

Kurzanleitung Raman Data Library



Inhaltsverzeichnis

1	Hinweise zum Dokument.....	3
1.1	Warn- und Gefahrensymbole.....	3
1.2	Sicherheit.....	3
1.3	Dokumentation.....	4
2	Raman Data Library – Workflow	5
2.1	Anmelden (nur cGxP-Version).....	5
2.2	Online- und Offline-Modus	6
2.3	Anzeige und Bedienoberfläche	7
3	Programm starten.....	9
3.1	Raman-Spektren importieren und Datensätze erzeugen.....	9
3.2	Spektralquellen	10

1 Hinweise zum Dokument

Bei dieser Anleitung handelt es sich um eine Kurzanleitung. Sie ist kein Ersatz für die gerätespezifische Betriebsanleitung.

1.1 Warn- und Gefahrensymbole

Struktur des Hinweises	Bedeutung
 WARNUNG Ursache (/Folgen) Folgen der Missachtung ▶ Abhilfemaßnahme	Dieses Symbol macht auf eine gefährliche Situation aufmerksam. Wird die gefährliche Situation nicht vermieden, kann dies zu Tod oder schweren Verletzungen führen.
 VORSICHT Ursache (/Folgen) Folgen der Missachtung ▶ 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 ▶ Maßnahme/Hinweis	Dieses Symbol macht auf Situationen aufmerksam, die zu Sachschäden führen können.

1.2 Sicherheit

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

1.3 Dokumentation

Alle Dokumentationen sind verfügbar:

- Au der Endress+Hauser mobile App: www.endress.com/supporting-tools
- Im Download-Bereich der Endress+Hauser Website: www.endress.com/downloads

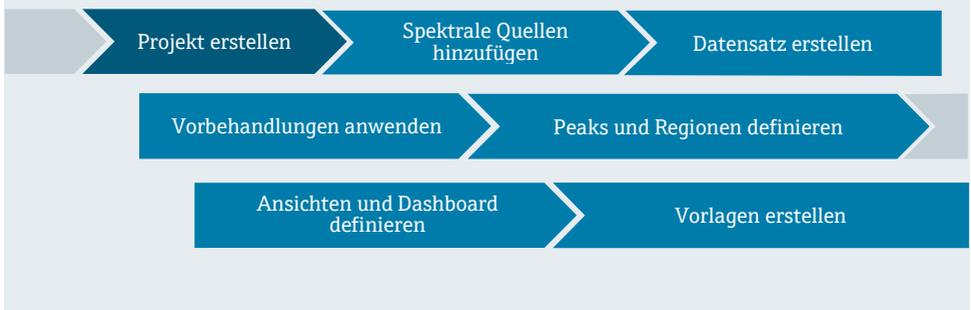
Das vorliegende Dokument ist wesentlicher Bestandteil dieses Dokumentationspakets, das Folgendes umfasst:

Teilenummer	Dokumenttyp	Beschreibung
BA02367C	Raman Data Library Benutzerbetriebsanleitung	Eine vollständige Übersicht über die Software-Merkmale und -Funktionalität zur Spektraldatenanalyse.
BA02349C	Raman Data Library Administratorbetriebsanleitung	Eine vollständige Übersicht über die Abläufe, die mit der Verwaltung der Sicherheit und der Raman Data Library-Datenbank zusammenhängen.
TIO1802C	Raman Data Library Technische Information	Planungshilfe für Ihr Datenanalysesystem. Das Dokument enthält alle technischen Daten zur Software.

2 Raman Data Library – Workflow

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

Vorgeschlagener Workflow für Raman Data Library



2.1 Anmelden (nur cGxP-Version)

In der cGxP-Version muss sich der Benutzer anmelden, um Raman Data Library zu öffnen. Anmeldenname und Passwort sind Pflichtfelder. Der Anmeldenname ist nicht groß-/kleinschriftempfindlich. Zum Beispiel ist der Anmeldenname "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.

Zur Erstanmeldung bei Raman Data Library folgende Anweisungen befolgen.

1. Nach der Installation bestätigen, dass der Endress+Hauser Raman Data Library-Dienst in der Liste der Windows-Dienste als in Betrieb aufgeführt wird.
2. Auf die Verknüpfung für Raman Data Library doppelklicken.



A0056090

Abbildung 1. Raman Data Library-Symbol auf dem Desktop

3. Mit den Anmeldedaten für die Erstanmeldung bei Raman Data Library anmelden:

- Der Benutzername ist **Administrator**.
- Das Passwort ist **Administrator1**.

Der Benutzer wird aufgefordert, das Passwort zu ändern. Neues Administratorpasswort notieren.

Wenn eine Systembenutzerauthentifizierung verwendet wird, dann an diesem Punkt einen zusätzlichen Benutzer anlegen. Durch das Hinzufügen eines Benutzers zusätzlich zum Standardadministrator, ist es bei Bedarf möglich, das Administratorpasswort zurückzusetzen. Siehe Kapitel *Creating a new user* in der *Raman Data Library Benutzerbetriebsanleitung* (BA02367C).

2.2 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 von Echtzeitprozessen 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.

2.3 Anzeige und Bedienoberfläche

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

Display-Skalierung auf 100 % setzen, um in Raman Data Library die korrekte Erfahrung mit der Benutzeroberfläche sicherzustellen.

2.3.1 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	Datensätze. Datensätze erzeugen und verwalten.
 A0055970	Datensatz analysieren. 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	Datenfelder. Datenfelder erzeugen und verwalten.
 A0055972	Spektralquellen. Spektralquellen (OPC/SPC) erzeugen und verwalten.
 A0055973	Projekte. Projekte erzeugen und verwalten.
 A0055974	Benutzer. Benutzer erzeugen und verwalten.
 A0055975	Einstellungen. Systemeinstellungen verwalten.

Multifunktionsleiste

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

- **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. Um den aktuellen Benutzer abzumelden oder die Sitzung zu beenden, auf das **X** in der rechten oberen Ecke klicken.
Beschreibungen dazu, wie Benutzer und Passwörter geändert werden, siehe Kapitel *User management* in der *Raman Data Library Benutzerbetriebsanleitung* (BA02367C).
- **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.



Abbildung 2. Multifunktionsleiste

Für Informationen zu Projekten siehe Kapitel *Projects* in der *Raman Data Library Benutzerbetriebsanleitung* (BA02367C). Beschreibungen dazu, wie Benutzer und Passwörter geändert werden, siehe Kapitel *Users and Security* in der *Raman Data Library Benutzerbetriebsanleitung*.

3 Programm starten

Nachdem Raman Data Library installiert wurde, muss die Software mit Daten gefüllt werden. Dieses Kapitel erläutert die Aufgaben des Benutzers bei der Erstinbetriebnahme, um Raman Data Library für die erstmalige Nutzung vorzubereiten.

3.1 Raman-Spektren importieren und Datensätze erzeugen

Dieser Abschnitt bietet einen Schnelleinstieg, um Raman Data Library mit Daten zu füllen. Dazu wird ein Datensatz erzeugt und zu einem Spektrenordner navigiert.

Den ersten Datensatz zu speichern, kann einige Minuten in Anspruch nehmen. Alle nachfolgenden Speichervorgänge verlaufen schneller.

Datensatz erzeugen

1. Im Menü die Option **Datasets**  auswählen.
Das Fenster **Existing Datasets** öffnet sich.
2. Auf **Create New Dataset** klicken.
3. Einen Namen für den Datensatz eingeben.
4. In der Liste **Data Source** die Option **Imported Spectra** auswählen.
5. Bis zum Ordner mit Spektrendateien blättern, dann auf **Select Folder** klicken.
Wenn der Import abgeschlossen ist, erscheinen ein Ordner und eine Liste mit Spektren. Standardmäßig sind alle Spektren ausgewählt. Mit der Umschalttaste, Strg und Strg+A können spezifische Spektren ausgewählt werden.
6. Alle Spektren ausgewählt lassen oder die gewünschten Spektren auswählen. Auf **Include** klicken.
Die im neuen Datensatz eingeschlossenen Spektren werden unter **Included Spectra** angezeigt.
7. Ein Kontrollkästchen auswählen, um alle Spektren der in Step 6 getroffenen Auswahl oder nur eine Teilmenge davon einzuschließen, in der die Software jedes zweite oder dritte Spektrum auswählt.
8. Auf **Create** klicken.
Wenn der Datensatz vollständig ist, öffnet sich das Fenster **Analyze Dataset**.
9. Auf **Save Dataset** klicken.
Hinter **Last Saved** werden ein Datum und eine Uhrzeit angezeigt.
10. Daten im Fenster **Analyze Dataset** analysieren und vorbehandeln. Der Benutzer kann außerdem die Größe von Darstellungen und Bereichen für eine benutzerspezifische Ansicht anpassen und Accumulations sowie Exposure Length, wie in der Liste Data Fields dargestellt, markieren.
11. Auf **Launch Dashboard** klicken, um das Dashboard für den neuen Datensatz anzuzeigen.

Über das Dashboard können neue Dashboard-Registerkarten hinzugefügt sowie Dashboards kopiert und bearbeitet werden. Nun durch Hinzufügen von Spektralquellen, Analysieren von Daten, Anwenden von Vorbehandlungen und Steuerung des Raman-Analysators mit dem Raman Data Library Workflow fortfahren. Anweisungen hierzu siehe *Raman Data Library Benutzerbetriebsanleitung* (BA02367C).

3.2 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.

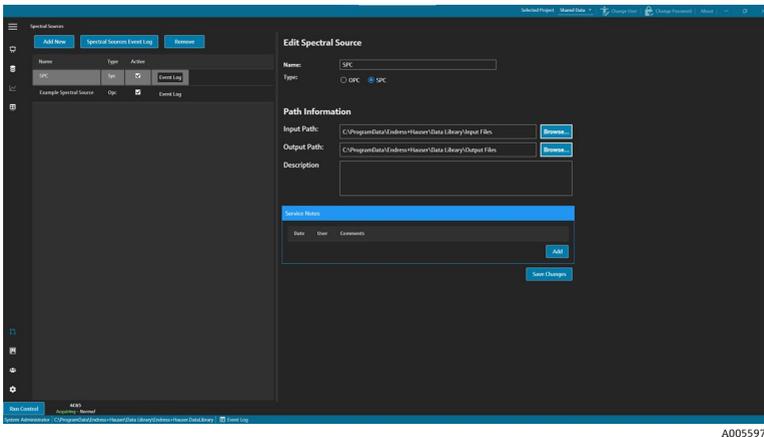


Abbildung 3. Fenster Spectral Sources

3.2.1 OPC-Spektralquelle hinzufügen

Eine OPC-Spektralquelle kann 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. Mehrere Raman-Analysatoren (bis zu 4) können an 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 wird.

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 4. OPC-Spektralquelle bearbeiten

2. Einen Namen für die Spektralquelle eingeben.
3. **OPC** auswählen.
4. Folgende Verbindungseinstellungen eingeben:
 - **Host Name.** Der Hostname oder die IP-Adresse des Raman RunTime OPC-Servers.
 - **Username.** Der Benutzername, der zur Erzeugung der OPC-Verbindung zum Raman RunTime OPC-Server verwendet wird. Standardeinstellung: "kaiser-opc".
 - **Password.** Das Passwort, das zur Erzeugung der OPC-Verbindung zum Raman RunTime OPC-Server verwendet wird. Standardeinstellung: "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 mit dem Hostnamen des Analysators keine Verbindung aufgebaut werden kann, Verbindungsaufbau mit der IP-Adresse versuchen. Möglicherweise wurde die Hostnamenauflösung im lokalen IT/OT-Netzwerk nicht korrekt konfiguriert.
 - 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.

3.2.2 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

1. 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** erzeugen.
 - Für ältere Software-Lösungen zwei Ordner erzeugen. Für einen Ordner den Namen **Input spectra** und für den anderen den Namen **Output spectra** vergeben. Ältere Software dafür konfigurieren, .spc-Dateien an den Ordner **Input** auszugeben.
2. Auf **Spectral sources**  und dann auf **Add New** klicken.

Das Fenster Edit Spectral Source öffnet sich.

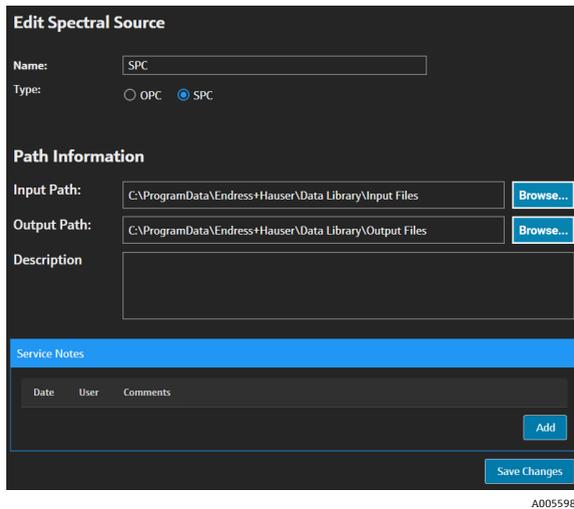


Abbildung 5. SPC-Spektralquelle bearbeiten

3. Einen Namen für die Spektralquelle eingeben.
4. **SPC** auswählen.
5. Im Feld **Input Path**:
 - Bei Raman RunTime Versionen niedriger als V6.4 bis zum freigegebenen Netzwerkordner unter dem Pfad `\\Computername oder IP-Adresse\DataLibraryBatchExport` blättern.
 - Bei älteren Software-Lösungen den **input path** auf das Ausgabeverzeichnis der älteren Software verweisen.
6. 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.
7. (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 zu 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.

www.addresses.endress.com
