或秒）。

- **Apply Threshold.** 将阈值应用于光谱。
- **Include Selected.** 包括所选数据值。
- **Exclude Selected.** 排除所选数据值。
- **Show Only Matched.** 仅显示具有匹配值的光谱。

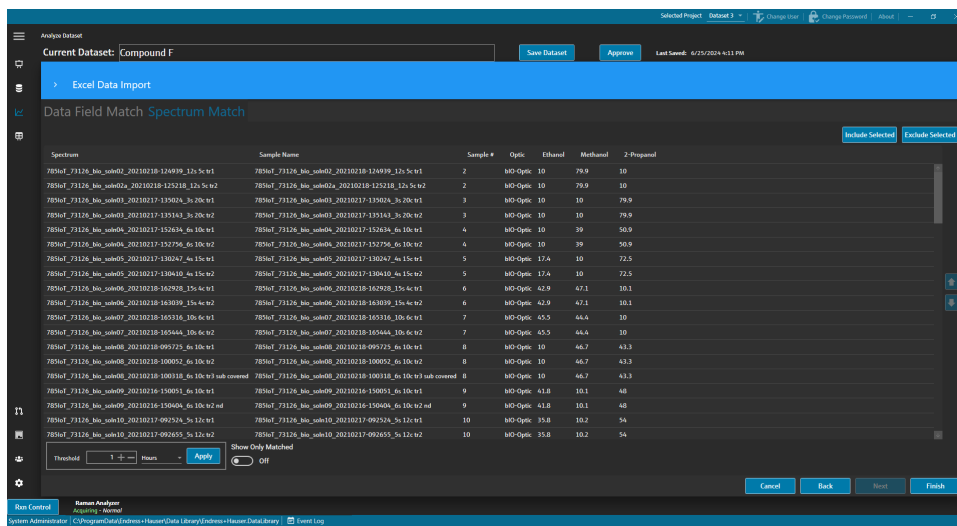


图 24. 导入数据，光谱匹配

7. 点击 **Finish**。在继续对话框中，点击 **OK**。
8. 点击 **Save Dataset**。

5.1.7 注释

注释图块允许您向一个光谱添加说明。这些注释不是特定于数据集的，可以在引用光谱的所有数据集中查看。

还可以为数据集或数据集中的一段时间添加注释。这是通过光谱网格图块中的 **Add Comment** 按钮完成的。更多信息参见 [修改光谱网格](#) →

向光谱添加注释

1. 在注释图块中，点击 **Add**。
显示“Add Comment”对话框。
2. 输入一个相关注释并点击 **OK**。
注释图块和光谱网格现在显示所选光谱的注释。

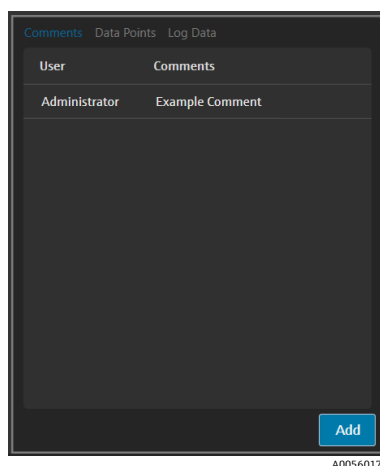


图 25. 光谱注释

5.1.8 数据点

“Data Points”选项卡显示所选光谱的 X 和 Y 数据点列表。

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

图 26. 数据点列表

5.1.9 日志数据

“Log Data”选项卡用于查看所选光谱的元数据 (.spc 审计日志)。点击 **Event Log** 查看所选光谱的事件日志。

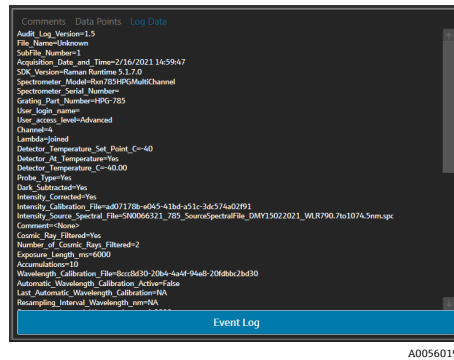


图 27. 事件日志

5.2 使用预处理

“Pretreat”选项卡用于对数据集中的光谱进行预处理。预处理可以随时删除、调整和重新应用，变化反映在光谱图以及峰和区域分析中。预处理为 **模板** → **📄** 的组成部分之一。

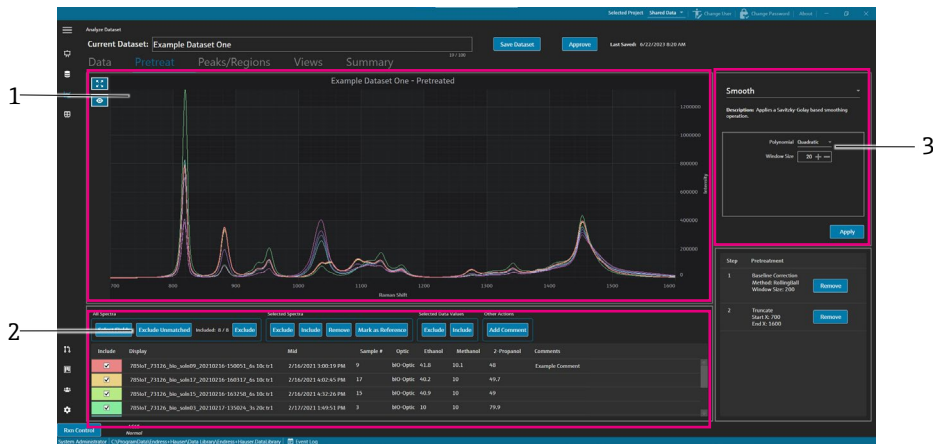


图 28. Pretreat 选项卡

图号	说明
1	Spectra plot. 显示未处理的光谱，直到应用预处理，然后它只在此处显示预处理的光谱。
2	Spectra grid. 列出显示的数据字段的光谱和相关数据值。提供用于包含或排除光谱和数据值以及导入参考数据的选项。在此处更改选项，例如包括或排除光谱，会反映在“Data”选项卡和工作流中的下一个选项卡上。
3	Pretreat pane. 这是应用或删除所有光谱预处理的地方。


预处理按照选择的顺序进行，以实现顺序的灵活性。以下预处理可以应用于数据集：

- 点击 **Apply** 应用选定的预处理。
- 点击 **Remove** 以删除相关的预处理。

5.2.1 截短

您可以截短光谱的一个区域，以专注于光谱的特定区域。将作物光谱截短到选定的 x 轴区域。

截短光谱

1. 在“Pretreat”选项卡中，通过点击绘图并在该区域上绘制一个正方形，或点击 **Zoom** ，放大要关注的光谱区域。
2. 在预处理窗格中，选择 **Truncate**。
3. 通过输入 **Start X** 和 **End X** 值来修改要截短的区域。点击 **Apply**。

截短预处理现在列在预处理窗格中。一旦应用了截短，它就不再在预处理列表中可用。

4. 点击 **Save Dataset**。

要更改截短限制，请删除任何当前的截短预处理并重新应用。

5.2.2 平滑

平滑预处理应用基于 Savitzky Golay 的平滑操作。

平滑光谱

1. 在预处理窗格中，选择 **Smooth**。
2. 选择以下选项：
 - **Polynomial–Quadratic or Cubic.** 当特定平滑化窗口中的数据近似遵循抛物线趋势时，二次多项式可能是首选。三次多项式可用于拟合局部数据点。
 - **Window size.** 确定在平滑过程中考虑多少个相邻数据点。根据信号中的噪声水平和所需的平滑水平调整窗口大小。较大的窗口尺寸提供了更多的平滑，但也可能在信号中引入更多的滞后或失真，而较小的窗口尺寸捕获了更精细的细节，但可能对噪声敏感。
3. 点击 **Apply**。

平滑预处理现在列在预处理窗格中。一旦应用了平滑，它就不再在预处理列表中可用。

4. 点击 **Save Dataset**。

如需更改平滑设置，请删除任何当前的平滑预处理并重新应用。

5.2.3 应用基线校正

基线校正预处理使用滚球、皮尔逊或导数方法从光谱中去除背景噪声。不能应用两个不同的基线校正。

基线校正方法值的选择应基于光谱数据的具体特征和基线失真的性质。用不同的值进行实验，以找到最佳平衡，从而准确识别峰值，这样做可能有所帮助。

在选择皮尔逊基线校正时，基线滤波和拟合的值决定了基线校正的强度或程度。

- **Low Fit Values (0-2)**。这些值应用了温和的基线校正。如果基线相对稳定，并且您希望保留数据中的细微特征，这可能是有益的。然而，它可能无法充分消除所有基线失真，从而可能导致峰值识别的准确性降低。
- **Medium Fit Values (3-4)**。这些值在消除基线失真和保持峰值完整性之间取得了平衡。对于许多数据集来说，这通常是一个很好的起点，因为它可以在不过度扭曲数据的情况下改善峰值识别。
- **High Fit Values (5)**。这些值应用了强基线校正，这对于具有显著基线漂移或噪声的数据非常有用。然而，激进的校正可能会消除或扭曲较小的峰值，从而可能导致遗漏或不准确地识别峰值。

应用基线校正

1. 在预处理窗格中，选择 **Baseline Correction**。
2. 选择 **Method** 和相关设置：
 - **Derivative**。计算每个光谱的平滑 Savitzky-Golay 导数。
 - **Derivative**。第一或第二。
 - **Polyomial**。二次或三次。
 - **Window size**。确定在基线校正中考虑多少个相邻数据点。
 - **Pearson**。通过迭代去除四阶多项式来估计每个光谱的基线。这通过从原始光谱中减去多项式拟合来消除基线失真。
 - **Fit type**。多项式、Legendre 或 Hermite 拟合类型定义如下：
 - **Polynomial**。将多项式函数拟合到光谱数据中以对基线进行建模。
 - **Legendre**。使用勒让德多项式（一组正交多项式）来拟合基线。勒让德多项式可以在特定区间内最小化误差。
 - **Hermite**。使用厄米多项式，这是由涉及高斯分布的权重函数定义的正交多项式。当数据具有类高斯分布时，可以使用厄米多项式。
 - **Baseline filter (0 to 5)**。确定应用于光谱数据的基线校正程度。
 - **Fit (0 to 5)**。确定应用于光谱数据的拟合过程的强度。
 - **Rolling ball**。在光谱下滚动一个固定大小的圆，并平滑地从所有接触点上移开。
 - **Window size**。确定在平滑过程中考虑多少个相邻数据点。
3. 点击 **Apply**。

基线预处理现在列在预处理图块中。一旦应用了基线校正，它就不再在预处理列表中可用。
4. 点击 **Save Dataset**。

要更改基线校正设置，请删除任何当前的基线校正预处理并重新应用。

5.2.4 归一化

归一化预处理将光谱缩放到一个共同的范围。不能对光谱进行双重归一化。

归一化光谱

1. 在预处理窗格中，选择 **Baseline Correction**。
2. 选择 **Method** 和相关设置：
 - **SNV**。通过去除平均值并除以标准偏差，对每个光谱进行归一化。
 - **Range**。将光谱中的所有值归一化为 0 到 1 的范围。
3. 点击 **Apply**。
归一化预处理现在列在预处理图块中。一旦应用了归一化，它就不再在预处理列表中可用。
4. 点击 **Save Dataset**。

如需更改归一化设置，请删除任何当前的归一化预处理并重新应用。

5.2.5 减去

减去预处理从所有光谱中减去一个参考光谱。

减去光谱

1. 在预处理窗格中，选择 **Subtract**。
2. 在 **Spectrum** 列表中选择要减去的光谱。点击 **Apply**。
减去预处理现在列在预处理图块中。一旦应用了减去，它就不再在预处理列表中可用。
3. 点击 **Save Dataset**。

要更改减去设置，请删除任何当前的减去预处理并重新应用。

5.2.6 过滤强度

强度过滤器预处理排除了所选 y 轴最小和最大范围之外的光谱。例如，如果激光被阻挡或在一段时间内产生不可用的数据，此过滤器会很有帮助。

过滤强度

1. 在预处理窗格中，选择 **Intensity Filter**。
2. 在 **Minimum Y** 和 **Maximum Y** 字段中输入最小和最大强度范围。点击 **Apply**。
强度过滤器预处理现在列在预处理图块中。一旦应用了强度过滤器，它就不再在预处理列表中可用。
3. 点击 **Save Dataset**。

如需更改强度过滤器设置，请删除任何当前的强度过滤器预处理并重新应用。

5.3 峰值和区域


Peaks 和 **Regions** 选项卡可用于为数据集上的特定 x 轴范围添加计算。峰值和区域是模板的组成部分。更多信息参见 [创建模板](#) → 



图 29. Peaks 和 Regions 选项卡

图号	说明
1	Spectra plot. 显示预处理的光谱。光谱图块用于选择峰和区域位置。在此互动程序中，您只能通过绘制框或双击来放大或缩小。
2	Peak plots. 显示峰值分析结果。在此互动程序中，您可以在峰值分析（趋势）和模型图（回归结果）之间切换。
3	Region plots. 当应用区域分析时，显示多元曲线分辨率（MCR）或主成分分析（PCA）的结果。
4	◀Peak 和◀Region. 显示一个对话框，用于添加和定义新的峰值和区域。
5	Peak and Region lists. 列出已定义的峰值和区域。您可以在此互动程序中选择和编辑峰值和区域。
6	Data Field Trend plot. 数据字段趋势图允许您将峰值和区域结果与测量数据进行比较。 3D plot. 以 3D 格式显示光谱图。

5.3.1 添加峰值和区域

峰值/区域选择窗口显示了数据集中峰值和区域的视觉表示。

添加峰值

1. 在峰值/区域选项卡上，点击◀ **Peak**。

显示添加峰值弹窗。

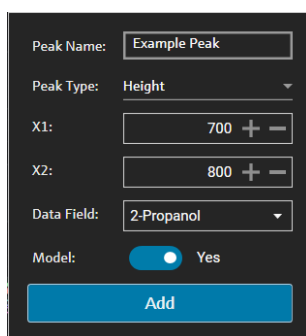


图 30. 添加峰值弹窗

2. 输入 **Peak Name**。这是峰值的显示名称。
3. 选择 **Peak Type**（高度、面积或中心）。当峰值因化学或物理变化而移动而不是增长或收缩时，中心峰值非常有用。

4. 输入 **X1** 和 **X2** 中的峰值范围。
5. (可选) 选择一个 **Data Field** 以映射到峰值。数据字段用于建模计算。
6. (可选) 如果在导出过程中为峰值创建了模型，则切换 **Model**。
7. 点击 **Add** 以创建新的峰值。
8. 点击 **Save Dataset**。

一旦添加了峰值，光谱图的突出显示区域就会显示出来。通过移动或拖动光谱图上峰值窗口的角部，可以移动、扩展或缩小峰值。

创建峰值后，在峰值图区域查看峰值分析趋势。您可以移动未使用的窗口来调整趋势图的大小，以获得更大的趋势视图。



图 31. 显示峰值和峰值分析的光谱图

添加区域

1. 在峰值/区域选项卡上，点击 **◀ Region**。
显示添加区域弹窗。


图 32. 显示添加峰值弹窗

2. 输入下列信息：
 - **Region Name** 字段是区域的显示名称。
 - **X1** 和 **X2** 字段是区域的范围。
 - **Calculation** 字段决定了对该区域进行哪种类型的计算（PCA 或 MCR）。
3. 点击 **Add** 创建新区域。

5.3.2 修改峰值和区域



在峰值分析中加入额外光谱

1. 选择 **Data** 或 **Pretreat** 选项卡。

- 在光谱网格中，滚动到要包含的光谱。
您可以按住 **shift** 键并滚动到最后一个光谱，以包含一个范围内的所有光谱。
- 在“Selected Spectra”框内点击 **Include**。
- 选择 **Peaks/Regions** 选项卡并点击 **Refresh Plot** 。
峰值趋势和光谱图中都包含了更多的光谱。
- 点击 **Save Dataset**。

从峰值分析中排除光谱

数据可以直接从趋势图中排除。这对于排除明显的异常值或实验没有变化时很有用。

- 通过在峰值分析图中的区域上点击并拖动来选择要排除的数据点。
点显示为粗体，排除按钮被激活。
- 点击 **Exclude Points** 。
- 在“Excluded Spectra”列表中点击“OK”。如果这些点是在多个峰值趋势上选择的，那么光谱名称可能会出现多次。
- 点击 **Refresh Plot** 。
峰值分析现在只显示未排除的数据。
- 点击 **Save Dataset**。

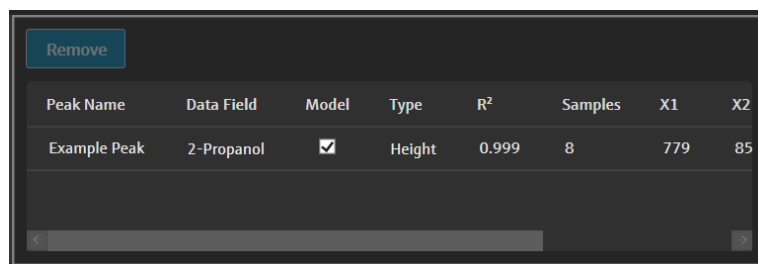
移动峰值和区域并调整其大小

通过点击并拖动夹点控制柄，可以移动峰值和区域并调整其大小。调整峰值或区域大小后，将重新计算分析。

修改或删除峰值或区域

在峰值和区域窗格的右侧，列出了峰值和区域。您可以在这些列表中查看和修改峰值或区域的属性。选择一个峰值或区域，然后点击 **Remove** 以删除所选峰值或区域。

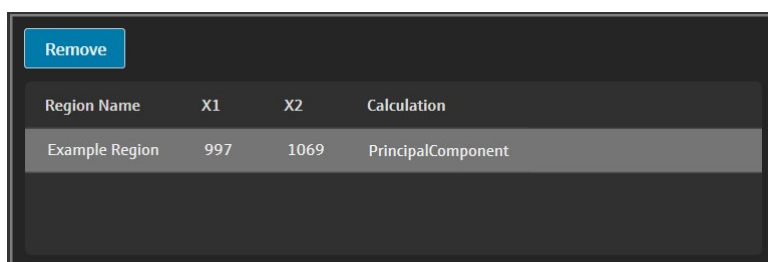
删除峰值或区域时，应删除或将使用从该峰值或区域生成的趋势的任何视图更新为新的峰值或区域。未能根据删除的峰值或区域更新或删除趋势视图会导致无法分析相关数据集。如果峰值或区域被删除，且相关视图未被更新或删除，则保存在面板上的视图的用户将无法登陆。



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

图 33. 峰值列表



Region Name	X1	X2	Calculation
Example Region	997	1069	PrincipalComponent

A0056049

图 34. 区域列表

5.3.3 查看峰值分析

“Peak Analysis”选项卡显示所有添加峰值的趋势图。峰值用自己的 y 轴添加。从峰值分析选项卡中，您可以：



- 点击 **Exclude Points**  以删除特定的数据点。
- 点击 **Refresh Plot**  以在修改数据点后刷新图形。



图 35. 峰值分析

5.3.4 查看模型图

“Model Plot”选项卡显示所选峰值的模型图。在模型图选项卡中，您可以：

- 点击 **Exclude Points**  以删除特定的数据点。
- 点击 **Refresh Plot**  以在修改数据点后刷新图形。当从“Data”选项卡中排除光谱或数据值时，使用 **Refresh Plot** 重新计算模型图。

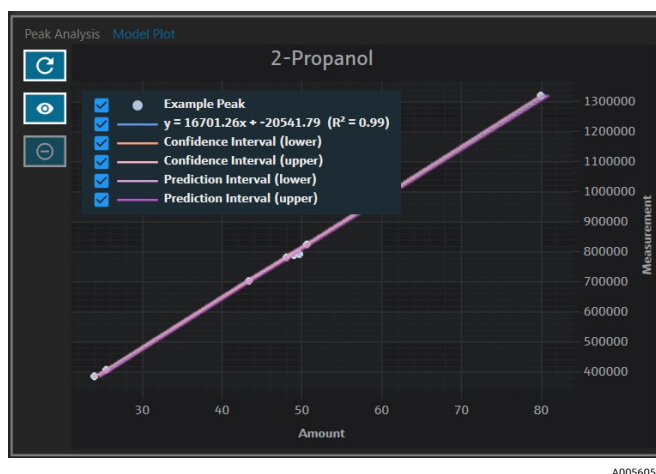


图 36. 模型图选项卡

5.4 创建面板视图：网格、趋势、光谱和 3D 图

“Views”选项卡用于为每个用例定义最相关的图。查看图表有很多选项，即使是简单的数据集。每个视图都可以作为视图集合的一部分添加到面板中。您可以创建首选的面板选项卡，在象限中显示一到四个图。

所有数据集都是使用两个预定义的视图创建的：光谱图和光谱网格。通过“Views”选项卡可以添加、修改和删除自定义视图。所选视图的预览显示在“Views”标签的右侧。

有 4 种视图类型：

- 趋势图
- 光谱数据图
- 光谱网格
- 3D 图

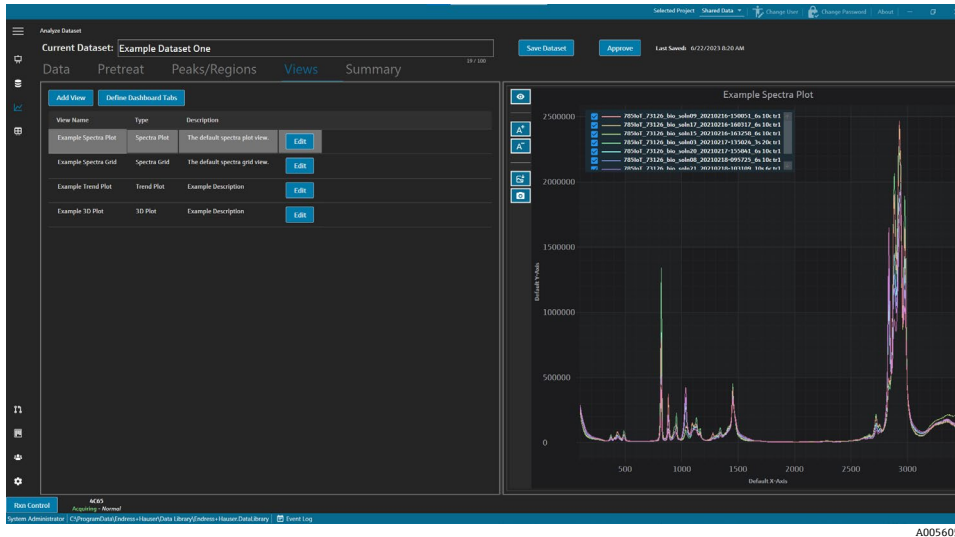


图 37. 视图选项卡

在“Views”选项卡中，您还可以点击 **Define Dashboard Tabs** 打开“Define Dashboard Tabs”窗口。参见 [定义一个面板](#) → 。

如需删除视图，请选择视图并点击 **Remove**。通过选择视图并按键盘上的“Delete”，可以删除视图（可选）。

5.4.1 创建或修改光谱图视图

光谱图视图可用于在可缩放图上查看数据集光谱。光谱图是为每个数据集生成的默认视图。

修改光谱图视图

1. 在视图选项卡，点击 **Add View**。
显示“View Definition”对话框。
2. 输入下列信息：
 - **Name**。视图的显示名称。
 - **Description**。视图的简要说明。
 - **View Type**。选择光谱图。
3. 选择以下选项：
 - **Use Pretreated data**。选择此选项可在视图中显示预处理的数据。如果未选中，原始（未预处理）数据将显示在视图中。
 - **Show latest spectrum only**。选择此选项仅显示具有最新结束日期时间的的光谱。如果未选中，则显示所有光谱。
4. 点击 **Close**。
5. 点击 **Save Dataset**。

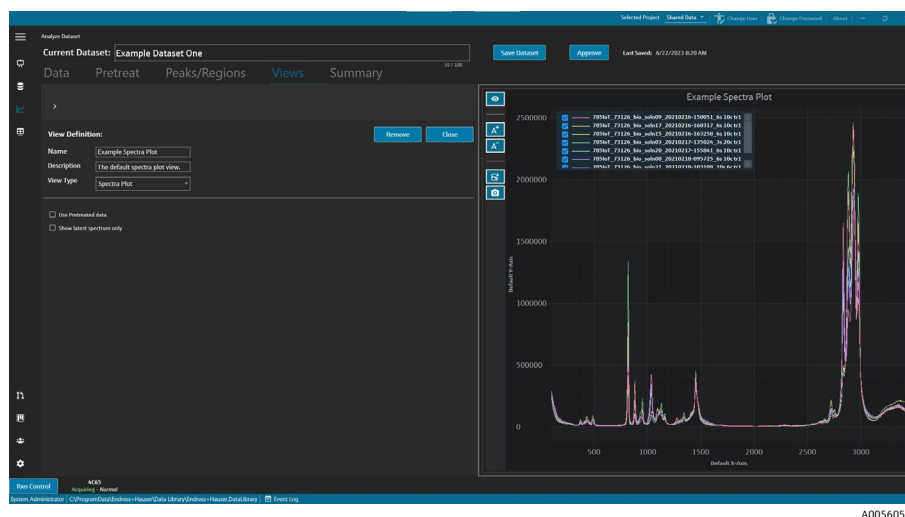


图 38. 光谱图视图

A0056052

5.4.2 修改光谱网格

光谱网格视图可用于以网格形式显示单个光谱。光谱网格是为每个数据集生成的默认视图。

修改光谱网格视图

- 在视图选项卡，点击 **Add View**。
显示“View Definition”对话框。
- 选择光谱网格并点击 **Edit**。
- 输入下列信息：
 - **Name**。视图的显示名称。
 - **Description**。视图的简要说明。
 - **View Type**。选择 **Spectra Grid**。
- 点击 **Close**。
- 点击 **Save Dataset**。

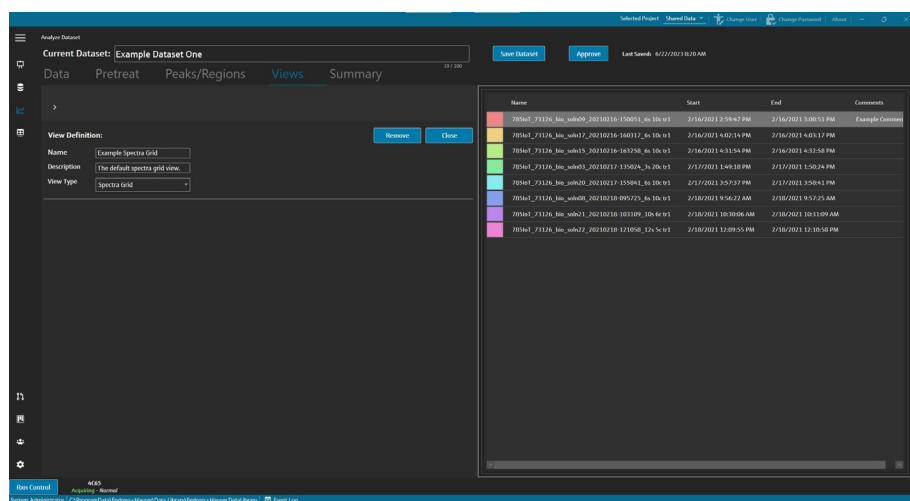


图 39. 光谱网格视图

A0056054

5.4.3 创建或修改趋势图视图

趋势图视图可用于查看数据集趋势。在趋势图视图中，x 轴表示光谱的相对采集时间。y 轴表示数据值、预测数据值或峰值度量。

您可以选择在视图中包含哪些数据字段和峰值。当为峰值中使用的数据字段选择 **Model** 时，预测值将显示在视图中。

创建和修改趋势图视图

1. 在视图选项卡，点击 **Add View**。
显示“View Definition”对话框。
2. 输入下列信息：
 - **Name**。视图的显示名称。
 - **Description**。视图的简要说明。
 - **View Type**。视图的类型。选择 **Trend Plot**。
3. 在 **Available data fields** 中，选择数据字段到图中。点击 **Include** ➤。
4. 在 **Available peaks** 中，选择峰值到图中。点击 **Include** ➤。
5. 点击 **Close**。
6. 点击 **Save Dataset**。

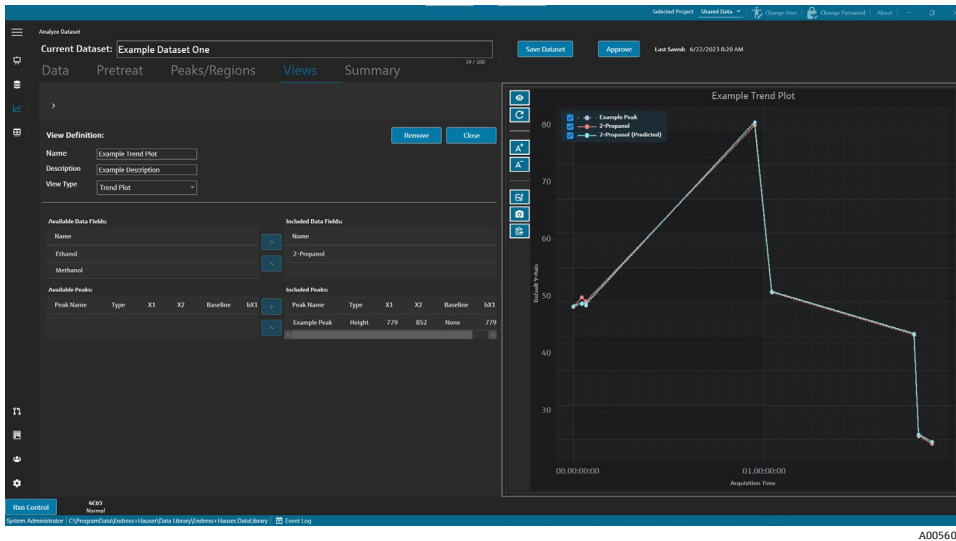


图 40. 趋势图视图

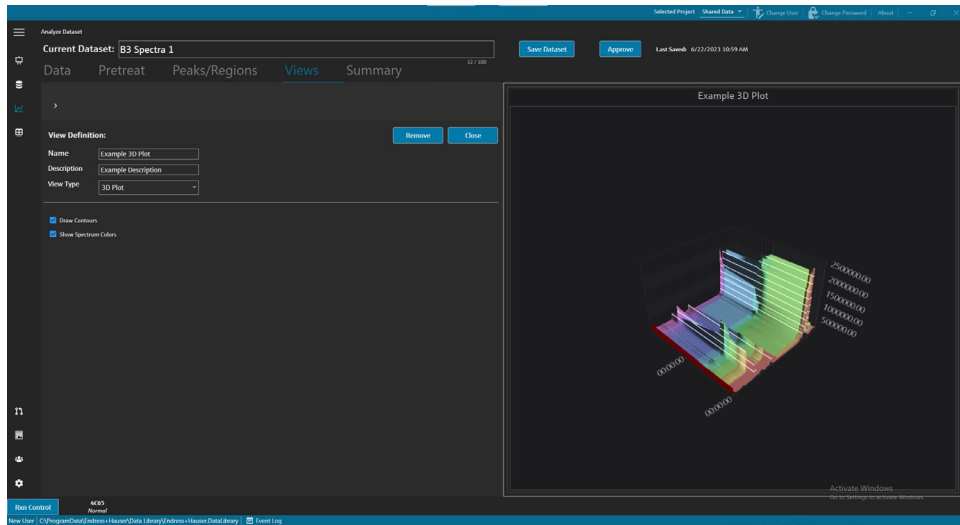
5.4.4 创建或修改 3D 图

3D 视图以具有 x、y 和 z 轴的图形显示光谱。该图可以提供关于光谱随时间变化或添加或删除变量时的差异的额外信息。

修改 3D 图视图

1. 在视图选项卡，点击 **Add View**。
显示“View Definition”对话框。
2. 输入下列信息：
 - **Name**。视图的显示名称。
 - **Description**。视图的简要说明。
 - **View Type**。选择 **3D 图**。
3. 将图调整到所需的视图：
 - **Draw Contours**。沿波长绘制轮廓线以突出光谱差异。
 - **Show Spectrum Colors**。打开或关闭光谱颜色，以突出显示光谱随时间的变化。
 - **Change angle of x, y, and z axes**。通过点击图并拖动到所需位置，可以调整视角。
 - **Zoom in or out**。鼠标滚轮可放大和缩小图。
4. 点击 **Close**。

5. 点击 **Save Dataset**。








A0056055

图 41. 3D 图视图


5.4.5 添加临时注释

在“Views”选项卡中，可以创建临时注释，包括突出显示的区域、标签、线条和箭头。然后，您可以将注释与视图一起保存，以便以后参考或共享。

在“Views”选项卡中，您可以：

导览项目	导览
 A0056085	Add Temporary Annotation. 向视图添加临时注释。
 A0056086	Save Image File. 保存带有注释的视图。
 A0056087	Copy Image to Clipboard. 将带有注释的当前视图复制到剪贴板。
 A0055992	Copy Plot Data to Clipboard. 将当前趋势图数据复制到剪贴板。
 A0055993	Remove Temporary Annotation. 从视图中删除临时注释。

创建临时注释

- 从“Views”选项卡中，选择要注释的视图。
- 点击 **Add Temporary Annotation** 。
- 选择 **Annotation type**:
 - **Line**。在视图上放置一条线。
 - **Line arrow**。在视图上放置一个箭头。
 - **Text**。在视图上放置文本。
 - **Box**。在视图上放置一个突出显示的框。
 - **Horizontal line**。在视图上放置一条水平线。
 - **Vertical line**。在视图上放置一条垂直线。
 - **Axis Marker**。在视图上放置一个轴线标记。

4. 点击 **Add Temporary Annotation**，然后点击视图以放置标记。
5. 通过执行以下操作之一保存视图：
 - 点击 **Save Image File** ，保存带有注释的视图。
 - 点击 **Copy Image to Clipboard** 。
 - 点击 **Copy Plot Data to Clipboard** 。
6. 点击 **Save Dataset**。

5.4.6 定义一个面板

在“Views”选项卡中，您可以定义和保存面板。为此，您必须首先创建前几节中概述的视图。默认情况下，“Views”选项卡包含每个数据集的“Spectra Plot”和“Spectra Grid”视图。

定义一个面板

1. 在视图选项卡中，点击 **Define Dashboard Tabs**。
显示当前数据集的默认选项卡，显示光谱图和光谱网格。
2. 点击 **Add New Tab**。
显示添加新选项卡弹窗。
3. 选择需要显示的视图数：
 - 单视图选项卡
 - 两视图选项卡
 - 三视图选项卡
 - 四视图选项卡
 显示一个新面板。

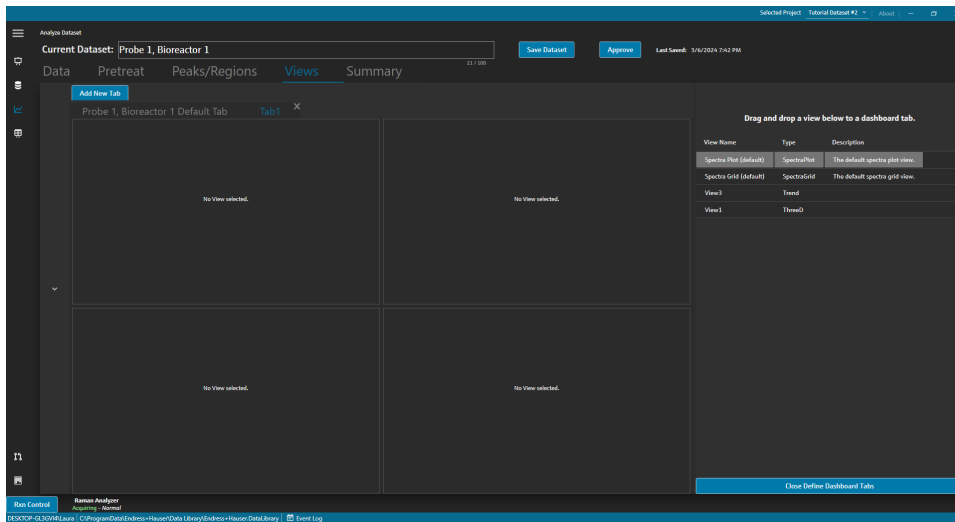
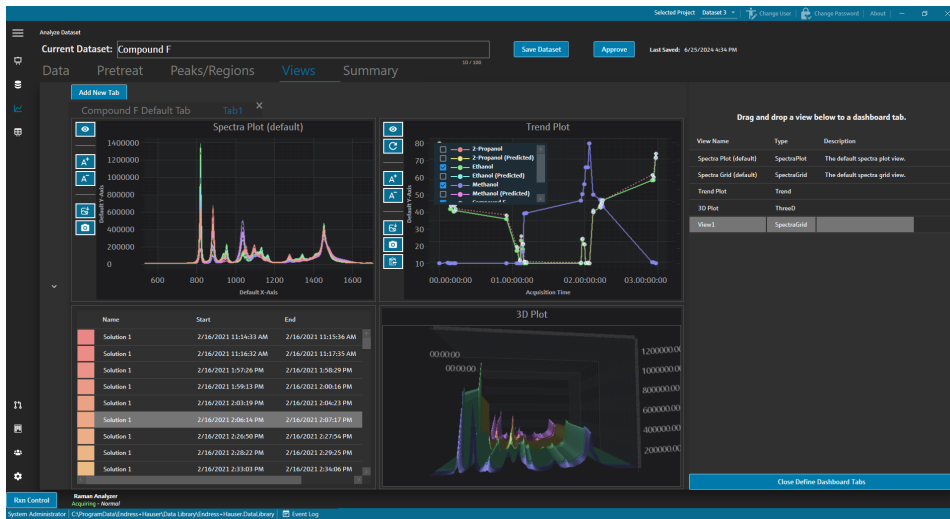


图 42. 定义一个新面板

4. 将右侧列表中的所需视图拖放到面板的所需区域。



A0056056

图 43. 在新面板上选择视图

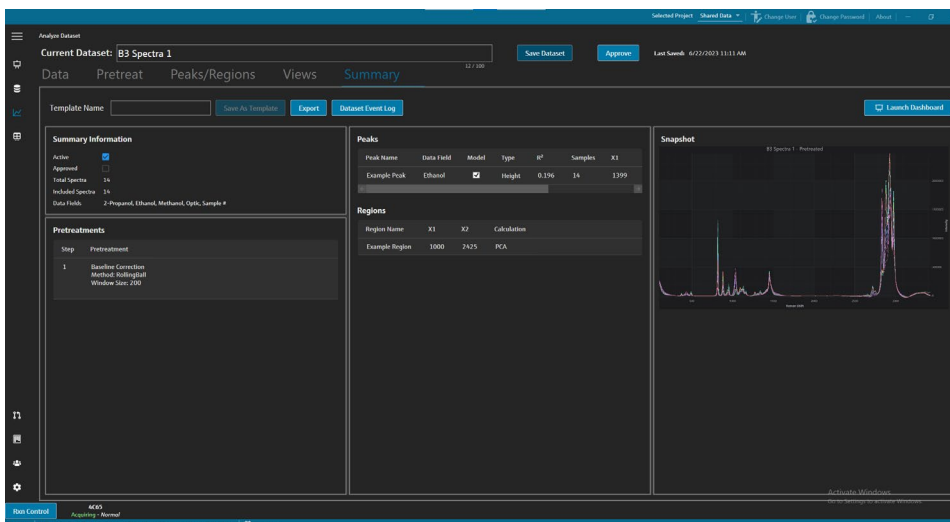
5. 双击选项卡名称并根据需要重命名面板。
6. 点击 **Save Dataset**。
7. 点击 **Close Define Dashboard Tabs**。

5.5 摘要

数据集在 **Summary** 选项卡中进行汇总和分析。**Summary** 选项卡也是保存模板、导出 Raman data library 模型文件以及导出数据集进行外部建模的地方。

在 **Summary** 选项卡中，您可以：

- **查看摘要信息**（关于数据集）。摘要信息表示数据集的状态、批准状态、包含的总光谱和适用的数据字段。还显示了预处理、峰值、区域和图的快照。
- **Export the dataset**。点击 **Export**，导出当前数据集。更多信息参见 [导出数据、数据集和模型](#) → 。
- **Launch dashboard tabs**。点击 **Launch Dashboard**，将数据集面板的副本添加到面板窗口。面板在“**Views**”选项卡中定义。参见 [创建面板视图：网格、趋势、光谱和 3D 图](#) → 。
- 从数据集创建模板。更多信息参见 [创建模板](#) → 。
- 查看与数据集相关的事件。点击 **Dataset Event Log**，查看当前数据集的事件日志。



A0056057

图 44. 摘要选项卡

5.5.1 创建模板

当数据集的组件可以在其他数据集中重用时，模板简化了数据集的创建。模板存储所有预处理、分析和视图设置，可以应用于新的数据集。模板包含以下内容：

- 显示的数据字段
- 预处理
- 峰值
- 区域
- 视图
- 面板选项卡

模板不包含光谱数据。

创建新数据集时，可以在“Create Dataset”窗口或“Rxn Control”窗口上选择保存的模板。如果在数据集创建过程中选择了模板，则模板的所有组件都将添加到新数据集中。


从当前数据集创建模板

1. 选择 **Summary** 选项卡。
2. 在 **Template Name** 字段输入一个名称。
3. 点击 **Save As Template**。
4. 点击 **OK**。

5.5.2 应用模板

创建新数据集时，可以应用模板。

应用模板

1. 从“Datasets”窗口，点击 **Create New Dataset**。
2. 命名数据集，导入相应的光谱，然后点击 **Include >**。
3. 在 **Template** 字段，从列表中选择模板。
4. 点击 **Create**。如果系统提示您保存未保存的数据集，请点击“OK”。

完成后，Raman data library 将沿 workflow 移动到“Analyze Dataset”窗口。

5.5.3 导出数据、数据集和模型

导出窗格用于将 Raman data library 数据集导出到外部和内部软件系统。Raman data library 导出文件 (.dlxport) 可用于将数据集从 Raman data library 的一个实例移动到另一个实例。如需导出到外部软件系统，数据集必须经过批准。

导出数据、数据集或模板

1. 从 **Datasets** 窗口，点击 **Export**。
显示导出菜单。

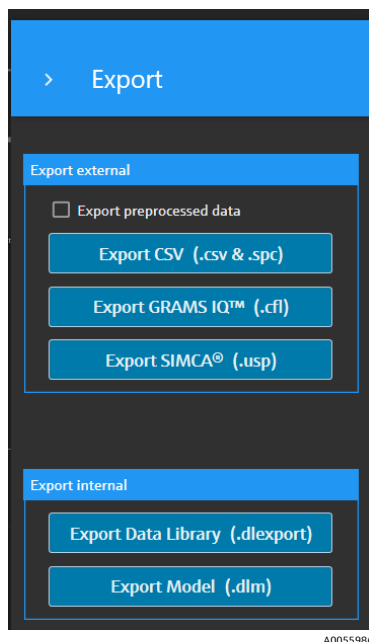


图 45. 导出菜单

2. 选择以下选项:

- **Export preprocessed data**。选中后，数据将在不进行预处理的情况下导出。
- **Export CSV**。将数据集导出为逗号分隔值文件 (.csv)，其中包含所有包含的数据字段的光谱名称和数据值。还导出一个压缩文件夹，其中包含 SPC (.SPC) 格式的光谱。
- **Export GRAMS IQ™**。将数据集导出为 GRAMS IQ™ (.cfl) 文件。还以 SPC (.SPC) 格式导出包含的光谱。需要在与 Raman data library 相同的计算机上安装有效的 GRAMS IQ™，才能导出为 GRAMS IQ™ (.cfl) 文件。
- **Export SIMCA®**。将数据集导出为 SIMCA® (.usp) 文件。需要在与 Raman data library 相同的计算机上安装有效的 SIMCA®，才能导出为 SIMCA® (.usp) 文件。
- **Export Data Library**。将数据集导出为 Raman data library (.dllexport) 文件。此文件类型可以在“Datasets”窗口中导入。
- **Export Model**。导出使用数据集的预处理和峰值创建的模型文件 (.dlm)。可以使用“Raman data library Rxn Control”窗口将此文件导出到 Raman RunTime。模型文件可用于在 RunTime 中生成组件进程值。

3. 导航到文件夹位置并命名数据文件。

4. 为当前数据集选择 **Mark Inactive** 或 **Keep Active**。

6 Rxn 拉曼光谱分析仪控制

Rxn Control 用于管理 Raman RunTime Rxn 分析仪进行 Raman 光谱收集和建模，旨在模拟 Raman RunTime 用户界面。如需访问“Raman Analyzer”窗口，必须创建 OPC 光谱源连接。具体说明参见添加 OPC 光谱数据源 → 。

注意

有关 Rxn 拉曼光谱分析仪和 Raman RunTime 软件的安全操作信息，请查看 *Raman RunTime 《操作手册》* (BA02180C)。

- ▶ 根据您使用的 Raman RunTime 版本，在使用 Raman data library Rxn Control 之前，请阅读相应的 *Raman RunTime 《操作手册》*。



图 46. Rxn Control 按钮

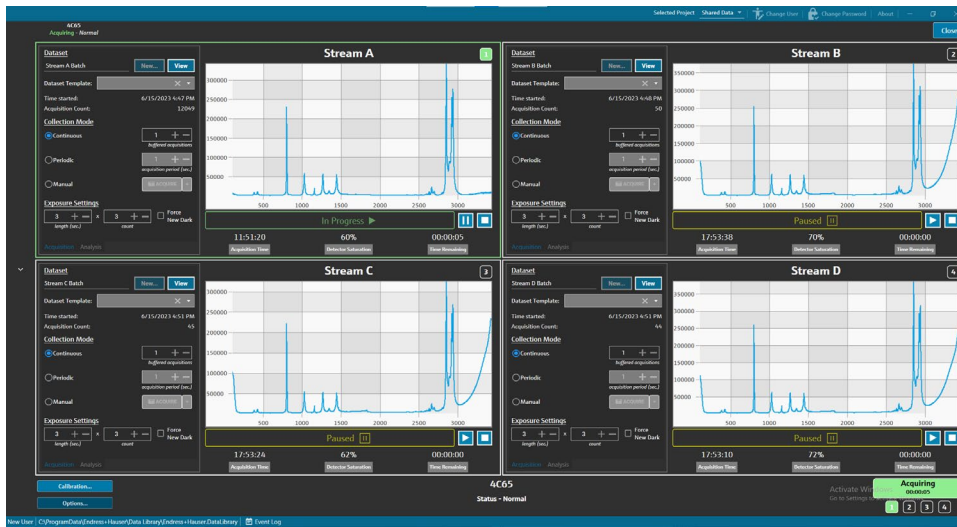


图 47. Raman Analyzer 窗口

Rxn Control 按钮仅在 Rxn 拉曼光谱分析仪连接到 Raman data library 时出现。如需连接分析仪，参见添加 OPC 光谱数据源 → 的说明。

6.1 分析仪选项

点击 Raman 分析仪窗口底部的 Options 即可访问 Analyzer Options 菜单。

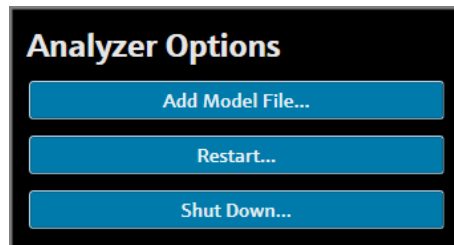


图 48. Rxn 分析仪选项

6.1.1 添加模型文件

添加模型文件：

1. 从 Rxn Control 窗口，点击 Options。
出现分析仪选项对话框。

2. 点击 **Add Model File**，选择要发送到 Raman RunTime 的模型文件。

添加的模型文件可用于分析。通过点击探测窗口上的 **Analysis** 选项卡可以启用或禁用它们。有效的文件类型包括: .usp、.rusp、.dlm、.pxm、.pxs、.cal、.mat 和 .unusb 文件。有关 Raman RunTime 支持的型号类型的详细信息，请参阅 *Raman RunTime 《操作手册》* (BA02180)。

重启或关闭分析仪的说明，参见 *重启或关闭分析仪* →

6.2 通道控制

Rxn 拉曼光谱分析仪在“Rxn Control”窗口中最多可以有 4 个探头或测量通道。每个通道在“Raman Analyzer”窗口上都有一个控制窗格。使用通道窗格选择和查看数据集、设置采集模式、设置曝光设置等。

每个通道窗格都包含反映 Raman RunTime 操作的设置。有关通道窗格中功能的完整说明，请参阅 *Raman RunTime 《操作手册》* (BA02180)。

6.2.1 通道数据采集

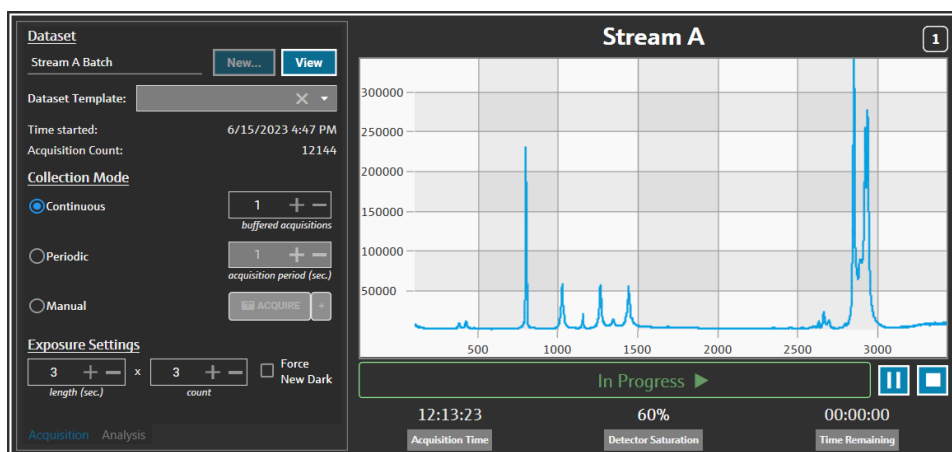
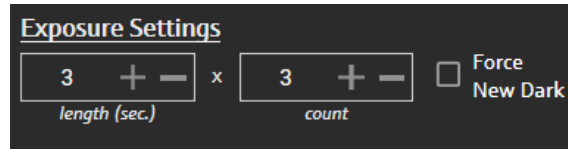


图 49. 通道控制窗格

从通道 **Acquisition** 选项卡，选择：

- **New**。创建一个新的命名数据集。
- **View**。在“Dashboard”窗口上启动当前数据集。
- **Dataset template**。选择要应用于新数据集的模板。在开始批处理之前，必须选择模板。
- **Time Started**。自当前数据集启动以来经过的时间（秒）。
- **Acquisition Count**。当前数据集的采集次数。
- **Collection Modes**。通过选择以下三个选项之一，可以更改探头采集模式：
 - **Continuous**。连续采集模式尽可能快地循环通过每个活动探头。建议在收集频繁的参考样本时进行方法开发，并在模型处于活动状态时进行监测和控制。连续模式包括缓冲采集选项。
 - **Periodic**。周期性收集模式以指定的间隔采集光谱，通常在方法开发过程中使用，以使光谱与从反应器或其他定时过程事件中提取的样本同步。在定期模式下，缓冲采集不是一种选择。
 - **Manual**。使用手动采集模式采集由 **Acquire** 按钮手动触发的光谱。通过点击+，可以为每个光谱指定样本名称。
- **Exposure Settings**。通过点击+和-或用键盘手动键入值，可以更改长度（秒）和计数的曝光设置。选择 **Force New Dark**，在每次采集后强制进行新的暗曝光。

收集新的暗曝光可以减轻由于暗电流导致的测量中的非样本贡献。有关 Force New Dark 的更多信息，请参阅 *Raman RunTime 《操作手册》* (BA02180)。

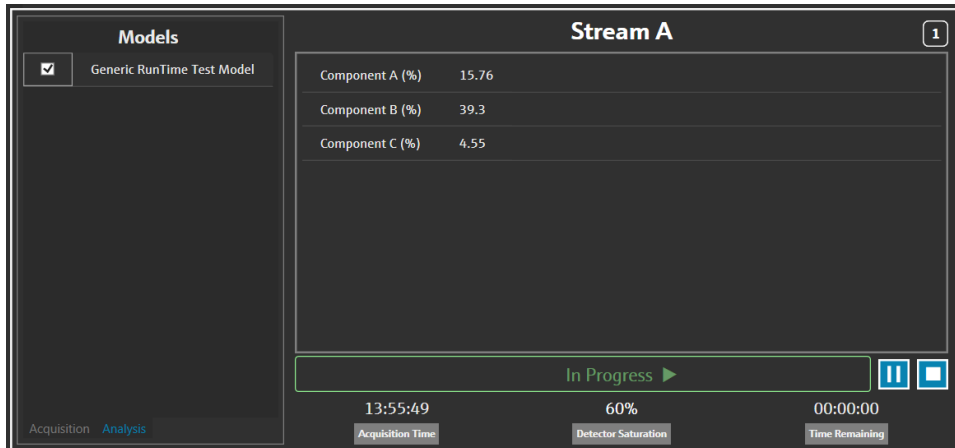


A0056075

图 50. 曝光设置

6.2.2 在通道分析选项卡上应用模型

通道 **Analysis** 选项卡使您能够在 Raman RunTime 中选择和应用模型，以在数据集采集期间接收模型预测。



A0056076

图 51. 通道控制分析选项卡

如需选择模型，请检查模型文件名。显示以下信息：

- 预测值显示在“Analysis”选项卡上。
- Raman RunTime 模型预测结果显示在“Analyze”窗口的方括号中，例如[8.14]。

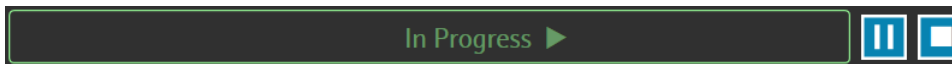
6.2.3 采集光谱数据

如需开始数据集采集，点击 **Play** ▶。数据集采集开始后，播放按钮变为暂停按钮。

点击 **Stop** ◻，停止数据集采集。

6.2.4 通道状态栏

信道状态栏显示在光谱图下方。通道的状态可以是“Not Started”、“In Process”、“Paused”或“Completed”。



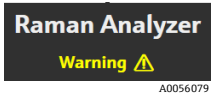
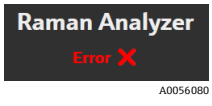
A0056077

图 52. 通道状态栏

6.2.5 分析仪状态和操作指示符

分析器状态指示符显示在“Rxn Control”窗口的底部中心。分析器有三种状态：正常、警告和错误。

状态	说明
<p>Raman Analyzer Status - Normal A0056078</p>	状态正常。

状态	说明
	如果遇到系统警告，显示屏将变为黄色警告。应确认警告，但无需立即采取措施。点击状态按钮，查看警告的详细信息。
	如果出现系统错误，显示变为一个红色错误。错误需要立即采取行动。点击状态按钮，查看警告的详细信息。

有关系统警告和错误的完整列表，请参阅 *Raman RunTime 《操作手册》* (BA02180)。

6.2.6 分析仪操作指示符

分析仪操作指示符显示在“Rxn Control”窗口的右下角。指示符显示当前正在执行的操作。如果操作是特定于通道的，则受影响的频道号会闪烁。在紧急情况下，指示符中的红色停止按钮会取消当前正在进行的校准或验证过程。



图 53. 采集光谱



图 54. 暂停或等待用户输入

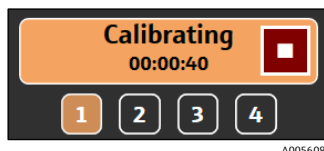


图 55. 校准 (探头或内部)



图 56. 验证探头

6.3 Rxn 拉曼光谱分析仪校准和验证

通过 Raman data library 进行 Rxn 拉曼光谱分析仪控制，不允许在不通过内部和探头校准的情况下收集光谱。光谱采集前需要完成所有校准。验证为可选操作，但建议执行。

有关校准或验证 Rxn 拉曼光谱分析仪或探头的完整说明，请参阅适用的探头校准套件说明和 *Raman RunTime* 《操作手册》（BA02180）。

执行 Rxn 分析仪校准和验证：

1. 从 **Raman Analyzer** 窗口，点击 **Calibration**。
校准对话框打开。
2. 选择内部校准选项：
 - **Calibration Mode**。内部校准的校准模式（自动、X 轴或全部）。
 - **Laser Power**。激光功率的单位为 mW。
 - 点击 **Calibrate**，执行内部校准。

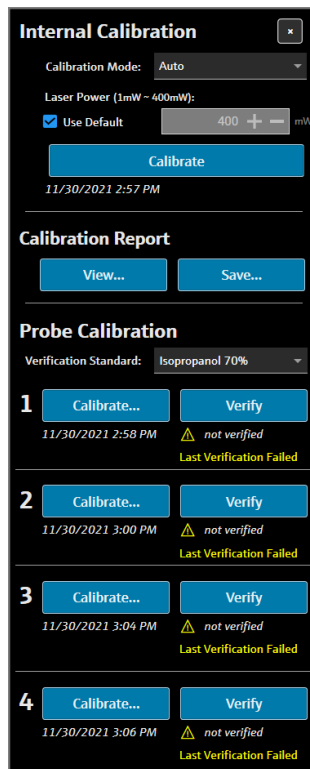
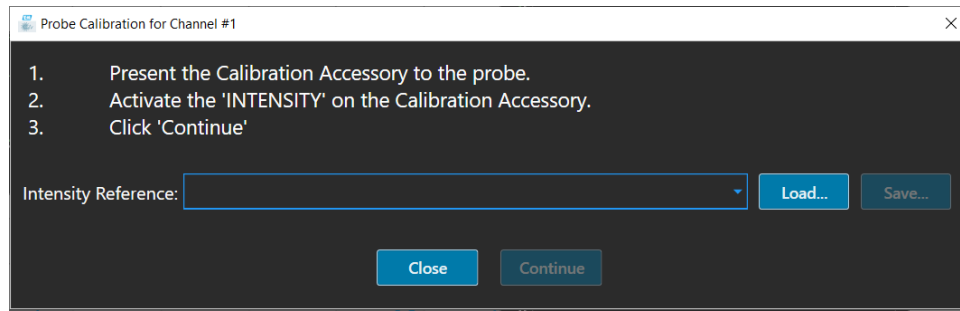


图 57. 校准对话框

3. 选择校准报告选项：
 - 点击 **View**，查看校准文件（.pdf）。
 - 点击 **Save**，保存校准文件（.pdf）副本。
4. 选择探头校准和验证选项：
 - **Verification Standard**。用于验证探头校准结果的标准参考样品。虽然收集 Raman 光谱不需要这一步，但强烈建议这样做。
 - 点击一个通道下的 **Calibrate**，执行打开探头校准窗口。按照校准说明，点击 **Load** 以选择用于探头校准的强度参考文件。点击 **Save**，保存所选强度参考文件的副本。

目前不支持通过 Raman data library Rxn 分析仪控制接口使用基于校准参考标准（CRS）的源光谱文件的 Raman 校准和验证套件。



A0056061

图 58. 探头校准窗口, HCA

- 点击 **Continue** 以开始探头校准。探头校准完成后，校准日期/时间会更新。
 - 点击 **Verify**，以验证探头校准结果。
5. 对每个分析仪和探头重复上述步骤。
 6. 校准和验证完成后，关闭校准对话框。

7 符合 FDA 21 CFR Part 11 法规要求

Raman data library 的 cGxP 版本增加了符合 FDA 21 CFR 第 11 部分的功能。这些功能支持《美国联邦法规》第 21 篇第 11 部分要求的集中实施，从而实现受控的流程设置。Raman data library 的 cGxP 版本包括对以下内容的支持：

- 用户管理
- 电子记录和电子签名
- 管理系统设置
- 审计跟踪（变更控制功能）
- 包括用户操作可追溯性和光谱数据可追溯性的事件日志

为了支持 Raman data library cGxP 的 21 CFR 第 11 部分实施，Endress+Hauser 提供了一份专用文件，Raman data library 21 CFR 第一部分问卷（部件号：4005768），该文件与 Raman data library 的 cGxP 版本一起交付。

7.1 用户管理

在《美国联邦法规》第 21 篇第 11 部分中，用户管理涉及一套控制和程序，以确保安全和受监管地访问电子记录和电子签名。Raman data library 的核心版本和 cGxP 版本之间的主要区别之一是用户管理。为了支持此 Raman data library, cGxP 集成了用户管理，其凭据身份验证本质上可以是本地的，即通过软件本身、通过本地 Windows 工作站登陆或通过连接到 Active Directory 域。

当使用本地身份验证模式时，支持强制密码复杂性方面的能力，以及在设定数量的登陆失败和自动超时后的锁定。如果使用基于域的凭据身份验证，则除软件超时之外的所有这些方面都由域控制。

本机部署了唯一的用户标识和访问控制。用户访问权限可以通过设置和控制用户角色进行配置。还可以禁用帐户并在下次登陆时强制更改密码。以事件日志的形式存在用户特定的审计跟踪。

Raman data library 中的用户管理以一种有助于确保电子记录安全、访问受控、所有用户操作可追溯的方式实施，支持受监管行业数据的可靠性和完整性。


有关管理用户的详细信息，请参阅 *用户管理（仅针对 cGxP 版本）* → 

7.2 电子记录和电子签名

电子记录和电子签名是《美国联邦法规》第 21 篇第 11 部分的基本组成部分，在法规所建立的标准下，这些都被认为是可信且可靠的，与纸质记录和手写签名效力相当。Raman data library 中的电子签名与个人用户及其凭据相关联，使其具有法律约束力且不可撤销。

为了帮助现场实施《美国联邦法规》第 21 篇第 11 部分 Raman data library，特别是在电子记录和电子签名方面，Endress+Hauser 提供有一份专用文件，即《美国联邦法典》第 21 章第 11 部分 ER/ES 评估 (p/n.4005770)，该文件随软件的 cGxP 变体一起交付。

7.3 管理系统设置

Raman data library 中的系统设置涉及安全方面，这些方面在帮助实现《美国联邦法规》第 21 篇第 11 部分合规性方面发挥着关键作用。系统设置在“Security”窗口中管理。有关管理安全设置的详细信息，请参阅 *安全设置（仅 cGxP 版本）* → 

7.4 通过变更控制功能进行审计跟踪

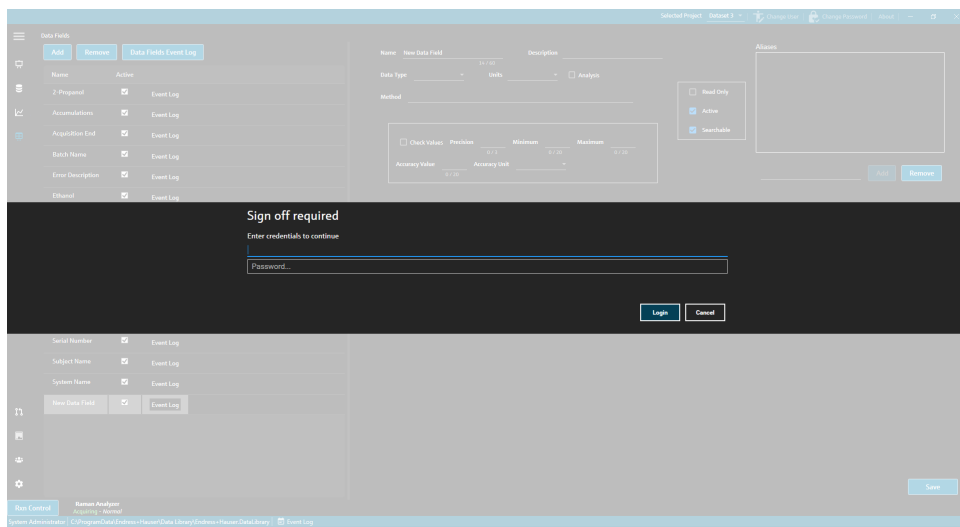
审计跟踪是《美国联邦法规》第 21 篇第 11 部分合规性的关键组成部分，确保对电子记录、系统或流程的任何更改都得到妥善管理和记录。

在 Raman data library 的 cGxP 版本中，作为用户管理的一个连接，实现了变更控制功能。这确保了所有变更都记录在案，包括变更原因、日期和时间，以及负责制定和批准变更的个人。在各种可用的事件日志中跟踪和记录更改的审计跟踪。此外，变更控制功能确保只有具有适当授权的人才能进行任何更新或修改。

某些操作，如删除或取消批准数据集以及添加、编辑或删除数据字段、删除项目或光谱源，需要用户在执行操作之前签字。在适当的情况下，用户需要使用他们的凭据注销，并选择更改的原因，并为任何相关评论留出空白。

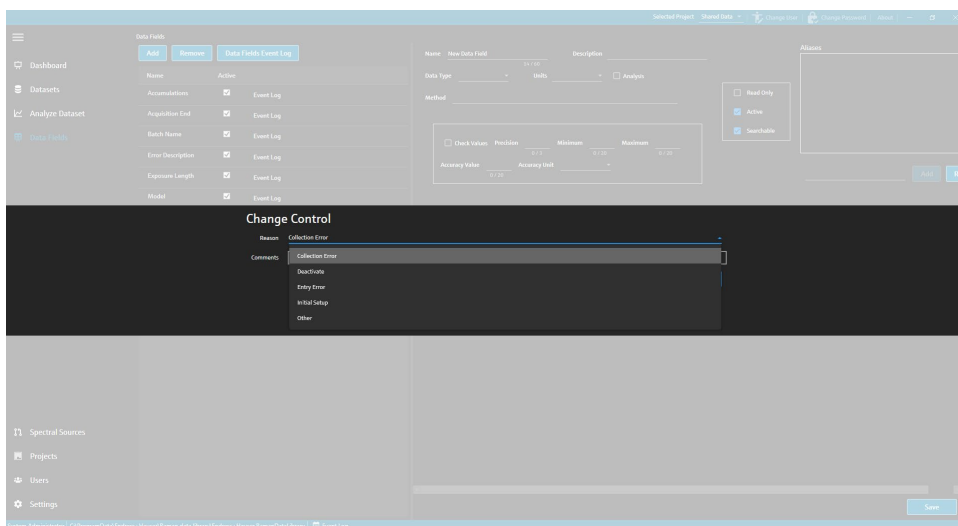
变更控制的默认原因有：

- 收集错误
- 关闭
- 输入错误
- 初始设置
- 其他



A0056145

图 59. 变更控制—需要用户签名



A0056146

图 60. 变更控制—提供变更说明和原因

这些变更控制措施有助于维护电子记录和系统的完整性、可靠性和合规性，并有助于质量团队的审批和审计流程。

7.5 使用事件日志

为了确保 cGxP 环境中所有事件的可追溯性和记录，Raman data library 具有包括基本审计跟踪的事件日志。这些范围从全局（所有操作）到用户或特定功能的事件日志。事件日志和审计跟踪是 21 CFR 第 11 部分合规性的重要组成部分，可确保电子记录的完整性和可追溯性。

用户可以在 Raman data library 中查看各种事件日志，包括：

- **Global event log。** 此事件日志可以从 Raman data library 中的所有屏幕访问，位于应用程序窗口的底部任务栏中。
- **User event logs。** 显示所有用户或特定用户的事件。这可以从用户屏幕访问。
- **Project and dataset event logs。** 显示所有项目或特定项目的事件，并列出与数据集相关的事件。这些日志可以从项目屏幕和数据集摘要屏幕访问。
- **Spectral source event logs。** 显示特定光谱源或所有光谱源的事件日志。
- **Data field event logs。** 显示特定数据字段或所有数据字段的事件日志。

事件日志可以以易于查看、不可修改和专有的文档格式查看和打印。支持在日志中搜索文本。在打开另一个事件日志之前，必须关闭当前事件日志。仅出于查看目的，事件日志可以保存为*.pdf、*.xlsx 和*.docx。

7.5.1 全局事件日志

全局事件日志显示 Raman data library 实现上的所有事件。由于记录信息的广度，加载全局事件日志可能需要一些时间。

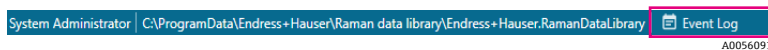


图 61. 全局事件日志按钮

7.5.2 用户事件日志

在“Users”窗口中，您可以查看列出与特定用户或所有用户相关的事件的事件日志。此日志收集对用户的所有更改，包括添加或删除用户、添加或删除角色、用户登陆和失败的登陆尝试。在“Users”窗口中，您可以选择以下事件日志：

- **Users Event Log。** 显示所有用户的事件日志。
- **Event Log。** 显示指定用户的事件日志。

Event Date	Category	Login Name	Reason	Comments	Description
5/31/2024 1:16:17 PM	Users				User 'System' signed in.
5/31/2024 1:22:45 PM	Users				User 'System' signed in.
5/31/2024 1:24:17 PM	Users				User 'System' signed in.
5/31/2024 1:24:50 PM	Users	DESKTOP-GL3GV14Laura			User 'Administrator' signed in.
5/31/2024 1:25:04 PM	Users	Administrator			User 'Administrator' password changed.
5/31/2024 1:26:29 PM	Users	Administrator			User 'Administrator' signed in.
5/31/2024 1:26:29 PM	Users	Administrator			User 'Angela' added.
5/31/2024 1:26:29 PM	Users	Administrator			User 'Angela' password set by User 'Administrator'.
5/31/2024 1:35:31 PM	Users	DESKTOP-GL3GV14Laura			User 'Administrator' signed in.

图 62. 用户事件日志

7.5.3 项目和数据集事件日志

在“Project”窗口中，您可以查看列出与项目相关的事件的事件日志，例如添加或删除数据集。在“Projects”窗口中，您可以选择：

- **Projects Event Log。** 查看所有项目的事件日志。

- **Event Log。** 查看一个特定项目的事件日志。

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

图 63. 项目事件日志

7.5.4 光谱数据源事件日志

在“Spectral Sources”窗口中，您可以查看事件日志，其中列出了与特定光谱源或所有光谱源相关的事件。此日志记录了光谱源的所有更改，例如添加新的光谱源、启动或停止 Rxn 拉曼光谱分析仪上的采集，或更改“Raman Analyzer”窗口中的批量采集设置。在“Spectral Sources”窗口中，您可以选择：

- **Spectral Sources Event Log。** 查看所有光谱源的事件日志。
- **Event Log。** 查看一个特定光谱源的事件日志。

Event Date	Category	Login Name	Reason	Comments	Description
5/31/2024 1:34:02 PM	Spectral Sources	Administrator			Spectral Source 'Runtime 6.5' added.
5/31/2024 1:50:04 PM	Rxn Control	DESKTOP-GL3GV14Laura			The laser power was set to 400 on analyzer 'Raman Analyzer'.
5/31/2024 1:50:49 PM	Spectral Sources	Administrator			Spectral Source 'Runtime 6.5' updated. Differences: 'EncryptedPassword' changed.
5/31/2024 2:26:04 PM	Rxn Control	DESKTOP-GL3GV14Laura			The laser power was set to 400 on analyzer 'Raman Analyzer'.
5/31/2024 3:03:06 PM	Spectral Sources	Administrator			Spectral Source 'Bioreactor 1-2' added.
6/3/2024 5:16:42 PM	Rxn Control	DESKTOP-GL3GV14Laura			The laser power was set to 400 on analyzer 'Raman Analyzer'.
6/3/2024 5:48:49 PM	Rxn Control	DESKTOP-GL3GV14Laura			The laser power was set to 400 on analyzer 'Raman Analyzer'.
6/3/2024 5:54:17 PM	Rxn Control	DESKTOP-GL3GV14Laura			The laser power was set to 400 on analyzer 'Raman Analyzer'.
6/3/2024 7:16:22 PM	Spectral Sources	Administrator			Spectral Source 'Runtime 6.5' updated. Differences: 'EncryptedPassword' changed.
6/6/2024 6:42:46 PM	Rxn Control	DESKTOP-GL3GV14Laura			The laser power was set to 400 on analyzer 'Raman Analyzer'.

A0056149

图 64. 光谱源事件日志

7.5.5 数据字段事件日志

在“Data Fields”窗口中，您可以查看列出与特定数据字段或所有数据字段相关的操作的事件日志。此日志收集对数据字段的所有更改，包括添加新字段、删除字段或添加别名。在“Data Fields”窗口中，您可以选择：

- **Data Fields Event Log。** 查看所有数据字段的事件日志。
- **Event Log。** 查看一个特定数据字段的事件日志。

Reports

1 of 1

100%

Find | Next

Data Fields - Event Log

Software Version 2.0.2

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

A0056150

图 65. 数据字段事件日志

8 诊断和故障排除

8.1 重启或关闭分析仪

开启或关闭分析仪：

1. 从 **Raman Analyzer** 窗口，点击 **Options**。
出现分析仪选项对话框。

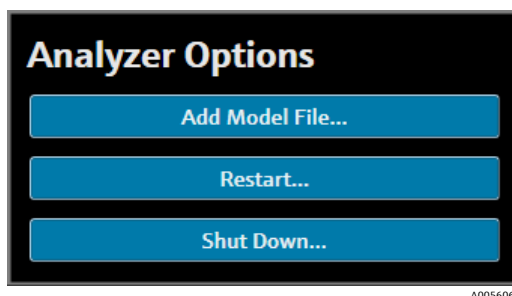


图 66. 分析仪选项

2. 选择以下条目之一：
 - 点击 **Restart** 以重启分析仪：
 - 点击 **Shut Down** 以关闭分析仪。
3. 点击确认对话框中的 **OK**。

关闭或重置 Raman RunTime 分析器后，重新启动 Windows 服务以将 Raman data library 连接到 RunTime。如需重新启动 Windows 服务，请使用托盘服务管理器停止然后启动 **Endress+Hauser Raman data library** 服务，或重新启动 Raman data library 计算机。

8.2 未能收集光谱

如果使用“Raman Analyzer”窗口获取光谱，光谱未添加到数据集中，则表明 Windows 服务已与 Raman RunTime 分析工具断开连接，需要重新建立连接。

Windows 服务可能会因各种原因与 Raman RunTime 分析工具断开连接，包括：

- 分析工具长时间关闭
- Raman RunTime 软件中的网络设置变更
- 运行 Raman data library 的计算机上的网络设置变更

如需重新连接 Windows 服务连接，请使用托盘服务管理器停止然后启动 **Endress+Hauser Raman data library** 服务，或重新启动 Raman data library 计算机。

9 技术支持

9.1 关于

点击顶部功能区中的 **About**，打开“About Raman Data Library”窗口。此窗口显示软件版本和版本号、安装 ID 和版权信息。

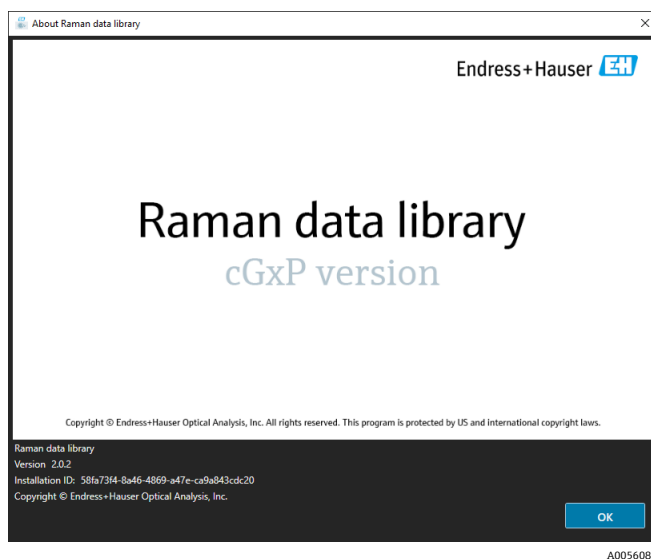


图 67. About 窗口

9.2 联系方式

如需技术服务，登陆公司网站 (<https://endress.com/contact>) 查询当地销售渠道列表。

10 版权信息

10.1 最终用户许可协议

本文档中包含 *Raman data library* 软件的最终用户许可协议副本，仅供参考。

安装或使用软件之前，请仔细阅读本软件许可协议。

点击“ACCEPT”按钮、安装产品或使用包含此产品的设备，即表示您同意受本协议的约束。如果您不同意本协议的所有条款，请单击“DO NOT ACCEPT”按钮，安装过程将不会继续。

这是 *Raman data library* 软件最终用户（“被许可方”）与 Endress+Hauser Optical Analysis, Inc.（“许可方”或“Endress+Hauser”）之间的最终用户许可协议，公司位于特拉华州，主要营业地址为 371 Parkland Plaza, Ann Arbor, Michigan 48103。通过安装 *Raman data library* 软件，您同意受本协议条款和条件的约束。

1.0. 非排他性许可。 许可方授予您使用 *Raman data library* 的非排他性许可，该数据库包括机器可读形式的计算机程序和数据包以及用户手册，共同构成“许可程序”，但须遵守以下条款和条件，它们适用于您安装的任何和所有版本的许可程序。

2.0. 权利范围。 被许可方可以：

2.1. 在一台计算机上安装许可程序，用于控制 Endress+Hauser 制造的光谱仪器；

2.2. 在 2.1 中定义的计算机上使用和执行被许可程序，以满足最终用户的需求；

2.3. 为支持您对许可程序的授权使用，将许可程序的机器可读指令或数据存储在指定计算机所关联的机器中、通过该机器传输该指令或数据并在该机器上显示该指令或数据；和

2.4. 以机器可读的目标代码形式制作一份许可程序副本，仅用于非生产性备份目的。

3.0. 专利保护和限制。

3.1. 许可程序受版权法保护。版权归 Endress+Hauser 所有。许可程序仅允许被许可方使用，不可出售。许可方不得向被许可方出售或转让许可程序的所有权。

3.2. 您对许可程序及其所有修改和增强的所有权利、所有权和利益（包括与其相关的所有商业秘密和版权的所有权）不拥有所有权。

3.3. 许可程序包含受版权和国际条约保护的机密和/或专有信息。保留所有权利。未经许可方书面许可，不得复印、复制或翻译将许可程序的任何部分。任何未经授权使用、披露、转让、转移或复制此机密信息的行为都将被依法全面追责。

3.4. 除非获得许可方的明确授权，否则您不得使用、复制、修改或分发许可程序（以电子方式或其他方式），或其任何副本、改编本、转录本或合并部分。被许可方不得对许可程序进行反汇编、反编译或以其他方式转译。您的权利不得转让、出租、分配或再授权，仅可将许可程序全部转让给 (1) 承担本协议义务的被许可方整个业务的利益继承人或 (2) 许可方合理接受的任何其他方，且该方签订了本协议的替代版本，并支付了旨在涵盖随附成本的管理费。未经许可方事先明确授权，被许可方不得在任何其他计算机系统中安装许可程序或在任何其他位置使用许可程序。如果您使用、复制或修改许可程序，或者以任何未经许可人明确授权的方式将许可程序的任何副本、改编、转录或合并部分的所有权转让给任何其他方，您的许可证将自动终止。

3.5. 您特此授权许可方在正常工作时间内以任何合理的方式进入被许可方的场所检查许可程序，以验证被许可方是否遵守本协议的条款。

3.6. 您承认，如果被许可方违反上述任何规定，许可方将无法获得足够的经济或损害赔偿。因此，许可方有权在收到请求后立即从任何有管辖权的法院获得针对此类违约的禁令。许可方获得禁令救济的权利不应限制其寻求进一步补救的权利。

4.0. 有限保证和责任限制。

4.1. 许可方已尽力确保许可程序的准确性和可靠性，以保证您的利益。本保证明确以您遵守许可程序随附材料中规定的操作、安全和数据控制程序为条件。

4.2. 在法律允许的范围内，在任何情况下，Endress+Hauser 均不对人身伤害或任何偶然、特殊、间接或结果性损害承担责任，包括但不限于利润损失、数据损失、业务中断或任何其他商业损害或损失，无论其因何种原因造成或与您使用或无法使用 Endress+Hauser 软件有关，也无论责任理论如何（合同、侵权或其他），即使 Endress+Hauser 已被告知有此类损害的可能性。某些司法管辖区不允许对人身伤害或附带或间接损害的责任进行限制，因此此限制可能不适用于您。在任何情况下，Endress+Hauser 对您承担的所有损害赔偿（除适用法律在涉及人身伤害的案件中可能要求的赔偿责任外）总额不得超过根据本协议向许可方支付的所有许可费的总额。即使上述补救措施未能达到其基本目的，上述限制也将适用。

4.3. 许可方对许可程序中的错误或遗漏不承担任何责任，并保留以任何理由对本协议中的任何产品进行更改和改进的权利，恕不另行通知。

4.4. 除本协议另有明确规定外，许可方不承担与许可程序有关的任何和所有承诺、陈述和保证，包括其状况、与任何陈述或描述的一致性、任何疏忽，以及其适销性或针对特定用途的适用性。许可程序中提供的信息并非也不应被理解为对所述许可程序作出的陈述或保证。

4.5. 许可方对您因许可程序和本协议而产生的所有索赔的累计责任，包括任何基于合同、侵权或严格责任的诉讼理由，不得超过根据本协议支付给许可方的所有许可费的总金额。本责任限制的适用不考虑本协议的其他条款是否被违反或被证明无效。许可方对数据或文档的丢失不承担任何责任，但被许可方有责任采取合理的备份预防措施。

4.6. 许可程序按“原样”出售，您承担其质量和性能的全部风险。

4.7. 根据某些法律（例如消费者法），您可能拥有额外的权利，这些法律不允许排除默示担保，也不允许排除或限制某些损害。如果适用此类法律，这些排除和限制可能不适用于您。

5.0. 杂项。

5.1. 本协议应受美国密歇根州法律管辖并据其解释，但明确排除密歇根州的法律选择规范。

5.2. 本协议的任何修改均不具有约束力，除非采用书面形式并由被要求执行修改的一方的授权代表签署。

5.3. 本协议要求或允许的任何通知均应以书面形式亲自递送或通过挂号信或认证邮件发送，要求回执，并附上足够的邮资。

5.4. 如果本协议的任何条款被任何有管辖权的法院或法庭宣布为无效或失效，则该等条款应视为无效并视为与本协议分离，本协议的其余条款仍然完全有效。

5.5. 本协议是许可方对被许可方的义务和责任的完整排他性声明，并取代许可方或代表许可方做出的与本协议主题相关的任何其他提议、陈述或其他沟通。

6.0 文档资料。

本文档仅供 Endress+Hauser Optical Analysis, Inc 的授权员工和代表使用。未经 Endress+Hauser Optical Analysis, Inc 的明确书面许可，不得以任何形式或任何方式（包括电子或机械方式），包括复印、录制或信息存储和检索系统，复制或传输本文件的任何部分，以用于买方个人使用以外的任何目的。根据法律规定，复制包括翻译成其他语言。

撰写本文档时，其所含信息被视为准确无误。Endress+Hauser Optical Analysis, Inc 保留更改其中所含信息的权利，恕不另行通知。

www.addresses.endress.com
