

# Краткое руководство по эксплуатации Библиотека данных рамановской спектроскопии



# Содержание

<b>1</b>	<b>Информация о настоящем документе.....</b>	<b>3</b>
1.1	Символы безопасности .....	3
1.2	Безопасность .....	3
1.3	Документация .....	3
<b>2</b>	<b>Рабочий процесс библиотеки данных рамановской спектроскопии .....</b>	<b>5</b>
2.1	Вход в систему (только для версии cGxP) .....	5
2.2	Режимы онлайн и офлайн.....	6
2.3	Пользовательский интерфейс.....	6
<b>3</b>	<b>Порядок запуска .....</b>	<b>9</b>
3.1	Импорт спектров комбинационного рассеяния и создание наборов данных .....	9
3.2	Спектральные источники.....	10

# 1 Информация о настоящем документе

Данный документ является кратким руководством по эксплуатации. Он не заменяет собой руководство по эксплуатации, относящееся к прибору.

## 1.1 Символы безопасности

Структура информации	Значение
<p><b>⚠ ПРЕДУПРЕЖДЕНИЕ</b></p> <p><b>Причины (последствия)</b>                      Последствия несоблюдения (если применимо)                      ▶ Корректирующее действие</p>	<p>Данный символ предупреждает об опасной ситуации. Если допустить такую ситуацию, она может привести к серьезным или смертельным травмам.</p>
<p><b>⚠ ОСТОРОЖНО!</b></p> <p><b>Причины (последствия)</b>                      Последствия несоблюдения (если применимо)                      ▶ Корректирующее действие</p>	<p>Данный символ предупреждает об опасной ситуации. Если допустить такую ситуацию, она может привести к травмам легкой или средней степени тяжести.</p>
<p><b>ℹ ПРИМЕЧАНИЕ</b></p> <p><b>Причина / ситуация</b>                      Последствия несоблюдения (если применимо)                      ▶ Действие / примечание</p>	<p>Данный символ предупреждает о ситуации, которая может привести к повреждению имущества.</p>

## 1.2 Безопасность

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

## 1.3 Документация

Все необходимые документы можно получить в перечисленных ниже источниках:

- В мобильном приложении Endress+Hauser: [www.endress.com/supporting-tools](http://www.endress.com/supporting-tools)
- В разделе "Документация" на веб-сайте Endress+Hauser: [www.endress.com/downloads](http://www.endress.com/downloads)

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

Номер документа	Тип документа	Описание
BA02367C	Руководство по эксплуатации библиотеки данных рамановской спектроскопии для пользователя	Полный обзор возможностей и функций программного обеспечения для спектрального анализа данных.
BA02349C	Руководство по эксплуатации библиотеки данных рамановской спектроскопии для администратора	Полный обзор операций, связанных с управлением безопасностью и информационной базой библиотеки данных рамановской спектроскопии.
TIO1802C	Библиотека данных рамановской спектроскопии. Техническая информация	Пособие по планированию системы анализа данных. Документ содержит все технические данные программного обеспечения.

## 2 Рабочий процесс библиотеки данных рамановской спектроскопии

Библиотека данных рамановской спектроскопии обладает возможностями и функциями, которые помогут создать рабочий процесс для спектрального анализа данных. Ниже показан предлагаемый рабочий процесс. После завершения одной части рабочего процесса, например импорта данных или применения предварительной обработки, программа открывает следующий этап обработки данных.



### 2.1 Вход в систему (только для версии cGxP)

В версии cGxP необходимо войти в систему, чтобы открыть библиотеку данных рамановской спектроскопии. Имя пользователя и пароль являются обязательными полями. Имя пользователя не чувствительно к регистру. Например, имя пользователя Jane эквивалентно имени jane.

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

Для первого входа в библиотеку данных рамановской спектроскопии воспользуйтесь следующими инструкциями.

1. После установки убедитесь в том, что служба библиотеки данных рамановской спектроскопии Endress+Hauser запущена в списке служб Windows.

2. Дважды щелкните ярлык библиотеки данных рамановской спектроскопии.



Рис. 1. Значок библиотеки данных рамановской спектроскопии на рабочем столе

3. Войдите в библиотеку данных рамановской спектроскопии, используя информацию для первого входа:

- Имя пользователя – **Administrator**.
- Пароль – **Administrator1**.

Вам необходимо изменить пароль. Запишите новый пароль администратора.

Если используется аутентификация пользователя системы, создайте дополнительного пользователя на данном этапе. Добавление одного пользователя дополнительно к администратору по умолчанию позволяет при необходимости сбросить пароль администратора. См. раздел "Создание нового пользователя" в руководстве по эксплуатации библиотеки данных рамановской спектроскопии для пользователя (BA02367C).

## 2.2 Режимы онлайн и офлайн

Библиотеку данных рамановской спектроскопии можно использовать в двух различных режимах:

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

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

## 2.3 Пользовательский интерфейс




При первом запуске библиотеки данных рамановской спектроскопии отображается пустая информационная панель со значками меню слева. Библиотека данных рамановской спектроскопии открывает пустую информационную панель до тех пор, пока не будет загружен набор данных и не будут настроены представления.

Для обеспечения удобства работы с библиотекой данных рамановской спектроскопии установите масштаб экрана на 100 %.

### 2.3.1 Меню


#### Главное меню

Главное меню в левой части библиотеки данных рамановской спектроскопии обеспечивает навигацию между функциями программы.

Пункт меню	Навигация
 A0055967	<b>Expand/collapse.</b> Отображение или скрытие пунктов меню.
 A0055968	<b>Dashboard.</b> Создание пользовательских информационных панелей и управление ими.
 A0055969	<b>Datasets.</b> Создание наборов данных и управление ими.
 A0055970	<b>Analyze Dataset.</b> Анализ активного набора данных. Активируется только при наличии активного набора данных. Данный пункт содержит пять подвкладок: <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Data (Данные)</li> <li>▪ Pretreat (Предварительная обработка)</li> <li>▪ Peaks/Regions (Пики / области)</li> <li>▪ Views (Представления)</li> <li>▪ Summary (Сводка)</li> </ul>
 A0055971	<b>Data Fields.</b> Создание полей данных и управление ими.
 A0055972	<b>Spectral sources.</b> Создание спектральных источников (OPC/SPC) и управление ими.
 A0055973	<b>Projects.</b> Создание проектов и управление ими.
 A0055974	<b>Users.</b> Создание пользователей и управление ими.
 A0055975	<b>Settings.</b> Управление системными настройками.

#### Ленточная панель инструментов

В верхней части библиотеки данных рамановской спектроскопии находится ленточная панель инструментов. С помощью ленточной панели инструментов можно выбрать следующие пункты:

- **Select a project.** Список Selected Project в верхней строке меню позволяет переключаться между проектами. Информация о проектах приведена в разделе "Проекты" → .
- **Change user (только для версии cGxP).** При нажатии данного инструмента можно переключиться на другого пользователя, не прекращая работу программы. Чтобы выйти из текущего пользователя или сеанса, выйдите из программы, нажав кнопку X в правом верхнем углу.

Описание смены пользователей и паролей приведено в разделе *"Управление пользователями"* в руководстве по эксплуатации библиотеки данных рамановской спектроскопии для пользователя (BA02367C).

- **Change password (только для версии cGxP).** При нажатии данного инструмента можно изменить пароль.
- **About.** При нажатии данного инструмента отображается версия программного обеспечения, номер версии, идентификатор установки и информация об авторских правах.



Рис. 2. Ленточная панель инструментов

Информация о проектах приведена в разделе *"Проекты"* в руководстве по эксплуатации библиотеки данных рамановской спектроскопии для пользователя (BA02367C). Описание смены пользователей и паролей приведено в разделе *"Пользователи и безопасность"* в руководстве по эксплуатации библиотеки данных рамановской спектроскопии для пользователя.



## 3 Порядок запуска


После установки библиотеки данных рамановской спектроскопии необходимо внести данные в программу. В данной главе описаны задачи запуска для подготовки библиотеки данных рамановской спектроскопии к первому использованию.

### 3.1 Импорт спектров комбинационного рассеяния и создание наборов данных

В данном разделе описывается быстрый способ получения данных в библиотеке данных рамановской спектроскопии. Для этого необходимо создать набор данных и перейти к папке со спектрами.

Сохранение первого набора данных может занять несколько минут. Последующие сохранения выполняются быстрее.

#### Для создания набора данных

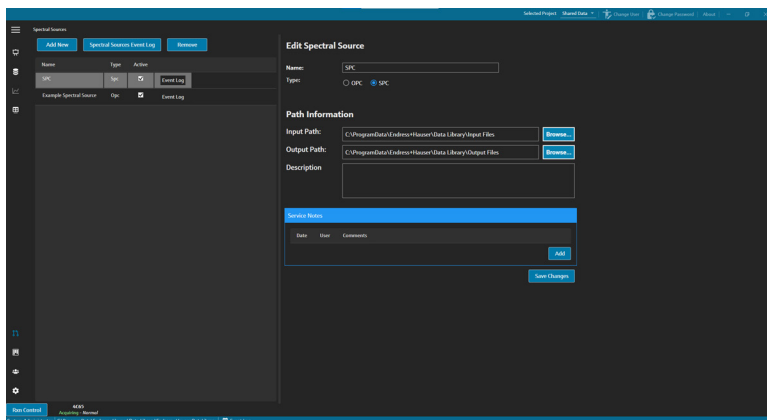
1. Выберите **Datasets**  в меню.  
Отобразится страница **Existing Datasets** с существующими наборами данных.
2. Нажмите кнопку **Create New Dataset**.
3. Введите имя набора данных.
4. В списке **Data Source** выберите **Imported Spectra**.
5. Перейдите в папку с файлами спектров, затем нажмите кнопку **Select Folder**.  
После завершения импорта появится папка и список спектров. По умолчанию выбраны все спектры. Для выбора конкретных спектров можно использовать клавиши Shift, Ctrl и Ctrl+A.
6. Оставьте все спектры выбранными или выберите необходимые спектры. Нажмите кнопку **Include**.  
Спектры, включенные в новый набор данных, показаны в пункте **Included Spectra**.
7. Установите флажок, чтобы включить все спектры выбора в Step 6 или включить только подмножество выбора, в котором программа выбирает каждый второй или третий спектр.
8. Нажмите кнопку **Create**.  
Когда набор данных будет завершен, появится экран **Analyze Dataset**.
9. Нажмите кнопку **Save Dataset**.  
Дата и время отображаются после **Last Saved**.
10. Проанализируйте и предварительно обработайте данные в окне **Analyze Dataset**.  
Можно также изменить размеры графиков и участков, чтобы настроить представления, и отметить параметры Accumulations и Exposure Length, отображаемые в списке Data Fields.

1.1. Нажмите кнопку **Launch Dashboard** для просмотра информационной панели для нового набора данных.

На информационной панели можно добавлять новые вкладки, копировать информационные панели и изменять информационные панели. Продолжайте рабочий процесс библиотеки данных рамановской спектроскопии, добавляя спектральные источники, анализируя данные, применяя предварительную обработку и управляя рамановским анализатором. Инструкции приведены в *руководстве по эксплуатации библиотеки данных рамановской спектроскопии для пользователя* (BA02367C).

## 3.2 Спектральные источники

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




A0055979

Рис. 3. Окно спектральных источников

### 3.2.1 Добавление спектрального источника OPC

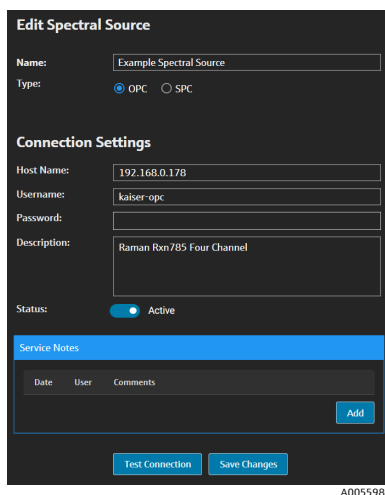
Можно создать спектральный источник OPC, чтобы библиотека данных рамановской спектроскопии могла установить OPC-соединение клиента унифицированной автоматизации (UA) с OPC-сервером Raman RunTime. OPC-соединение позволяет пользователям просматривать, контролировать и собирать спектры с систем анализаторов Raman Rxn Endress+Hauser. К библиотеке данных рамановской спектроскопии могут быть подключены несколько рамановских анализаторов (до 4).

Для OPC-соединения между библиотекой данных рамановской спектроскопии и Raman RunTime требуется версия Raman RunTime 6.4 или более поздняя. Анализаторы Raman Rxp, работающие с более ранними версиями Raman RunTime (до 6.4), могут использовать спектральный источник SPC в соответствии с описанием в разделе "Добавление спектрального источника SPC" → .

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

### Для добавления спектрального источника OPC

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



A0055980

Рис. 4. Редактирование спектрального источника OPC

2. Введите имя спектрального источника.
3. Выберите **OPC**.
4. Введите следующую информацию о настройках соединения:
  - **Host Name.** Имя хоста или IP-адрес OPC-сервера Raman RunTime.
  - **Username.** Имя пользователя, используемое для создания OPC-соединения с OPC-сервером Raman RunTime. По умолчанию: kaiser-opc.
  - **Password.** Пароль, используемый для создания OPC-соединения с OPC-сервером Raman RunTime. По умолчанию: opc.
  - **Description.** Опциональное описание спектрального источника OPC.
  - **Status.** Состояние спектрального источника OPC, активное или неактивное.
  - **Service Notes.** Комментарии обслуживающего персонала или пользователей о спектральном источнике OPC. Нажмите кнопку **Add**, чтобы добавить новое примечание по обслуживанию.

5. Нажмите кнопку **Test Connection**, чтобы проверить соединение с OPC-сервером Raman RunTime. Для обеспечения успешного соединения:

- Перед сохранением спектрального источника OPC выполните тестовое соединение.
- Если использование имени хоста анализатора не приводит к успешному соединению, попробуйте использовать IP-адрес. Это может быть просто связано с неправильной настройкой разрешения имени хоста в вашей локальной IT/OT-сети.
- В качестве альтернативы стандартным учетным данным OPC можно также использовать учетные данные одной из учетных записей пользователей, настроенных на анализаторе с Raman RunTime, для аутентификации OPC-соединения анализатора.

6. Нажмите кнопку **Save Changes**.

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

### 3.2.2 Добавление спектрального источника SPC

Функция спектрального источника SPC автоматически импортирует спектры из анализаторов Raman Rxn, работающих с более ранними версиями Raman RunTime (до 6.4). Это позволяет использовать библиотеку данных рамановской спектроскопии с унаследованными программными решениями Endress+Hauser для рамановского анализа. Добавление спектрального источника SPC позволяет библиотеке данных рамановской спектроскопии автоматически считывать и сохранять файлы .src в базе данных библиотеки данных рамановской спектроскопии и делать их доступными для наборов данных.

Для спектрального источника SPC требуется входной путь, по которому библиотека данных рамановской спектроскопии следит за новыми файлами и импортирует их, и выходной путь, по которому библиотека данных рамановской спектроскопии перемещает файлы SPC после их импорта.

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

#### Для добавления спектрального источника SPC

1. На компьютере с библиотекой данных рамановской спектроскопии создайте папку(-и) .src:

- Для более ранних версий Raman RunTime (до 6.4) создайте одну папку с именем **Output spectra (Выходные спектры)**.
- Для унаследованных программных решений создайте две папки. Назовите одну папку **Input spectra (Входные спектры)**, а другую – **Output spectra (Выходные спектры)**. Настройте унаследованное программное обеспечение на вывод файлов .src в папку **Input**.

2. Выберите пункт **Spectral sources** , затем нажмите кнопку **Add New**.  
Отобразится панель редактирования спектрального источника.

Рис. 5. Редактирование спектрального источника SPC

3. Введите имя спектрального источника.
4. Выберите **SPC**.
5. В поле **Input Path (Входной путь)**:
  - Для более ранних версий Raman RunTime (до 6.4) перейдите к общей сетевой папке по пути `\\computer name или IP address\DataLibraryBatchExport`.
  - Для унаследованных программных решений укажите **входной путь** к выходному каталогу унаследованного программного обеспечения.
6. В поле **Output Path (Выходной путь)** перейдите к папке выходных спектров, созданной в Step 1. Это путь к каталогу, используемый для вывода файлов .src после их считывания в систему.
7. (Опционально) Введите следующую информацию:
  - **Description**. Описание спектрального источника SPC.
  - **Service Notes**. Комментарии пользователей о спектральном источнике SPC. Нажмите кнопку **Add**, чтобы добавить новое примечание по обслуживанию.
8. Нажмите кнопку **Save Changes** и **OK** в ответ на запрос.

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

[www.addresses.endress.com](http://www.addresses.endress.com)

---