



TECHNISCHE UNIVERSITÄT
BERGAKADEMIE FREIBERG

Die Ressourcenuniversität. Seit 1765.

Fakultät für Maschinenbau Verfahrens- und Energietechnik
Institut für Keramik, Glas- und Baustofftechnik

Anleitung zur Nutzung der ASPEX-Auswertung v1.0

Florian Kerber

Institut für Keramik, Glas- und Baustofftechnik

26. März 2021

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung	3
1.1	Allgemeines	3
1.2	Software und Ausführen des Programmes	3
2	Einstellungen	3
2.1	Allgemeine Einstellungen	3
2.2	Messwerte	4
2.3	Einlesen	4
2.4	Datentitel	5
2.4.1	Rulefile	6
2.5	Partikelklassierung	7
2.5.1	Abstandsüberprüfung	7
2.5.2	Positionsnormierung	9
2.5.3	Zusammensetzungsnormierung	9
2.5.4	Vorklassierung	9
2.5.5	Berechnung der Flächenanteile	10
2.5.6	Clusterprüfung	10
2.5.7	Ergebnisse	10
2.6	Partikelgrößenbestimmungen	11
2.6.1	Klassierungsmerkmal	11
2.6.2	Größenklassen	12
2.6.3	Weitere Einstellungen	12
2.6.4	Ergebnisse	12
2.7	Darstellungen	12
2.7.1	Eingabeeinstellungen	13
2.7.2	Ausabeeinstellungen	14
2.7.3	Ergebnisse	14
3	Parameterlog	14
4	Parametersets	15

1 Einführung

1.1 Allgemeines

Dieses Programm dient zur Auswertung von Datensätzen, die mittels einer AFA-Analyse in dem ASPEX-Gerät gewonnen wurden. Dabei bieten sich verschiedene Möglichkeiten der Auswertung. Diese beinhalten unter anderem das Durchführen von Partikelklassierungen, Partikelgrößenbestimmungen, diverse Darstellungen und andere Dinge. Jede der erwähnten Funktionen bietet eine Vielzahl von Einstellungen, mit denen sich die Auswertung für den jeweiligen Untersuchungszweck individuell anpassen lassen kann. Das Programm bietet die Möglichkeit, beliebig viele Datensätze gleichzeitig zu analysieren und auszuwerten. Eine Anpassung des verwendeten Rulefiles ist über eine einfache Excel-Datei möglich und kann anschließend für alle gewünschten Datensätze neu angewendet und die Partikelklassierung erneut durchgeführt werden. In dieser Anleitung wird die Handhabung des Programms anhand eines Beispiels erläutert.

1.2 Software und Ausführen des Programmes

Dieses Programm wurde in R geschrieben. Für dessen Nutzung ist die Installation von R 3.6.3 oder höher erforderlich, welche auf der offiziellen Website von R für das jeweilige Betriebssystem heruntergeladen werden kann. Für ein manuelles Starten ist die weiterhin die Nutzung von RStudio erforderlich, welche ebenfalls auf der zugehörigen offiziellen Website heruntergeladen werden kann. Es empfiehlt sich, die Installation in der hier erwähnten Reihenfolge durchzuführen, da somit RStudio R automatisch erkennt und einrichtet. Alternativ kann das Programm über eine simple .bat Datei gestartet werden. In diesem Fall wird RStudio nicht benötigt. Bei der Einrichtung des Programmes müssen zwei Dateipfade in der Datei *Run ASPEX-Auswertung_v1.0* angegeben werden.

- "C:\Program Files\R\R-3.6.3\bin\R.exe"-e
- "shiny::runApp('F:/ASPEX-Auswertung_v1.0', launch.browser = TRUE)"

Der erste Pfad zeigt auf die Datei *R.exe* im Installationsordner von R. Der Befehl `shiny::runApp()` startet das Programm aus dem in den Klammern angegebenen Ordnerpfad. Zu beachten ist, dass bei dem zweiten Befehl / genutzt werden müssen, da es sich um einen R-Befehl handelt, während erster Befehl ein Windows-Befehl und deshalb mit \ notiert ist. Nach anpassen der Pfade kann das Programm künftig mit der Verknüpfung *ASPEX-Auswertung*, welche beispielsweise auf den Desktop verschoben werden kann, gestartet werden. Das Programm öffnet sich nun im als Standard festgelegten Browser in einem neuen Tab. Nach erfolgreicher Ausführung ist das Programm nun einsatzbereit. Die Handhabung wird in den folgenden Kapiteln erläutert.

2 Einstellungen

Zu Beginn jeder Auswertung müssen Einstellungen, wie aktuelles Projekt, verwendete Messwerte und dem zu verwenden Rulefile vorgenommen werden.

2.1 Allgemeine Einstellungen

Vor jeder Auswertung müssen Einstellungen in dem im Abbildung 1 gezeigten Feld vorgenommen werden.

Abb. 1: Allgemeine Einstellungen

In dem Feld *Projekt* wird ein Projektordner definiert, der sich anschließend in dem Hauptordner *01 - Projekte* wiederfindet. Innerhalb eines Projektes kann weiterhin eine Unterteilung in verschiedene Chargen vorgenommen werden, deren Namen in der Variable *Charge* festgelegt wird. In dem Feld *Probenanzahl* wird die Anzahl an Datensätzen in dieser Charge als numerische Zahl angegeben. *Referenzfläche* liefert eine Fläche in mm^2 , auf die die spätere Partikelanalyse normiert wird. In manche Fällen ist es notwendig, mehrere Analyse an den gleichen Datensätzen durchzuführen, wenn beispielsweise eine Anpassung des verwendeten Rulefiles oder ähnliches erfolgt. Um die Entwicklung der Ergebnisse nachvollziehen zu können, besteht die Möglichkeit, mehrere Versionen einer Analysen an einer einzelnen Charge durchzuführen und abzuspeichern. Dafür dient das Feld *Version*. Der Versionsname kann dabei beliebig gewählt werden.

Nach Eintragung aller Namen können über den Button *Erzeugung eines neuen Projekt- oder Chargenordners* die jeweiligen Ordner erzeugt werden, falls diese noch nicht vorhanden sind. Durch klicken auf *weiter* öffnet sich der nächste Tab *Messwerte*

2.2 Messwerte

Alle durchführbaren Funktionen des Programms benötigen mindestens einen Datensatz, wie er durch die AFA-Analyse mittels ASPEX generiert wird. Unter dem Tab *Messwerte* werden Details zu den Messwerten eingestellt. Die möglichen Einstellungen sind in Abbildung 2 zu sehen.

2.3 Einlesen

Das Einlesen der Datensätze erfolgt automatisch. Um dies erfolgreich durchführen zu können ist eine gewisse Form der Datensätze notwendig. Im Rohformat liegen die Datensätze als .csv Datei vor. Alternativ kann aber auch das Format .txt genutzt werden. Das vorliegende Dateiformat wird unter *Dateiformat.Messwerte* angegeben. Da es sich bei dem ASPEX-Gerät um eine Entwicklung aus dem amerikanischen Raum handelt, ist das Trennzeichen dieser .csv-

The screenshot shows the 'Messwerte' (Measurements) tab in the Samplemanager application. It contains the following elements:

- Navigation tabs:** 'Allgemeine Einstellungen', 'Messwerte' (active), and 'Rulefile'.
- Dateiformat der Messwerte:** A dropdown menu currently showing '.CSV'.
- Trennzeichen:** A dropdown menu currently showing 'Semikolon'.
- Dezimalzeichen:** A dropdown menu currently showing 'Komma'.
- Datentitel der Messwerte laden:** A section with a text input field containing the placeholder 'Durchsuchen oder Pfad eingeben'.
- Buttons:** 'Durchsuchen' (Search), 'Zurück' (Back), and 'Weiter' (Next).

Abb. 2: Samplemanager

Dateien ein ",". Im Gegensatz dazu ist das Trennzeichen von mit Excel im deutschsprachigen Raum erstellten .csv-Dateien ein ";". Ähnlich verhält sich das Dezimaltrennzeichen, welches im amerikanischen Raum und deshalb auch bei den mittels ASPEX erzeugten Datensätzen ein "." ist, wohingegen im deutschsprachigen Raum typischerweise ein "," verwendet wird. Dies gilt es für den jeweiligen Fall zu prüfen. Das Trennzeichen kann beispielsweise auch leer, also ein Tabulator sein. Dies kommt häufig bei .txt-Dateien vor. Das vorliegende Trenn- bzw. Dezimalzeichen wird in den Feldern *Trennzeichen* bzw. *Dezimalzeichen* definiert.

Um die Daten korrekt einlesen zu können, müssen einige Änderungen an dem Rohdatensatz, d.h. der .csv-Datei vorgenommen werden. Als Spaltennamen dient jeweils die erste Zeile der Tabelle. Dort wird bei einigen Spalten standardmäßig das Sonderzeichen # verwendet, welches in R zur Kennzeichnung von Kommentaren dient. Deshalb würden diese Spalten bei einem Einlesen nicht als tatsächliche Spaltennamen interpretiert werden, sodass das Einlesen fehlerhaft wäre. Es ist deshalb notwendig, alle Spalten, die das Sonderzeichen # enthalten, umzubenennen, indem das Zeichen einfach entfernt wird. Standardmäßig tritt dies bei den Spalten *PART*, *FIELD*, *MAGFIELD* und *TYPE(4ET)* auf. Ein Trennen der Messwerte in einzelne Spalten sollte jedoch nicht vorgenommen werden, da dies von R automatisch durchgeführt wird. Nach dem Umbenennen des ersten Datensatzes kann die Zeile mit den Spaltennamen einfach kopiert und in allen weiteren Datensätzen mit der gleichen Struktur eingefügt werden. Alle zu analysierenden Datensätze müssen anschließend in den Ordner *01 - Projekte/Projektname/Chargenname/Messwerte* kopiert werden.

In Abbildung 3 sind beispielhaft vier Datensätze mit der zugehörigen Datei für die Datensatztitel dargestellt.

2.4 Datentitel

Um im weiteren Verlauf die Bezeichnung der Datensätze zu erhalten, müssen im Folgenden die Titel der Datensätze angegeben werden. Dies erfolgt ebenfalls in einer .csv-Datei. Dabei

Name	Änderungsdatum	Typ	Größe
Datensatz_01.csv	14.04.2020 16:12	Microsoft Excel-C...	1,413 KB
Datensatz_02.csv	14.04.2020 16:12	Microsoft Excel-C...	294 KB
Datensatz_03.csv	14.04.2020 16:12	Microsoft Excel-C...	920 KB
Datensatz_04.csv	14.04.2020 16:12	Microsoft Excel-C...	847 KB
Titel_Analyse_01.csv	14.04.2020 15:34	Microsoft Excel-C...	1 KB

Abb. 3: Datensätze

ist es wichtig, dass der Titel des jeweiligen Datensatzes exakt der Bezeichnung der zugehörigen Datensatzdatei entspricht. Für das gegebene Beispiel ergibt sich die in Abbildung 4 dargestellte .csv-Datei für die Datensatztitel. Neben den Titeln wird in dieser Datei auch noch die Messfläche der jeweiligen Datensätzen in mm^2 erfasst, welche später für die Analyse notwendig ist.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I
1	Titel	Messfläche							
2	Datensatz_01	7							
3	Datensatz_02	8							
4	Datensatz_03	9							
5	Datensatz_04	10							
6									
7									
8									
9									
10									
11									

Abb. 4: Datensatztitel und Messfläche

Diese Datei kann unter einem beliebigen Namen in einem beliebigen Ordner, vorzugsweise aber im gleichen Ordner wie die zugehörigen Messwerte, abgespeichert werden. Der verwendete Dateiname und deren Pfad wird in dem Feld unter *Datentitel der Messwerte laden* angegeben oder die Datei kann durch Klicken von *Durchsuchen* ausgewählt werden. Durch Klicken von *weiter* wird der Tab *Rulefile* geöffnet.

2.4.1 Rulefile

Das Rulefile liefert die Definitionen für die einzelnen Partikelklassen und wird in Form einer .csv-Datei angegeben. Die Erstellung kann folglich mit Hilfe einer Excel-Arbeitsmappe erfolgen, welche anschließend als .csv-Datei exportiert wird. Alternativ wird auch das Dateiformat .txt unterstützt. In Abbildung 5 ist ein Beispiel für das Format eines Rulefiles gegeben.

Dieses setzt sich zusammen aus den Spalten *Klassennamen* und *Klassenbedingungen* für die

	A	B	C	D
1	Klassenname	Klassenbedingung	PreKlassennamen	PreKlassenbedingungen
2	Klasse_01	$C > 1 \ \& \ Al > 10 \ \& \ (Fe+Cr) < 40 \ \& \ O * 0.05 > 10$	Klasse_01_pre	...
3	Klasse_02	$Si > 10 \ \ Cr > 10$	Klasse_02_pre	...
4	Klasse_03	$Mg > 20$	Klasse_03_pre	...
5	Klasse_04	$(Fe-30) > 20$		
6	andere	$Fe < 100$		
7				
8				
9				
10				
11				
12				
13				
14				

Abb. 5: Rulefile

tatsächliche Partikelklassierung und den Spalten *PreKlassennamen* und *PreKlassenbedingungen* für eine eventuelle Vorklassierung. Näheres zur Vorklassierung folgt in Kapitel 2.5.4

In den Klassenbedingungen können Bedingungen für die einzelnen gemessenen Elemente aufgestellt werden. Außerdem können auch Berechnungsschritte durchgeführt werden. Zu beachten ist, dass als Dezimalzeichen ein Punkt verwendet werden muss. Bei mehreren Bedingungen können die logischen Operatoren & (und) bzw. | (oder) verwendet werden. Die Klassennamen können beliebig gewählt werden. Die Klassen werden während der Partikelklassierung in chronologischer Reihenfolge abgearbeitet, d.h. sobald ein Partikel in eine Klasse passt, werden die folgenden Klassen nicht mehr geprüft. Die Klasse andere mit der Definition *beliebiges Element* < 100 , welche immer als letzte Klasse festgelegt werden sollte, erfasst somit alle nicht in die vorherigen Klassen zugeordneten Partikel, da kein Element mehr als 100 % der Zusammensetzung einnehmen kann und die Bedingung somit immer erfüllt ist.

Nach Erstellung des Rulefiles kann dieses unter einem beliebigem Namen in einem beliebigen Ordner, vorzugsweise jedoch in dem Ordner *02 - Rulefiles*, abgespeichert werden. Die zu verwendende Datei bzw. deren Speicherpfad wird genau wie die Datentitel-Datei in dem Feld unter *Rulefile laden* eingegeben oder durch Klicken von *Durchsuchen* ausgewählt. Unter der Annahme, dass derartige Rulefiles im deutschsprachigen Raum erstellt werden, wurden die Einstellung für das Trenn- bzw. Dezimalzeichen bereits auf die jeweiligen Standards vorgenommen, sodass an dieser Stelle keine weiteren Einstellung nötig sind.

2.5 Partikelklassierung

Eine wesentliche Funktion des Programms ist die Klassierung der analysierten Partikel anhand ihrer Zusammensetzung in einzelne Partikelklassen. Dafür stehen mehrere Einstellungen zu Verfügung, die in Abbildung 6 dargestellt sind und in den folgenden Unterkapiteln erläutert werden. Nachdem alle Einstellungen vorgenommen wurden, kann die Partikelklassierung mit dem Button *Partikelklassierung ausführen* gestartet werden.

2.5.1 Abstandsüberprüfung

Bei einer AFA-Analyse mittels APSEX kann es vorkommen, dass ein Partikel mehrmals erfasst wird, wenn es entweder genau auf einer Feldgrenze liegt oder wenn es den eingestellten Schwellenwert nur knapp unterschreitet, sodass Teile des Partikels oberhalb und Teile unterhalb des

Abb. 6: Partikelklassierung

Schwellenwertes liegen. Außerdem kann es sein, dass es sich um einen Einschluss handelt, welcher in der Tiefe verbunden ist und lediglich durch das Schleifen getrennt und deshalb als zwei separate Partikel erfasst wurde. Eine solche Mehrfachbestimmung wird bei der Betrachtung der x- und y-Positionen der Partikel sichtbar. Doppelt bestimmte Partikel haben nur einen sehr kleinen Abstand zwischen einander. Durch die Abstandsüberprüfung kann ein minimaler Abstand festgelegt werden, der zwischen zwei Partikeln, die der gleichen Klasse zugeordnet wurden, in x- und in y-Richtung liegen muss, dass sie als separate Partikel betrachtet werden. Andernfalls wird nur einer der Partikel berücksichtigt, wobei dann die Partikelfläche dieses Partikel um die des nicht berücksichtigten Partikels erweitert wird. Liegen mehr als zwei Partikel zu nahe aneinander wird trotzdem nur ein Partikel für die Analyse berücksichtigt, wobei die Fläche aller weiteren Partikel zu der des berücksichtigten Partikels addiert wird.

Der minimale Abstand zwischen zwei Partikeln in mm sowohl in x- als auch in y-Richtung wird durch das entsprechende Feld angegeben. Standardmäßig wird nur der Abstand zwischen zwei nacheinander detektierten Partikeln überprüft. Ist eine Abstandsüberprüfung zu weiteren Partikeln gewünscht muss die Funktion *Abstandsüberprüfung für die nächsten 10 Partikel* aktiviert werden. In diesem Fall wird der Abstand eines Partikels zu den nächsten zehn detektierten Partikeln überprüft. Dies ist insofern sinnvoll, da Messung immer zeilenweise, also in x-Richtung erfolgt. Erfolgt nun eine doppelte Bestimmung, bei denen die detektierten Punkte 1 und 2 untereinander liegen, d.h. die x-Werte sind annähernd gleich und die y-Werte unterscheiden sich, liegen jedoch noch unter der Grenze des minimalen Abstandes und gleichzeitig befindet sich auf der y-Koordinate von Punkt 1 noch ein Punkt 3 mit stark abweichendem x-Wert, so würde der Abstand zwischen Punkt 1 und 3 nicht aber zwischen Punkt 1 und

2 überprüft werden, da die Partikel aufgrund der zeilenweisen Detektion in der Reihenfolge 1-3-2 detektiert werden. In einem solche Fall würde die ausführliche Überprüfung trotzdem das doppelt bestimmte Partikel erkennen. Beispielhaft ist diese Konstellation in Abbildung 7 dargestellt.



Abb. 7: Zeilenweise Detektion von Partikeln

2.5.2 Positionsnormierung

Die x- und y-Koordinaten werden anhand des Probenisches im ASPEX-Gerät erfasst. Da die gemessene Probe auf diesem Tisch frei positioniert werden kann, unterscheiden sich die absolut Koordinaten bei zwei gemessenen Proben, die bspw. nebeneinander liegen. Eine Darstellung der Punkte kann deshalb erschwert werden. Durch die Positionsnormierung erfolgt eine Normierung der Punkte auf den Koordinatenursprung in dem der Punkt mit der kleinsten x- und y-Koordinate auf den Punkt (0;0) gelegt wird und alle weiteren Punkte relativ dazu berechnet werden.

2.5.3 Zusammensetzungsnormierung

Bei der Messung der Partikel wird immer ein Teil des Untergrundes, häufig eine Eisenmatrix, mit gemessen, sodass in allen Partikel scheinbar ein gewisser Anteil an Fe enthalten ist. Diese ist jedoch nicht tatsächlich Teil der Partikelzusammensetzung und kann somit zu verfälschten Ergebnissen führen. Deshalb kann es sinnvoll sein, diese Fe-Anteile zu entfernen und die übrig gebliebene Zusammensetzung neu auf 100 % zu normieren. Welche Elemente für die Normierung berücksichtigt werden sollen, kann entsprechend ausgewählt werden. Falls gewünschte Elemente nicht in der Liste verfügbar sind, können diese unter der Option *weitere* hinzugefügt werden. Gleiches gilt für Elemente die nicht berücksichtigt werden sollen und stattdessen auf 0 gesetzt werden.

2.5.4 Vorklassierung

Aufgrund der Zusammensetzungsnormierung ist unter Umständen eine Vorklassierung notwendig. Sollte beispielsweise Fe aus der Zusammensetzung entfernt werden, so würde ein Fe-Kratzer mit einer Zusammensetzung von 95 % Fe, 4 % O und Spuren anderer Elemente nach einer Normierung völlig Falsch gedeutet werden, da daraus ein Partikel mit überwiegend O und deutlichen Anteilen der eigentlich nur in Spuren vorhandenen Elemente wird. Deshalb gibt es die Option der Vorklassierung, bei denen bestimmte Partikel, wie beispielsweise Fe-Kratzer, Schmutz oder Fe-Oxide vor der Zusammensetzungsnormierung klassiert werden. Die zu klassierenden Pre-Klassen werden ebenfalls im Rulefile in den Spalten *PreKlassennamen* und *PreKlassenbedingungen* definiert.

2.5.5 Berechnung der Flächenanteile

Es besteht die Möglichkeit neben der einfachen Bestimmung der Partikelanzahl einer jeweiligen Klasse auch den Flächenanteil dieser Partikelklasse an der gesamt gemessenen Fläche zu berechnen.

2.5.6 Clusterprüfung

Weiterhin besteht die Möglichkeit, die Messfläche auf Clusterbildung der Partikel einer Klasse zu untersuchen. Es muss eine Raster an Feldern festgelegt werden, in welche die Messfläche unterteilt wird. Dieses kann beliebig fein gewählt werden. *Anzahl der Spalten* definiert dabei die Anzahl der Spalten, d.h. wie viele Felder in einer Reihe liegen. Die Feldbreite wird anschließend anhand der Gesamtbreite der Messfläche berechnet. Wird die Option *Quadrate* aktiviert, so wird die Anzahl der Felder pro Spalte, d.h. die Anzahl der Reihen so bestimmt, dass möglichst quadratische Felder entstehen. Dabei werden in Abhängigkeit von den Abmessung der gesamten Messfläche nur selten exakte Quadrate erreicht. Alternativ kann die Option *Quadrate* deaktiviert werden und die Anzahl der Felder pro Spalte in *Anzahl der Reihen* manuell festgelegt werden. Nach der Unterteilung bestimmt die Funktion für jede Partikelklasse die Partikelanzahl pro Feld, woraus eine mittlere Partikelanzahl sowie eine relative Standardabweichung berechnet wird. Dies ermöglicht es, eine Aussage über die Verteilung der Partikel auf der Probe zu treffen. Je größer die Standardabweichung, desto unregelmäßiger sind die Partikel auf der Messfläche verteilt. Neben dem Mittelwert und der Standardabweichung wird weiterhin der Median, die minimale Partikelanzahl pro Fläche und die maximale Partikelanzahl pro Fläche berechnet. Wird die Option *Darstellungen generieren* aktiviert, so wird für jede Klasse und Probe ein Säulendiagramm erstellt, wobei die Säulenhöhe durch die Partikelanzahl des jeweiligen Feldes definiert ist.

2.5.7 Ergebnisse

Alle Ergebnisse der Partikelklassierung befinden sich in dem Ordner *01 - Projekte/Projektname/Chargenname/Ergebnisse/Version/Klassierung*. Die Zusammenfassung über die Partikelanzahl aller Klassen und Datensätze befindet sich in der Datei *Partikelanzahl_Charge_Version.csv* und in auf die eingestellte Fläche normierter Form in der Datei *Partikelanzahl_flächennormiert_Charge_Version.csv*. Die Ergebnisse der Berechnung der Flächenanteile befinden sich in den Dateien *Gesamtfläche_der_Klassen_Charge_Version.csv* bzw. *Flächenanteile_der_Klassen_Charge_Version.csv*. Der Unterordner *all* enthält die Dateien, in denen alle Partikel eines Datensatzes abgespeichert sind, wobei sich diese Dateien insofern von den ursprünglichen Messwerten unterscheiden, dass eine eventuelle Normierung angewendet wurde und eine Spalte, die den Klassennamen des jeweiligen Partikels enthält, hinzugefügt wurde. In dem Unterordner *nach Klassen* sind die Partikel für jeden Datensatz und Klasse sortiert nach den Klassennamen gespeichert wohingegen der Ordner *nach Proben* die Partikel sortiert nach Datensatznamen enthält.

Die Ergebnisse der Clusterprüfung sind in dem Ordner *01 - Projekte/Projektname/Chargenname/Ergebnisse/Version/Clusterprüfung* abgespeichert. Die mittlere Partikelanzahl je Klasse und Probe, sowie die Standardabweichung, der Median, das Maximum und das Minimum befinden sich in der Datei *Clusterprüfung_Zusammenfassung_Charge_Version.csv*. Im Unterordner *Darstellungen* sind die Säulendiagramme für jede Probe abgespeichert. Der Unterordner *Matrizen* enthält die Rohdaten der bestimmten Partikel je Feld in Matrizenform sortiert nach Klassen bzw. nach Proben. Der Unterordner *Partikel pro Feld* enthält die Rohdaten aller

Klassen einer Probe. Im Unterordner *Statistische Auswertung* sind die oben genannten statistischen Größen für alle Klassen einer Probe bzw. für alle Proben je Klasse zusammengefasst.

2.6 Partikelgrößenbestimmungen

Das Programm bietet weiterhin die Möglichkeit, die detektierten Partikel in verschiedene Größenklassen zu klassifizieren. Zu beachten ist, dass für diese Funktion im Voraus eine Partikelklassierung, wie sie in Kapitel 2.5 beschrieben wird, durchgeführt werden muss. Die Vorgehensweise und alle Einstellungsmöglichkeiten, wie sie in Abbildung 8 gezeigt sind, sollen in den folgenden Unterkapiteln erläutert werden. Nachdem alle Einstellungen vorgenommen wurden, wird die Partikelgrößenbestimmung durch den Button *Partikelgrößenbestimmung ausführen*

Abb. 8: Partikelgrößenbestimmung

2.6.1 Klassierungsmerkmal

Zunächst muss ein Kriterium festgelegt werden, nach welchem die Partikel klassifiziert werden sollen. Diese Einstellung wird unter *Klassierungsmerkmal* gespeichert und muss einem Spaltennamen der zu analysierenden Messwerte entsprechen. Ein typisches Beispiel dafür ist die Spalte *AREA*. Theoretisch kann diese Funktion auch dazu genutzt werden, um nach Kriterien zu klassifizieren, die keine Partikelgröße repräsentieren. So kann beispielsweise nach dem Anteil eines gemessenen Elementes klassifiziert werden. Wenn die als Auswahl *andere* getroffen wurde, so besteht die Möglichkeit ein beliebiges Merkmal im darunterliegenden Feld einzugeben. Eine weitere Möglichkeit bietet sich durch die Funktion *Berechnung des Äquivalentdurchmesser*, die anhand der Partikelfläche den Durchmesser eines der Partikelfläche entsprechenden Kreises berechnet. Die berechneten Werte werden der Tabelle aus der Datei *Datensatzname_all_Particles_Version.csv* hinzugefügt und unter dem neuen Namen *Datensatzname_all_Particles_with_Dequi_Version.csv* gespeichert. Dieses Funktion empfiehlt sich bei der Nutzung des Abstandsüberprüfers. Der Abstandsüberprüfer addiert die Flächen der nebeneinander liegenden und deshalb als eins betrachteten Partikel auf. Die Berechnung des Äquivalentdurchmessers erfolgt an dieser aufsummierten Fläche. Wird hingegen eine Grö-

ße, die bereits bei der Analyse berechnet wurde, wie beispielsweise der *DMAX*, genutzt, so wird im Falle von zwei benachbarten, als eins betrachteten Partikel, lediglich die Größe des einen betrachtet und nicht die Summe aus beiden Partikelgrößen. Damit kann es zu einer Verfälschung der Ergebnisse der Partikelgrößenbestimmung kommen. Eine sichere Variante ist deshalb, entweder anhand der Partikelfläche zu klassifizieren oder die Funktion *Berechnung des Äquivalentdurchmesser* zu aktivieren und den Äquivalentdurchmesser als Merkmal zu nutzen. Zu beachten ist, dass bei einer Nutzung von *Äquivalentdurchmesser* unbedingt die entsprechende Funktion zu dessen Berechnung aktiviert werden muss.

2.6.2 Größenklassen

Im Folgenden müssen die einzelnen Größenklassen definiert werden. Dazu muss zunächst die gewünschte Gesamtanzahl an Klassen in *Anzahl der Größenklassen* als numerische Zahl gespeichert werden.

Anschließend werden die Grenze dieser Klassen angegeben. Dabei wird immer die obere Grenze der jeweiligen Klassen angegeben. Die untere Grenze einer Klasse ergibt sich aus der oberen Grenze der vorherigen. Die untere Grenze der ersten Klasse ist 0. Es können folglich keine Lücken zwischen den Klassen entstehen. Für die Größenklassierung gilt, dass jeweils die untere Grenze nicht, die obere hingegen mit in der Größenklasse enthalten ist. Dies bedeutet für das in Abbildung 8 gegebene Beispiel die Klassen (0-1], (1-3], (3-5] usw. Durch Klicken auf den Button *Grenzen Anwenden* wird in einer Vorschau gezeigt, welche Klassen durch die angegebenen Grenzen gebildet werden.

2.6.3 Weitere Einstellungen

Als weitere Einstellungsmöglichkeiten kann die Funktion *für alle Partikel* aktiviert werden. Dies führt dazu, dass die Partikelgrößenbestimmung für alle Partikel gemeinsam durchgeführt und gespeichert wird.

Durch das Aktivierung der Funktion *für die einzelnen Klassen* wird die Partikelgrößenbestimmung separat für die Klassen des unter *Rulefile* ausgewählten Rulefiles durchgeführt. Standardmäßig werden die Ergebnisse aller Klassen eines Datensatzes in einer Datei gespeichert. Sollte zusätzlich eine Speicherung der Ergebnisse einer Klasse für alle Datensätze einer Charge erwünscht sein, muss die Funktion *Speicherung nach Klassen* aktiviert werden.

2.6.4 Ergebnisse

Alle Ergebnisse der Partikelgrößenbestimmung befinden sich in dem Ordner *01 - Projekte/Projektname/Chargenname/ Ergebnisse/Version/Partikelgröße*.

Der Unterordner *nach Klassen* enthält die Partikelgrößen aller Datensätze gespeichert nach den jeweiligen Klassen. Der Ordner *nach Proben* enthält die Partikelgrößen alle Klassen gespeichert nach den jeweiligen Datensätzen.

Eine Partikelgrößenbestimmung für alle Partikel gemeinsam wird unter dem Namen *Partikelgröße_alle_Partikel_Charge_Version.csv* bzw. *Partikelgröße_alle_Partikel_flächennormiert_Charge_Version.csv* für die flächennormierte Form gespeichert.

2.7 Darstellungen

Eine weitere Funktion ist die Erzeugung von verschiedenen Darstellungen der klassierten Partikeln in x-y-Plots. Die dafür notwendigen Einstellungen werden im Folgende erläutert. Nach

dem vornehmen aller Einstellungen wird die Darstellungserzeugung durch den Button *Darstellungen erzeugen* gestartet.

Abb. 9: Darstellungen

2.7.1 Eingabeeinstellungen

Zunächst muss ausgewählt werden, welche Größe auf der x- bzw. y-Achse dargestellt werden soll. Dies kann jede beliebige Spalte sein, die in den Messwerten vorhanden ist. Der exakte Name der Spalten muss in den Feldern *x-Achse* bzw. *y-Achse* angegeben werden. Durch Klicken von *Auswahl aktualisieren* werden alle möglichen Spalten der aktuell verwendeten Messwerte als Auswahlmöglichkeit angeboten. Voraussetzung dafür ist, dass alle Einstellungen in den Tabs *Allgemeine Einstellungen*, *Messwerte* und *Rulfile* korrekt vorgenommen wurden. Unter *Helligkeitsverlauf* kann eine dritte Größe angegeben, die bei der Darstellung in Form eines Helligkeitsverlaufes angegeben wird. Dabei wird der jeweilige z-Wert eines Punktes auf einer Skala zwischen dem Minimalwert und dem Maximalwert normiert. Die Skalierung dieses Helligkeitsverlaufes kann in dem entsprechenden Regler auf der rechten Seite vorgenommen werden. Für farbige Skalen ist der Minimalwert stets null.

Die Skalierung der x- und y-Achse sowie die Position der Legende wird ebenfalls in den entsprechenden Reglern vorgenommen. Für das gegebene Beispiel bedeutet dies, dass die x-Achse einen Skalenwert von 0 bis 60 zeigt.

Unter der Auswahl *Darstellungen* kann ausgewählt werden, ob die Darstellung für alle Partikel des jeweiligen Datensatz erfolgen soll oder ob ausgewählte Klassen dargestellt werden sollen. Sollte eine Darstellung von hinsichtlich der Zusammensetzung normierten Daten erwünscht sein, muss die Option *Normierte Zusammensetzung darstellen* aktiviert werden. Dies hat zur

Folge, dass die normierten Messwerte für die Darstellung genutzt werden.

Für eine Darstellungen nach Klassen werden die Daten aus den Dateien im Unterordner *Ergebnisse/Version/Klassierung/all* genutzt, d.h. es muss im Voraus eine Partikelklassierung durchgeführt worden sein. Dies ermöglicht weitere Einstellungen. Unter *Anzahl der darzustellenden Klassen* wird eingestellt, wieviele verschiedene Klassen dargestellt werden sollen.

Die darzustellenden Klassen werden in den entsprechenden Feldern ausgewählt. Durch Klicken von *Auswahl aktualisieren* werden alle möglichen Klassen des aktuell geladenen Rulefiles aus Auswahlmöglichkeit angeboten. Voraussetzung dafür ist, dass unter dem Tab *Rulefile* ein Rulefile ausgewählt wurde.

Die Option *Farbig* ermöglicht die Darstellung der verschiedenen Klassen mit unterschiedlichen Farben. Andernfalls erfolgt die Darstellung mit unterschiedlichen Symbolen jedoch lediglich in Graustufen.

Das Aktivieren der Funktion *Farbig* ermöglicht zusätzlich die Aktivierung der Funktion *Symbol mit schwarzer Umrandung*. Wird diese Funktion aktiviert, so erhalten alle Symbole einen schwarzen Rand jedoch mit unterschiedlicher farblicher Füllung. Dies wird bei Darstellungen empfohlen, bei denen aufgrund des Helligkeitsverlaufes viele sehr transparente Punkte auftreten. Die schwarze Umrandung ermöglicht dann immer noch ein gutes Erkennen.

Durch Aktivieren von *Vorschau* wird eine Vorschau eingeblendet mit den aktuell vorgenommenen Einstellungen eingeblendet. Als Datengrundlage wird dafür der erste Datensatz aus der aktuell ausgewählten Charge gewählt. Voraussetzung dafür ist, dass alle Einstellungen in den Tabs *Allgemeine Einstellungen*, *Messwerte* und *Rulefile* korrekt vorgenommen wurden.

2.7.2 Ausgabeeinstellungen

Dargestellt werden immer alle Datensätze, d.h. die Anzahl der Plots entspricht der unter *Probenanzahl* eingestellten Zahl. Die Anordnung der Plots kann mit den Variablen *Anzahl Bilder pro Spalte*, die die Anzahl der Reihen, und *Anzahl Bilder pro Reihe*, die die Anzahl der Spalten auf einer A4 Seite angibt, eingestellt werden. Wenn eine Seite gefüllt ist, wird eine neue erstellt. Nachdem alle Darstellungen erzeugt wurden, werden diese unter einer PDF-Datei abgespeichert. Die Option *Klassennamen.in.Datei* ermöglicht es, im Dateiname der abgespeicherten Darstellungen alle dargestellten Klassen anzuzeigen. Unter Umständen kann es vorkommen, dass der Dateiname zu lang ist, da dieser maximal 100 Zeichen enthalten kann. Um Zeichen einzusparen, kann diese Option deaktiviert werden. Stattdessen wird dann nur noch die Anzahl der dargestellten Klassen notiert.

2.7.3 Ergebnisse

Alle Darstellungen werden unter dem Ordner *01 - Projekte/Projektname/Chargenname/Ergebnisse/Version/Darstellungen* abgespeichert. Ist die Option *Darstellungen.gesamt* aktiviert, werden die Dateien im Unterordner *gesamt* abgespeichert. Bei einer Aktivierung der Funktion *Darstellung.Klassen* erfolgt die Speicherung hingegen in dem Unterordner *nach Klassen*.

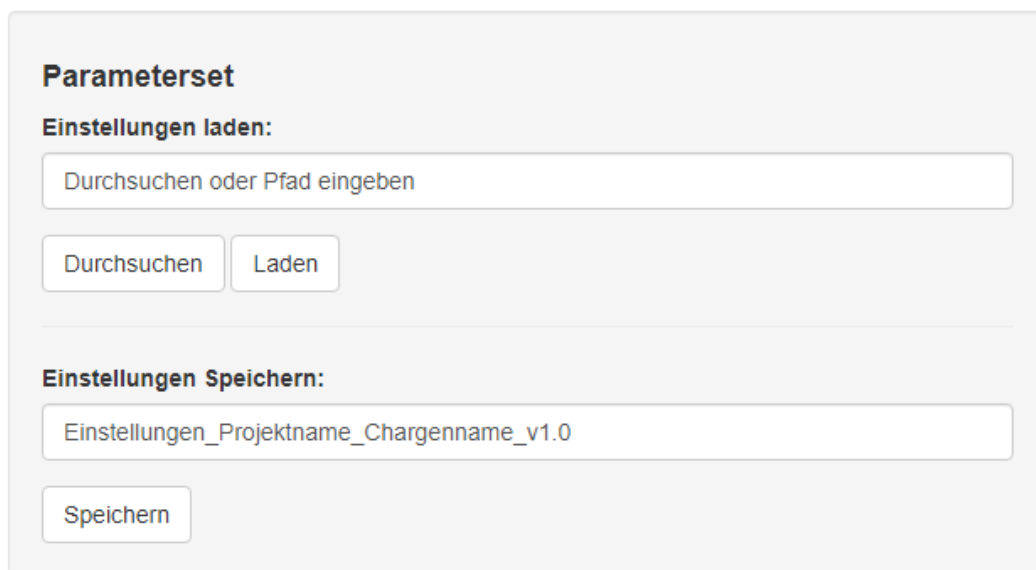
3 Parameterlog

In dem Ordner *04 - Log* werden die Einstellungen jeder durchgeführten Analyse in Form einer .txt-Datei gespeichert, um im Nachhinein, die jeweiligen Einstellungen und die verwendeten Datensätze bzw. Rulefiles nachzuvollziehen. Der Dateiname beinhaltet dabei jeweils das Datum, an dem die jeweilige Analyse durchgeführt wurde, einen Zeitstempel, den Chargenname, um welche Art von Analyse es sich handelte und die entsprechende Version der Analyse. Für

eine einfachere Zuordnung wird eine Kopie dieser Datei in dem jeweiligen Chargenordner in dem Unterordner *Parameterlog* abgelegt.

4 Parametersets

Alle vorgenommenen Einstellungen können als Parameterset abgespeichert werden. Dafür dient der Button *Speichern* im Einstellungsfeld *Parameterset* (siehe Abbildung 10). Das Parameterset wird dabei unter dem im darüberliegenden Feld angegebenen Namen in dem Ordner *03 - Einstellungen* im Ordner des Programmes abgespeichert.



Parameterset

Einstellungen laden:

Durchsuchen oder Pfad eingeben

Durchsuchen Laden

Einstellungen Speichern:

Einstellungen_Projektnamen_Chargenname_v1.0

Speichern

Abb. 10: Parameterset

Für folgende Analysen ist es nun möglich, Parametersets zu laden. Dafür muss mittels *Durchsuchen* die zu ladende Einstellungsdatei (.csv-Datei) ausgewählt werden und mit dem Button *Laden* geladen werden. Zu beachten ist, dass alle aktuellen Einstellungen durch die Einstellungen aus der Datei überschrieben werden.