

简明操作指南

拉曼光谱数据库




目录

1	文档信息.....	3
1.1	安全图标.....	3
1.2	安全.....	3
1.3	文档资料.....	3
2	拉曼光谱数据库工作流程.....	5
2.1	登陆（仅针对 cGxP 版本）.....	5
2.2	在线和离线模式.....	6
2.3	用户界面.....	6
3	如何开始.....	8
3.1	导入拉曼光谱和创建数据集.....	8
3.2	光谱数据源.....	9

1 文档信息

本文档为《简明操作指南》，不能用于替代设备配套《操作手册》。

1.1 安全图标

信息结构	含义
 警告 原因 (/后果) 不遵守安全指南的后果 ▶ 补救措施	危险状况警示图标。若未能避免这种危险状况，可能导致人员死亡或严重伤害。
 小心 原因 (/后果) 不遵守安全指南的后果 ▶ 补救措施	危险状况警示图标。若未能避免这种危险状况，可能导致人员轻微或中等伤害。
注意 原因/状况 不遵守安全指南的后果 ▶ 补救措施/说明	可能导致财产受损的状况警示图标。

1.2 安全

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

1.3 文档资料

配套文档资料的查询方式：

- 通过 Endress+Hauser 移动应用程序：www.endress.com/supporting-tools
- 登陆 Endress+Hauser 公司网站的“资料下载”区：www.endress.com/downloads

本文档为全套文档资料的组成部分，其中包括：

文档资料代号	文档资料类型	说明
BA02367C	拉曼光谱数据库用户 《操作手册》	光谱数据分析软件特性和功能的完整介绍。
BA02349C	拉曼光谱数据库管理员 《操作手册》	安全性管理和拉曼光谱数据库相关操作的完整介绍。
TI01802C	拉曼光谱数据库 《技术资料》	数据分析系统的设计规划指南。本文档包含软件的所有技术参数。

2 拉曼光谱数据库工作流程

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



2.1 登陆（仅针对 cGxP 版本）

在 cGxP 版本中，用户必须登陆才能打开拉曼光谱数据库。登陆名和密码均为必填项。登陆名不区分大小写。例如，登陆名“Jane”等同于“jane”。

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

首次登陆拉曼光谱数据库时，请遵照以下说明。

1. 安装完成后，确认 Endress+Hauser 拉曼光谱数据库服务在 Windows 服务列表中运行。
2. 双击拉曼光谱数据库快捷方式。



图 1. 拉曼光谱数据库桌面图标

3. 使用首次登陆信息登陆拉曼光谱数据库：

- 用户名为 **Administrator**。
- 密码为 **Administrator1**。

用户必须更改密码。记下新的管理员密码。

使用系统用户身份验证时，可在此创建一个附加用户。当在默认管理员之外添加一个附加用户时，可根据需要重置管理员密码。参见“*创建新用户*”章节→拉曼光谱数据库用户《操作手册》(BA02367C)。

2.2 在线和离线模式

拉曼光谱数据库支持以下两种模式：

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

通过这两种模式，用户可以理解并执行在实时过程环境中收集的拉曼光谱。

2.3 用户界面




首次启动拉曼光谱数据库时，将显示带有左侧菜单图标空白仪表盘。除非完成数据集加载和视图配置，否则拉曼光谱数据库将始终打开空白仪表盘。

为确保拉曼光谱数据库提供预期的 UI 体验，请将显示比例调节至 100%。

2.3.1 菜单

主菜单

拉曼光谱数据库左侧的主菜单能够帮助用户切换导览不同软件功能。

菜单项	导览
 A0055967	Expand/collapse: 显示或隐藏菜单项。
 A0055968	Dashboard: 创建和管理用户仪表盘。
 A0055969	Datasets: 创建和管理数据集。

菜单项	导览
 A0055970	Analyze Dataset: 分析活动数据集。仅在在有活动数据集时启用。此菜单项包含五个子选项卡： <ul style="list-style-type: none"> ▪ Data ▪ Pretreat ▪ Peaks/Regions ▪ Views ▪ Summary
 A0055971	Data Fields: 创建和管理数据字段。
 A0055972	Spectral sources: 创建和管理光谱数据源（OPC/SPC）。
 A0055973	Projects: 创建和管理项目。
 A0055974	Users: 创建和管理用户。
 A0055975	Settings: 管理系统设置。

工具栏

拉曼光谱数据库顶部包含一个功能区/工具栏。功能区/工具栏中包含以下项目：

- **Selected Project:** 通过顶部菜单的 Selected Project 列表，用户可以在不同项目间切换。有关项目的信息，请参见“项目”章节 → [📄](#)。
- **Change User (仅针对 cGxP 版本) :** 点击此工具可切换至其他用户，而不影响程序运行。如需登出当前用户或会话，点击右上角的 **X** 按钮即可退出软件。
有关切换用户和更改密码的说明，请参见“用户管理”章节 → [拉曼光谱数据库用户《操作手册》 \(BA02367C\)](#)。
- **Change Password (仅针对 cGxP 版本) :** 点击此工具可更改用户密码。
- **About:** 点击此工具可显示软件版本、版本号、安装 ID 和版权信息。



A0056151

图 2. 功能区/工具栏

有关项目的说明，请参见“项目”章节 → [拉曼光谱数据库用户《操作手册》 \(BA02367C\)](#)。
有关切换用户和更改密码的说明，请参见“用户与安全性”章节 → [拉曼光谱数据库用户《操作手册》](#)。

3 如何开始

拉曼光谱数据库安装完成后，必须将数据导入软件。本章介绍了首次使用拉曼光谱数据库时需要完成哪些初始操作。

3.1 导入拉曼光谱和创建数据集

本节介绍了如何将数据快速导入拉曼光谱数据库。为此需要创建数据集并浏览至光谱文件夹。保存首个数据集会花费数分钟时间。日后可以更快完成保存。

创建数据集

1. 从菜单中选择 **Datasets** 。

显示 **Existing Datasets** 页面。

2. 点击 **Create New Dataset**。
3. 输入一个数据集名称。
4. 在 **Data Source** 列表中选择 **Imported Spectra**。
5. 浏览至带光谱文件的文件夹，然后点击 **Select Folder**。

导入完成后，将显示文件夹和光谱列表。默认选中所有光谱。可使用 **Shift**、**Ctrl** 和 **Ctrl+A** 键选择特定光谱。

6. 选择所有光谱，或只选择需要的光谱。点击 **Include**。
新数据集中包含的光谱显示在 **Included Spectra** 下。
7. 勾选方框，以包含 **Step 6** 中选择的所有光谱，或者仅包含子集（即软件每隔一个或两个光谱选择一个光谱）。
8. 点击 **Create**。

数据集完成后，将显示 **Analyze Dataset** 页面。

9. 点击 **Save Dataset**。

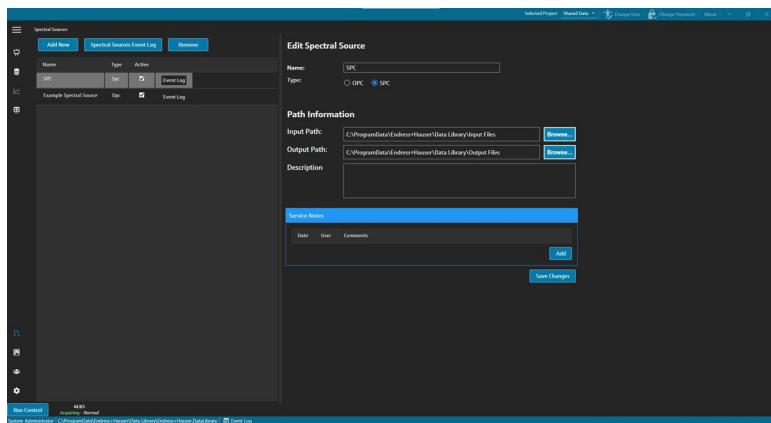
Last Saved 后面显示日期和时间。

10. 在 **Analyze Dataset** 窗口中分析和预处理数据。此外，还可调整绘图和区域大小，以此自定义视图；也可标记 **Data Fields** 列表所示的累积量和曝光长度。
11. 点击 **Launch Dashboard**，查看新数据集的仪表板。

在仪表板中可以添加新仪表板选项卡、复制仪表板和修改仪表板。通过添加光谱数据源、分析数据、执行预处理和控制拉曼光谱分析仪，用户可以继续拉曼光谱数据库工作流程。具体说明参见 *拉曼光谱数据库用户《操作手册》*（BA02367C）。

3.2 光谱数据源

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



A0055979

图 3. 光谱数据源窗口

3.2.1 添加 OPC 光谱数据源

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

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

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

添加 OPC 光谱数据源

1. 在光谱数据源窗口中点击 **Add New**。
显示 Edit Spectral Source 窗格。

图 4. 编辑光谱数据源

2. 输入一个光谱数据源名称。
3. 选择 **OPC**。
4. 输入以下连接设置信息：
 - **Host Name:** Raman RunTime OPC 服务器的主机名或 IP 地址。
 - **Username:** 与 Raman Runtime OPC 服务器建立 OPC 连接所需的用户名。默认设置：“kaiser-opc”。
 - **Password:** 与 Raman Runtime OPC 服务器建立 OPC 连接所需的密码。默认设置：“opc”。
 - **Description:** OPC 光谱数据源的描述信息（选填）。
 - **Status:** OPC 光谱数据源的状态，可以是活动或非活动状态。
 - **Service Notes:** 服务人员或用户对 OPC 光谱数据源的注释。点击 **Add** 按钮可添加新注释。
5. 点击 **Test Connection** 检查与 Raman RunTime OPC 服务器的连接。为了确保成功连接：
 - 在保存 OPC 光谱数据源之前执行测试连接。
 - 如果使用分析仪的主机名没有实现成功连接，请尝试使用 IP 地址。这可能只是因为在本本地 IT/OT 网络上没有正确配置主机名解析。
 - 作为默认 OPC 凭据的备选方案，还可使用在 Raman Runtime 分析软件上配置的任一用户帐户凭据验证分析仪 OPC 连接。
6. 点击 **Save Changes**。

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


3.2.2 添加 SPC 光谱数据源

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

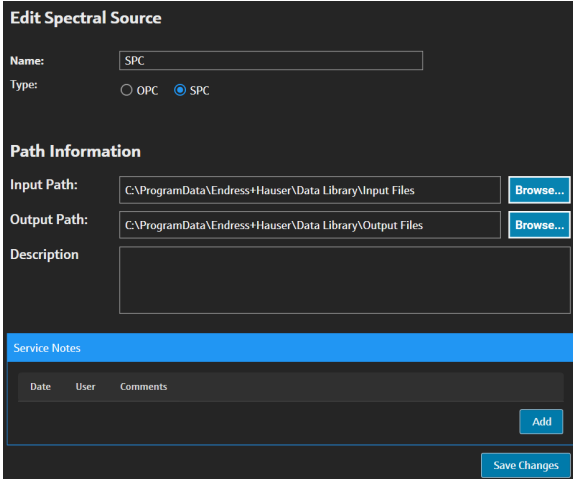
SPC 光谱数据源需要一个输入路径（供拉曼光谱数据库检测并导入新文件）和一个输出路径（供拉曼光谱数据库在导入 SPC 文件后移动这些文件）。

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

添加 SPC 光谱数据源

1. 在带有拉曼光谱数据库的计算机上创建 .spc 文件夹：
 - 如果所用 Raman Runtime 软件的版本低于 v6.4，则会创建一个名为 **Output spectra** 的文件夹。
 - 对于旧版软件解决方案，将创建两个文件夹。一个文件夹命名为 **Input spectra**，另一个文件夹命名为 **Output spectra**。将旧版软件配置为输出 .spc 文件至 **Input** 文件夹。
2. 点击 **Spectral sources** ，然后点击 **Add New**。

显示 Edit Spectral Source 窗格。



Date	User	Comments
------	------	----------

A0055981

图 5. 编辑 SPC 光谱数据源

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

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

www.addresses.endress.com
