

Benutzerbetriebsanleitung Raman Data Library 2.0



Inhaltsverzeichnis

| | | | |
|---|-----------|---|-----------|
| 1 Hinweise zum Dokument | 3 | 5.3 Spitzenwerte und Bereiche | 36 |
| 1.1 Dokumentfunktion | 3 | 5.4 Dashboardansichten erstellen: Gitter-, Trend-, Spektren- und 3D-Darstellung..... | 41 |
| 1.2 Warn- und Gefahrensymbole..... | 3 | 5.5 Summary | 47 |
| 1.3 Sicherheit | 3 | 6 Raman Rxn Analyzer Control..... | 50 |
| 1.4 Glossar | 3 | 6.1 Analysatoroptionen | 50 |
| 1.5 Dokumentation..... | 5 | 6.2 Kanalsteuerung | 51 |
| 1.6 Eingetragene Marken | 5 | 6.3 Kalibrier- und Verifizierungsprotokoll des Raman-Analysators | 54 |
| 2 Produktbeschreibung | 6 | 7 Einhaltung von FDA 21 CFR Teil 11 . | 56 |
| 2.1 Installation | 6 | 7.1 Benutzerverwaltung | 56 |
| 2.2 Sicherheitseinstellungen (nur cGxp Ausführung) | 6 | 7.2 Elektronische Aufzeichnungen und elektronische Signaturen | 56 |
| 2.3 User management (nur cGxP-Version) | 7 | 7.3 Verwaltung von Systemeinstellungen | 56 |
| 3 Software-Betriebsabläufe | 12 | 7.4 Audit-Trail durch Änderungskontrollfunktion..... | 57 |
| 3.1 Anmelden (nur cGxP-Version)..... | 12 | 7.5 Mit Ereignisprotokollen arbeiten..... | 58 |
| 3.2 Online- und Offline-Modus | 12 | 8 Diagnose und Störungsbehebung..... | 61 |
| 3.3 Benutzerschnittstelle | 12 | 8.1 Neustart oder Ausschalten des Analysators | 61 |
| 4 Hinzufügen von Daten in Raman Data Library | 16 | 8.2 Spektren werden nicht gesammelt | 61 |
| 4.1 Projekte | 16 | 9 Support..... | 62 |
| 4.2 Spektralquellen..... | 17 | 9.1 About | 62 |
| 4.3 Datensätze..... | 20 | 9.2 Kontaktinformationen..... | 62 |
| 4.4 Datenfelder | 23 | 10 Copyright-Informationen..... | 63 |
| 5 Analyse von Datensätzen | 26 | 10.1 Endbenutzer-Lizenzvereinbarung..... | 63 |
| 5.1 Anzeige von Datensätzen | 26 | | |
| 5.2 Einsatz von Vorbehandlungen | 33 | | |

1 Hinweise zum Dokument

1.1 Dokumentfunktion

Dieses Dokument enthält Anweisungen für allgemeine Benutzeraufgaben im Rahmen einer Nutzung von Raman Data Library einschließlich Navigation, Felderläuterung, Datenmanipulation und mehr. Verwaltungsanweisungen einschließlich Hinweise zur Installation, Datenbank, Benutzerverwaltung und Sicherheit enthält die *Administratorbetriebsanleitung Raman Data Library (BA02349C)*.

1.2 Warn- und Gefahrensymbole

| Struktur der Hinweise | Bedeutung |
|--|---|
|  Warnhinweis Ursachen (/Folgen) Folgen der Missachtung (wenn zutreffend) ▶ Abhilfemaßnahme | Dieses Symbol macht auf eine gefährliche Situation aufmerksam. Wird die gefährliche Situation nicht vermieden, kann dies zu schweren Verletzungen gegebenenfalls mit Todesfolge führen. |
|  Vorsicht Ursachen (/Folgen) Folgen der Missachtung (wenn zutreffend) ▶ Abhilfemaßnahme | Dieses Symbol macht auf eine gefährliche Situation aufmerksam. Wird die gefährliche Situation nicht vermieden, kann dies zu mittelschweren oder leichten Verletzungen führen. |
|  Hinweis Ursache/Situation Folgen der Missachtung (wenn zutreffend) ▶ Maßnahme/Hinweis | Dieses Symbol macht auf Situationen aufmerksam, die zu Sachschäden führen können. |

1.3 Sicherheit

Für Informationen zum sicheren Betrieb der Raman-Rxn-Analysatoren und der Raman RunTime-Software, siehe *Raman RunTime v6.5 Betriebsanleitung (BA02180C)*. Es empfiehlt sich, vor dem Verwenden von Raman Data Library die *Raman RunTime v6.4 (oder neuer) Betriebsanleitung* vollständig zu lesen.

1.3.1 IT-Sicherheit

IT-Sicherheitsmaßnahmen, die das Gerät und dessen Datentransfer zusätzlich schützen, sind gemäß den Sicherheitsstandards des Betreibers vom Betreiber zu implementieren.

1.4 Glossar

| Begriff | Beschreibung |
|------------------------|---|
| Abschlussbericht | Ein Dokument, das alle Ergebnisse der Ausführung eines Validierungsdokuments zusammenfasst. |
| Audit Trail | Unabhängige computergenerierte Aufzeichnung von Änderungen an elektronischen Aufzeichnungen mit Angabe von Zeit, Bearbeiter, Aktion, Inhalt und gegebenenfalls Grund. |
| Autorisierter Benutzer | Endbenutzer, der die erforderliche Schulung abgeschlossen hat und Zugang zur Anwendung erhalten hat. |
| BCA | Background Correction Accuracy (Korrektheit der Hintergrundinformationen) |
| °C | Grad Celsius |
| CFL | Das neue CFL-Dateiformat, das in der "Galactic Industries Corp. Universal Data Format Specification" vom 4. September 1997 definiert wurde |
| Cfm | Kubikfuß pro Minute |
| CFR | Code of Federal Regulation (Bundesgesetz über technische Vorschriften) |
| cGMP | Current Good Manufacturing Practices (derzeitig geltende bewährte Herstellungsverfahren) |
| cGxP | Current Good clinical, laboratory, and/or manufacturing Practices (derzeitig geltende bewährte klinische, labortechnische und/oder Herstellungsverfahren) |

| Begriff | Beschreibung |
|-----------------------------|--|
| CMMS | Computerized Maintenance Management System (Computergestütztes Instandhaltungsmanagementsystem): eine computergestützte Datenbank, die alle Wartungsaufträge enthält und für die Planung von Aktivitäten verwendet wird. |
| COTS | Configurable Off-The-Shelf (Konfigurierbare Standardlösung) |
| CTQ | Critical To Quality (Qualitätskritisch) |
| Datenanalyse | Arbeitsprozess mit dem Ziel, nützliche Informationen aus den vom Spektrometer gelieferten Rohdaten zu erhalten. |
| Elektronische Signatur | Genehmigung des elektronischen Datensatzes durch eine Person in Form einer digitalen Bestätigung, die rechtlich bindend ist und der handschriftlichen Unterschrift entspricht. |
| Elektronischer Datensatz | Jede Kombination von Datensätzen in digitaler Form, die erstellt, geändert, gewartet, archiviert, abgerufen oder von einem Computersystem und für eine cGxp-regulierte Aktivität genutzt werden. |
| GAML | Generalized Analytical Markup Language |
| GCC | Global Change Control (Globale Änderungskontrolle) |
| GDP | Good Documentation Practices (bewährte Dokumentationsverfahren) |
| GHz | Gigahertz |
| Grafische Daten | Schlüsseldaten, Informationen, Attribute, die in grafischer Form dargestellt werden können. |
| Hz | Hertz |
| IAPP | Information Asset Protection Policy (Richtlinie zum Schutz von Informationsressourcen) |
| In Situ | Am ursprünglichen Ort |
| IQ | Installationsqualifizierung |
| Kritische Anforderung | Eine Anforderung, die eine negative Auswirkung auf die Anforderungen der Regulierungsbehörde, der Datenintegrität oder der Sicherheit hat, wenn sie nicht erfüllt ist. |
| LAN | Local Area Network (lokales Netzwerk) |
| Nicht-kritische Anforderung | Eine Anforderung, die keine nachteiligen Auswirkungen auf die Anforderungen der Regulierungsbehörde, der Datenintegrität oder der Sicherheit hat. |
| Nm | Nanometer |
| OQ | Operational Qualification (Betriebsqualifikation) |
| OS | Operating System (Betriebssystem) |
| Password | Passwort (der eindeutige, private Code, den der Benutzer zu Identifikationszwecken eingibt) |
| PAT | Process Analytical Technology (Prozessanalysetechnik) |
| PC | Personal Computer |
| ppb | Parts per billion (Teile pro Milliarde) |
| ppm | Parts per million (Teile pro Million) |
| psig | Pounds per square inch gauge (Pfund pro Quadratzoll relativ) |
| QC | Qualitätskontrolle |
| RAM | Random Access Memory (Arbeitsspeicher) |
| Raman-Rxn4-Analysator | Ein integriertes Spektroskopie-System zur Aufnahme von Glasfasersonden zur Probenanalyse. |
| Savitzky-Golay-Filter | Ein digitaler Filter, der auf eine Reihe digitaler Datenpunkte angewendet werden kann, um die Daten zu glätten. Die Genauigkeit der Daten wird erhöht, ohne die Signaltendenz zu verzerren. |
| SPC | Vom Entwickler festgelegtes Dateiformat. |
| Spektren | Die Rohdaten des Raman-Spektrometers nach der Verarbeitung in das SPC-Format (GRAMM). |
| URS | User Requirements Specification (Spezifikation der Benutzeranforderungen) |
| USV | Unterbrechungsfreie Stromversorgung |

1.5 Dokumentation

Alle Dokumentationen sind wie folgt verfügbar:

- Auf dem mitgelieferten Mediengerät (nicht bei allen Geräteausführungen Bestandteil des Lieferumfangs)
- Auf der Endress+Hauser mobile App: www.endress.com/supporting-tools
- Im Download-Bereich der Endress+Hauser Website: www.endress.com/downloads

Das vorliegende Dokument ist wesentlicher Bestandteil dieses Dokumentationspakets, das Folgendes umfasst:

| Teilenummer | Dokumenttyp | Beschreibung |
|-------------|---|--|
| BA02349C | Administratorbetriebsanleitung Raman Data Library | Eine vollständige Übersicht über die Abläufe, die mit der Verwaltung der Sicherheit und der Raman Data Library-Datenbank zusammenhängen. |
| KA01717C | Kurzanleitung Raman Data Library | Eine Kurzanleitung zur Verwendung von Raman Data Library nach der Installation. |
| TI01802C | Raman Data Library Technische Information | Planungshilfe für das Datenanalyzesystem. Das Dokument enthält alle technischen Daten zur Software. |

1.6 Eingetragene Marken

SIMCA® Eingetragene Marke von Sartorius Stedim Biotech.

GRAMS IQ™ Eingetragene Marke von Thermo Fisher Scientific.

2 Produktbeschreibung

Raman Data Library von Endress+Hauser ist eine Software, die zur Organisation, Visualisierung, Analyse und Berichterstattung von Raman-Rxn-Spektraldaten entwickelt wurde. Raman Data Library ergänzt die im Raman-Rxn von Endress+Hauser eingebettete Raman RunTime durch die Speicherung, Organisation und Analyse von Spektren sowie die Datenerfassung mehrerer Analysegeräte vom Labor bis zum cGxP.

Raman Data Library wurde für Benutzer entwickelt, die Raman-Spektren visualisieren, mit Referenzdaten verknüpfen und univariate Peak-Modelle erzeugen müssen. Mit dieser Software können vorbereitete Daten für die externe multivariable Modellierung exportiert werden.

Funktionen von Raman Data Library:

- **Datenorganisation.** Gleicht Spektren mit Referenzwerten ab, bereitet Daten vor der chemometrischen Modellierung vor, bietet eine durchsuchbare Datenspeicherung und gewährleistet die Datenintegrität.
- **Datenanalyse.** Ermöglicht eine verbesserte Spektrenvisualisierung und einfache Analysen wie Peak-Trending und univariate Modellierung.
- **cGxP-Option.** Einhaltung der Branchenstandards für die Rückverfolgbarkeit, Speicherung und Archivierung von Spektraldaten.

Raman Data Library speichert Spektraldaten in einer sicheren, eingebetteten SQLite-Datenbank, führt Berechnungen an den Spektraldaten durch und zeigt Spektraldaten und die zugehörigen Metadaten in Berichten und auf dem Bildschirm an. Diese Funktion ermöglicht Raman-Spektren als Referenzdaten für die quantitative Raman-Methodenentwicklung und als Unterstützung für die Bedürfnisse von FDA 21 CFR Part 11 im Rahmen einer validierten Analyse-Lösung zu fungieren.

Raman Data Library kann so implementiert werden, dass sie 21 CFR Part 11-konform ist, wenn sie mit dem cGxP-Setup-Installationsprogramm installiert und durch IQ/OQ mit Endress+Hauser und PQ mit dem Kunden qualifiziert wird. Wenn es im cGxP-Modus installiert wurde, ermöglicht das Programm die Erfassung, Speicherung und Organisation von Raman-Spektren, sodass die Spektren

- als Kalibrierdatensatz für eine quantitative Raman-Modellentwicklung als Teil einer validierten Analyselösung oder
- als Eingabedaten für validierte Modelle dienen können, die zur Vorhersage von Prozess- oder Probeneigenschaften verwendet werden.

2.1 Installation

Raman Data Library ist für die Installation auf einer eigenständigen Workstation ausgelegt. Raman Data Library enthält Funktionen zum Exportieren von Daten aus jeder Instanz der Anwendung und zum Importieren der Daten an einen zentralen Speicherort. Siehe hierzu die Installationsanweisungen im Dokument *Administratorbetriebsanleitung Raman Data Library* (BA02349C).

2.2 Sicherheitseinstellungen (nur cGxp Ausführung)

In cGxp-Umgebungen verwendet Raman Data Library eine Benutzerauthentifizierung, um die Rückverfolgbarkeit und Protokollierung aller Ereignisse sicherzustellen. In der Kernumgebung von Raman Data Library werden Benutzerverwaltung und Benutzerauthentifizierung nicht verwendet.

Im Fenster Settings können die Systemsicherheitseinstellungen geändert werden. Um Änderungen an Systemsicherheitseinstellungen vorzunehmen, muss die Rolle als System Settings Manager angemeldet sein.

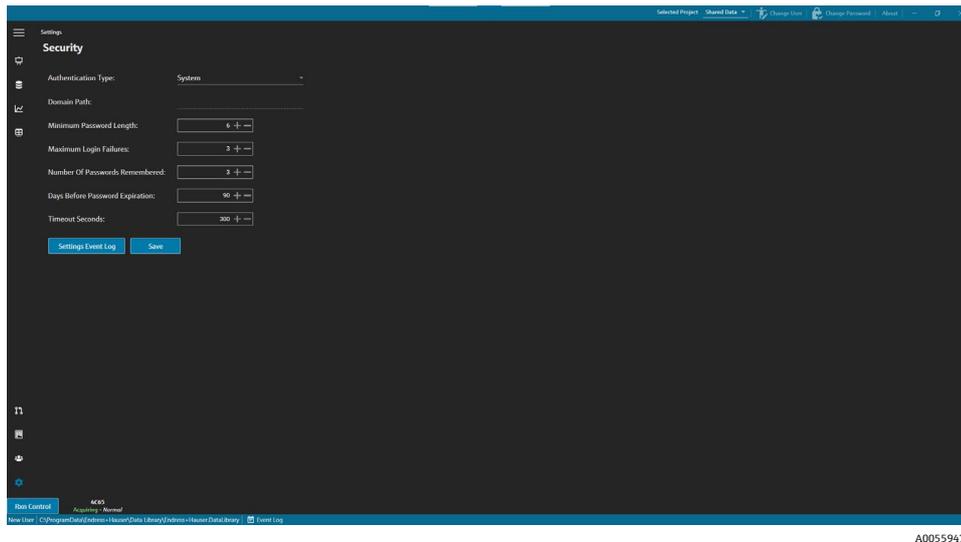


Abbildung 1. Fenster Security

Im Fenster Settings kann Folgendes ausgewählt werden:

- **Authentication type.** Der Authentifizierungstyp für die Anwendung. Der Benutzer kann zwischen den Modi für System, Domain und Local authentication wählen.
- **Domain path.** (Nur Domänenauthentifizierung) Der Domänenpfad.
- **Minimum password length.** Die Mindestanzahl der Zeichen für ein Benutzerkennwort. Die zulässige Mindestanzahl von Zeichen beträgt 6.
- **Maximum login failures.** Die Anzahl der fehlgeschlagenen Anmeldeversuche, die zulässig sind, bevor ein Benutzerkonto gesperrt wird.
- **Number of passwords remembered.** Die Anzahl der eindeutigen neuen Passwörter, die mit einem Benutzerkonto verknüpft werden müssen, bevor ein altes Passwort wiederverwendet werden kann.
- **Days before password expiration.** Der Zeitraum (in Tagen), in dem ein Passwort verwendet werden kann, bevor das System den Benutzer auffordert, es zu ändern. Es können Passwörter festgelegt werden, die nach einer bestimmten Anzahl von Tagen ablaufen. Wenn ein Passwort zeitlich unbegrenzt benutzt werden soll, wird die Anzahl der Tage auf 0 gesetzt.
- **Timeout seconds.** Der Zeitraum (in Sekunden) der zulässigen Inaktivität vor Eintritt eines System-Timeouts. Nach einem System-Timeout müssen die Benutzer die Anmeldeinformationen erneut eingeben, um die Anwendung fortzusetzen oder zu beenden. Wenn das Timeout auf 0 Sekunden gesetzt ist, wird die Funktion System-Timeout deaktiviert. Der maximal einstellbare Timeout-Wert beträgt 3600 Sekunden (60 Min).

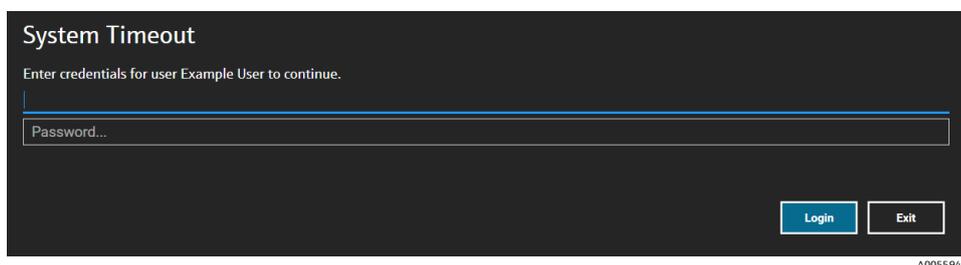


Abbildung 2. System-Timeout

- **Save.** Speichert die Systemsicherheitseinstellungen.
- **Settings event log.** Zeigt das Ereignisprotokoll für Einstellungen an.

2.3 User management (nur cGxP-Version)

In cGxP-Umgebungen authentifiziert Raman Data Library Benutzer, um die Rückverfolgbarkeit und Protokollierung aller Ereignisse sicherzustellen. Die Kernversion von Raman Data Library bietet keine Verwaltung und Authentifizierung von Benutzern.

Das Fenster Users ermöglicht es Managern, Benutzerkonten hinzuzufügen, zu aktualisieren und zu löschen. Es ermöglicht Managern auch, Ereignisse eines bestimmten Benutzers oder alle Ereignisse aller Benutzer anzuzeigen. Um Benutzer verwalten zu können, muss die Rolle Users Manager bei einem Konto angemeldet sein.

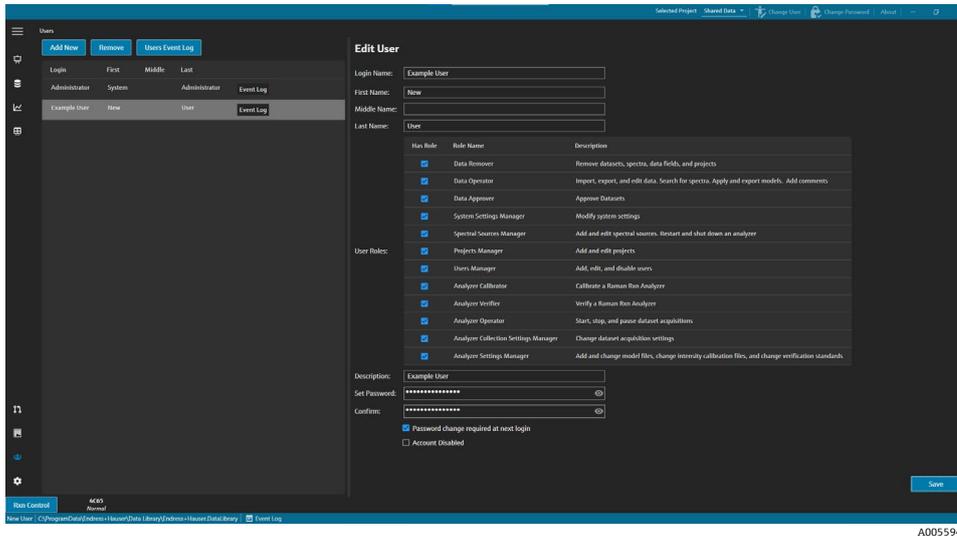


Abbildung 3. Fenster Users

Im Fenster Users kann Folgendes ausgewählt werden:

- **Add New.** Erstellt einen neuen Benutzer.
- **Remove.** Entfernt den ausgewählten Benutzer. Zum Entfernen eines Benutzers ist die Rolle Data Remover erforderlich.
- **Users Event Log.** Zeigt das Ereignisprotokoll für alle Benutzer an.
- **Event Log.** Zeigt das Ereignisprotokoll für den angegebenen Benutzer an.

2.3.1 User roles

Im Rahmen der Funktionalität der Benutzerrollen kann ein Benutzermanager Benutzer mit Berechtigungen anlegen, die der vom Kunden festgelegten Organisationsstruktur entsprechen. Daher gibt es keine festen Benutzergruppen. Stattdessen gibt es viele Möglichkeiten, Berechtigungen durch Zuweisung einer Kombination von Benutzerrollen zu strukturieren.

Benutzerrollen können verwendet werden, um die Funktionalität der Benutzer einzuschränken. Einem bestimmten Benutzer kann eine beliebige Kombination von Rollen zugewiesen werden, von allen Rollen bis zu keiner Rolle.

| Rolle | Zulässige Aktionen |
|--------------------------|---|
| Data Remover | <ul style="list-style-type: none"> ▪ Datensätze entfernen ▪ Spektren entfernen ▪ Datenfelder entfernen ▪ Projekte entfernen |
| Data Operator | <ul style="list-style-type: none"> ▪ Importieren, Exportieren und Bearbeiten von Daten ▪ Suche nach Spektren ▪ Anwenden und Exportieren von Modellen ▪ Hinzufügen von Kommentaren |
| Data Approver | Genehmigung von Datensätzen |
| System Settings Manager | Bearbeiten der Systemeinstellungen |
| Spectral Sources Manager | <ul style="list-style-type: none"> ▪ Hinzufügen und Bearbeiten von Spektralquellen ▪ Neustarten und Herunterfahren des Analysators |
| Projects Manager | <ul style="list-style-type: none"> ▪ Projekte hinzufügen ▪ Projekte bearbeiten |

| Rolle | Zulässige Aktionen |
|--------------------------------------|---|
| Users Manager | <ul style="list-style-type: none"> ▪ Benutzer hinzufügen ▪ Benutzer bearbeiten ▪ Benutzer deaktivieren |
| Analyzer Calibrator | Kalibrierung von Raman-Rxn-Analysatoren |
| Analyzer Verifier | Verifizierung von Raman-Rxn-Analysatoren |
| Analyzer Operator | <ul style="list-style-type: none"> ▪ Datensatzerfassung starten ▪ Datensatzerfassung stoppen ▪ Datensatzerfassung unterbrechen |
| Analyzer Collection Settings Manager | Ändern der Einstellungen für die Datensatzerfassung |
| Analyzer Settings Manager | <ul style="list-style-type: none"> ▪ Hinzufügen und Ändern von Modelldateien ▪ Ändern der Kalibrierdateien für die Intensität ▪ Ändern der Verifizierungsstandards |

Benutzerrollen können auf ein Satz von Rechten beschränkt oder in Sätze kombiniert werden, die sich auf Aufgaben einer funktionalen Rolle beziehen. Die folgende Tabelle zeigt Beispiele für Rollensätze, die Benutzern, Vorgesetzten und Administratoren zugeordnet werden können.

| Benutzerstuf | Zugewiesene Rollen |
|---------------|---|
| User | <ul style="list-style-type: none"> ▪ Data Operator ▪ Spectral Sources Manager ▪ Analyzer Calibrator ▪ Analyzer Verifier ▪ Analyzer Operator ▪ Analyzer Collection Settings Manager ▪ Analyzer Settings Manager |
| Supervisor | <ul style="list-style-type: none"> ▪ Data Remover ▪ Data Approver ▪ System Settings Manager ▪ Projects Manager |
| Administrator | <ul style="list-style-type: none"> ▪ Users Manager |

2.3.2 Neuen Benutzer anlegen

Vorgehensweise beim Anlegen eines neuen Benutzers

1. Im Fenster Users auf **Add New** klicken.

Neue Benutzerkonten für Raman Data Library für alle neuen Systembenutzer erstellen. Raman Data Library kann zwar Benutzernamen ändern, aber diese Funktion sollte nur verwendet werden, um den Namen eines Benutzers aufgrund einer Namensänderung zu aktualisieren. Das Benutzerkonto nicht umbenennen, um das Konto einer anderen Person zuzuweisen.

Es erscheint der Bildschirm Edit User.

Edit User

Login Name:

First Name:

Middle Name:

Last Name:

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

User Roles:

Description:

Set Password:

Confirm:

Password change required at next login
 Account Disabled

A0055964

Abbildung 4. Bildschirm Edit User

2. Die Benutzereigenschaften eingeben:
 - **Login Name.** Der Name, der für die Anmeldung am System verwendet wird. Jeder Anmelde-name muss eindeutig sein und zwischen 1 und 100 Zeichen lang sein.
 - **First Name.** Vorname des Benutzers. Er kann 0 bis 100 Zeichen lang sein.
 - **Middle Name.** Der zweite Vorname des Benutzers. Er kann 0 bis 100 Zeichen lang sein.
 - **Last Name.** Der Nachname des Benutzers. Er kann 0 bis 100 Zeichen lang sein.
 - **User Roles.** Die Rollen, die dem Benutzer in Raman Data Library zugewiesen werden. Benutzerrollen können hinzugefügt oder entfernt werden, indem das Kontrollkästchen **Include** für jede Rolle ausgewählt oder abgewählt wird. Siehe Abschnitt *Benutzerrollen* →
 - **Description.** Eine Beschreibung des Benutzers.
3. In das Feld **Set Password** ein gültiges Passwort eingeben und mit **Confirm Password** bestätigen. Ein Passwort muss folgende Mindestanforderungen erfüllen:
 - Es muss mindestens ein Sonderzeichen enthalten
 - Es muss Groß- und Kleinbuchstaben enthalten
 - Es muss die im Fenster Settings eingestellte minimale Passwortlänge einhalten
4. (Optional) **Password change required at next login** beim Anlegen eines neuen Benutzers wählen.
5. Auf **Save** klicken.

2.3.3 Benutzer deaktivieren

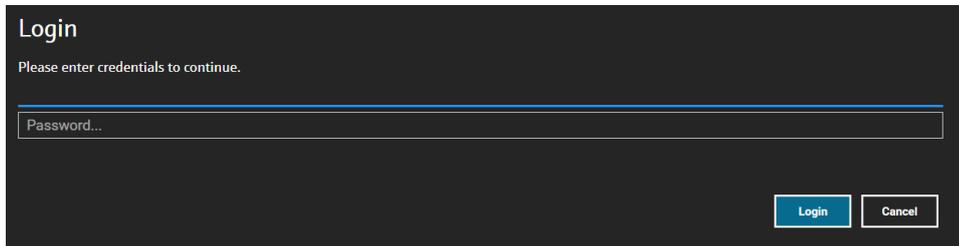
Inaktive Benutzerkonten in Raman Data Library können deaktiviert werden, sollten jedoch in Raman Data Library für historische und Audit-Trail-Zwecke immer beibehalten werden. Ein deaktivierter Benutzer kann nicht angemeldet werden.

Benutzer deaktivieren

1. Im Fenster Users das Benutzerkonto auswählen, das deaktiviert werden soll.
2. **Account Disabled** wählen.
3. Auf **Save** klicken.

2.3.4 Benutzerwechsel

Auf **Change User** in der oberen Symbolleiste klicken, um zu einem anderen Benutzer zu wechseln. Um zu einem anderen Benutzer zu wechseln, müssen die Anmeldeinformationen korrekt eingegeben werden.



A0055965

Abbildung 5. Anmeldung eines Benutzers

2.3.5 Passwort ändern

Auf **Change Passwort** in der oberen Symbolleiste klicken, um das Passwort für den aktuellen Benutzer zu ändern. Der Benutzer muss das alte Passwort und das neue Passwort eingeben. Anschließend muss er das neue Passwort bestätigen.

Das Passwort muss den Mindestanforderungen an ein Passwort entsprechen. Ein Passwort muss mindestens ein Sonderzeichen und Groß- und Kleinbuchstaben enthalten. Es muss darüber hinaus die minimale Passwortlänge erfüllen, die im Einstellungsfenster festgelegt wurde.



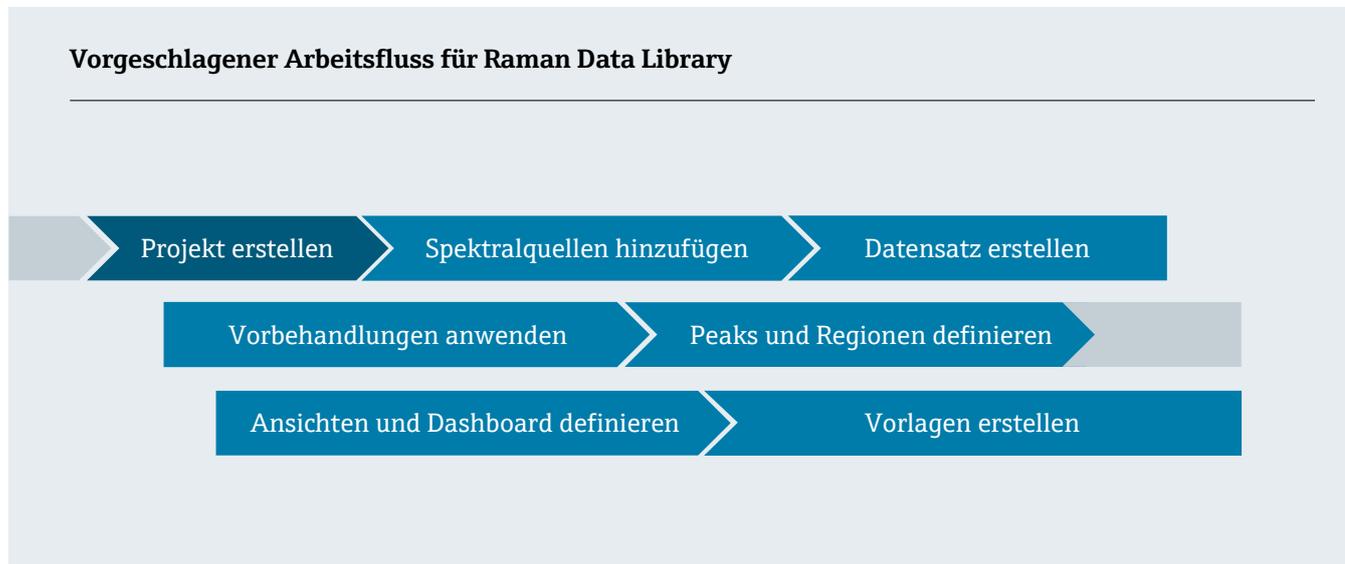
A0055966

Abbildung 6. Change Password Dialog

Dieser Menüpunkt ist nicht verfügbar, wenn der Authentifizierungsmodus auf Local Windows oder Domain gesetzt ist. Mit diesen Authentifizierungsmodi werden Passwortänderungen vom ausgewählten Authentifizierungsserver vorgenommen.

3 Software-Betriebsabläufe

Raman Data Library bietet Merkmale und Funktionen, die dabei helfen können, einen Arbeitsfluss für die Spektraldatenanalyse zu erstellen. Nachfolgend ist ein vorgeschlagener Arbeitsfluss dargestellt. Sobald der Benutzer einen Teil des Arbeitsflusses abgeschlossen hat, wie beispielsweise das Importieren von Daten oder das Anwenden von Vorbehandlungen, ruft die Software den nächsten Schritt in der Verarbeitung der Benutzerdaten auf.



In diesem Handbuch wird darauf eingegangen, wie verschiedene Arbeitsflüsse entwickelt werden von der Hinzufügung von Daten zur Raman Data Library, um Projekte zu erstellen, über Vorbehandlungen bis zur Analyse von Daten.

Nachdem Raman Data Library installiert wurde, empfiehlt es sich, sich mit der Softwareschnittstelle vertraut zu machen. Dies ermöglicht die Entwicklung eines Datenanalysearbeitsflusses, der den vorliegenden Anforderungen entspricht. Anweisungen für einen Schnellstart siehe *Kurzanleitung Raman Data Library (KA01717C)*.

3.1 Anmelden (nur cGxP-Version)

In der cGxP-Version von Raman Data Library muss der Benutzer sich anmelden, um Raman Data Library zu öffnen.

Anmeldename und Passwort sind Pflichtfelder. Der Anmeldename ist nicht groß-/kleinschriftempfindlich. Beispielsweise ist der Anmeldename "Jane" äquivalent zum Namen "jane".

Als Sicherheitsmaßnahme wird ein Benutzer, der eine konfigurierbare Anzahl von fehlgeschlagenen Anmeldeversuchen erreicht hat, automatisch gesperrt. In diesem Fall muss der Administrator kontaktiert werden, um den gesperrten Benutzer wieder zu aktivieren.

3.2 Online- und Offline-Modus

Raman Data Library kann auf zwei Arten verwendet werden:

- **Online.** Live-Daten werden von einem Raman-Analysator an die Modellierungssoftware geleitet und ergeben eine Echtzeitanalyse der Zusammensetzung.
- **Offline.** Datensätze werden importiert und können unabhängig vom Echtzeit-Prozess analysiert werden. Im Offline-Modus kann der Benutzer zudem Vorlagen anhand von bekannten Analyten erstellen sowie Modelle und Datensatzvorlagen erzeugen, um diese mit Echtzeitdaten zu nutzen und zu vergleichen.

Mit diesen beiden Modi können Benutzer die in Echtzeit-Prozessumgebungen erfassten Raman-Spektren verstehen und entsprechend handeln.

3.3 Benutzerschnittstelle

Wenn Raman Data Library zum ersten Mal gestartet wird, erscheint ein leeres Dashboard mit Menüsymbolen auf der linken Seite. Das linke Menü kann erweitert werden. Raman Data Library öffnet sich mit einem leeren Dashboard, bis ein Datensatz geladen wird und Ansichten konfiguriert werden.

Um in Raman Data Library die beabsichtigte UI-Erfahrung sicherzustellen, muss die Windows-Anzeigeskalierung auf 100 % eingestellt werden.

3.3.1 Menüs

Hauptmenü

Das Hauptmenü auf der linken Seite von Raman Data Library ermöglicht die Navigation zwischen Software-Funktionen.

| Menüposition | Navigation |
|---|---|
|  A0055967 | Erweitern/Reduzieren. Menüpositionen anzeigen oder ausblenden. |
|  A0055968 | Dashboard. Benutzer-Dashboards erzeugen und verwalten. |
|  A0055969 | Datasets. Datensätze erzeugen und verwalten. |
|  A0055970 | Analyze Dataset. Aktiven Datensatz analysieren. Nur aktiviert, wenn ein aktiver Datensatz vorhanden ist. Diese Menüposition enthält fünf Registerkarten: <ul style="list-style-type: none"> ▪ Data ▪ Pretreat ▪ Peaks/Regions ▪ Views ▪ Summary |
|  A0055971 | Data Fields. Datenfelder erzeugen und verwalten. |
|  A0055972 | Spektralquellen. Spektralquellen (OPC/SPC) erzeugen und verwalten. |
|  A0055973 | Projekte. Projekte erzeugen und verwalten. |
|  A0055974 | Users. Benutzer anlegen und verwalten. Diese Funktion ist nur für die cGxp-Version von Raman Data Library verfügbar. |
|  A0055975 | Settings. Systemeinstellungen verwalten. Diese Funktion ist nur für die cGxp-Version von Raman Data Library verfügbar. |

Multifunktionsleiste

Am oberen Rand von Raman Data Library befindet sich eine Multifunktionsleiste. Über diese Funktionsleiste kann der Benutzer:

- **Ein Projekt auswählen.** Mithilfe der Liste Selected Project in der oberen Menüleiste kann zwischen Projekten umgeschaltet werden. Informationen zu Projekten, siehe *Projekte* → .
- **Benutzer ändern (nur cGxP-Version).** Durch Klicken auf Change User kann auf einen anderen Benutzer umgeschaltet werden, während das Programm weiterläuft. Beschreibung zur Änderung von Benutzern und Passwörtern siehe *Benutzerverwaltung (nur cGxP-Version)*.
- **Passwort ändern (nur cGxP-Version).** Durch Klicken auf Change Password kann das Passwort geändert werden.
- **Informationen anzeigen.** Durch Klicken auf About werden Software-Version, Versionsnummer, Installations-ID und Copyright-Informationen angezeigt.



A0056151

Abbildung 7. Multifunktionsleiste

3.3.2 Dashboard der Data Library

Das Dashboard ist die Hauptansicht für die Routineanalyse. Es zeigt Registerkarten an, die für die Anzeige von gespeicherten Datensätzen konfiguriert werden können. Eine Dashboard-Registerkarte kann Ansichten von mehreren Datensätzen enthalten. Für die Anzeige auf dem Dashboard muss mindestens ein Datensatz definiert werden.

Zum Verwenden des Dashboards muss zunächst eine anfängliche Einrichtung erfolgen, die am Beginn dieses Kapitels in den Abschnitten *Daten zur Raman Data Library hinzufügen* →  und *Datensätze analysieren* →  beschrieben wurde. Anweisungen für einen Schnellstart siehe *Kurzanleitung Raman Data Library (KA01717C)*.

Wenn Raman Data Library gestartet wird, werden die Dashboard-Registerkarten der vorherigen Sitzung geladen. Wenn kein vorheriges Dashboard definiert wurde, wie dies bei der ersten Nutzung der Software der Fall ist, ist das Dashboard leer. Zuvor gespeicherte Dashboard-Registerkarten können erneut geladen werden, indem auf **Launch Dashboard** auf der Registerkarte Summary im Fenster Analyse Dataset geklickt wird. Wenn Raman Data Library geschlossen wird, werden die Dashboard-Registerkarten automatisch gespeichert.

Wenn das Dashboard konfiguriert und für einen neuen Datensatz gestartet wird, bietet es zwei Standardansichten an: Das Spektrenraster und das Spektrendiagramm. Weitere Ansichten für einen Datensatz können im Analysedatensatz unter der Registerkarte **Views** definiert werden. Siehe Abschnitt *Erstellen von Dashboard-Ansichten*: Für Details zum Definieren von Ansichten siehe *Raster-, Trend-, Spektren- und 3D-Darstellung* → .

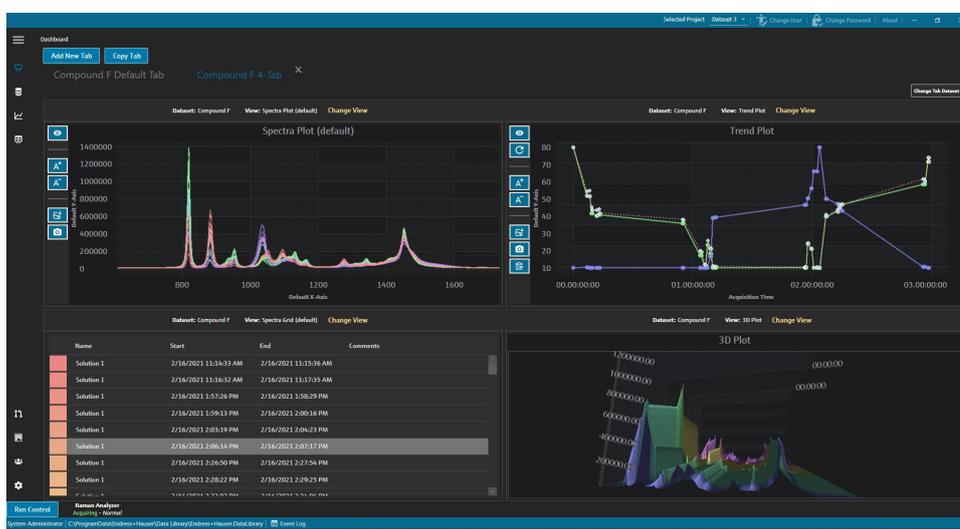


Abbildung 8. 4er-Ansicht Dashboard-Registerkarte

Auf dem Dashboard stehen folgende Funktionen zur Verfügung:

- Mit der Registerkarte **Add New** wird ein weiteres Dashboard hinzugefügt. Wenn eine neue Dashboard-Registerkarte hinzugefügt wird, erscheint die Aufforderung, die Anzahl der Ansichten (1 bis 4) auszuwählen. Eine Dashboard-Registerkarte kann Ansichten von mehreren Datensätzen enthalten.
- Die Registerkarte **Copy** erstellt eine neue Kopie der aktuellen Dashboard-Registerkarte.
- **Change View**. Ändert die Ansicht des Datensatzes, indem der Benutzer ein anderes Diagramm oder Raster auswählen kann.
- **Change Tab Dataset**. Wählt einen Datensatz aus und entfernt alle Ansichten aus einer Dashboard-Registerkarte. Der ausgewählte Datensatz wird geladen, sodass die Ansichten von Diagrammen für einen ausgewählten Datensatz schnell zur Dashboard-Registerkarte hinzugefügt werden können.
- **X**. Schließt eine Dashboard-Registerkarte.

Erstellen eines neuen Dashboards

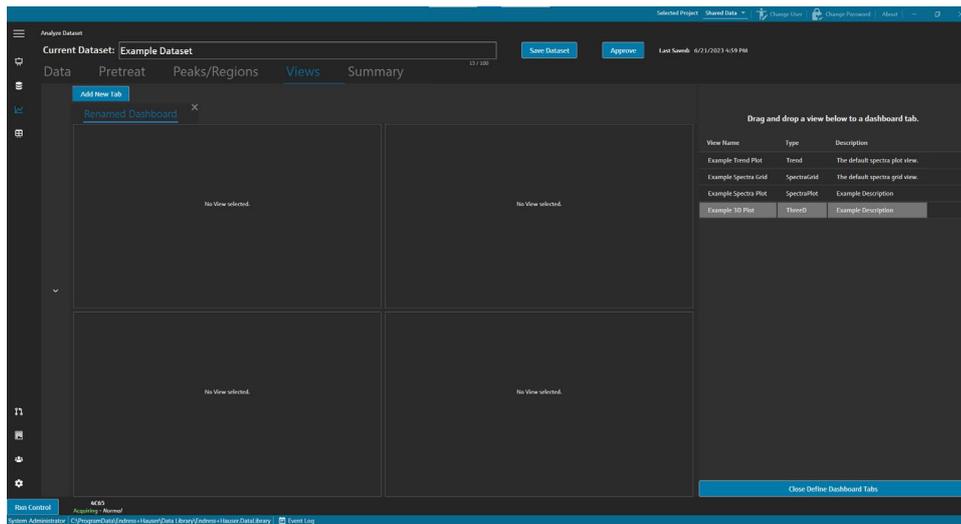
Für dieses Verfahren ist es erforderlich, dass der Benutzer Spektralquellen hinzugefügt, aus diesen Quellen einen Datensatz erstellt und über das Fenster *Analyze Dataset* ein erstes Dashboard gestartet hat. Für Anweisungen siehe *Daten zur Raman Data Library hinzufügen* →  und *Datensätze analysieren* → .

1. Auf dem Dashboard auf die Registerkarte **Add New** klicken.

Auf der Registerkarte *Add New* wird eine Auswahl der Ansichten entsprechend der gewählten Anzahl auf dem neuen Dashboard angezeigt.

2. Auf der Liste, die mit der Registerkarte **Add New** angezeigt wird, die Anzahl der Ansichten (1-4) auswählen, die auf dem neuen Dashboard angezeigt werden soll.

Wenn ein neues Dashboard erstellt wird, werden keine Ansichten von Diagrammen oder Rastern angezeigt.



A0055977

Abbildung 9. Leere Dashboard-Registerkarte

Um eine Ansicht zu erstellen, die mehr als die Standardansichten *Spectra Plot* und *Spectra Grid* anzeigt, müssen im Fenster *Analyze Dataset* Ansichten hinzugefügt werden.

3. Ansichten werden mithilfe der Anweisungen in *Dashboard-Ansichten erstellt: Gitter-, Trend-, Spektren- und 3D-Darstellung* → . Nach Rückkehr zum Dashboard,
4. auf der neuen Dashboard-Registerkarte auf **Change View** klicken.
Der Dialog zum Ändern der Ansicht wird angezeigt.
5. Nach Auswählen der Datensatzquelle die Ansicht auswählen. Auf **Change View** klicken.

Auf dem Dashboard wird die neue Ansicht angezeigt. Um ein Dashboard umzubenennen, auf den Namen der Dashboard-Registerkarte doppelklicken.

Um ein Dashboard zu speichern, muss es in der Registerkarte *Views* definiert und gespeichert werden. Siehe *Dashboard-Ansichten erstellen: Gitter-, Trend-, Spektren- und 3D-Darstellung* → .

4 Hinzufügen von Daten in Raman Data Library

Dieses Kapitel enthält Anweisungen zum Erstellen von Datenströmen, Spektralquellen und zum Importieren von SPC-Dateien in Datensätze. Das Hinzufügen von Daten zur Raman Data Library kann automatisch oder manuell erfolgen. Die automatische Datenbeschaffung wird über das Fenster Spectral Sources eingerichtet. Manuelle Importe von SPC-Dateien erfolgen über das Fenster Datasets.

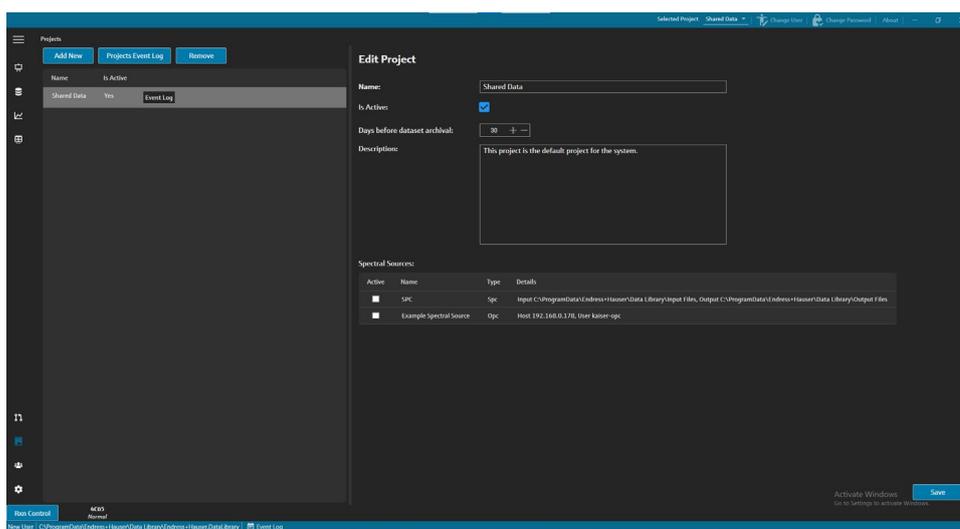
Es gibt drei Möglichkeiten, Raman-Spektren in Raman Data Library zu bringen:

- Manueller Import von Ordnern mit SPC-Dateien
- Automatischer Import von SPC-Dateien aus einem überwachten Ordner
- Automatischer Import über eine OPC-Verbindung zu Raman RunTime

4.1 Projekte

Projekte enthalten und verwalten Daten. Um Daten in Raman Data Library zu importieren, muss zunächst ein Projektcontainer für die Daten erstellt werden. Im Fenster Projects kann Folgendes ausgeführt werden:

- **Add New.** Neues Projekt hinzufügen.
- **Projects Event Log.** (Nur cGxp-Version) Ereignisprotokoll für alle Projekte anzeigen.
- **Event Log.** (cGxp-Version) Ereignisprotokoll für ein bestimmtes Projekt anzeigen.
- **Remove.** Ausgewähltes Projekt entfernen. In der cGxp-Version von Raman Data Library ist die Rolle Data Remover erforderlich, um ein Projekt zu entfernen.
- **Save.** Ausgewähltes Projekt speichern.



A0055978

Abbildung 10. Fenster Projects

4.1.1 Neues Projekt hinzufügen

Um ein Projekt hinzuzufügen,

1. im Fenster Projects  auf **Add New** klicken.
Es wird der Bereich Edit Project angezeigt.
2. Folgende Daten eingeben:
 - **Name.** Der Name des Projekts.
 - **Is Active.** Angabe, ob das Projekt aktiv ist oder nicht. Wenn das Kontrollkästchen Active deaktiviert ist, wird das Projekt nicht in der Liste Selected Project in der Menüleiste angezeigt.
 - **Tage bis zur Archivierung des Datensatzes.** Die Anzahl der Tage, nach denen Datensätze automatisch archiviert und im Fenster Datasets ausgeblendet werden. Archivierte Datensätze können im Fenster Datasets angezeigt werden, indem das Kontrollkästchen Show Archived Datasets aktiviert wird.

- **Description.** Die Beschreibung des Projekts.
- **Spectral Sources.** Bestimmt, welche Spektralquellen für das ausgewählte Projekt aktiv sind.
Spektren, Datenfelder und Datensätze, die in einem Projekt erstellt werden, können in einem anderen Projekt nicht angezeigt werden. Bei geteilten Datenprojekten können die in einem Projekt gespeicherten Daten jedoch mit anderen Projekten geteilt werden. Dies ist nützlich, um Referenzspektren oder gemeinsame Datenfelder zu speichern, damit sie einfach in mehrere Projekte aufgenommen werden können. Um ein gemeinsam genutztes Datenprojekt zu erstellen, wählen Sie alle Datenquellen, die für das Projekt gelten, aus der Liste aus.

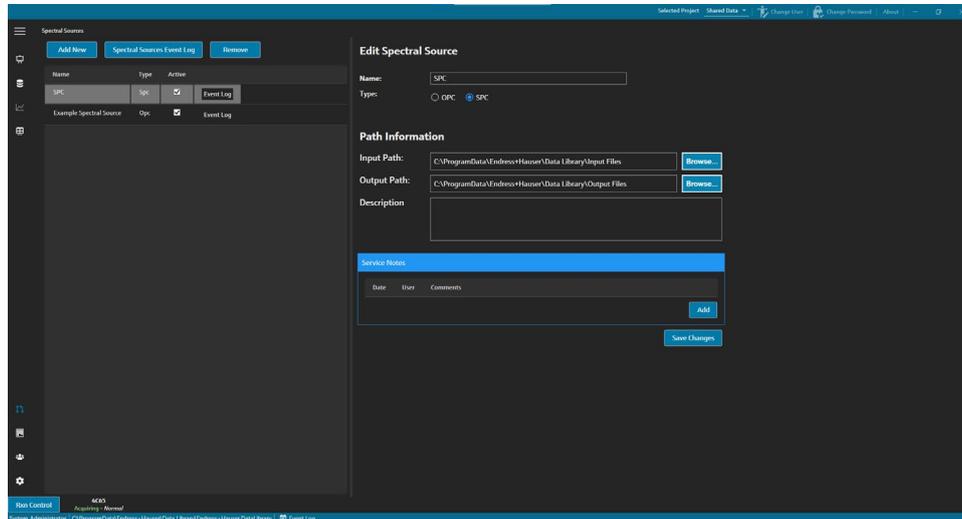
3. Auf **Save** klicken.

4.2 Spektralquellen

Spektralquellen sind Quellen für Spektraldaten. Bei einer Spektralquelle kann es sich um einen überwachten Eingangsordner halten, der spektroskopische Dateien (.spc) oder Spektren enthält, die in Echtzeit über eine OPC-Verbindung an einen Raman Rxn-Analysator übertragen werden. In der cGxP-Version von Raman Data Library ist die Rolle Spectral Sources Manager erforderlich, um Spektralquellen hinzuzufügen oder Änderungen an bestehenden Spektralquellen vornehmen zu können.

Aus dem Fenster Spectral Sources kann Folgendes ausgewählt werden:

- **Add New.** Neue Spektralquelle erstellen.
- **Spectral Sources Event Log.** Ereignisprotokoll für alle Spektralquellendateien anzeigen.
- **Event Log.** Zeigt ein Ereignisprotokoll für eine bestimmte Spektralquelle an.
- **Remove.** Ausgewählte Spektralquellendatei entfernen. In der cGxp-Version von Raman Data Library ist die Rolle Data Remover erforderlich, um eine Spektralquelle zu entfernen.
- **Name.** Der Anzeigename der Spektralquelle.
- **Type.** Der Typ der Spektralquelle, entweder OPC oder SPC.



A0055979

Abbildung 11. Fenster Spectral Sources

4.2.1 OPC-Spektralquelle hinzufügen

Es kann eine OPC-Spektralquelle erzeugt werden, damit Raman Data Library eine OPC Unified Automation (UA) Client-Verbindung zu einem Raman RunTime OPC-Server herstellen kann. Die OPC-Verbindung erlaubt Benutzern, Spektren von Endress+Hauser Raman Rxn-Analysatorsystemen anzuzeigen, zu kontrollieren und zu erfassen. Es können mehrere Raman-Analysatoren (bis zu 4) an eine Raman Data Library angeschlossen werden.

Für eine OPC-Verbindung zwischen Raman Data Library und Raman RunTime ist mindestens Raman RunTime V6.4 erforderlich. Raman Rxn-Analysatoren, die mit älteren Raman RunTime-Versionen als V6.4 arbeiten, können eine SPC-Spektralquelle verwenden, wie in *SPC-Spektralquelle hinzufügen* → beschrieben.

Wenn eine OPC-Spektralquelle verwendet wird, Ruhezustandsfunktion des Geräts in den Windows-Einstellungen deaktivieren.

OPC-Spektralquelle hinzufügen

1. Im Fenster Spectral Sources auf **Add New** klicken.
Das Fenster Edit Spectral Source öffnet sich.

Abbildung 12. OPC-Spektralquelle bearbeiten

2. Einen Namen für die Spektralquelle eingeben.
3. **OPC** auswählen.
4. Folgende Verbindungseinstellungen eingeben:
 - **Host Name.** Der Hostname des Raman-RunTime-OPC-Servers.
 - **Username.** Der Benutzername, der zur Erzeugung der OPC-Verbindung zum Raman RunTime OPC-Server verwendet wird. Der Standardbenutzername ist **kaiser-opc**.
 - **Password.** Das Passwort, das zur Erzeugung der OPC-Verbindung zum Raman RunTime OPC-Server verwendet wird. Das Standardpasswort ist **opc**.
 - **Description.** Eine optionale Beschreibung der OPC-Spektralquelle.
 - **Status.** Ein Status der OPC-Spektralquelle, entweder Active oder Inactive.
 - **Service Notes.** Kommentare des Servicepersonals oder Benutzers zur OPC-Spektralquelle. Auf **Add** klicken, um einen neuen Servicehinweis hinzuzufügen.
5. Auf **Test Connection** klicken, um die Verbindung zum Raman RunTime-OPC-Server zu testen.
Um eine erfolgreiche Verbindung sicherzustellen:
 - Vor dem Speichern einer OPC-Spektralquelle eine Testverbindung durchführen.
 - Wenn die Testverbindung nicht erfolgreich ist, muss sichergestellt werden, dass der Raman-Analysator eingeschaltet, verfügbar und mit dem Netzwerk verbunden ist und dass die Netzwerkports, die in Abschnitt *Raman Rxn2 and Raman Rxn4 network configuration* in der *Raman RunTime Betriebsanleitung (BA02180C)* definiert wurden, entsprechend konfiguriert sind.
 - Eine nicht erfolgreiche Verbindung kann einfach daran liegen, dass die Hostnamen-Auflösung im lokalen IT-/OT-Netzwerk nicht richtig konfiguriert ist. Den lokalen IT-Administrator über den Vorgang informieren.
 - Alternativ zu den standardmäßigen OPC-Anmeldedaten können auch die Anmeldedaten eines auf dem Raman RunTime-Analysator konfigurierten Benutzerkontos verwendet werden, um die OPC-Verbindung des Analysators zu authentifizieren.
6. Auf **Save Changes** klicken.

Wenn die Verbindung erfolgreich hergestellt wurde, wird eine Meldung eingeblendet, und die Werkzeugleiste zur Rxn-Steuerung erscheint in der Leiste am unteren Bildschirmrand zusammen mit dem zugewiesenen Namen der Spektralquelle und ihrem Status.

4.2.2 SPC-Spektralquelle hinzufügen

Die SPC-Spektralquellenfunktion importiert automatisch Spektren von Raman Rxn-Analysatoren, die mit Raman RunTime Versionen niedriger als V6.4 arbeiten. Dies ermöglicht die Verwendung von Raman Data Library mit den älteren Raman-Software-Lösungen von Endress+Hauser. Das Hinzufügen einer SPC-Spektralquelle ermöglicht es Raman Data Library .spc-Dateien automatisch zu lesen, in der Datenbank von Raman Data Library zu speichern und sie für Datensätze zur Verfügung zu stellen.

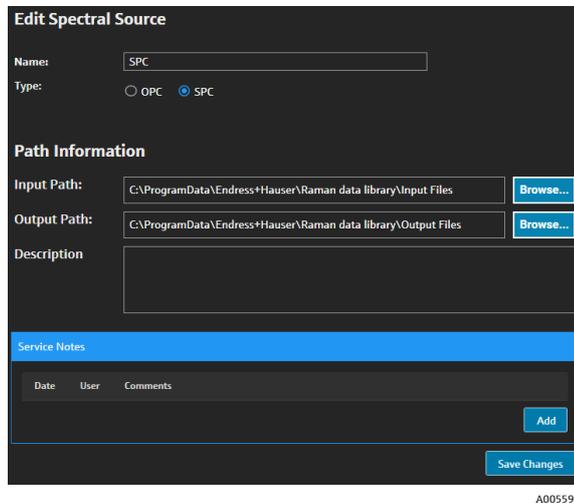
Die SPC-Spektralquelle erfordert einen Eingabepfad, den Raman Data Library auf neue Dateien überwacht, um sie zu importieren, und einen Ausgabepfad, zu dem Raman Data Library die SPC-Dateien verschiebt, nachdem sie importiert wurden.

Anweisungen zum Export von .spc-Dateien aus Raman RunTime siehe *SPC file network export* in der *Raman RunTime Betriebsanleitung* (BA02180C).

SPC-Spektralquelle hinzufügen

- Auf dem Computer, auf dem Raman Data Library installiert ist, den/die .spc-Ordner erzeugen:
 - Für Raman RunTime Versionen niedriger als V6.4 einen Ordner mit dem Namen **Output spectra** erstellen.
 - Für ältere Software-Lösungen zwei Ordner erzeugen. Für einen Ordner den Namen **Input spectra** und für den anderen den Namen **Output spectra** vergeben. SPC-Dateien aus älteren Raman-Software-Lösungen müssen in den Ordner **Input spectra** verschoben werden.
- Auf **Spectral Sources**  und anschließend auf **Add New** klicken.

Das Fenster Edit Spectral Source öffnet sich.



A0055981

Abbildung 13. SPC-Spektralquelle bearbeiten

- Einen Namen für die Spektralquelle eingeben.
- SPC auswählen.
- Im Feld **Input Path**:
 - Bei Raman RunTime Versionen niedriger als V6.4 bis zum freigegebenen DataLibraryBatchExport-Ordner unter dem Pfad `\\Computername oder IP-Adresse\DataLibraryBatchExport` blättern.
 - Bei älteren Software-Lösungen den **Input Path** auf das Ausgabeverzeichnis der älteren Software verweisen.
- Im Feld **Output Path** bis zu dem Spektrenausgabeordner blättern, der in Step 1 erzeugt wurde. Dies ist der Verzeichnispfad, der für die Ausgabe der .spc-Dateien verwendet wird, nachdem diese ins System eingelesen wurden.
- (Optional) Folgende Informationen eingeben:
 - Description.** Eine Beschreibung der SPC-Spektralquelle.

- **Service Notes.** Benutzerkommentare zur SPC-Spektralquelle. Auf **Add** klicken, um einen neuen Servicehinweis hinzuzufügen.

8. Auf **Save Changes** klicken und die Eingabeaufforderung mit OK bestätigen.

In Raman RunTime Versionen niedriger als V6.4 enthält der freigegebene Netzwerkordner DataLibraryBatchExport Unterordner und .spc-Dateien, die auf dem Raman-Analysator erfasst wurden. Nachdem die .spc-Dateien eingelesen und zur Raman Data Library hinzugefügt wurden, werden sie aus diesem Netzwerkverzeichnis in den Spektrenausgabeordner verschoben, der wie weiter oben beschrieben, erzeugt wurde. Alle .spc-Dateien bleiben auf dem Raman-Analysator. Sie werden lediglich aus dem Ordner DataLibraryBatchExport verschoben.

4.3 Datensätze

Das Fenster Datasets dient zum Erstellen, Anzeigen, Importieren, Exportieren und Entfernen von Datensätzen. Für vorhandene Datensätze können zusammenfassende Informationen zum Datensatz angezeigt werden.

In Raman Data Library enthält ein Datensatz mindestens ein Spektrum. Datensätze können für Analysen oder Modellierungen innerhalb der Software oder für den Export in externe Programme kombiniert werden. Um Spektren anhand eines Datensatzes analysieren zu können, muss mindestens ein Spektrum ausgewählt werden.

Im Fenster Datasets kann Folgendes ausgewählt werden:

- **Create New Dataset.** Zeigt den Bereich **Create Dataset** an. In der cGxp-Version von Raman Data Library ist die Rolle Data Operator erforderlich, um neue Datensätze zu erstellen.
- **Analyze.** Öffnet den ausgewählten Datensatz und zeigt den Datensatz im Analysefenster an.
- **Import Data Library.** Importiert eine vorhandene Datensatzdatei (.delexport).
- **Export.** Zeigt den Exportbereich an.
- **Remove.** Entfernt den ausgewählten Datensatz. Um einen Datensatz zu entfernen, ist eine Anmeldung mit der Rolle Data Remover erforderlich.
- **Show Inactive Datasets.** Zeigt die mit inaktiv markierten Datensätze an.
- **Show Archived Datasets.** Zeigt Datensätze an, die archiviert wurden. Datensätze werden nach einer konfigurierbaren Anzahl von Tagen automatisch als archiviert markiert. Die Anzahl Tage kann im Feld Days before dataset archival im Fenster Projects geändert werden.

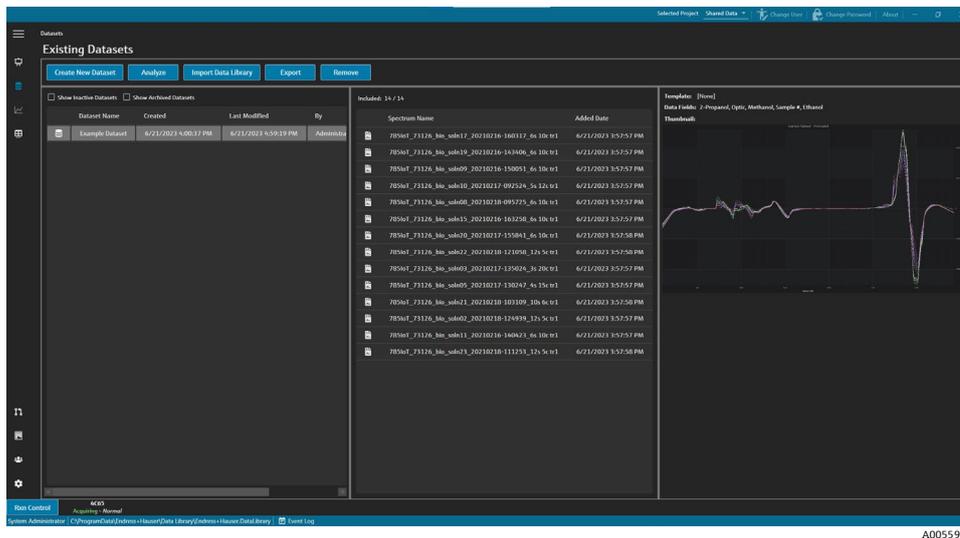


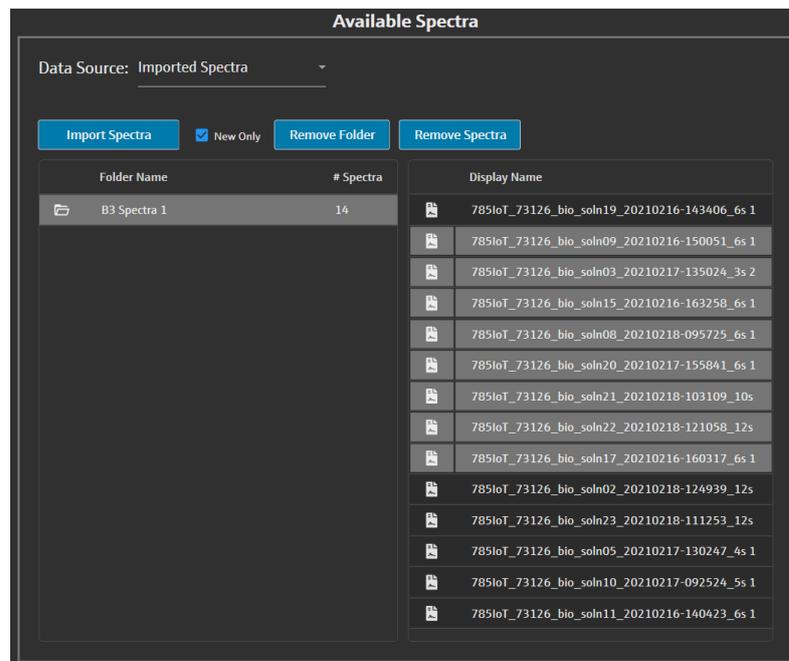
Abbildung 14. Vorhandene Datensätze

4.3.1 Datensatz erstellen

Um Spektren auszuwählen, die in einen Datensatz aufgenommen werden sollen, können Daten aus verschiedenen Quellen ausgewählt werden. Folgende Datenquellen stehen zur Verfügung:

- **Imported Spectra.** Diese Auswahl zeigt alle verfügbaren Ordner und Spektren an, die in Raman Data Library importiert wurden.
- **Reference Spectra.** Diese Auswahl zeigt alle Spektren an, die als Referenzspektrum markiert sind.
- **Search.** Diese Auswahl ermöglicht die Suche nach Spektren, die definierte Kriterien erfüllen. Die Suchkriterien können einzeln hinzugefügt oder entfernt werden. Spektren können nach einem Namensfeld, einem Startdatum, einem Enddatum oder nach beliebigen definierten Datenwerten für Datenfelder, die als durchsuchbar definiert sind, gesucht werden.
- **Existing Datasets.** Diese Auswahl ermöglicht die Suche nach Spektren, die in einem anderen Datensatz vorhanden sind. Eine Übersicht des ausgewählten Datensatzes wird angezeigt. Wenn **Include** ► angeklickt wird, werden alle Spektren aus dem ausgewählten Datensatz einbezogen.
- **Folders.** Diese Auswahl listet Spektren auf, die über eine OPC-Verbindung zu Raman RunTime gesammelt wurden und in Ordnern auf dem Computer von Raman Data Library gespeichert sind.

Sobald die verfügbaren Spektren ausgewählt wurden, können die ausgewählten Spektren mit **Include** ► in den neuen Datensatz integriert werden. Um Spektren aus dem neuen Datensatz zu entfernen, die entsprechenden Spektren auswählen und auf **Remove** klicken.



A0055983

Abbildung 15. Datenquelle, Bereich für importierte Spektren

Datensatz erstellen

1. Im Hauptmenü auf **Datasets**  klicken.
2. Auf **Create New Dataset** klicken.
Das Fenster Create Dataset wird angezeigt.

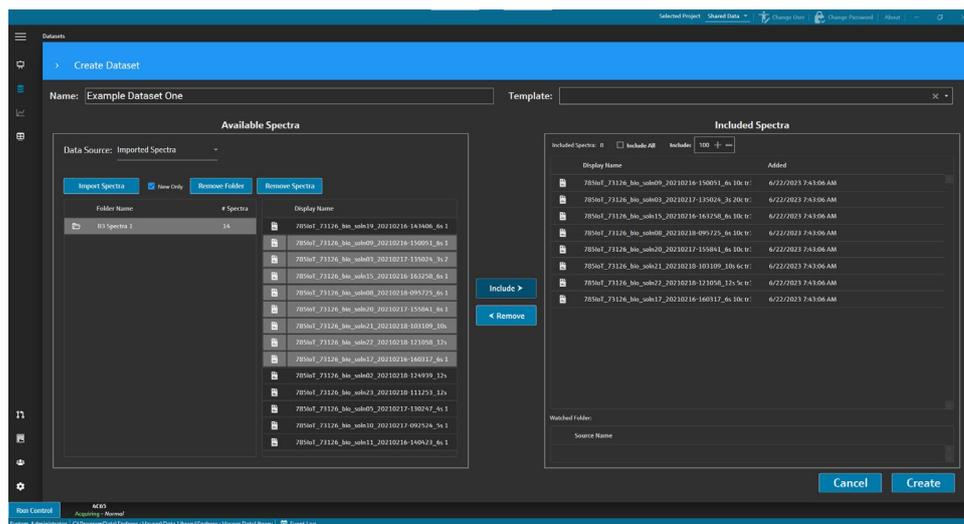


Abbildung 16. Fenster Create Dataset

3. Im Fenster Create Dataset Folgendes eingeben:
 - **Name.** Name des neuen Datensatzes. Datensatznamen müssen eindeutig sein und eine Länge von 1 bis 100 Zeichen haben.
 - **Template.** Die beim Erstellen des Datensatzes zu verwendende Vorlage. Vorlagen können verwendet werden, um vorab ausgewählte Datenfelder, Vorbehandlungen, Spitzenwerte, Bereichen, Ansichten und Dashboard-Registerkarten automatisch auf einen neuen Datensatz anzuwenden.
4. Aus der Datenquellenliste Folgendes auswählen:
 - **Import Spectra** zur Auswahl eines Ordners mit Spektrendateien (.spc).
 - **Reference Spectra** zur Auswahl von Spektren, die als Referenzspektrum markiert sind.
 - **Search** zur Suche nach Spektren, die bestimmte Kriterien erfüllen. Spektren können über ein Namensfeld, ein Startdatum, ein Enddatum oder andere Datenwerte gesucht werden.
 - **Existing Datasets** zur Suche nach Spektren, die in einem anderen Datensatz vorhanden sind. Bei Klick auf **Include >** werden alle Spektren aus dem ausgewählten Datensatz einbezogen.
 - **Folders** zur Auswahl von Spektren, die über eine OPC-Verbindung zu Raman RunTime gesammelt wurden und in Ordnern auf dem Computer von Raman Data Library gespeichert sind. Die Spektrendateinamen werden im Ordnerbrowser nicht angezeigt.
5. Im Fenster **Available Spectra** die Spektren auswählen, die berücksichtigt werden sollen, oder durch Auswahl von **Include All** im Spektrumfenster, alle Spektren im Ordner importieren.
Die im neuen Datensatz integrierten Spektren werden unter **Included Spectra** angezeigt.
6. Im Fenster **Included Spectra** können zu entfernende Spektren ausgewählt werden.
 - **Include All** auswählen, um alle Spektren der Auswahl in Step 5 zu berücksichtigen oder nur eine Teilmenge der Auswahl einzubeziehen, bei der die Software jedes zweite oder dritte Spektrum auswählt.
 - Auf **Remove Folder** klicken, um den ausgewählten Ordner und alle Spektren innerhalb dieses Ordners zu entfernen. In der cGxp-Version von Raman Data Library ist die Rolle Data Remover erforderlich, um einen Ordner zu entfernen.
 - Auf **Remove Spectra** klicken, um die ausgewählten Spektren aus dem Datensatz zu entfernen. In der cGxp-Version von Raman Data Library ist die Rolle Data Remover erforderlich, um Spektren zu entfernen.
7. Auf **Create** klicken.
Der Arbeitsfluss von Raman Data Library erstellt den neuen Datensatz und verschiebt sich im Arbeitsfluss zum Fenster Analyze.
8. Auf **Save Dataset** klicken.

4.3.2 Speichern eines Datensatzes

Datensätze werden nicht automatisch in Raman Data Library gespeichert, es sei denn, die Erfassung für einen Datensatz wird aus Raman Data Library heraus initiiert. Es ist wichtig, die Datensätze regelmäßig zu speichern.

Datensätze können über das Fenster **Analyze Dataset** gespeichert werden. Wird Raman Data Library vor dem Speichern des Datensatzes geschlossen, gehen alle Änderungen verloren.

Datensatz speichern

1. Im Hauptmenü auf **Analyze Dataset**  klicken.
2. Auf **Save Dataset** klicken.

Wenn der erste Datensatz gespeichert wird, kann der Vorgang einige Minuten dauern. Alle nachfolgenden Speichervorgänge verlaufen schneller. Nachdem ein Datensatz gespeichert wurde, wird das Feld **Last Saved** aktualisiert und zeigt das Datum und die Uhrzeit der letzten Speicherung an.

4.3.3 Datensatz freigeben

Freigegebene Datensätze sind *schreibgeschützt* und können nicht geändert werden. Im Fenster **Analyze Dataset** kann die Freigabe eines Datensatzes erteilt oder widerrufen werden.

Erteilung der Freigabe oder Widerruf der Freigabe eines Datensatzes

- Im Fenster **Analyze Dataset** auf **Approve** klicken, um den Datensatz als freigegeben zu markieren.
- Auf **Unapprove** klicken, um die Freigabe eines Datensatzes zu widerrufen.

4.4 Datenfelder

Datenfelder sind qualitative und quantitative Informationen, die mit einem Spektrum verknüpft sind. Für quantitative Analysen kann der Benutzer die Präzision, Einheiten, primäre Methodendetails und weitere mit dem Spektrum verbundene Informationen festlegen.

Raman Data Library sammelt voreingestellte Datenfeldinformationen aus dem SPC-Protokoll oder den OPC-Datenquellen. Die in der Datenfeldliste angezeigten Einheiten und Datenwerte können je nach Art des Spektrenabrufs variieren. Beim Import von Daten über OPC aus Raman RunTime v6.4+ werden die meisten Standarddatenfelder automatisch ausgefüllt. Um Benutzerfehler beim Import zu reduzieren, können Datenfeldern Aliasnamen hinzugefügt werden.

Im Fenster **Data Fields** können Datenfelder hinzugefügt, aktualisiert und gelöscht werden. In der cGxp-Version von Raman Data Library ist die Rolle **Data Fields Manager** erforderlich, um Datenfelder zu ändern.

Im Fenster **Data Fields** kann Folgendes ausgewählt werden:

- **Add.** Erstellt ein neues Datenfeld.
- **Remove.** Entfernt das ausgewählte Datenfeld. In der cGxp-Version von Raman Data Library ist die Rolle **Data Remover** erforderlich, um ein Datenfeld zu entfernen.
- **Data Fields Event Log.** (nur cGxp-Version) Zeigt das Ereignisprotokoll für alle Datenfelder an.
- **Event Log.** (nur cGxp-Version) Zeigt das Ereignisprotokoll für ein bestimmtes Datenfeld an.
- **Save.** Speichert das ausgewählte Datenfeld.

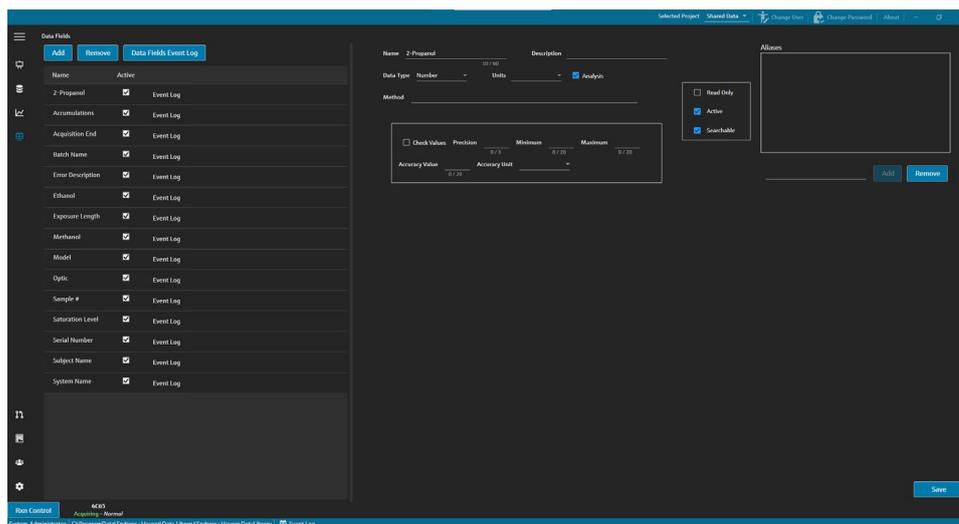


Abbildung 17. Fenster Data Fields

A0055985

Eigenschaften von Datenfeldern

| Eigenschaft | Bedeutung |
|-------------|--|
| Name | Name des Datenfelds. |
| Description | Beschreibung des Datenfelds. |
| Aliases | Es können Aliasnamen für gängige Variationen in der Schreibweise und Kennzeichnung hinzugefügt werden, um Benutzerfehler zu reduzieren. Beispielsweise können die Begriffe <i>Konzentration</i> , <i>Konzentrierung</i> und <i>Konz.</i> mit dem gleichen Datenfeldnamen verbunden werden. Durch das Hinzufügen eines Aliasnamens werden häufige Fehler beim Sammeln von Daten beim Import vermieden, und die Kennzeichnung im gesamten Arbeitsablauf wird automatisiert. Beim Datenimport werden Aliasnamen für den Abgleich mit einer Spaltenüberschrift in Excel verwendet. Unter diesem Menüpunkt kann ein Aliasname hinzugefügt oder entfernt werden. |
| Data Type | Die Art des Datenwerts, der für das Datenfeld eingegeben werden kann: <ul style="list-style-type: none"> Boolescher Wert Zahl Datum Text |
| Units | Die für den Datentyp verwendeten Einheiten. |
| Analysis | Datenfelder, die mit Analysis gekennzeichnet sind, können in Analysevorgängen verwendet werden. |
| Method | Ein beschreibendes Feld zur Angabe der Erfassungsmethode. |
| Read Only | Datenfelder, die mit Read Only gekennzeichnet sind, können nicht geändert werden. |
| Active | Datenfelder, die mit Active gekennzeichnet sind, erscheinen im Fenster Analysis. |
| Searchable | Datenfelder, die mit Searchable gekennzeichnet sind, können durchsucht werden. |

| Eigenschaft | Bedeutung |
|----------------|---|
| Check Values | Datenfelder, die mit Check Values gekennzeichnet sind, schließen automatisch Datenwerte aus, die nicht den in den Feldern Precision, Minimum, Maximum und Accuracy Value angegebenen Anforderungen entsprechen. |
| Precision | Dieser Wert bezeichnet die erforderliche Anzahl der Stellen hinter dem Dezimalpunkt. |
| Minimum | Untere Grenze für Werte. |
| Maximum | Obere Grenze für Werte. |
| Accuracy Value | Beschreibendes Feld zur Angabe des Genauigkeitsgrades. |
| Accuracy Unit | Beschreibende Feldanzeige zur Genauigkeitseinheit. |

Datenfeld hinzufügen

1. Im Fenster Data Fields auf **Add** klicken.
2. Die Eigenschaften des Datenfelds eingeben. Siehe Tabelle Datenfeldeigenschaften oben.
3. Auf **Save** klicken.

5.1.1 Spektrendarstellung

Auf der Registerkarte Data wird ein Diagramm der Spektren dargestellt. Die Spektrendarstellung zeigt alle enthaltenen Spektren in ihrer unverarbeiteten Form.

Navigieren durch die Spektrendarstellung

| Navigationselement | Navigation |
|---|--|
| — | Einen Rahmen innerhalb der Spektrendarstellung klicken und ziehen, um einen bestimmten Bereich zu vergrößern. Um wieder herauszuzoomen, links auf die Darstellung doppelklicken. |
|  A0055988 | Inhalt zoomen. Zoomt auf den vollen Umfang der Daten. Diese Schaltfläche wird in den meisten Diagrammen angezeigt. |
|  A0055989 | Legende umschalten. Zeigt oder verbirgt die Legende. Diese Schaltfläche wird in den meisten Diagrammen angezeigt. |
|  A0055990 | Spektrumfarbe ändern. Ändert die Farbe des gewählten Spektrums. |

Referenzspektrumnamen ändern

Ein bestimmtes Spektrum kann umbenannt werden, wenn beispielsweise bekannt ist, dass das erste gesammelte Spektrum 100 % eines Analyten ausmacht.

1. Im Spektrenrasterbereich die Spektren auswählen.
2. Rechts klicken, anschließend **Mark as Reference** auswählen oder die Schaltfläche **Mark as Reference** anklicken. Der Dialog Spectrum rename required wird angezeigt.
3. Einen Namen für die Referenzspektren eingeben und auf OK klicken.
4. Die Legende der Spektrendarstellung umschalten und bestätigen, dass das Referenzspektrum jetzt umbenannt wurde.
5. Auf **Save Dataset** klicken.

Um den Namen eines Spektrums auf das Original zurückzusetzen, auf **Select Fields** klicken und anschließend **Name** und **Close** auswählen. Der ursprüngliche Name des Spektrums erscheint in der Liste. Anzeigenamen können bearbeitet werden, der ursprüngliche Name aus der Erfassungssoftware jedoch nicht.

Anzeigefarbe einer Spektrumanzeige ändern

Die Farbe eines bestimmten Spektrums kann geändert werden, wenn sich beispielsweise das Referenzspektrum visuell von anderen Spektren abheben soll.

1. Im Spektrenrasterbereich das Spektrum auswählen.
2. Auf **Style Spectrum**  klicken und anschließend die gewünschte Farbe auswählen. Das Spektrum wird nun in der ausgewählten Farbe angezeigt.
3. Auf **Save Dataset** klicken.

5.1.2 Datenfeld auswählen

Rechts neben dem Spektrendarstellungsbereich sind Datenfelder aufgelistet. Bestimmte Datenfelder können durch Aktivieren oder Deaktivieren der Spalte **Displayed** angezeigt oder ausgeblendet werden. Wenn ein Datenfeld mit Displayed markiert ist, kann es in der Analyse verwendet werden und ist im Datenexport enthalten. Die angezeigten Datenfelder sind Bestandteil einer Vorlage. Siehe Abschnitt *Vorlagen erstellen* → .

Um Datenfelder in der Liste der angezeigten Datenfelder auszuwählen, **Displayed** neben dem Feld auswählen, das angezeigt werden soll. Die ausgewählten Felder werden jetzt im Spektrenraster angezeigt. Die erste Auswahl aus der Liste der Datenfelder wird erst zeitverzögert angezeigt. Nachfolgende Datenfelder werden schneller angezeigt.

Die Datenfeldliste ist editierbar. Siehe Abschnitt *Datenfelder* → .

Datenfelder im Spektrenraster auswählen

1. Auf **Select Fields** im Spektrenraster klicken.
Das Fenster für die Feldauswahl wird angezeigt.
2. Die gewünschten Felder auswählen. Standardmäßige Felder aus Raman Runtime umfassen:
 - Name
 - Anzeigename
 - Beginn: Datum, Uhrzeit
 - Ende: Datum, Uhrzeit
 - Mittelpunkt: Datum, Uhrzeit
 - Fehler
3. Auf **Close** klicken.

Die ausgewählten Felder werden jetzt im Spektrenraster angezeigt.

5.1.3 Trenddarstellung der Datenfelder

Rechts neben der Liste der Datenfelder wird ein Diagramm mit Datentrends angezeigt. Die Trenddarstellung des Datenfelds zeigt die Spektraldatenwerte im Zeitverlauf.



Abbildung 19. Trenddarstellung der Datenfelder

Im Datenfeldbereich ist Folgendes möglich:

| Navigationselement | Navigation |
|---|---|
|  A0055988 | Inhalt zoomen. Zoomt auf den vollen Umfang der Daten. Diese Schaltfläche wird in den meisten Diagrammen angezeigt. |
|  A0055989 | Legende umschalten. Zeigt oder verbirgt die Legende. Diese Schaltfläche wird in den meisten Diagrammen angezeigt. |
|  A0055992 | Diagrammdaten in die Zwischenablage kopieren. Kopiert die aktuellen Trenddiagrammdaten in die Zwischenablage. |
|  A0055993 | Punkte ausschließen. Schließt die ausgewählten Datenwerte aus. |

5.1.4 Box Plot

Die Registerkarte Box Plot zeigt einen Boxplot für das ausgewählte Datenfeld an. Es werden das Maximum, das obere Quartil, der Median, das untere Quartil, das Minimum und die Standardabweichung des Datenfeldes angezeigt. Der Boxplot kann bei der Analyse nicht sequenzieller Datenproben nützlich sein.

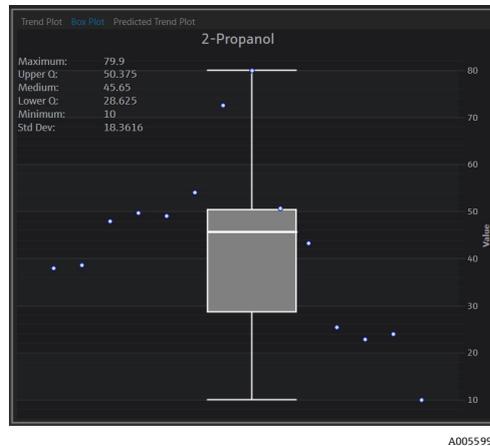


Abbildung 20. Boxplot

5.1.5 Predicted Data Field Trends

Auf der Registerkarte Predicted Data Field Trends werden die vorhergesagten Spektrendatenwerte im Zeitverlauf angezeigt.

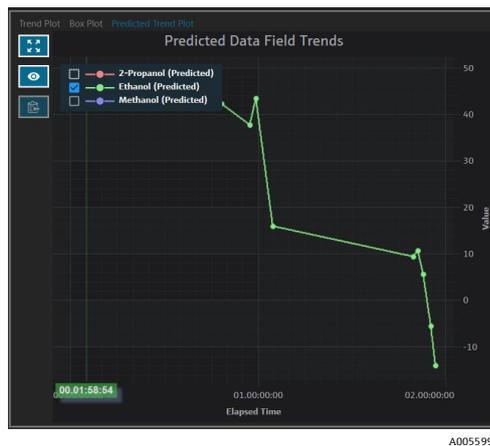


Abbildung 21. Predicted Data Field Trends

5.1.6 Spektrenraster

Am unteren Rand der Registerkarte Data zeigt das Spektrenraster Spektren und deren zugeordnete Datenwerte für angezeigte Felder an.

| All Spectra | | Selected Spectra | | Selected Data Values | | | | Other Actions | | | | | | | | | | | | | | |
|-------------------------------------|--|--------------------------|-------------------|----------------------|--------------------------|----------|--------------------------|---------------|--------------------------|---------|--------------------------|--------|--------------------------|-------------------|--------------------------|---------|--------------------------|---------|--------------------------|-------------|--------------------------|-------------|
| <input type="checkbox"/> | Select Fields | <input type="checkbox"/> | Exclude Unmatched | Included: 6 / 6 | <input type="checkbox"/> | Exclude | <input type="checkbox"/> | Exclude | <input type="checkbox"/> | Include | <input type="checkbox"/> | Remove | <input type="checkbox"/> | Mark as Reference | <input type="checkbox"/> | Exclude | <input type="checkbox"/> | Include | <input type="checkbox"/> | Import Data | <input type="checkbox"/> | Add Comment |
| Include | Display | Mid | Sample # | Optic | Ethanol | Methanol | 2-Propanol | Comments | | | | | | | | | | | | | | |
| <input checked="" type="checkbox"/> | 785lot_73126_bio_soln09_20210216-150051_6s 10c.tr1 | 2/16/2021 3:00:19 PM | 9 | BIO-Optic | 41.8 | 10.1 | 48 | | | | | | | | | | | | | | | |
| <input checked="" type="checkbox"/> | 785lot_73126_bio_soln17_20210216-160317_6s 10c.tr1 | 2/16/2021 4:02:45 PM | 17 | BIO-Optic | 40.2 | 10 | 49.7 | | | | | | | | | | | | | | | |
| <input checked="" type="checkbox"/> | 785lot_73126_bio_soln15_20210216-163258_6s 10c.tr1 | 2/16/2021 4:32:26 PM | 15 | BIO-Optic | 40.9 | 10 | 49 | | | | | | | | | | | | | | | |
| <input checked="" type="checkbox"/> | 785lot_73126_bio_soln03_20210217-135024_3s 20c.tr1 | 2/17/2021 1:49:51 PM | 3 | BIO-Optic | 10 | 10 | 79.9 | | | | | | | | | | | | | | | |
| <input checked="" type="checkbox"/> | 785lot_73126_bio_soln20_20210217-155841_6s 10c.tr1 | 2/17/2021 3:58:09 PM | 20 | BIO-Optic | 10 | 39.4 | 50.6 | | | | | | | | | | | | | | | |
| <input checked="" type="checkbox"/> | 785lot_73126_bio_soln08_20210218-095725_6s 10c.tr1 | 2/18/2021 9:56:53 AM | 8 | BIO-Optic | 10 | 46.7 | 43.3 | | | | | | | | | | | | | | | |
| <input checked="" type="checkbox"/> | 785lot_73126_bio_soln21_20210218-103109_10s 6c.tr1 | 2/18/2021 10:30:37 AM | 21 | BIO-Optic | 24.1 | 50.4 | 25.5 | | | | | | | | | | | | | | | |
| <input checked="" type="checkbox"/> | 785lot_73126_bio_soln22_20210218-121050_12s 5c.tr1 | 2/18/2021 12:10:26 PM | 22 | BIO-Optic | 10 | 66 | 24 | | | | | | | | | | | | | | | |

Abbildung 22. Spektrenraster

Im Spektrenrasterbereich können Spektren und Felder ausgewählt werden, die einbezogen werden sollen. Die Funktionalität des Spektrenrasters wird im Folgenden beschrieben.

| Spektrenrasterelement | Anzeigefunktionalität |
|-----------------------|--|
| All Spectra | <ul style="list-style-type: none"> ▪ Select Fields. Legt fest, welche Felder im Raster angezeigt werden sollen: Name, Anzeigename, Startdatum, Enddatum, Mittelwertzeit und Fehler. Bei langen Datenerfassungen kann es nützlich sein sowohl den Start- als auch den Mittelpunkt zu betrachten. ▪ Exclude Unmatched. Es werden alle Spektren ausgeschlossen, die nicht mindestens einen Datenwert für die ausgewählten Datenfelder enthalten. ▪ Exclude/Include. Ausschließen oder Einbeziehen aller Spektren. |
| Selected Spectra | <ul style="list-style-type: none"> ▪ Exclude. Es werden Spektren ausgeschlossen, die im Spektrenraster ausgewählt sind. ▪ Include. Es werden Spektren einbezogen, die im Spektrenraster ausgewählt sind. ▪ Remove. Es werden Spektren entfernt, die im Spektenraster ausgewählt sind. ▪ Mark as Reference. Markiert das erste Spektrum, das im Spektrenraster ausgewählt wird, als Referenzspektrum. Der Benutzer muss einen neuen Anzeigenamen für das Spektrum eingeben. |
| Selected Data Values | <ul style="list-style-type: none"> ▪ Exclude. Schließt die ausgewählten Datenwerte aus. ▪ Include. Ausgewählte Datenwerte werden einbezogen. |
| Other Actions | <ul style="list-style-type: none"> ▪ Import Data. Auswahl einer Excel-Datei für den Datenimport. Öffnet das Fenster Import Data. ▪ Add Comment. Fügt einen Datensatzkommentar hinzu. Der Benutzer wird aufgefordert, ein Startdatum und ein Enddatum auszuwählen. Der Kommentar wird für alle Spektren in diesem Bereich hinzugefügt. Die Datensatzkommentare beziehen sich nur auf den Datensatz, in dem sie hinzugefügt werden. Die Datensatzkommentare werden nicht in anderen Datensätzen angezeigt. |

Ausschluss von Daten aus dem Spektrenraster oder der Darstellung

Es ist möglich, Spektren aus dem Raster und der Darstellung auszuschließen, wenn beispielsweise der Laser während eines Teils des Experiments blockiert ist oder anderweitig unbrauchbare Daten erzeugt.

1. Auf der Spektrenanzeige heranzoomen, bis nur noch die Junk-Daten zu sehen sind.
2. Die Maus über eine Spektrenlinie im Diagramm bewegen und klicken, um sie auszuwählen.
Das Spektrum wird nun auch im Spektrenraster hervorgehoben.
3. Mit der Umschalttaste werden alle Spektren oberhalb des ausgewählten Spektrums hervorgehoben.
4. Mit der ausgewählten Spektrenbox auf **Exclude** klicken.
5. Auf **Save Dataset** klicken.

Wenn nicht alle Spektren beim ersten Versuch hervorgehoben wurden, müssen möglicherweise noch weitere Spektren ausgeschlossen werden. Durch herauszoomen in der Spektrendarstellung kann überprüft werden, ob alle Junk-Spektren nun ausgeschlossen sind.

Daten importieren

Es können Datenfelder und Werte aus einer vorhandenen Excel-Tabelle importiert werden.

1. Im Gitterraster auf **Import Data** klicken.
Ein Fenster zum Auswählen einer zu importierenden Datei wird angezeigt.
2. Zur Excel-Datei navigieren und auf **Open** klicken.
Nach dem Navigieren zur Excel-Datei wird das Fenster zum Import von Daten angezeigt.

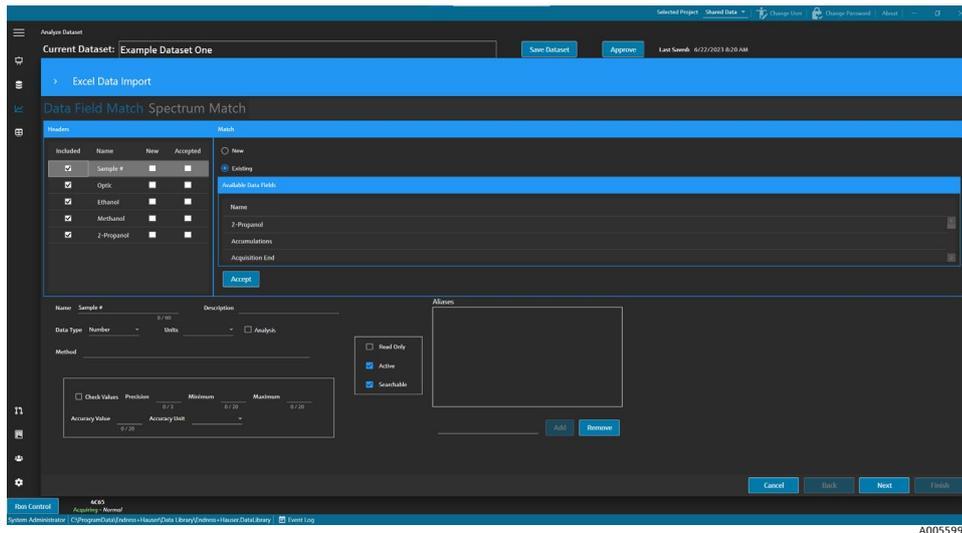


Abbildung 23. Datenimport, Data Field Match

3. In der Registerkarte Data Field Match kann Folgendes ausgewählt werden:
 - **Included.** Bestimmt, ob das Datenfeld mit seinen Werten importiert wird.
 - **Match New/Existing.** Manuelle Auswahl, ob das ausgewählte Feld als neu oder als vorhanden behandelt wird. Wenn das Feld vorhanden ist, kann ausgewählt werden, mit welchem Feld es abgeglichen werden soll. Bei einem neuen Feld kann es auf dieselbe Weise bearbeitet werden wie im Data Field Editor (siehe oben).
 - **Accepted.** Datenfelder können als Akzeptiert markiert werden, um Änderungen nachzuverfolgen.
4. Das Datenfeld muss definiert werden. Eine Beschreibung, Einheiten, Aliasnamen sowie Unter- und Obergrenzen hinzufügen. Siehe Tabelle *Data Field Parameters* → . Sie enthält eine vollständige Beschreibung der Datenfeldparameter.
5. Auf **Next** klicken.
6. In der Registerkarte Spectrum Match Tab kann Folgendes ausgewählt werden:
 - **Pfeile nach oben/unten.** Diese Pfeile können verwendet werden, um Proben nach oben oder unten zu verschieben, um sie mit Spektren in Einklang zu bringen.
 - **Threshold.** Zulässige Differenz zwischen der Spektrumzeit und der nächstgelegenen Probenahmezeit (in Stunden, Minuten oder Sekunden).
 - **Apply Threshold.** Wendet den Schwellenwert auf die Spektren an.
 - **Include Selected.** Ausgewählte Datenwerte werden einbezogen.
 - **Exclude Selected.** Schließt die ausgewählten Datenwerte aus.
 - **Show Only Matched.** Nur Spektren anzeigen, die übereinstimmende Werte aufweisen.

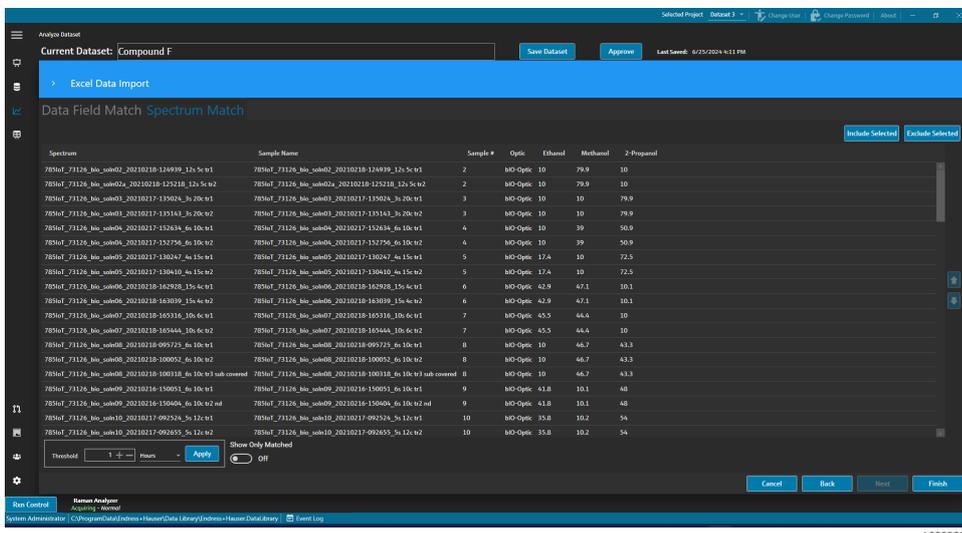


Abbildung 24. Datenimport, Spectrum Match

7. Auf **Finish** klicken. Auf dem folgenden Dialogfeld **OK** klicken.
8. Auf **Save Dataset** klicken.

5.1.7 Comments

Mit der Kachel Comments können Kommentare zu einem Spektrum hinzugefügt werden. Diese Kommentare sind nicht datensatzspezifisch und können in allen Datensätzen angezeigt werden, die auf das Spektrum verweisen.

Kommentare können auch für einen Datensatz oder für einen Zeitraum innerhalb eines Datensatzes hinzugefügt werden. Dies erfolgt über die Schaltfläche **Add Comment** in der Kachel Spectra Grid. Siehe Abschnitt *Spektrengitter ändern* → .

Kommentar zu einem Spektrum hinzufügen

1. In der Kachel Comments auf **Add** klicken.
Das Dialogfeld Add Comment wird angezeigt.
2. Nach Eingabe eines Kommentars auf **OK** klicken.
Die Kachel Comments und das Spektrenraster zeigen nun den Kommentar für das ausgewählte Spektrum an.

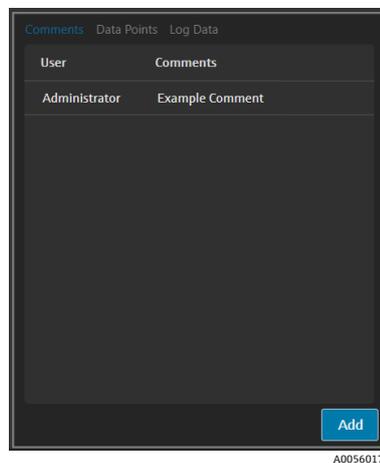
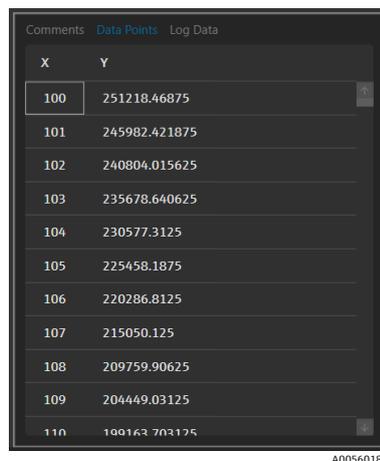


Abbildung 25. Spektrumkommentare

5.1.8 Data points

Die Registerkarte Data Points zeigt eine Liste mit X- und Y-Datenpunkten des ausgewählten Spektrums an.



| 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 |

Abbildung 26. Liste der Datenpunkte

5.1.9 Log data

Die Registerkarte Log Data dient zur Anzeige der Metadaten (an .spc Audit Log) des ausgewählten Spektrums. Auf **Event Log** klicken, um das Ereignisprotokoll für das ausgewählte Spektrum anzuzeigen.

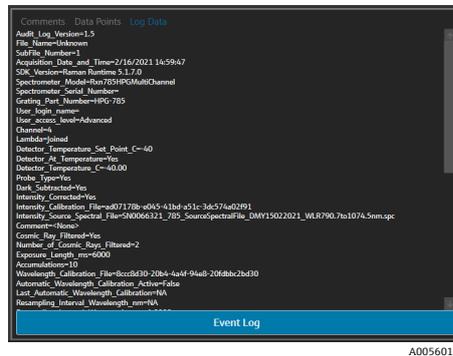


Abbildung 27. Ereignisprotokoll

5.2 Einsatz von Vorbehandlungen

Die Registerkarte Pretreat dient zur Anwendung von Vorbehandlungen auf die Spektren im Datensatz. Vorbehandlungen können jederzeit entfernt, angepasst und erneut angewendet werden. Änderungen werden in der Spektrumdarstellung und in der Analyse der Spitzenwerte und Bereiche angezeigt. Vorbehandlungen sind eine Komponente der *Vorlagen* →

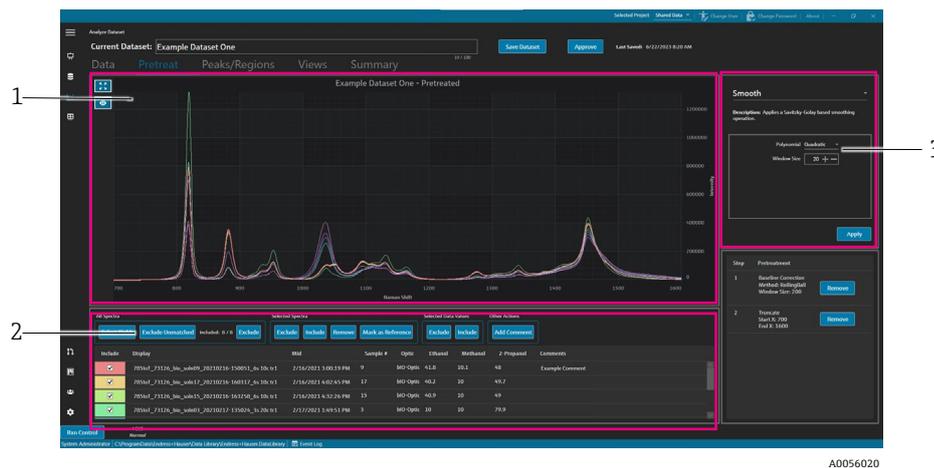


Abbildung 28. Registerkarte Pretreat

| Nr. | Beschreibung |
|-----|---|
| 1 | Spectra plot. Zeigt nicht verarbeitete Spektren bis eine Vorbehandlung durchgeführt wird. Anschließend werden hier nur die vorbehandelten Spektren angezeigt. |
| 2 | Spectra grid. Listet Spektren und zugeordnete Datenwerte für angezeigte Datenfelder auf. Bietet Optionen für die Einbeziehung oder Ausschließung von Spektren und Datenwerten sowie für das Importieren von Referenzdaten. Eine hier vorgenommene Änderung der Optionen, wie beispielsweise das Ein- oder Ausschließen von Spektren, wird auf der Registerkarte Data und für die nächsten Registerkarten im Arbeitsfluss übernommen. |
| 3 | Pretreat pane. Hier werden alle Spektrum-Vorbehandlungen angewendet oder entfernt. |

Vorbehandlungen werden in der Reihenfolge ihrer Auswahl angewendet, um eine sequenzielle Flexibilität zu ermöglichen. Folgende Vorbehandlungen können auf einen Datensatz angewendet werden:

- Auf **Apply** klicken, um die ausgewählte Vorbehandlung anzuwenden.
- Auf **Remove** klicken, um die zugehörige Vorbehandlung zu entfernen.

5.2.1 Begrenzen von Bereichen

Es ist möglich, einen Bereich eines Spektrums zu begrenzen, um sich auf bestimmte Bereiche eines Spektrums zu konzentrieren. Dies geschieht durch die Begrenzung von Spektren auf einen ausgewählten Bereich der x-Achse.

Ein Spektrum begrenzen

1. Auf der Registerkarte Pretreat kann der Bereich der Spektren, auf den man sich konzentrieren möchte, vergrößert werden, indem man auf die Darstellung klickt und ein Quadrat über dem Bereich zeichnet oder auf **Zoom** klickt .

2. Im Bereich Pretreat **Truncate** auswählen.
3. Zum Zuschneiden eines Bereichs die Werte für **Start X** und **End X** eingeben. Auf **Apply** klicken.
Die Vorbehandlung Truncate wird nun im Vorbehandlungsbereich aufgeführt. Nach Anwendung der Funktion Truncate ist sie in der Liste der Vorbehandlungen nicht mehr verfügbar.
4. Auf **Save Dataset** klicken.

Um die Begrenzungen für einen zugeschittenen Bereich zu ändern, alle aktuellen Truncate-Vorbehandlungen entfernen und erneut anwenden.

5.2.2 Glätten

Die Vorbehandlung Smooth wendet einen Savitzky-Golay-Glättungsfilter an.

Glätten eines Spektrums

1. Im Bereich Pretreat **Smooth** auswählen.
2. Eine der folgenden Optionen auswählen:
 - **Polynomial–Quadratic or Cubic.** Quadratische Polynome können bevorzugt werden, wenn die Daten in einem bestimmten Glättungsfenster näherungsweise einem parabolischen Trend folgen. Um die lokalen Datenpunkte anzupassen, können kubische Polynome verwendet werden.
 - **Window size.** Bestimmt, wie viele benachbarte Datenpunkte während des Glättungsprozesses berücksichtigt werden. Die Fenstergröße sollte je nach Rauschpegel im Signal und dem gewünschten Glättungsgrad angepasst werden. Größere Fenster sorgen für eine stärkere Glättung, können aber auch zu mehr Verzögerung oder eine Verzerrung des Signals führen, während kleinere Fenster feinere Details erfassen, aber anfälliger für Rauschen sind.
3. Auf **Apply** klicken.
Die Vorbehandlung Smooth wird nun im Vorbehandlungsbereich aufgeführt. Nach der Anwendung von Smooth ist sie auf der Liste der Vorbehandlungen nicht mehr verfügbar.
4. Auf **Save Dataset** klicken.

Um die Glättungseinstellungen zu ändern, alle aktuellen geglätteten Vorbehandlungen entfernen und den Vorgang wiederholen.

5.2.3 Grundlinienkorrektur anwenden

Die Vorbehandlung baseline correction entfernt Hintergrundgeräusche aus Spektren mithilfe einer Rolling-Ball-, Pearson- oder Ableitungsmethode. Es können nicht zwei verschiedene Grundlinienkorrekturen angewendet werden.

Die Auswahl der Methodenwerte für die Grundlinienkorrekturen sollte auf den spezifischen Merkmalen Ihrer Spektraldaten und der Art der Grundlinienverzerrungen basieren. Es kann nützlich sein, mit verschiedenen Werten zu experimentieren, um die optimale Balance für eine genaue Spitzenwertidentifizierung zu finden.

Bei Auswahl der Pearson-Grundlinienkorrektur bestimmen die Werte für Grundlinienfilter und -anpassung die Intensität oder den Grad der Grundlinienkorrektur.

- **Niedrige Anpassungswerte (0-2).** Diese Werte führen eine geringfügige Grundlinienkorrektur durch. Dies kann von Vorteil sein, wenn die Grundlinie relativ stabil ist und man feine Merkmale in den Daten erhalten möchte. Allerdings werden dadurch möglicherweise nicht alle Grundlinienverzerrungen angemessen entfernt, was zu einer weniger genauen Spitzenwertermittlung führen kann.

- **Mittlere Anpassungswerte (3-4).** Diese Werte sorgen für ein Gleichgewicht zwischen der Beseitigung von Verzerrungen der Grundlinie und der Wahrung der Integrität der Spitzenwerte. Dies ist oft ein guter Ausgangspunkt für viele Datensätze, um die Identifizierung von Spitzenwerten verbessern können, ohne die Daten übermäßig zu verzerren.
- **Hohe Anpassungswerte (5).** Diese Werte wenden eine starke Grundlinienkorrektur an, die für Daten mit erheblicher Grundliniendrift oder mit Rauschen nützlich sein kann. Eine zu starke Korrektur kann jedoch kleinere Spitzenwerte entfernen oder verzerren, was möglicherweise dazu führt, dass Spitzenwerte übersehen oder falsch identifiziert werden.

Grundlinienkorrektur anwenden

1. Im Bereich Pretreat **Baseline Correction** auswählen.
2. Mit klicken auf **Method** die Methode und die gewünschten Einstellungen auswählen:
 - **Derivative.** Berechnet eine geglättete Savitzky-Golay-Ableitung für jedes Spektrum.
 - **Derivative.** Erste oder zweite.
 - **Polyomial.** Quadratisch oder kubisch.
 - **Window size.** Bestimmt, wie viele benachbarte Datenpunkte bei der Grundlinienkorrektur berücksichtigt werden.
 - **Pearson.** Abschätzung der Grundlinie für jedes Spektrum durch iterative Entfernung von Polynomen vierter Ordnung. Dadurch werden Grundlinienverzerrungen beseitigt, indem die polynomische Anpassung vom ursprünglichen Spektrum subtrahiert wird.
 - **Fit type.** Polynom-, Legendre- oder Hermite-Anpassungswerte sind wie folgt definiert:
 - **Polynomial.** Passt eine Polynomfunktion an die Spektraldaten an, um die Grundlinie zu berechnen.
 - **Legendre.** Verwendet Legendre-Polynome, die eine Reihe orthogonaler Polynome sind, um die Grundlinie anzupassen. Legendre-Polynome können einen Fehler über ein bestimmtes Intervall minimieren.
 - **Hermite.** Verwendet Hermite-Polynome, d. h. orthogonale Polynome, die durch eine Gewichtungsfunktion definiert sind, die eine Gaußsche Verteilung beinhaltet. Hermite-Polynome können verwendet werden, wenn Daten eine Gaußsche Verteilung aufweisen.
 - **Baseline filter (0 bis 5).** Bestimmt den Grad der auf die Spektrendaten angewendeten Grundlinienkorrektur.
 - **Fit (0 bis 5).** Bestimmt die Intensität des Anpassungsverfahrens, das auf die Spektraldaten angewendet wird.
 - **Rolling ball.** Zieht einen Kreis fester Größe unter ein Spektrum und entfernt ihn sanft von allen Berührungspunkten.
 - **Window size.** Bestimmt, wie viele benachbarte Datenpunkte während des Glättungsprozesses berücksichtigt werden.
3. Auf **Apply** klicken.

Die Vorbehandlung Baseline Correction wird jetzt auf der Kachel Pretreatment aufgeführt. Sobald die Grundlinienkorrektur angewendet wurde, ist sie nicht mehr in der Liste der Vorbehandlungen verfügbar.
4. Auf **Save Dataset** klicken.

Um die Einstellungen für die Grundlinienkorrektur zu ändern, muss die aktuelle Grundlinienkorrektur-Vorbehandlung entfernt und erneut angewendet werden.

5.2.4 Normalisierung

Die Vorbehandlung Normalize skaliert Spektren auf einen gemeinsamen Bereich. Ein Spektrum kann nicht doppelt normalisiert werden.

Vorgehensweise bei der Normalisierung eines Spektrums

1. Im Bereich Pretreat **Baseline Correction** auswählen.
2. Mit klicken auf **Method** die Methode und die gewünschten Einstellungen auswählen:

- **SNV.** Jedes Spektrum wird normalisiert, indem sein Mittelwert entfernt und durch seine Standardabweichung geteilt wird.
 - **Range.** Normalisiert alle Werte in einem Spektrum auf den Bereich von 0 bis 1.
3. Auf **Apply** klicken.
Die Vorbehandlung Normalize wird jetzt auf der Kachel Pretreatment aufgeführt. Sobald die Vorbehandlung Normalize angewendet wurde, ist sie nicht mehr in der Liste der Vorbehandlungen verfügbar.
 4. Auf **Save Dataset** klicken.

Um die Einstellungen für die Normalisierung zu ändern, muss die aktuelle Vorbehandlung Normalize entfernt und erneut angewendet werden.

5.2.5 Subtraktion

Die Vorbehandlung Subtract subtrahiert ein einzelnes Referenzspektrum von allen Spektren.

Spektrum subtrahieren

1. Im Bereich Pretreat **Subtract** auswählen.
2. Das zu subtrahierende Spektrum in der Liste **Spectrum** auswählen. Auf **Apply** klicken.
Die Vorbehandlung Subtract wird nun auf der Kachel Pretreatment aufgeführt. Sobald die Vorbehandlung Subtract angewendet wurde, ist sie nicht mehr in der Liste der Vorbehandlungen verfügbar.
3. Auf **Save Dataset** klicken.

Um die Einstellungen für Subtract zu ändern, muss die aktuelle Vorbehandlung Subtract entfernt und neu angewendet werden.

5.2.6 Intensität filtern

Die Vorbehandlung Intensity Filter schließt Spektren außerhalb des ausgewählten Mindest- und Höchstbereichs auf der y-Achse aus. Dieser Filter ist hilfreich, wenn beispielsweise der Laser blockiert ist oder anderweitig für einen bestimmten Zeitraum unbrauchbare Daten erzeugt.

Nach Intensität filtern

1. Im Bereich Pretreat **Intensity Filter** auswählen.
2. In den Feldern **Minimum Y** und **Maximum Y** einen minimalen und maximalen Intensitätsbereich eingeben. Auf **Apply** klicken.
Die Vorbehandlung Intensity Filter wird nun auf der Kachel Pretreatment aufgeführt. Sobald die Vorbehandlung Intensity Filter angewendet wurde, ist sie nicht mehr in der Liste der Vorbehandlungen verfügbar.
3. Auf **Save Dataset** klicken.

Um die Einstellungen des Intensitätsfilters zu ändern, die aktuelle Vorbehandlung Intensity Filter entfernen und erneut anwenden.

5.3 Spitzenwerte und Bereiche

In der Registerkarte Peaks and Regions können Berechnungen für bestimmte x-Achsenbereiche in einem Datensatz hinzugefügt werden. Spitzenwerte und Bereiche sind ein Bestandteil von Vorlagen. Siehe Abschnitt *Vorlagen erstellen* → .w

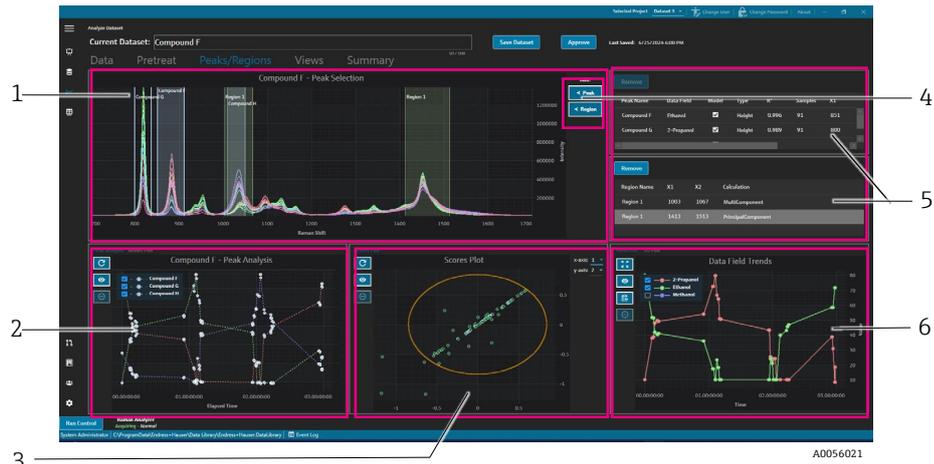


Abbildung 29. Registerkarte Peaks and Regions

| Nr. | Beschreibung |
|-----|--|
| 1 | Spectra Plot. Zeigt vorbehandelte Spektren an. Die Kachel Spectra Plot wird verwendet, um die Positionen von Spitzenwerten und Bereichen auszuwählen. In dieser Kachel kann man nur durch Aufziehen eines Rahmens oder durch Doppelklick hinein- oder herauszoomen. |
| 2 | Peak Plots. Zeigt Ergebnisse der Spitzenwertanalyse an. In dieser Kachel kann zwischen Peak Analysis (Trends) und Model Plot (Regressionsergebnisse) gewechselt werden. |
| 3 | Region Plots. Zeigt Ergebnisse der multivariaten Kurvenauflösung (MCR) oder der Hauptkomponentenanalyse (PCA) an, wenn eine Bereichsanalyse durchgeführt wird. |
| 4 | ◀ Peak und ◀ Region. Zeigt ein Dialogfeld zum Hinzufügen und Definieren neuer Spitzenwerte und Bereiche an. |
| 5 | Peak and Region lists. Listen mit definierten Spitzenwerten und Bereichen. In dieser Kachel können Spitzenwerte und Bereiche ausgewählt und bearbeitet werden. |
| 6 | Data Field Trend Plot. Die Kachel Data Field Trend Plot ermöglicht es, Spitzenwert- und Bereichsergebnisse mit gemessenen Daten zu vergleichen. 3D Plot. Anzeige der Spektrendarstellungen in 3D. |

5.3.1 Spitzenwerte und Bereiche hinzufügen

Das Auswahlfenster für Spitzenwerte/Bereiche zeigt eine visuelle Darstellung von Spitzenwerten und Bereichen innerhalb eines Datensatzes.

Spitzenwerte hinzufügen

1. Auf der Registerkarte Peaks/Regions **◀ Peak** klicken.
Das Popup-Fenster Add Peak wird angezeigt.

Abbildung 30. Popup-Fenster Add Peak

2. Im Feld **Peak Name** den Namen des Spitzenwerts eingeben. Dies ist nachfolgend der Anzeigename des Spitzenwerts.

- Im Feld **Peak Type** den Spitzenwerttyp auswählen (height, area oder center). Center Peak als Auswahl ist nützlich, wenn sich die Spitzenwerte aufgrund einer chemischen oder physikalischen Veränderung verschieben, anstatt zu wachsen oder zu schrumpfen.
- Den Bereich des Spitzenwerts in **X1** und **X2** eingeben.
- Optional in **Data Field** ein Datenfeld auswählen, das dem Spitzenwert zugeordnet werden soll. Das Datenfeld wird in der Modellierungsberechnung verwendet.
- Optional **Model** umschalten, wenn beim Export ein Modell für den Spitzenwert erstellt wird.
- Auf **Add** klicken, um einen neuen Spitzenwert zu erstellen.
- Auf **Save Dataset** klicken.

Sobald der Spitzenwert hinzugefügt wurde, wird ein hervorgehobener Bereich der Spektrendarstellung angezeigt. Durch Verschieben oder Ziehen der Ecken der Spektrendarstellung lässt sich der Spitzenwert verschieben, vergrößern oder verkleinern.

Nach der Erstellung eines Spitzenwerts lässt sich der Trend der Spitzenwertanalyse im Bereich des Spitzenwertdiagramms anzeigen. Nicht benutzte Fenster lassen sich verschieben, um die Trenddarstellung für eine größere Ansicht von Trends zu ändern.



Abbildung 31. Spektrendarstellung mit Spitzenwertanalyse

Bereiche hinzufügen

- Auf der Registerkarte Peaks/Bereiche auf **Region** klicken. Das Popup-Fenster Add Region erscheint.

A0056047

Abbildung 32. Popup-Fenster Add Region

- Folgende Daten eingeben:
 - Im Feld **Region Name** wird der Anzeigename des Bereichs angezeigt.
 - Die Felder **X1** und **X2** stellen die Ausdehnung des Bereichs dar.
 - Das Feld **Calculation** legt fest, welche Art von Berechnung (PCA oder MCR) für den Bereich durchgeführt wird.
- Auf **Add** klicken, um einen neuen Bereich zu erzeugen.

5.3.2 Spitzenwerte und Bereiche ändern

Um zusätzliche Spektren in der Spitzenanalyse einzubeziehen, wie folgt vorgehen:

1. Die Registerkarte **Data** oder **Pretreat** auswählen.
2. Im Spektrenraster zum Spektrum scrollen, das hinzugefügt werden soll.
Umschalttaste gedrückt halten und zum letzten Spektrum scrollen, um alle Spektren in einem Bereich einzuschließen.
3. In der ausgewählten Spektrenbox auf **Include** klicken.
4. Die Registerkarte **Peaks/Regions** wählen und auf **Refresh Plot**  klicken.
Sowohl in den Spitzenwerttrends als auch im Spektrumdiagramm sind nun mehr Spektren enthalten.
5. Auf **Save Dataset** klicken.

Spektren aus der Spitzenwertanalyse ausschließen

Es ist möglich, Daten direkt aus der Trenddarstellung auszuschließen. Dies ist nützlich, um offensichtliche Ausreißer auszuschließen oder wenn keine Änderung an einem Experiment vorgenommen wurde.

1. Die auszuschließenden Datenpunkte durch Klicken und Ziehen über den Bereich im Diagramm Peak Analysis auswählen.
Die Punkte werden fett dargestellt und die Schaltfläche Exclude ist aktiviert.
2. Auf **Exclude Points**  klicken.
3. Auf OK klicken, um die Liste der ausgeschlossenen Spektren zu öffnen. Wenn die Punkte auf mehreren Spitzenwerttrends ausgewählt wurden, können Spektrennamen auch mehrmals angezeigt werden.
4. Auf **Refresh Plot**  klicken.
Die Spitzenwertanalyse zeigt nun nur die nicht ausgeschlossenen Daten.
5. Auf **Save Dataset** klicken.

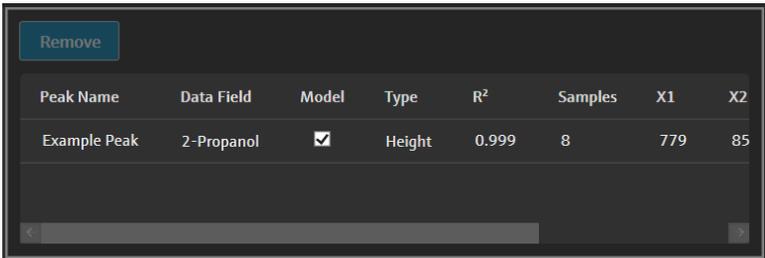
Spitzenwerte und Bereiche verschieben und deren Größe ändern

Spitzenwerte und Bereiche können durch Klicken und Ziehen an den Ziehpunkten verschoben und in der Größe verändert werden. Nach einer Änderung der Größe eines Spitzenwerts oder Bereichs wird die Analyse neu berechnet.

Spitzenwerte und Bereiche ändern oder entfernen

Rechts neben dem Bereich Peaks and Regions werden Spitzenwerte und Bereiche aufgelistet. Die Eigenschaften eines Spitzenwerts oder eines Bereichs können in diesen Listen angezeigt und geändert werden. Nach Auswählen eines Spitzenwerts oder Bereichs und klicken auf **Remove** wird der ausgewählte Spitzenwert oder Bereich entfernt.

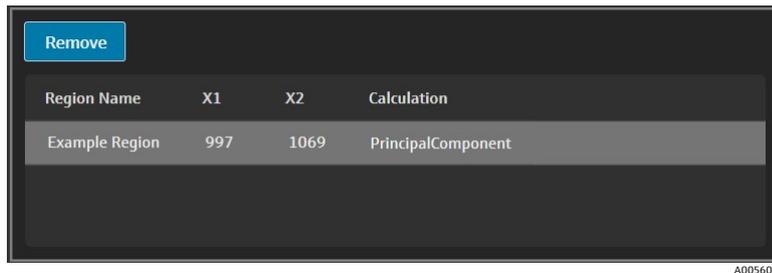
Wenn ein Spitzenwert oder ein Bereich entfernt wird, sollten alle Ansichten, die einen aus diesem Spitzenwert oder Bereich generierten Trend verwenden, entfernt oder auf einen neuen Spitzenwert oder Bereich aktualisiert werden. Wird eine Trendansicht, die auf einem entfernten Spitzenwert oder Bereich basiert, nicht aktualisiert oder entfernt, kann der zugehörige Datensatz nicht analysiert werden. Benutzer, die eine Ansicht in ihrem Dashboard gespeichert haben, können sich nicht anmelden, wenn ein Spitzenwert oder ein Bereich entfernt wurde und die zugehörige Ansicht nicht aktualisiert oder entfernt wird.



| 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

Abbildung 33. Spitzenwertliste



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

Abbildung 34. Bereichsliste

5.3.3 Spitzenwertanalyse anzeigen

Die Registerkarte Peak Analysis zeigt eine Trenddarstellung für alle hinzugefügten Spitzenwerte an. Spitzenwerte werden mit eigener y-Achse hinzugefügt. Mit der Registerkarte Peak Analysis stehen folgende Möglichkeiten zur Verfügung:

- Durch klicken auf **Exclude Points**  können spezifische Datenpunkte entfernt werden.
- Durch klicken auf **Refresh Plot**  kann das Diagramm nach dem Ändern von Datenpunkten aktualisiert werden.



Abbildung 35. Spitzenwertanalyse

5.3.4 Modelldarstellung anzeigen

Die Registerkarte Model Plot zeigt das Modelldiagramm für den ausgewählten Spitzenwert an. Mit der Registerkarte Model Plot stehen folgende Möglichkeiten zur Verfügung:

- Durch Klicken auf **Exclude Points**  können spezifische Datenpunkte entfernt werden.
- Durch Klicken auf **Refresh Plot**  kann das Diagramm nach dem Ändern von Datenpunkten aktualisiert werden. Wenn Spektren oder Datenwerte auf der Registerkarte Data ausgeschlossen werden, kann die Modellgrafik mithilfe der Schaltfläche **Refresh Plot** neu berechnet werden.

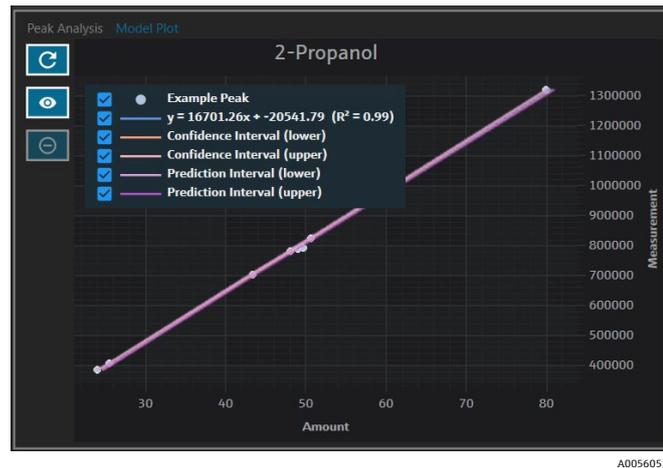


Abbildung 36. Registerkarte Modelldiagramm

5.4 Dashboardansichten erstellen: Gitter-, Trend-, Spektren- und 3D-Darstellung

Die Registerkarte Views wird verwendet, um die relevantesten Diagramme für jeden Anwendungsfall zu definieren. Es gibt zahlreiche Darstellungsoptionen für Diagramme, auch für einfach aufgebaute Datensätze. Jede Ansicht kann im Rahmen einer Gruppe von Ansichten einem Dashboard hinzugefügt werden. Es können bevorzugte Dashboard-Registerkarten erstellt werden, die ein bis vier Diagramme in Quadraten darstellen.

Alle Datensätze werden mit zwei vordefinierten Ansichten erstellt: Spektrendarstellung und Spektrenraster. Benutzerdefinierte Ansichten können mit der Registerkarte Views hinzugefügt, geändert und entfernt werden. Eine Vorschau der ausgewählten Ansicht wird auf der rechten Seite der Registerkarte Views angezeigt.

Es gibt 4 Ansichtentypen:

- Trenddarstellung
- Spektrendarstellung
- Spektrenraster
- 3D-Darstellung

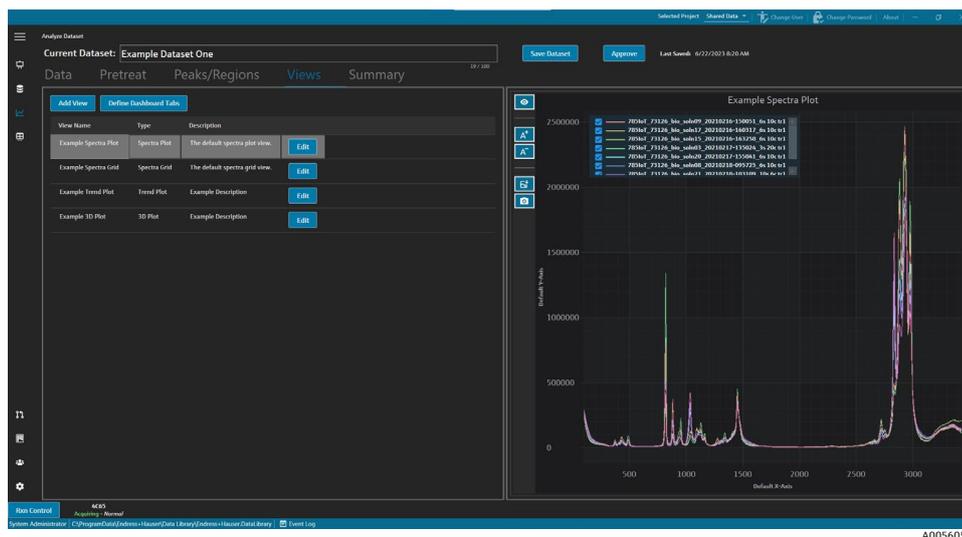


Abbildung 37. Registerkarte Views

Auf der Registerkarte Layouts kann man auch auf **Define Dashboard Tabs** klicken, um das Fenster Define Dashboard Tabs zu öffnen. Siehe Abschnitt *Dashboard definieren* →

Um eine Ansicht zu entfernen, die Ansicht auswählen und auf **Remove** klicken. Optional kann eine Ansicht entfernt werden, indem die Ansicht ausgewählt und auf der Tastatur die Entf-Taste gedrückt wird.

5.4.1 Ansicht der Spektrendarstellung erstellen oder ändern

Mithilfe einer Spektrendarstellungsansicht können die Datensatzspektren auf einem zoombaren Diagramm angezeigt werden. Die Spektrendarstellung ist eine Standardansicht, die für jeden Datensatz generiert wird.

Spektrendarstellungsansicht ändern

1. Auf der Registerkarte Views auf **Add View** klicken.
Das Dialogfeld View Definition wird angezeigt.
2. Folgende Daten eingeben:
 - **Name.** Der Anzeigename der Ansicht.
 - **Description.** Eine kurze Beschreibung der Ansicht.
 - **View Type.** Spectra Plot auswählen.
3. Eine der folgenden Optionen auswählen:
 - **Use Pretreated data.** Auswählen, um vorbereitete Daten in der Ansicht anzuzeigen. Wenn das Kontrollkästchen nicht aktiviert ist, werden die nicht vorbereiteten Rohdaten in der Ansicht angezeigt.
 - **Show latest spectrum only.** Auswählen, um nur das Spektrum mit dem neuesten Enddatum und der neuesten Endzeit anzuzeigen. Wenn das Kontrollkästchen nicht aktiviert ist, werden alle Spektren angezeigt.
4. Auf **Close** klicken.
5. Auf **Save Dataset** klicken.

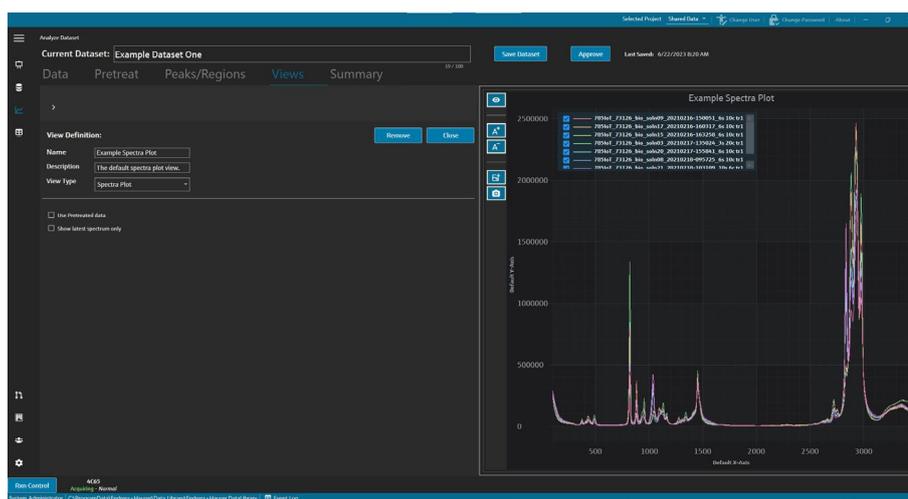


Abbildung 38. Spektrendarstellungsansicht

5.4.2 Spektrenraster ändern

Mit der Spektrenrasteransicht können einzelne Spektren in Rasterform angezeigt werden. Das Spektrenraster ist eine Standardansicht, die für jeden Datensatz generiert wird.

Spektrenrasteransicht ändern

1. Auf der Registerkarte Views auf **Add View** klicken.
Das Dialogfeld View Definition wird angezeigt.
2. Das Spektrenraster auswählen und **Edit** klicken.
3. Folgende Daten eingeben:
 - **Name.** Der Anzeigename der Ansicht.
 - **Description.** Eine kurze Beschreibung der Ansicht.
 - **View Type.** Spectra Grid auswählen.
4. Auf **Close** klicken.
5. Auf **Save Dataset** klicken.

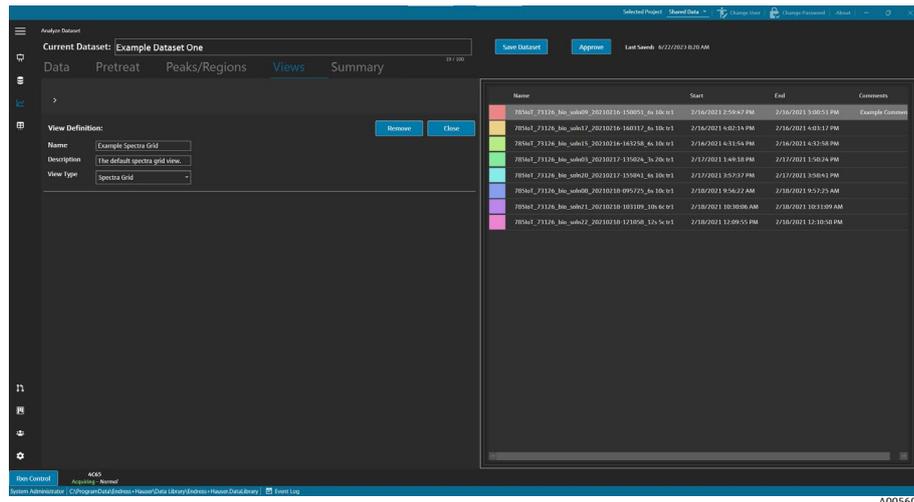


Abbildung 39. Spektrenrasteransicht

5.4.3 Trenddarstellungsansicht erstellen oder ändern

Zur Anzeige von Datensatztrends kann eine Trenddarstellungsansicht verwendet werden. In der Trenddarstellungsansicht stellt die x-Achse die relative Erfassungszeit der Spektren dar. Die y-Achse stellt Datenwerte, vorhergesagte Werte oder Spitzenwerte dar.

Es kann ausgewählt werden, welche Datenfelder und Spitzenwerte in die Ansicht einbezogen werden. Wenn **Model** für ein Datenfeld ausgewählt wird, das in einem Spitzenwert verwendet wird, werden in der Ansicht Vorhersagewerte angezeigt.

Trenddarstellungsansicht erstellen und ändern

1. Auf der Registerkarte Views auf **Add View** klicken.
Das Dialogfeld View Definition wird angezeigt.
2. Folgende Daten eingeben:
 - **Name.** Der Anzeigename der Ansicht.
 - **Description.** Eine kurze Beschreibung der Ansicht.
 - **View Type.** Die Art der Ansicht. **Trend Plot** auswählen.
3. Aus **Available data fields** die darzustellenden Datenfelder auswählen. Auf **Include** ► klicken.
4. Aus **Available peaks** die darzustellenden Spitzenwerte auswählen. Auf **Include** ► klicken.
5. Auf **Close** klicken.
6. Auf **Save Dataset** klicken.

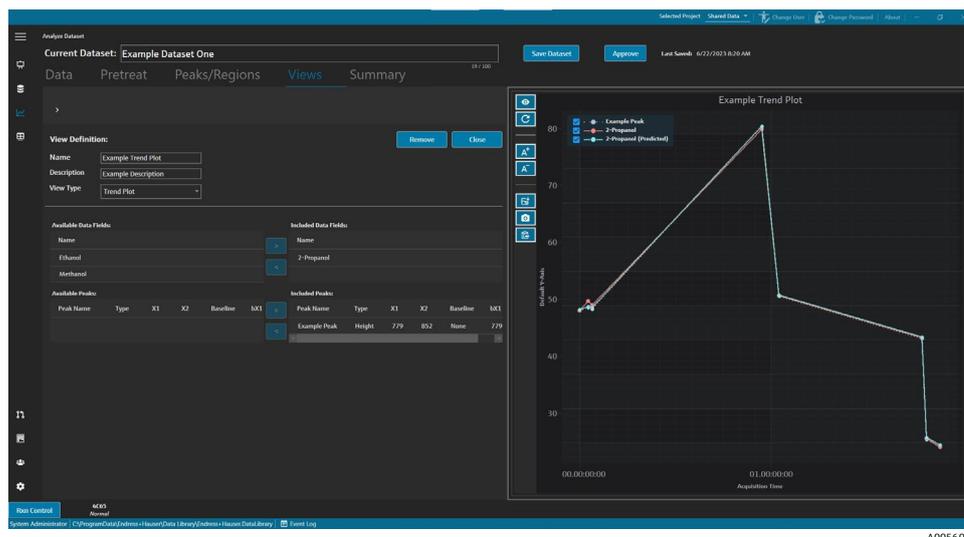


Abbildung 40. Trenddarstellungsansicht

5.4.4 3D-Darstellung erstellen oder ändern

Eine 3D-Darstellung zeigt die Spektren in einem Diagramm mit x-, y- und z-Achsen an. Dieses Diagramm kann zusätzliche Informationen über die Unterschiede in Spektren im Laufe der Zeit oder beim Hinzufügen oder Entfernen von Variablen liefern.

3D-Darstellungsansicht ändern

1. Auf der Registerkarte Views auf **Add View** klicken.
Das Dialogfeld View Definition wird angezeigt.
2. Folgende Daten eingeben:
 - **Name.** Der Anzeigename der Ansicht.
 - **Description.** Eine kurze Beschreibung der Ansicht.
 - **View Type.** 3D Plot auswählen.
3. Die 3D-Darstellung wunschgemäß anpassen:
 - **Draw Contours.** Zeichnet Konturlinien entlang einer Wellenlänge, um Unterschiede in Spektren hervorzuheben.
 - **Show Spectrum Colors.** Schaltet Spektralfarben ein oder aus, um Veränderungen von Spektren im Laufe der Zeit hervorzuheben.
 - **Change angle of x, y, and z axes.** Der Betrachtungswinkel kann durch Klicken auf das Diagramm und Ziehen an die gewünschte Position angepasst werden.
 - **Zoom in or out.** Mit dem Mousrad wird die Darstellung vergrößert oder verkleinert.
4. Auf **Close** klicken.
5. Auf **Save Dataset** klicken.

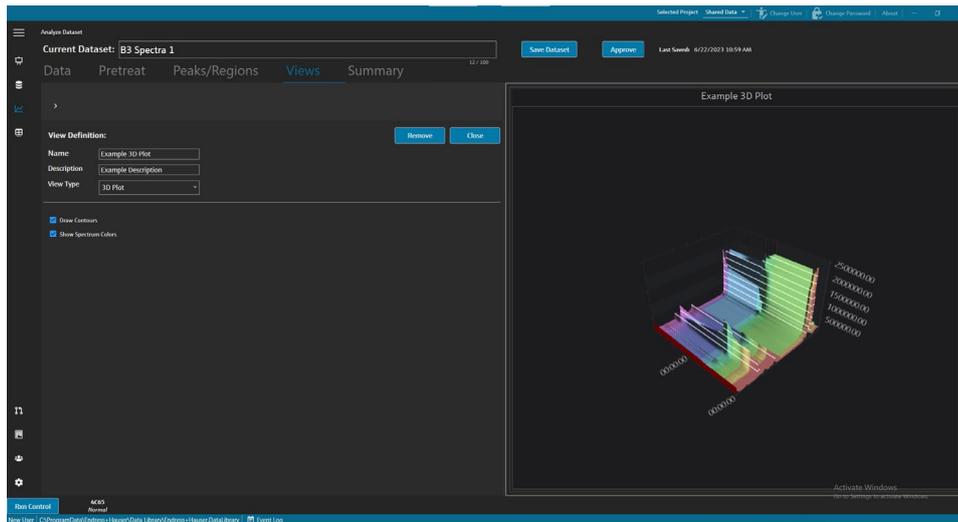


Abbildung 41. 3D-Darstellungsansicht

5.4.5 Temporäre Anmerkungen hinzufügen

Auf der Registerkarte Views können temporäre Anmerkungen wie hervorgehobene Bereiche, Beschriftungen, Linien und Pfeile erstellt werden. Anschließend können die Anmerkungen mit der Ansicht gespeichert werden, um später darauf zuzugreifen oder sie zu teilen.

In der Registerkarte Views kann Folgendes ausgewählt werden:

| Navigationselement | Navigation |
|--------------------|--|
| A0056085 | Temporäre Anmerkung hinzufügen. Fügt eine temporäre Anmerkung zur Ansicht hinzu. |
| A0056086 | Bilddatei speichern. Speichert die Ansicht mit Anmerkungen. |
| A0056087 | Ansicht in die Zwischenablage kopieren. Kopiert die aktuelle Ansicht mit der Anmerkung in die Zwischenablage. |
| A0055992 | Diagrammdateien in die Zwischenablage kopieren. Kopiert die aktuellen Trenddiagrammdateien in die Zwischenablage. |
| A0055993 | Temporäre Anmerkung entfernen. Entfernt eine temporäre Anmerkung aus der Ansicht. |

Temporäre Anmerkungen erstellen

1. Aus der Registerkarte Views eine Ansicht auswählen, die hervorgehoben werden soll.
2. Auf **Add Temporary Annotation** klicken.
3. Mit **Annotation type** die Darstellung der Anmerkung auswählen:
 - **Line.** Platziert eine Linie in die Ansicht.
 - **Line arrow.** Platziert eine Pfeillinie in die Ansicht.
 - **Text.** Platziert Text in die Ansicht.
 - **Box.** Platziert ein hervorgehobenes Feld in die Ansicht.
 - **Horizontal line.** Platziert eine horizontale Linie in die Ansicht.
 - **Vertical line.** Platziert eine vertikale Linie in die Ansicht.
 - **Axis Marker.** Platziert eine Achsenmarkierung in die Ansicht.

4. Auf **Add Temporary Annotation** klicken und anschließend auf die Ansicht klicken in die die Markierung platziert werden soll.
5. Die Ansicht durch Auswahl eines der folgenden Elemente speichern:
 - Auf **Save Image File**  klicken, um die Ansicht mit den Anmerkungen zu speichern.
 - Auf **Copy Image to Clipboard**  klicken.
 - Auf **Copy Plot Data to Clipboard**  klicken.
6. Auf **Save Dataset** klicken.

5.4.6 Dashboard definieren

In der Registerkarte Views kann ein Dashboard definiert und gespeichert werden. Dazu müssen zunächst die Ansichten erstellt werden, die in den vorherigen Abschnitten beschrieben wurden. Standardmäßig enthält die Registerkarte Views für jeden Datensatz eine Spektrendarstellung und eine Spektrenrasteransicht.

Zur Definition eines Dashboards Folgendes auswählen

1. In der Registerkarte Views auf **Define Dashboard Tabs** klicken.
Eine Standardregisterkarte für den aktuellen Dataset zeigt die Spektrendarstellung und das Spektrenraster an.
2. Auf **Add New Tab** klicken.
Das Popup-Fenster Add New Tab erscheint.
3. Die Anzahl der anzuzeigenden Ansichten auswählen:
 - 1-View Registerkarte
 - 2-View Registerkarte
 - 3-View Registerkarte
 - 4-View Registerkarte

Ein neues Dashboard wird angezeigt.

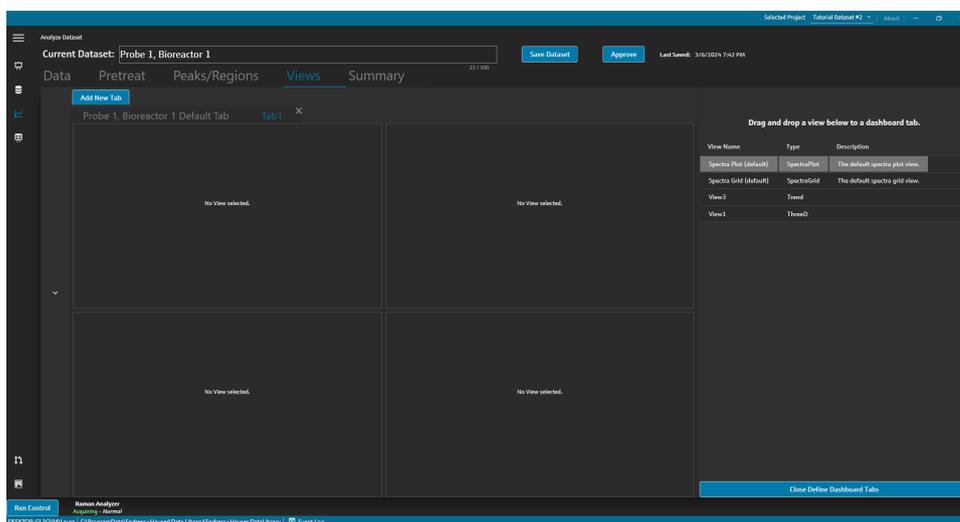
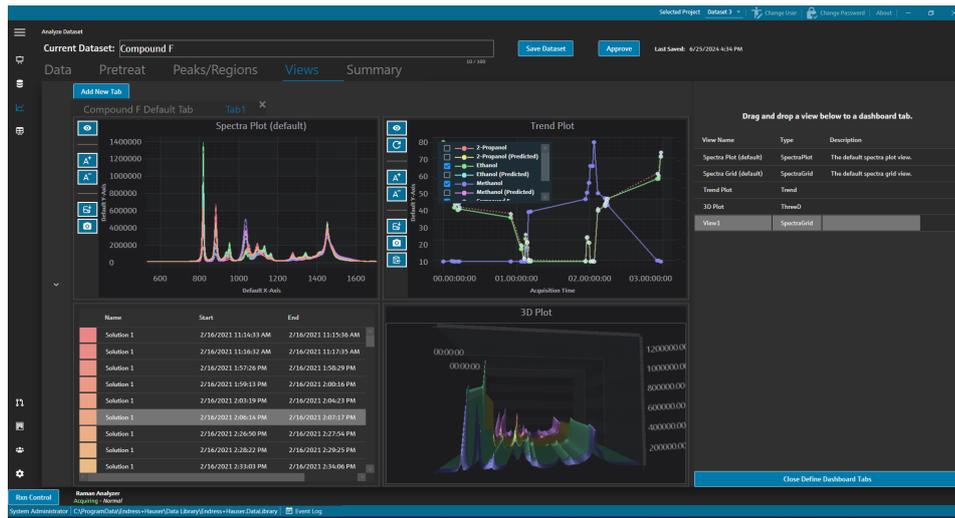


Abbildung 42. Neues Dashboard definieren

4. Die gewünschten Ansichten mit Drag-and-Drop aus der Liste rechts in den gewünschten Bereich des Dashboards ziehen.



A0056056

Abbildung 43. Ausgewählte Ansichten auf einem neuen Dashboard

5. Doppelklicken auf den Registerkartennamen und das Dashboard wie gewünscht benennen.
6. Auf **Save Dataset** klicken.
7. Auf **Close Define Dashboard Tabs** klicken.

5.5 Summary

Datensätze werden zusammengefasst und es wird eine Analyse auf die Registerkarte Summary angewendet. Auf der Registerkarte Summary werden Vorlagen gespeichert, Modelldateien von Raman Data Library exportiert und Datensätze für die externe Modellierung exportiert.

In der Registerkarte Summary kann Folgendes ausgewählt werden:

- Mit **View summary information** zusammenfassende Informationen zum Datensatz anzeigen. Die zusammengefassten Informationen enthalten den Status des Datensatzes, seinen Freigabestatus, die Gesamtzahl der enthaltenen Spektren und die anwendbaren Datenfelder. Darüber hinaus werden Vorbehandlungen, Spitzenwerte, Bereiche und eine Momentaufnahme der Darstellung ebenfalls angezeigt.
- **Export the dataset.** Auf **Export** klicken, um den aktuellen Datensatz zu exportieren. Siehe Abschnitt *Daten, Datensätze und Modelle exportieren* →
- **Dashboard-Registerkarten kopieren.** Auf **Launch Dashboard** klicken, um eine Kopie des Dashboards des Datensatzes zum Dashboard-Fenster hinzuzufügen. Das Dashboard wird in der Registerkarte Views definiert. Siehe Abschnitt *Dashboard-Ansichten erstellen: Gitter-, Trend-, Spektren- und 3D-Darstellung* → .
- Mit **Create templates** Vorlagen aus dem Datensatz erstellen. Siehe Abschnitt *Vorlagen erstellen* → .
- Mit **View events** mit dem Datensatz verknüpfte Ereignisse anzeigen. Auf **Dataset Event Log** klicken, um das Ereignisprotokoll für den aktuellen Datensatz anzuzeigen.

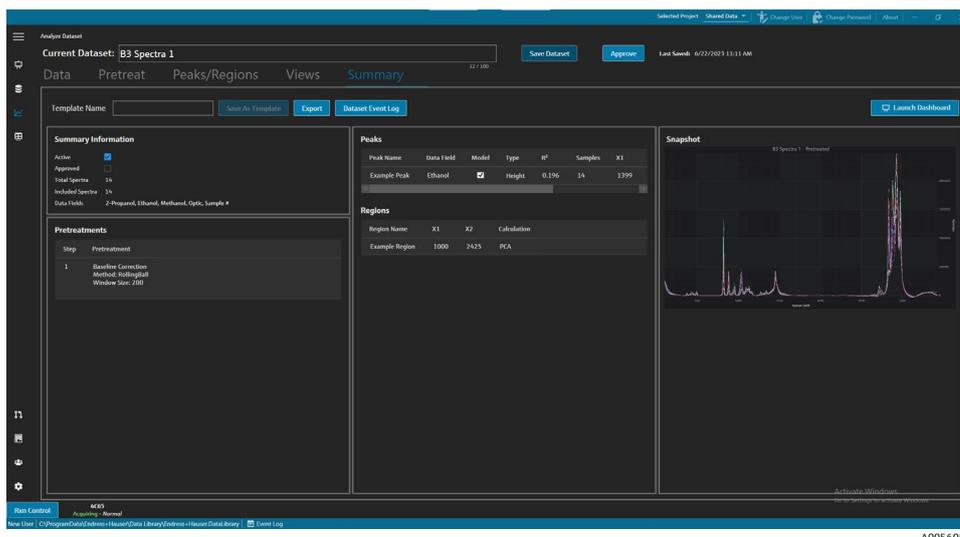


Abbildung 44. Registerkarte Zusammenfassung

5.5.1 Vorlagen erstellen

Wenn Komponenten eines Datensatzes in anderen Datensätzen wiederverwendet werden können, vereinfachen Vorlagen die Erstellung von Datensätzen. Vorlagen speichern alle Vorbehandlungen, Analysen und Ansichtseinstellungen und können auf neue Datensätze angewendet werden. Eine Vorlage enthält Folgendes:

- Angezeigte Datenfelder
- Vorbehandlungen
- Spitzenwerte
- Bereiche
- Ansichten
- Dashboard-Registerkarten

Eine Vorlage enthält keine Spektrendaten.

Gespeicherte Vorlagen können im Fenster Create Dataset beim Erstellen eines neuen Datensatzes oder im Fenster Rxn Control ausgewählt werden. Wird während der Datensatzerstellung eine Vorlage ausgewählt, werden alle Komponenten der Vorlage dem neuen Datensatz hinzugefügt.

Aus dem aktuellen Datensatz eine Vorlage erstellen

1. Registerkarte **Summary** auswählen.
2. Im Feld **Template Name** einen Namen eingeben.
3. Auf **Save As Template** klicken.
4. Auf **OK** klicken.

5.5.2 Vorlagen anwenden

Beim Anlegen eines neuen Datensatzes kann eine Vorlage angewendet werden.

Eine Vorlage anwenden

1. Im Fenster Datasets  auf **Create New Dataset** klicken.
2. Einen Namen für den Datensatz vergeben, die entsprechenden Spektren importieren und auf **Include >** klicken.
3. Im Feld **Template** die Vorlage in der Liste auswählen.
4. Auf **Create** klicken. Wenn die Aufforderung erscheint, einen nicht gespeicherten Datensatz zu speichern, auf **OK** klicken.

Nach Abschluss des Vorgangs wird Raman Data Library im Arbeitsfluss zum Fenster Analyze Dataset verschoben.

5.5.3 Daten, Datensätze und Modelle exportieren

Der Exportbereich wird verwendet, um Datensätze von Raman Data Library in externe und interne Softwaresysteme zu exportieren. Eine Exportdatei von Raman Data Library (.dlexport) kann dazu verwendet werden, Datensätze von einer Instanz von Raman Data Library in eine andere zu verschieben. Für den Export in externe Softwaresysteme muss der Datensatz freigegeben sein.

Export von Daten, Datensätzen und Modellen

1. Im Fenster **Datasets**  auf **Export** klicken.

Das Exportmenü wird angezeigt.

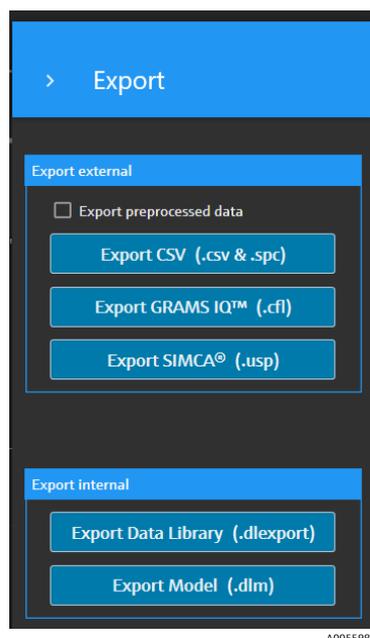


Abbildung 45. Exportmenü

2. Eine der folgenden Optionen auswählen:
 - **Export preprocessed data.** Wenn diese Option aktiviert ist, werden die Daten ohne Vorbehandlung exportiert.
 - **Export CSV.** Exportiert den Datensatz als kommagetrennte Datei (.csv) mit den Namen der Spektren und den Datenwerten für alle enthaltenen Datenfelder. Exportiert auch einen gezippten Ordner mit den enthaltenen Spektren im SPC-Format (.spc).
 - **Export GRAMS IQ™.** Exportiert den Datensatz als GRAMS IQ™-Datei (.cfl). Exportiert auch die enthaltenen Spektren im SPC-Format (.spc). Eine gültige GRAMS IQ™ Installation auf dem gleichen Computer wie Raman Data Library ist erforderlich, um eine GRAMS IQ™-Datei (.cfl) exportieren zu können.
 - **Export SIMCA®.** Exportiert den Datensatz als SIMCA®-Datei (.usp). Eine gültige SIMCA®-Installation auf dem gleichen Computer wie Raman Data Library ist erforderlich, um eine COSIMA®-Datei (.usp) exportieren zu können.
 - **Export Data Library.** Exportiert den Datensatz als Raman-Datenbibliothek-Datei (.dlexport). Dieser Dateityp kann auf dem Fenster Datasets importiert werden.
 - **Export Model.** Exportiert eine Modelldatei (.dlm), die mithilfe von Vorbehandlungen und Spitzenwerten des Datensatzes erstellt wird. Diese Datei kann mithilfe des Raman Data Library Rxn-Control-Fensters in Raman Runtime exportiert werden. Die Modelldatei kann verwendet werden, um Komponentenprozesswerte in RunTime zu generieren.
3. Zum Speicherort und dem Namen der Datendatei navigieren.
4. **Mark Inactive** oder **Keep Active** für den aktuellen Datensatz auswählen.

6 Raman Rxn Analyzer Control

Rxn Control wird zur Verwaltung von Raman RunTime Rxn-Analysatoren für die Erfassung und Modellierung von Raman-Spektren verwendet und ist so konzipiert, dass es die Benutzeroberfläche von Raman RunTime nachahmt. Um auf das Raman-Analysator-Fenster zugreifen zu können, muss eine OPC-Spektralquellenverbindung erstellt werden. Siehe Abschnitt *OPC-Spektralquelle hinzufügen* → .

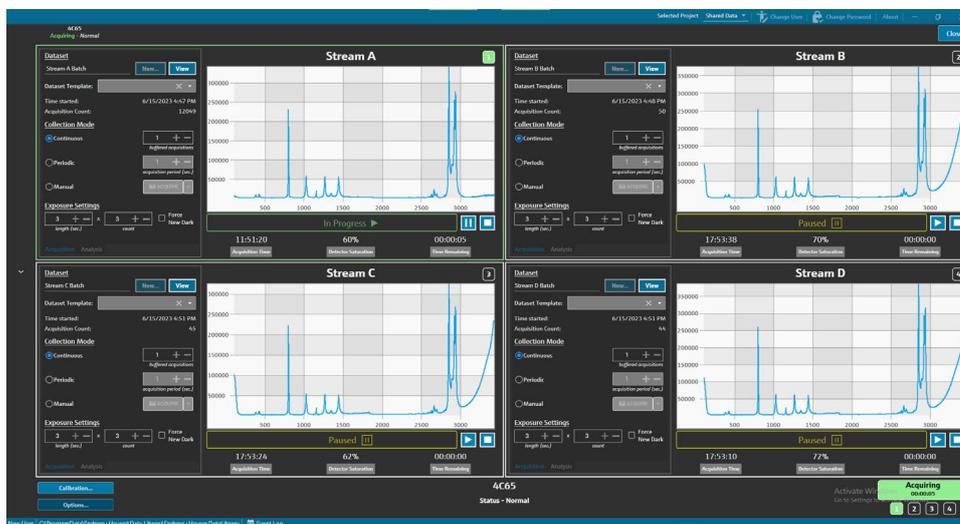
Hinweis

Für Informationen zum sicheren Betrieb von Raman-Rxn-Analysatoren und der Raman RunTime-Software siehe *Raman RunTime Betriebsanleitung (BA02180C)*.

- ▶ Je nach verwendeter Version von Raman RunTime empfiehlt es sich, die entsprechende *RunTime Bedienungsanleitung* zu lesen, bevor Raman Data Library Rxn Control verwendet wird.



Abbildung 46. Schaltfläche Rxn Control



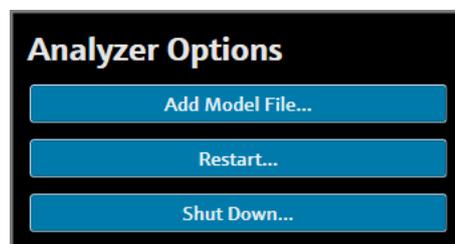
A0056059

Abbildung 47. Fenster Raman-Analysator

Die Schaltfläche **Rxn Control** ist nur vorhanden, wenn ein Raman-Rxn-Analysator mit Raman Data Library verbunden ist. Anweisungen zum Anschließen eines Analysators siehe *OPC-Spektralquelle anschließen* → .

6.1 Analysatoroptionen

Das Menü **Analyzer Options** wird nach Klicken auf **Options** am unteren Rand des Fensters **Raman Analyzer** angezeigt.



A0056062

Abbildung 48. Rxn-Analysator-Optionen

6.1.1 Modelldatei hinzufügen

Um eine Modelldatei hinzuzufügen, wie folgt vorgehen:

1. Im Fenster **Rxn Control** auf **Options** klicken.
Das Dialogfenster **Analyzer Options** wird angezeigt.

2. Auf **Add Model File** klicken, um eine Modelldatei auszuwählen, die an Raman RunTime gesendet werden soll. Für die Analyse können hinzugefügte Modelldateien verwendet werden. Sie werden durch Klicken auf die Registerkarte **Analysis** in einem Sensorfenster aktiviert oder deaktiviert. Gültige Dateitypen sind: .usp, .rusp, .dlm, .pxm, .pxs, .cal, .mat und .unsb. Einzelheiten zu den unterstützten Modelltypen von Raman Runtime enthält die Broschüre *Raman RunTime Betriebsanleitung* (BA02180).

Hinweise zum Neustart oder zum Herunterfahren des Analysators enthält der Abschnitt *Analysator erneut starten oder ausschalten* → .

6.2 Kanalsteuerung

Raman-Rxn-Analysatoren können über bis zu 4 Sonden oder Messkanäle im Rxn-Steuerungsfenster haben. Jeder Kanal verfügt über einen Steuerungsbereich im Raman-Analysator-Fenster. Mithilfe des Kanalbereichs können unter anderem Datensätze, Einstellungsmodi, Einstellungen für die Exposition ausgewählt und angezeigt werden.

Jeder Kanalbereich enthält Einstellungen, die die Raman RunTime-Vorgänge widerspiegeln. Für eine vollständige Beschreibung der Funktionen in einem Kanalbereich siehe *Raman RunTime Betriebsanleitung* (BA02180).

6.2.1 Kanalerfassung

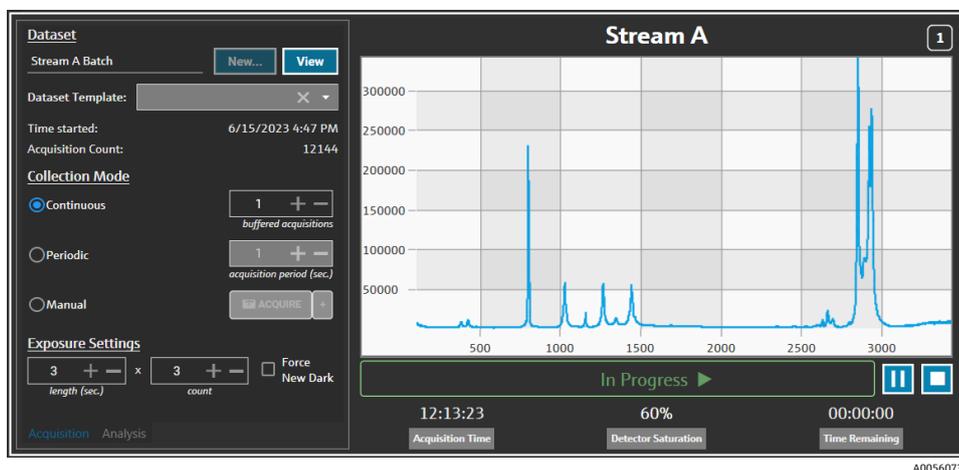


Abbildung 49. Kanalsteuerungsbereich

Auf der Kanalsteuerungsregisterkarte **Acquisition** Folgendes auswählen:

- **New.** Erstellt einen neuen, mit Namen versehenen Datensatz.
- **View.** Startet den aktuellen Datensatz im Fenster Dashboard.
- **Dataset template.** Wählt eine Vorlage aus, die auf den neuen Datensatz angewendet werden soll. Vor dem Start einer Charge muss eine Vorlage ausgewählt werden.
- **Time Started.** Die seit dem Start des aktuellen Datensatzes verstrichene Zeit (in Sekunden).
- **Acquisition Count.** Die Anzahl der Erfassungen für den aktuellen Datensatz.
- **Collection Modes.** Der Modus für die Sondenerfassung kann durch Auswahl einer von drei Optionen geändert werden:
 - **Continuous.** Der kontinuierliche Erfassungsmodus durchläuft zyklisch alle aktiven Sonden so schnell wie möglich. Diese Einstellung empfiehlt sich zur Methodenentwicklung, wenn häufige Referenzproben erfasst werden, und zur Überwachung und Steuerung, wenn Modelle aktiv sind. Der Modus Continuous umfasst eine Option für gepufferte Abfragen.
 - **Periodic.** Im periodischen Erfassungsmodus werden Spektren in festgelegten Intervallen abgefragt und typischerweise während der Methodenentwicklung verwendet, um zu ermöglichen, dass sich Spektren mit Proben synchronisieren, die Reaktoren oder anderen zeitgesteuerten Prozessereignissen entnommen werden. Gepufferte Abfragen sind im Modus Periodic nicht als Option verfügbar.
 - **Manual.** Den Erfassungsmodus Manual verwenden, um Spektren abzufragen, die manuell über die Schaltfläche  **Acquire** ausgelöst wurden. Beispielnamen können für jedes Spektrum durch Klicken auf + angegeben werden.

- **Exposure Settings.** Die Expositionseinstellungen für Länge (Sekunden) und Anzahl können durch Klicken auf + und – oder durch manuelle Eingabe eines Werts über die Tastatur geändert werden. Durch Auswahl von **Force New Dark** kann nach jeder Abfrage eine neue Dunkelexposition veranlasst werden.

Das Erfassen einer neuen Dunkelheitsexposition kann die durch den Dunkelstrom verursachten nicht zur Probe gehörenden Beiträge in der Messung verringern. Für weitere Informationen zur Funktion Force New Dark siehe *Raman RunTime Betriebsanleitung* (BA02180).

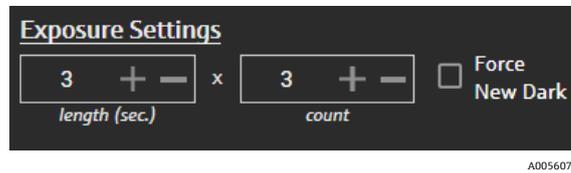


Abbildung 50. Expositionseinstellungen

6.2.2 Modelle auf der Registerkarte Channel Analysis anwenden

Die Registerkarte **Analysis** ermöglicht es, Modelle innerhalb von Raman Runtime auszuwählen und anzuwenden, um Modellvorhersagen während der Datensatzerfassung zu empfangen.

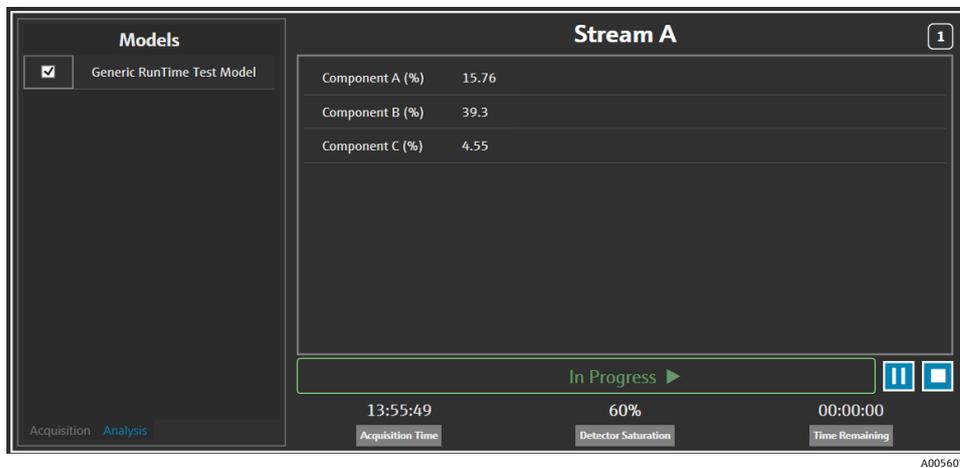


Abbildung 51. Registerkarte Channel Control Analysis

Um ein Modell auszuwählen, den Namen der Modelldatei prüfen. Folgende Informationen werden angezeigt:

- Die Vorhersagewerte werden auf der Registerkarte Analysis angezeigt.
- Die vom Raman RunTime-Modell vorhergesagten Ergebnisse werden im Analysefenster in eckigen Klammern angezeigt, beispielsweise [8.14]:

6.2.3 Spektren erfassen

Um die Erfassung von Datensätzen zu starten, auf **Play** ► drücken. Nachdem die Erfassung der Datensätze begonnen hat, ändert sich die Wiedergabetaste in eine Pausentaste.

Auf **Stop** ■ drücken, um die Erfassung von Datensätzen zu stoppen.

6.2.4 Kanalstatusleiste

Die Kanalstatusleiste wird unterhalb des Spektrendiagramms angezeigt. Ein Kanal kann den Status Not Started, In Process, Paused oder Completed haben.



Abbildung 52. Kanalstatusleiste

6.2.5 Analysatorenstatus und Aktionsindikatoren

Die Statusanzeige des Analysators wird unten in der Mitte des Fensters Rxn Control angezeigt. Es gibt drei Analysatorstatuswerte: Normal, Warning und Error.

| Status | Beschreibung |
|--|---|
|  <p>Raman Analyzer Status - Normal A0056078</p> | Dies ist der normale Status. |
|  <p>Raman Analyzer Warning ⚠️ A0056079</p> | Wird eine Systemwarnung festgestellt, wechselt die Anzeige zu einem Warnhinweis in der Farbe Gelb. Warnungen sollten zur Kenntnis genommen werden, allerdings ist möglicherweise keine sofortige Maßnahme erforderlich. Auf die Schaltfläche Status klicken, um Details der Warnung anzuzeigen. |
|  <p>Raman Analyzer Error ❌ A0056080</p> | Wenn ein Systemfehler festgestellt wird, nimmt die Schaltfläche Status die Farbe Rot an. Fehler erfordern sofortiges Handeln. Auf die Schaltfläche Status klicken, um Details der Warnung anzuzeigen. |

Siehe *Raman RunTime Raman RunTime Betriebsanleitung (BA02180)* für eine vollständige Auflistung aller Systemwarnungen und Systemfehler.

6.2.6 Aktionsanzeige des Analysators

Die Aktionsanzeige des Analysators wird unten rechts im Fenster Rxn Control angezeigt. Sie zeigt die aktuell ausgeführte Aktion an. Wenn die Aktion kanalspezifisch ist, blinkt die Nummer des betroffenen Kanals. Bei einem Notfall kann der aktuell stattfindende Kalibrierungs- oder Verifizierungsprozess durch Drücken der roten Stopptaste in der Aktionsanzeige abgebrochen werden.



Abbildung 53. Erfassen von Spektren



Abbildung 54. Unterbrochen oder wartet auf Benutzereingabe



Abbildung 55. Kalibrierung (Sonde oder intern)



Abbildung 56. Sonde wird überprüft

6.3 Kalibrier- und Verifizierungsprotokoll des Raman-Analysators

Die Steuerung des Raman-Rxn-Analysators über Raman Data Library lässt keine Spektrenerfassung ohne vorherige interne und Sondenkalibrierung zu. Vor der Spektrenabfrage sind alle Kalibrierungen vorzunehmen. Die Prüfung ist optional, wird jedoch empfohlen.

Für vollständige Anweisungen zur Kalibrierung oder Verifizierung eines Raman-Rxn-Analysators oder einer Sonde siehe die entsprechende Anweisung für das Sondenkalibrierungskit und die *Raman RunTime Betriebsanleitung* (BA02180).

Ausführen der Kalibrierung und Verifizierung des Rxn-Analysators:

1. Im Fenster **Raman Analyzer** auf **Calibration** klicken.
Das Dialogfenster Calibration wird geöffnet.
2. Es können folgende interne Kalibrieroptionen ausgewählt werden:
 - **Calibration Mode.** Der Kalibrierungsmodus für die interne Kalibrierung (Auto, XAxis oder All).
 - **Laser Power.** Die Leistung des Lasers in mW.
 - Auf **Calibrate** klicken, um eine interne Kalibrierung durchzuführen.



A0056060

Abbildung 57. Dialogfenster Calibration

3. Es können folgende interne Berichtsoptionen für die Kalibrierung ausgewählt werden:
 - Auf **View** klicken, um die Kalibrierungsdatei (.pdf) anzuzeigen.
 - Auf **Save** klicken, um eine Kopie der Kalibrierungsdatei (.pdf) zu speichern.
4. Es können folgende Optionen für die Kalibrierung und Verifizierung der Sonde ausgewählt werden:
 - **Verification Standard.** Die Standardreferenzprobe, die zur Überprüfung der Sondenkalibrierungsergebnisse verwendet wird. Dieser Schritt ist zwar nicht erforderlich, um ein Raman-Spektrum zu erfassen, wird jedoch dringend empfohlen.
 - Auf **Calibrate** unter einem Kanal klicken, um das Kalibrierfenster der Sonde zu öffnen. Den Kalibrierungsanweisungen folgen und auf **Load** klicken, um eine Intensity Reference-Datei auszuwählen, die für die Sondenkalibrierung verwendet werden soll. Auf **Save** klicken, um eine Kopie der ausgewählten Intensity Reference-Datei zu speichern.

Die Verwendung des Raman-Kalibrierungs- und Verifizierungskits mit einer auf einem Kalibrierungsreferenzstandard (CRS) basierenden Quellen-Spektrendatei wird derzeit nicht über die Rxn Analysator-Steuerungsschnittstelle von Raman Data Library unterstützt.

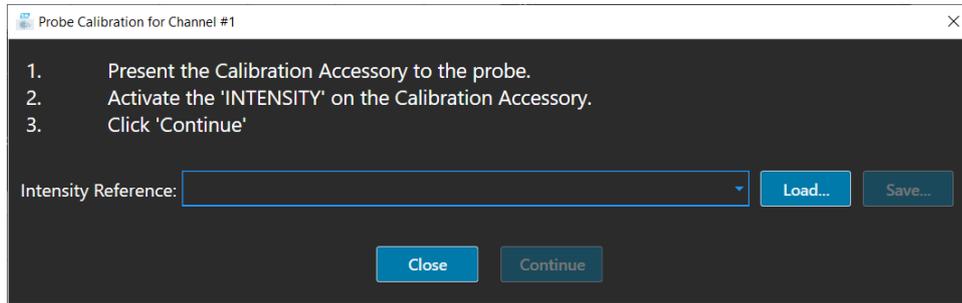


Abbildung 58. Sondenkalibrierungsfenster, HCA

- Auf **Continue** klicken um die Sondenkalibrierung zu starten. Nach Abschluss der Sondenkalibrierung, wird das Kalibrierungsdatum und die Uhrzeit angepasst.
 - Auf **Verify** klicken, um die Ergebnisse der Sondenkalibrierung zu prüfen.
5. Die obigen Schritte für jeden Analysator und jede Sonde wiederholen.
 6. Nach Abschluss der Kalibrierung und Überprüfung das Kalibrierungsdialogfeld schließen.

7 Einhaltung von FDA 21 CFR Teil 11

Die cGxP-Version von Raman Data Library bietet zusätzliche Funktionen für die Einhaltung von FDA 21 CFR Teil 11. Diese Funktionen unterstützen eine zentralisierte Umsetzung der Anforderungen von 21 CFR Teil 11 und ermöglichen eine regulierte Prozesseinstellung. Die cGxP-Version von Raman Data Library unterstützt Folgendes:

- Benutzerverwaltung
- Elektronische Aufzeichnungen und elektronische Signaturen
- Verwaltung von Systemeinstellungen
- Audit-Trail (Funktion zur Änderungskontrolle)
- Ereignisprotokolle, die die Rückverfolgbarkeit von Benutzeraktionen und Spektrendaten enthalten

Zur Unterstützung der 21 CFR Teil 11-Implementierungen von Raman Data Library cGxP hat Endress+Hauser ein spezielles Dokument, den Raman-Data Library 21 CFR Part 11 Questionnaire (p/n 4005768), zur Verfügung gestellt, das mit der cGxP-Version von Raman Data Library geliefert wird.

7.1 Benutzerverwaltung

In 21 CFR Teil 11 bezieht sich die Benutzerverwaltung auf die Gesamtheit der Kontrollen und Verfahren, die einen sicheren und geregelten Zugriff auf elektronische Aufzeichnungen und elektronische Unterschriften gewährleisten. Einer der Hauptunterschiede zwischen der Kernversion von Raman Data Library und der cGxP-Version ist die Benutzerverwaltung. Zur Unterstützung dieser Raman Data Library hat cGxP eine Benutzerverwaltung integriert, deren Berechtigungsnachweis lokal erfolgen kann, d. h. über die Software selbst, über lokale Windows-Arbeitsplatzanmeldungen oder über eine Verknüpfung mit einer Active Directory-Domäne.

Wenn ein lokaler Authentifizierungsmodus verwendet wird, wird die Möglichkeit, Aspekte der Kennwortkomplexität durchzusetzen, sowie die Sperrung nach einer festgelegten Anzahl von Anmeldefehlern und eine automatische Abschaltung bei Zeitüberschreitung unterstützt. Wenn die domain-basierte Authentifizierung von Zugangsdaten verwendet wird, werden alle diese Aspekte mit Ausnahme der Software-Zeitüberschreitung von der Domäne gesteuert.

Die eindeutige Identifizierung von Benutzern und die Zugriffskontrolle werden nativ bereitgestellt. Zugriffsrechte für Benutzer können mit festgelegten und kontrollierten Benutzerrollen konfiguriert werden. Auch die Fähigkeit, Konten zu deaktivieren und eine Passwortänderung bei der nächsten Anmeldung zu erzwingen, ist ebenfalls verfügbar. Ein benutzerspezifischer Audit-Trail in Form von Ereignisprotokollen ist vorhanden.

Die Benutzerverwaltung innerhalb Raman Data Library ist so implementiert, dass die Sicherheit elektronischer Aufzeichnungen gewährleistet ist, der Zugriff kontrolliert wird und alle Benutzeraktionen nachverfolgbar sind, wodurch die Zuverlässigkeit und Integrität von Daten in regulierten Branchen unterstützt wird.

Einzelheiten zur Benutzerverwaltung siehe *Benutzerverwaltung (nur cGxP-Version)* → .

7.2 Elektronische Aufzeichnungen und elektronische Signaturen

Elektronische Aufzeichnungen und elektronische Unterschriften sind grundlegende Bestandteile von 21 CFR Teil 11, in der die Kriterien festgelegt sind, nach denen sie als vertrauenswürdig, zuverlässig und gleichwertig mit Papieraufzeichnungen und handschriftlichen Unterschriften gelten. Elektronische Signaturen in Raman Data Library sind mit einzelnen Benutzern und ihren Anmeldedaten verknüpft, wodurch sie rechtlich bindend werden und nicht anfechtbar sind.

Zur Unterstützung von Standorten bei der Umsetzung von 21 CFR Teil 11 in Bezug auf Raman Data Library und insbesondere in Bezug auf das Thema elektronische Aufzeichnungen und elektronische Signaturen wurde von Endress+Hauser ein spezielles Dokument, das Raman Data Library 21 CFR Part 11 ER/ES Assessment (p/n. 4005770), zur Verfügung gestellt, das mit der cGxP-Variante der Software geliefert wird.

7.3 Verwaltung von Systemeinstellungen

Die Systemeinstellungen in Raman Data Library beziehen sich auf Sicherheitsaspekte, die eine entscheidende Rolle bei der Einhaltung von 21 CFR Teil 11 spielen. Systemeinstellungen werden im Fenster Security verwaltet.

Einzelheiten zur Verwaltung von Systemeinstellungen siehe *Sicherheitseinstellungen (nur cGxP-Version)* → .

7.4 Audit-Trail durch Änderungskontrollfunktion

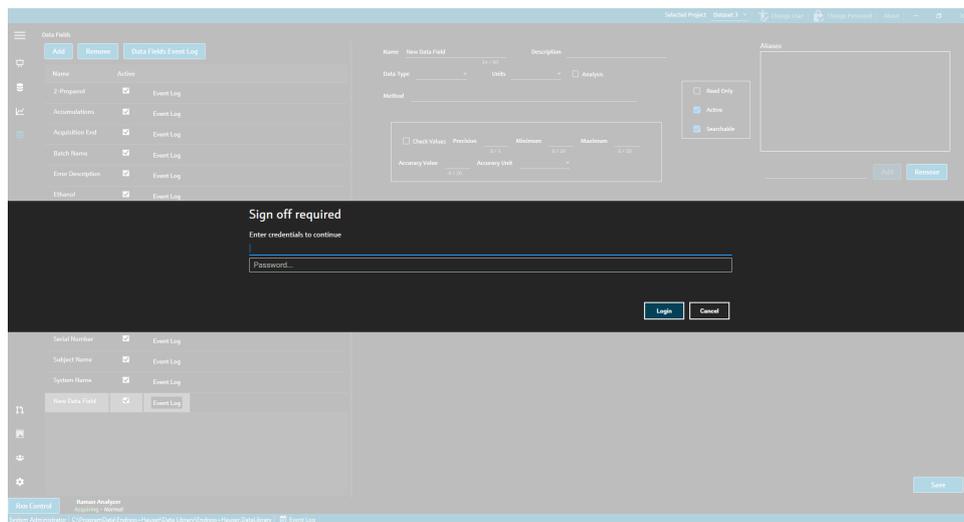
Der Audit-Trail ist ein entscheidender Bestandteil der Einhaltung von 21 CFR Teil 11 und stellt sicher, dass alle Änderungen an elektronischen Aufzeichnungen, Systemen oder Prozessen ordnungsgemäß verwaltet und dokumentiert werden.

In der cGxP-Version von Raman Data Library wurde als Ergänzung zur Benutzerverwaltung eine Änderungskontrollfunktion implementiert. Dadurch wird sichergestellt, dass alle Änderungen dokumentiert werden, einschließlich Grund für die Änderung, Datum und Uhrzeit sowie die für die Durchführung und Genehmigung der Änderung verantwortliche Person. Ein Prüfpfad der Änderungen wird in den verschiedenen verfügbaren Ereignisprotokollen nachverfolgt und dokumentiert. Darüber hinaus stellt die Änderungskontrollfunktion sicher, dass nur Personen mit entsprechender Berechtigung Aktualisierungen oder Änderungen vornehmen können.

Bestimmte Aktionen, wie das Entfernen oder Zurückweisen von Datensätzen und das Hinzufügen, Bearbeiten oder Entfernen von Datenfeldern, das Entfernen von Projekten oder Spektralquellen, erfordern eine Zustimmung des Benutzers, bevor die Aktion durchgeführt werden kann. Gegebenenfalls muss der Benutzer mit seinen Anmeldedaten eine Bestätigung vornehmen und einen Grund für die Änderung auswählen.

Für die Änderungskontrolle stehen standardmäßig folgende Gründe zur Verfügung:

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



A0056145

Abbildung 59. Änderungskontrolle – Benutzerbestätigung erforderlich

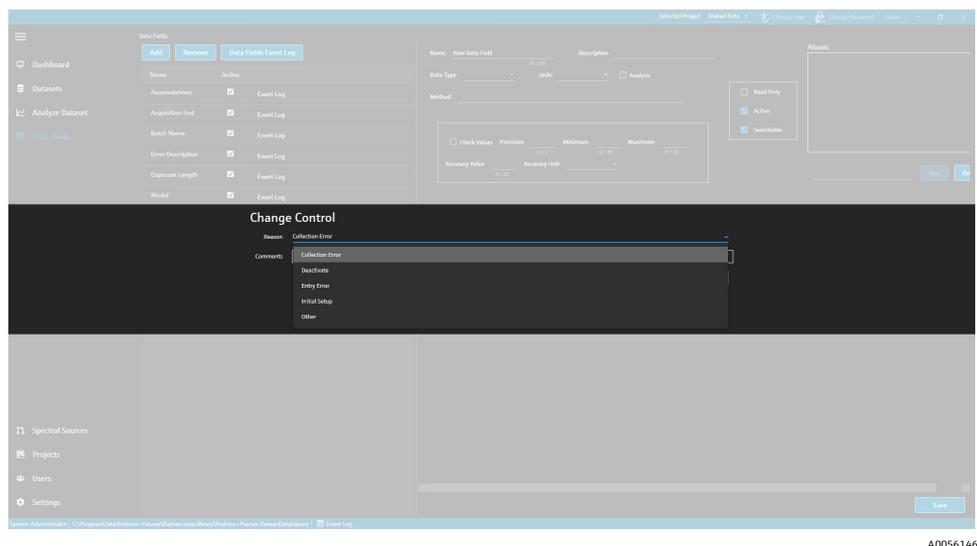


Abbildung 60. Änderungskontrolle – Bereitstellung einer Änderungsbeschreibung und eines Grundes

Diese Maßnahmen zur Änderungskontrolle tragen dazu bei, die Integrität, Zuverlässigkeit und Konformität elektronischer Aufzeichnungen und Systeme zu gewährleisten, und unterstützen die Genehmigungs- und Prüfprozesse durch ein Qualitätsteam.

7.5 Mit Ereignisprotokollen arbeiten

Um die Rückverfolgbarkeit und Protokollierung aller Ereignisse in einer cGxP-Umgebung zu gewährleisten, verfügt Raman Data Library über Ereignisprotokolle, die einen grundlegenden Prüfpfad enthalten. Dazu gehören globale (alle Aktionen) bis hin zu benutzer- und funktionsspezifischen Ereignisprotokollen. Ereignisprotokolle und Prüfpfade sind wesentliche Bestandteile der Einhaltung von 21 CFR Part 11 und gewährleisten die Integrität und Rückverfolgbarkeit elektronischer Aufzeichnungen.

Folgende Arten von Ereignisprotokollen stehen Benutzern in Raman Data Library zur Verfügung:

- **Global event log.** Dieses Ereignisprotokoll kann von allen Bildschirmen in Raman Data Library aus aufgerufen werden und befindet sich in der unteren Taskleiste des Anwendungsfensters.
- **User event logs.** Zeigt Ereignisse für alle Benutzer oder einen bestimmten Benutzer an. Der Zugriff erfolgt über den Bildschirm Users.
- **Project and dataset event logs.** Zeigt Ereignisse für alle Projekte oder ein bestimmtes Projekt an und listet Ereignisse im Zusammenhang mit einem Datensatz auf. Auf diese Protokolle kann über den Bildschirm Projects und den Bildschirm Dataset Summary zugegriffen werden.
- **Spectral source event logs.** Zeigt das Ereignisprotokoll für bestimmte Spektralquellen oder alle Spektralquellen an.
- **Data field event logs.** Zeigt das Ereignisprotokoll ein bestimmtes Datenfeld oder für alle Datenfelder an.

Ereignisprotokolle können in einem leicht lesbaren, unveränderlichen und proprietären Dokumentformat angezeigt und gedruckt werden. Die Suche nach Text innerhalb des Protokolls wird unterstützt. Vor dem Öffnen eines anderen Ereignisprotokolls muss das aktuelle Ereignisprotokoll geschlossen werden. Zu reinen Anzeigezwecken können Ereignisprotokolle in den Formaten *.pdf, *.xlsx und *.docx gespeichert werden.

7.5.1 Global event log

Das globale Ereignisprotokoll zeigt alle Ereignisse auf einer Implementierung von Raman Data Library an. Aufgrund der Vielzahl der protokollierten Daten kann es einige Zeit dauern, bis das globale Ereignisprotokoll geladen ist.

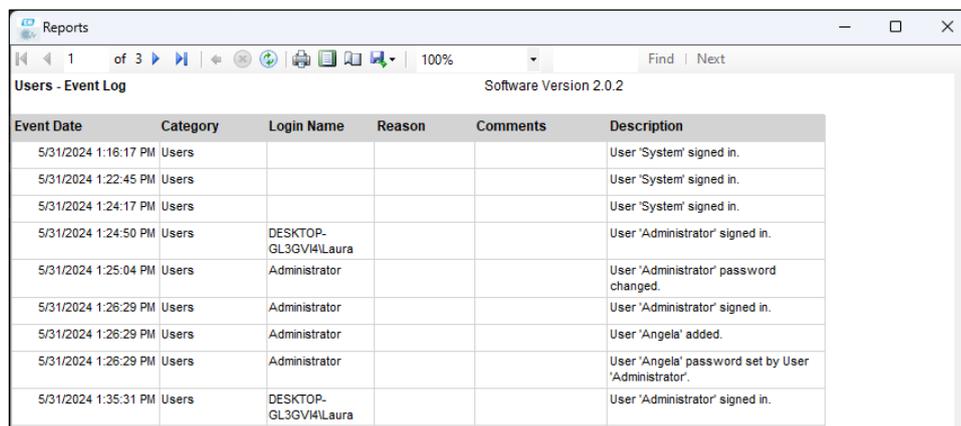


Abbildung 61. Schaltfläche Global Event Log

7.5.2 User Event Log

Im Fenster Users können die Ereignisprotokolle angezeigt werden, in denen Ereignisse in Bezug auf einen bestimmten Benutzer oder alle Benutzer aufgeführt sind. In diesem Protokoll werden alle Änderungen an Benutzern erfasst, einschließlich des Hinzufügens oder Entfernens von Benutzern, des Hinzufügens oder Entfernens von Rollen für einen Benutzer, Benutzeranmeldungen und fehlgeschlagene Anmeldeversuche. Im Fenster Users können die folgenden Ereignisprotokolle ausgewählt werden:

- **Users Event Log.** Zeigt das Ereignisprotokoll für alle Benutzer an.
- **Event Log.** Zeigt das Ereignisprotokoll für den angegebenen Benutzer an.



| 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. |

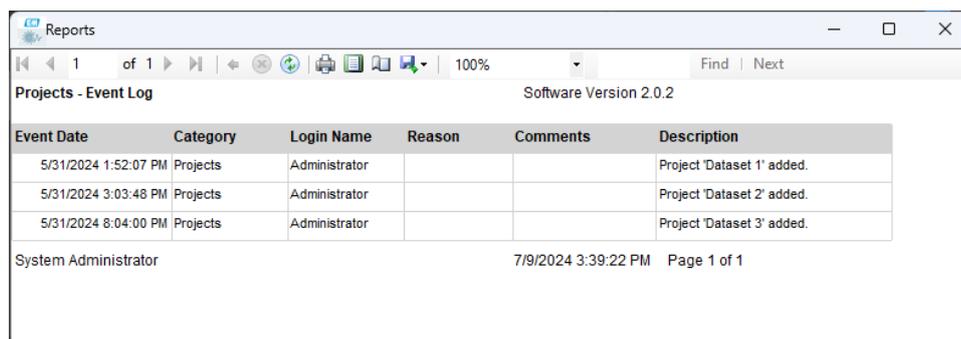
A0056147

Abbildung 62. User Event Log

7.5.3 Projects und Dataset Event Logs

Im Fenster Project können Ereignisprotokolle angezeigt werden, in denen Ereignisse im Zusammenhang mit einem Projekt aufgeführt sind, beispielsweise das Hinzufügen oder Entfernen von Datensätzen. Im Fenster Projects kann Folgendes ausgewählt werden:

- **Projects Event Log.** Ereignisprotokoll für alle Projekte anzeigen.
- **Event Log.** Ereignisprotokoll für ein bestimmtes Projekt anzeigen.



| 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

Abbildung 63. Project Event Log

7.5.4 Ereignisprotokolle für Spektrenquellen anzeigen

Im Fenster Spectral Sources können Ereignisprotokolle angezeigt werden, in denen Ereignisse im Zusammenhang mit einer bestimmten Spektralquelle oder allen Spektralquellen aufgeführt sind. In diesem Protokoll werden alle Änderungen an Spektralquellen aufgezeichnet, beispielsweise das Hinzufügen neuer Spektralquellen, das Starten oder Stoppen der Erfassung auf einem Raman-Rxn-Analysator oder das Ändern der Einstellungen für die Chargenerfassung im Fenster des Raman-Analysators. Im Fenster Spectral Sources kann Folgendes ausgewählt werden:

- **Spectral Sources Event Log.** Zeigt ein Ereignisprotokoll für alle Spektralquellen an.
- **Event Log.** Zeigt ein Ereignisprotokoll für eine bestimmte Spektralquelle an.

| Event Date | Category | Login Name | Reason | Comments | Description |
|----------------------|------------------|----------------------|--------|----------|--|
| 5/31/2024 1:34:02 PM | Spectral Sources | Administrator | | | Spectral Source 'Runtime 6.5' added. |
| 5/31/2024 1:50:04 PM | Rxn Control | DESKTOP-GL3GV4\Laura | | | The laser power was set to 400 on analyzer 'Raman Analyzer'. |
| 5/31/2024 1:50:49 PM | Spectral Sources | Administrator | | | Spectral Source 'Runtime 6.5' updated. Differences: 'EncryptedPassword' changed. |
| 5/31/2024 2:26:04 PM | Rxn Control | DESKTOP-GL3GV4\Laura | | | The laser power was set to 400 on analyzer 'Raman Analyzer'. |
| 5/31/2024 3:03:06 PM | Spectral Sources | Administrator | | | Spectral Source 'Bioreactor 1-2' added. |
| 6/3/2024 5:16:42 PM | Rxn Control | DESKTOP-GL3GV4\Laura | | | The laser power was set to 400 on analyzer 'Raman Analyzer'. |
| 6/3/2024 5:48:49 PM | Rxn Control | DESKTOP-GL3GV4\Laura | | | The laser power was set to 400 on analyzer 'Raman Analyzer'. |
| 6/3/2024 5:54:17 PM | Rxn Control | DESKTOP-GL3GV4\Laura | | | The laser power was set to 400 on analyzer 'Raman Analyzer'. |
| 6/3/2024 7:16:22 PM | Spectral Sources | Administrator | | | Spectral Source 'Runtime 6.5' updated. Differences: 'EncryptedPassword' changed. |
| 6/6/2024 6:42:46 PM | Rxn Control | DESKTOP-GL3GV4\Laura | | | The laser power was set to 400 on analyzer 'Raman Analyzer'. |

Abbildung 64. Spectral Source Event Log

7.5.5 Ereignisprotokolle für Datenfelder anzeigen

Im Fenster Data Fields können Ereignisprotokolle angezeigt werden, die Aktionen in Bezug auf ein bestimmtes Datenfeld oder alle auflisten. In diesem Protokoll werden alle Änderungen an Datenfeldern erfasst, einschließlich das Hinzufügen neuer Felder, das Entfernen von Feldern oder das Hinzufügen von Aliasnamen. Im Fenster Data Fields kann Folgendes ausgewählt werden:

- **Data Fields Event Log.** Zeigt ein Ereignisprotokoll für alle Datenfelder an.
- **Event Log.** Zeigt ein Ereignisprotokoll für ein bestimmtes Datenfeld an.

| 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. |

Abbildung 65. Data Fields Event Log

8 Diagnose und Störungsbehebung

8.1 Neustart oder Ausschalten des Analysators

Für einen Neustart oder zum Ausschalten des Analysators wie folgt vorgehen:

1. Im Fenster **Raman Analyzer** auf **Options** klicken.
Das Dialogfenster Analyzer Options wird angezeigt.

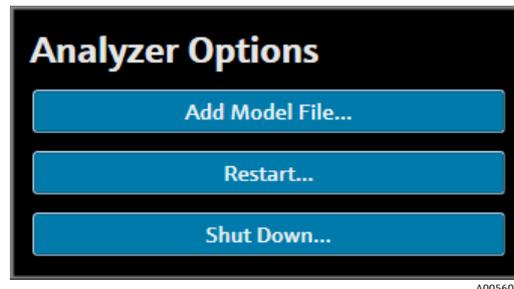


Abbildung 66. Analyzer Options

2. Eine der folgenden Optionen auswählen:
 - Auf **Restart** klicken, wenn der Analysator neu gestartet werden soll.
 - Auf **Shut Down** klicken, wenn der Analysator ausgeschaltet werden soll.
3. Auf dem folgenden Dialogfeld **OK** klicken.

Nachdem ein Raman-RunTime-Analysator ausgeschaltet oder zurückgesetzt wurde, muss der Windows-Dienst neu gestartet werden, um Raman Data Library mit RunTime zu verbinden. Um den Windows-Dienst neu zu starten, den **Endress+Hauser Raman Data Library** Dienst mithilfe des Taskleistendienstemanagers stoppen und anschließend neu starten oder den Computer mit Raman Data Library neu starten.

8.2 Spektren werden nicht gesammelt

Wenn Spektren über das Raman-Analysator-Fenster erfasst werden und die Spektren nicht zu einem Datensatz hinzugefügt werden, bedeutet dies, dass der Windows-Dienst die Verbindung zum Raman-Laufzeitanalysator getrennt hat und die Verbindung neu hergestellt werden muss.

Der Windows-Dienst kann aus verschiedenen Gründen die Verbindung zum Raman RunTime-Analysator trennen, darunter:

- Abschalten des Analysators für längere Zeiträume
- Ändern der Netzwerkeinstellungen in der Raman RunTime-Software
- Ändern der Netzwerkeinstellungen auf dem Computer, auf dem Raman Data Library läuft.

Um die Windows-Dienstverbindung wiederherzustellen, den **Endress+Hauser Raman Data Library** Dienst mithilfe des Taskleistendienstemanagers stoppen und anschließend neu starten oder den Computer mit Raman Data Library neu starten.

9 Support

9.1 About

Im oberen Menüband auf **About** klicken, um das Fenster About Raman Data Library zu öffnen. In diesem Fenster werden die Softwareversion und die Versionsnummer, die Installations-ID und Copyright-Informationen angezeigt.

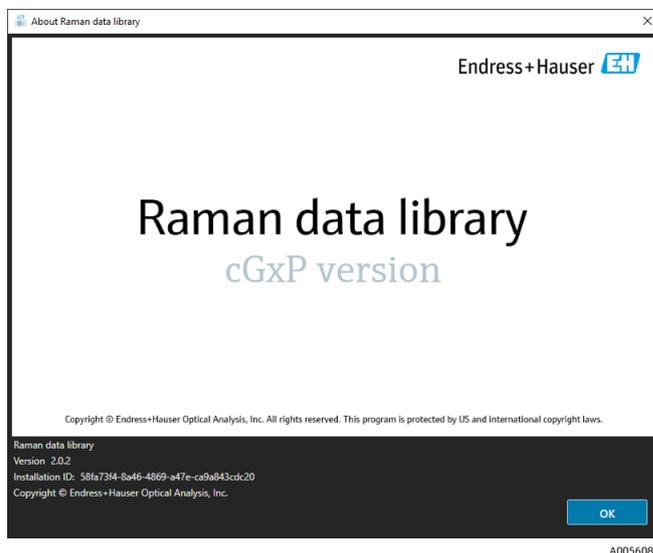


Abbildung 67. Fenster About

9.2 Kontaktinformationen

Wenn technische Unterstützung erforderlich ist, die Website (<https://endress.com/contact>) besuchen. Sie enthält eine Liste der lokalen Vertriebskanäle in der betreffenden Region.

10 Copyright-Informationen

10.1 Endbenutzer-Lizenzvereinbarung

Eine Kopie der Lizenzvereinbarung für Endbenutzer für *Raman Data Library* Software ist in diesem Dokument zu Referenzzwecken enthalten.

Diese Lizenzvereinbarung für die Software sorgfältig durchlesen, bevor die Software installiert oder verwendet wird.

Durch Anklicken der Schaltfläche "Accept", Installieren des Produkts oder der Nutzung von Geräten, die dieses Produkt enthalten, erklären Sie sich mit dieser Vereinbarung einverstanden. Wenn Sie nicht mit allen Bedingungen dieser Vereinbarung einverstanden sind, klicken Sie auf die Schaltfläche "Do not accept". Damit wird der Installationsvorgang nicht fortgesetzt.

Dies ist eine Lizenzvereinbarung für Endbenutzer zwischen Ihnen, dem Endbenutzer von *Raman Data Library*-Software ("Lizenznehmer") und Endress+Hauser Optical Analysis, Inc. ("Lizenzgeber" oder "Endress+Hauser"), einem Unternehmen aus Delaware mit Hauptgeschäftssitz in 371 Parkland Plaza, Ann Arbor, Michigan 48103. Durch die Installation von *Raman Data Library* Software erklären Sie sich mit den Bedingungen dieser Vereinbarung einverstanden.

1.0. Nicht-exklusive Nutzungslizenz. Der Lizenzgeber gewährt dem Lizenznehmer eine nicht-exklusive Lizenz zur Nutzung von Raman Data Library, die ein Paket aus Computerprogrammen und Daten in maschinenlesbarer Form sowie die Benutzerhandbücher umfasst, die zusammen das "Lizenzprogramm" bilden, und zwar gemäß den folgenden Bedingungen, die für alle vom Lizenznehmer installierten Versionen des Lizenzprogramms gelten.

2.0. Umfang der gewährten Rechte. Der Lizenznehmer ist zu Folgendem berechtigt:

2.1. Installation des lizenzierten Programms auf einem einzelnen Computer zur Steuerung von Spektrometern, die von Endress+Hauser hergestellt wurden.

2.2. Nutzung und Ausführung des lizenzierten Programms auf einem Computer, wie in 2.1 definiert, zum Zwecke der Erfüllung der Bedürfnisse des Endnutzers.

2.3. Zur Unterstützung der autorisierten Nutzung des lizenzierten Programms werden die maschinenlesbaren Anweisungen oder Daten des lizenzierten Programms in Maschinen gespeichert, über diese übertragen und auf diesen angezeigt, die mit dem/den angegebenen Computer(n) verbunden sind. Und:

2.4. Anfertigung einer Kopie des lizenzierten Programms in maschinenlesbarer Form als Objektcode ausschließlich für nicht-produktive Sicherheitszwecke.

3.0. Urheberrecht und Einschränkungen.

3.1. Das lizenzierte Programm ist urheberrechtlich geschützt. Die Urheberrechte liegen bei Endress+Hauser. Das lizenzierte Programm wird dem Lizenznehmer zur Nutzung überlassen, jedoch nicht an ihn verkauft. Der Lizenzgeber verkauft das lizenzierte Programm nicht an den Lizenznehmer und überträgt auch kein Eigentum am Programm an ihn.

3.2. Der Lizenznehmer erwirbt keinerlei Eigentumsrechte, Rechtstitel und Anteile am lizenzierten Programm und an allen Änderungen und Verbesserungen daran (einschließlich des Eigentums an allen damit verbundenen Geschäftsgeheimnissen und Urheberrechten).

3.3. Dieses lizenzierte Programm enthält vertrauliche und/oder geschützte Informationen, die durch Urheberrechte und internationale Verträge geschützt sind. Alle Rechte vorbehalten. Kein Teil des lizenzierten Programms darf ohne schriftliche Genehmigung des Lizenzgebers fotokopiert, vervielfältigt oder in eine andere Sprache übersetzt werden. Jede unbefugte Nutzung, Offenlegung, Abtretung, Übertragung oder Vervielfältigung dieser vertraulichen Informationen wird unter Ausschöpfung des gesamten gesetzlichen Rahmens strafrechtlich verfolgt.

3.4. Der Lizenznehmer darf das lizenzierte Programm (elektronisch oder anderweitig) oder Kopien, Adaptionen, Transkriptionen oder zusammengeführte Teile davon nur mit ausdrücklicher Genehmigung des Lizenzgebers verwenden, kopieren, ändern oder verbreiten. Der Lizenznehmer darf das Lizenzprogramm nicht rückassemblieren, rückkompilieren oder anderweitig übersetzen. Die Rechte des Lizenznehmers dürfen nicht übertragen, vermietet, abgetreten oder unterlizenzieren werden, mit Ausnahme einer Übertragung des lizenzierten Programms in seiner Gesamtheit an (1) einen Rechtsnachfolger des gesamten Unternehmens des Lizenznehmers, der die Verpflichtungen aus dieser Vereinbarung übernimmt, oder (2) eine andere Partei, die für den Lizenzgeber akzeptabel ist und eine Ersatzversion dieser Vereinbarung eingeht sowie eine Verwaltungsgebühr zur Deckung der damit verbundenen Kosten entrichtet. Der Lizenznehmer darf das lizenzierte Programm ohne die vorherige ausdrückliche Genehmigung

des Lizenzgebers nicht auf einem anderen Computersystem installieren oder an einem anderen Standort verwenden. Wenn der Lizenznehmer das lizenzierte Programm auf eine Weise verwendet, kopiert oder ändert, die nicht ausdrücklich vom Lizenzgeber genehmigt wurde oder wenn er den Besitz einer Kopie, Anpassung, Transkription oder eines zusammengeführten Teils des lizenzierten Programms auf eine andere Partei überträgt, ohne dass dies ausdrücklich vom Lizenzgeber genehmigt wurde, wird die Lizenz automatisch gekündigt.

3.5. Der Lizenzgeber wird hiermit vom Lizenznehmer ermächtigt, die Räumlichkeiten des Lizenznehmers zu betreten, um das lizenzierte Programm während der regulären Geschäftszeiten in angemessener Weise zu überprüfen und die Einhaltung der Bedingungen dieser Vereinbarung durch den Lizenznehmer zu kontrollieren.

3.6. Der Lizenznehmer erkennt an, dass der Lizenzgeber im Falle eines Verstoßes des Lizenznehmers gegen eine der vorstehenden Bestimmungen keinen angemessenen Anspruch auf Geld oder Schadenersatz hat. Der Lizenzgeber ist daher berechtigt, bei jedem zuständigen Gericht sofort eine einstweilige Verfügung gegen einen solchen Verstoß zu erwirken. Das Recht des Lizenzgebers auf Unterlassungsansprüche schränkt sein Recht auf weitere Rechtsmittel nicht ein.

4.0. Eingeschränkte Gewährleistung und Haftungsbeschränkung.

4.1. Der Lizenzgeber hat im Interesse des Lizenznehmers dafür Sorge getragen, die Richtigkeit und Zuverlässigkeit des lizenzierten Programms sicherzustellen. Diese Zusicherung ist ausdrücklich an die Bedingung geknüpft, dass sich der Lizenznehmer an die in den Begleitmaterialien zum Lizenzprogramm enthaltenen Betriebs-, Sicherheits- und Datenkontrollverfahren hält.

4.2. Soweit gesetzlich zulässig, haftet Endress+Hauser in keinem Fall für Personenschäden oder zufällige, spezifische, indirekte oder Folgeschäden jeglicher Art, einschließlich, aber nicht beschränkt auf Schäden durch entgangenen Gewinn, Datenverlust, Betriebsunterbrechung oder andere wirtschaftliche Schäden oder Verluste, die sich aus oder im Zusammenhang mit der Nutzung oder der Unfähigkeit zur Nutzung der Endress+Hauser Software durch den Lizenznehmer ergeben, unabhängig von der Ursache und der Haftungsgrundlage (Vertrag, unerlaubte Handlung oder anderweitig), wobei es unerheblich ist, ob Endress+Hauser auf die Möglichkeit solcher Schäden hingewiesen wurde. In einigen Rechtsordnungen ist die Beschränkung der Haftung für Personenschäden oder für zufällige oder Folgeschäden nicht zulässig, sodass diese Beschränkung möglicherweise nicht auf den Lizenznehmer zutrifft. In keinem Fall übersteigt die Gesamthaftung von Endress+Hauser dem Lizenznehmer gegenüber für alle Schäden (sofern nicht durch geltendes Recht in Fällen von Personenschäden vorgeschrieben) den Gesamtbetrag aller an den Lizenzgeber im Rahmen dieses Vertrags gezahlten Lizenzgebühren. Die vorstehenden Einschränkungen gelten auch dann, wenn das oben genannte Rechtsmittel seinen wesentlichen Zweck verfehlt.

4.3. Der Lizenzgeber übernimmt keine Haftung für Fehler oder Auslassungen im lizenzierten Programm und behält sich das Recht vor, ohne weitere Ankündigung Änderungen und Verbesserungen an den hierin enthaltenen Produkten vorzunehmen.

4.4. Sofern in dieser Vereinbarung nicht ausdrücklich etwas anderes festgelegt ist, lehnt der Lizenzgeber jegliche Verpflichtungen, Zusicherungen und Gewährleistungen in Bezug auf das lizenzierte Programm ab, einschließlich in Bezug auf seinen Zustand, seiner Übereinstimmung mit einer Zusicherung oder Beschreibung. Dies gilt auch für jegliche Inanspruchnahme wegen Fahrlässigkeit und seiner Marktgängigkeit oder Eignung für einen bestimmten Zweck. Die mit dem lizenzierten Programm bereitgestellten Informationen sind nicht als Zusicherungen oder Gewährleistungen in Bezug auf das beschriebene lizenzierte Programm zu verstehen.

4.5. Die Gesamthaftung des Lizenzgebers dem Lizenznehmer gegenüber für alle Ansprüche im Zusammenhang mit dem lizenzierten Programm und dieser Vereinbarung, einschließlich aller Anspruchsgrundlagen, die sich aus dem Vertrag, einer unerlaubten Handlung oder einer verschuldensunabhängigen Haftung ergeben, darf den Gesamtbetrag aller an den Lizenzgeber im Rahmen dieser Vereinbarung gezahlten Lizenzgebühren nicht übersteigen. Diese Haftungsbeschränkung gilt unabhängig davon, ob andere Bestimmungen dieser Vereinbarung verletzt wurden oder sich als unwirksam erwiesen haben. Der Lizenzgeber haftet nicht für den Verlust von Daten oder Dokumentationen, wobei davon ausgegangen wird, dass der Lizenznehmer für angemessene Sicherungsmaßnahmen verantwortlich ist.

4.6. Das Lizenzprogramm wird ohne Mängelgewähr vertrieben und der Lizenznehmer übernimmt das gesamte Risiko in Bezug auf Qualität und Leistung des Programms.

4.7. Möglicherweise hat der Lizenznehmer nach bestimmten Gesetzen, z. B. Verbraucherschutzgesetzen, zusätzliche Rechte, die den Ausschluss stillschweigender Gewährleistungen oder den Ausschluss oder die Beschränkung bestimmter Schäden nicht zulassen. Wenn derartige Gesetze gelten, können gegebenenfalls diese Ausschlüsse und Beschränkungen nicht gegenüber dem Lizenznehmer zur Anwendung kommen.

5.0. Verschiedenes.

5.1. Diese Vereinbarung unterliegt den Gesetzen des US-Bundesstaats Michigan und ist gemäß diesen Gesetzen auszulegen, wobei die Rechtswahlvorschriften des US-Bundesstaats Michigan ausdrücklich ausgeschlossen sind.

5.2. Änderungen dieser Vereinbarung sind nur verbindlich, wenn sie schriftlich erfolgen und von einem bevollmächtigten Vertreter der Partei unterzeichnet werden, gegen die die Durchsetzung der Änderung angestrebt wird.

5.3. Alle im Rahmen dieser Vereinbarung erforderlichen oder zulässigen Mitteilungen müssen schriftlich erfolgen und persönlich zugestellt oder per Einschreiben oder beglaubigter Post mit Rückschein und ordnungsgemäßer Frankierung versandt werden.

5.4. Für den Fall, dass eine der Bestimmungen dieser Vereinbarung von einem zuständigen Gericht für ungültig oder nichtig erklärt wird, ist nur diese Bestimmung oder sind nur diese Bestimmungen null und nichtig und gelten als von dieser Vereinbarung abgetrennt. Alle übrigen Bestimmungen dieser Vereinbarung bleiben in vollem Umfang in Kraft und wirksam.

5.5. Diese Vereinbarung stellt die vollständige und ausschließliche Erklärung der Verpflichtungen und Verantwortlichkeiten des Lizenzgebers gegenüber dem Lizenznehmer dar und ersetzt jegliche andere Äußerungen, Zusicherungen oder sonstige Mitteilungen des Lizenzgebers, die von ihm indirekt oder in seinem Namen in Bezug auf den Gegenstand dieser Vereinbarung abgegeben wurden.

6.0 Dokumentation.

Dieses Dokument ist für den Gebrauch durch autorisierte Mitarbeiter und Vertreter von Endress+Hauser Optical Analysis, Inc. bestimmt. Kein Teil dieses Dokuments darf ohne die ausdrückliche schriftliche Genehmigung von Endress+Hauser Optical Analysis, Inc. in irgendeiner Form oder auf irgendeine Weise, sei es elektronisch oder mechanisch, einschließlich Fotokopien, Aufzeichnungen oder Informationsspeicher- und -abrufsysteme, für andere Zwecke als den persönlichen Gebrauch des Erwerbers vervielfältigt oder übertragen werden. Nach dem Gesetz umfasst das Kopieren auch die Übersetzung in eine andere Sprache.

Die in diesem Dokument enthaltenen Informationen gelten zum Zeitpunkt der Erstellung als korrekt. Endress+Hauser Optical Analysis, Inc. behält sich das Recht vor, die darin enthaltenen Informationen ohne Vorankündigung zu ändern.

www.addresses.endress.com
