



TECHNISCHE UNIVERSITÄT  
BERGAKADEMIE FREIBERG

Die Ressourcenuniversität. Seit 1765.

Fakultät für Maschinenbau Verfahrens- und Energietechnik  
Institut für Keramik, Feuerfest und metalkeramische Verbundwerkstoffe

# **Anleitung zur Nutzung von ASPEX-Auswertung v1.3**

**Florian Kerber**

Institut für Keramik, Feuerfest und metalkeramische Verbundwerkstoffe

7. Juni 2021

## Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einführung</b>	<b>3</b>
1.1	Allgemeines . . . . .	3
1.2	Software und Einrichten des Programmes . . . . .	3
<b>2</b>	<b>Allgemeine Einstellungen</b>	<b>4</b>
2.1	Einstellungen aus Datei . . . . .	4
2.2	Bezeichnung . . . . .	5
2.3	Messwerte . . . . .	5
2.4	Rulefile . . . . .	7
<b>3</b>	<b>Auswertung</b>	<b>8</b>
3.1	Partikelklassierung . . . . .	8
3.1.1	Abstandsüberprüfung . . . . .	8
3.1.2	Positionsnormierung . . . . .	9
3.1.3	Zusammensetzungsnormierung . . . . .	9
3.1.4	Vorklassierung . . . . .	10
3.1.5	Berechnung der Flächenanteile . . . . .	10
3.1.6	Clusterprüfung . . . . .	10
3.1.7	Automatische Partikelgrößenbestimmung . . . . .	10
3.1.8	Ergebnisse . . . . .	11
3.2	Partikelgrößenbestimmungen . . . . .	11
3.2.1	Klassierungsmerkmal . . . . .	12
3.2.2	Größenklassen . . . . .	12
3.2.3	Weitere Einstellungen . . . . .	12
3.2.4	Ergebnisse . . . . .	13
3.3	Darstellungen . . . . .	13
3.3.1	Eingabeeinstellungen . . . . .	13
3.3.2	Ausabeeinstellungen . . . . .	14
3.3.3	Ergebnisse . . . . .	14
<b>4</b>	<b>Tools</b>	<b>15</b>
4.1	Datenbank . . . . .	15
4.2	Rulefile-Editor . . . . .	15
<b>5</b>	<b>Parameterlog</b>	<b>15</b>

# 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. Die Erstellung und Anpassung von Rulefiles ist über den Rulefile-Editor möglich. In dieser Anleitung wird die Handhabung des Programms anhand eines Beispiels erläutert.

## 1.2 Software und Einrichten des Programmes

Dieses Programm wurde in R unter der Nutzung von Windows geschrieben. Für die Nutzung ist die Installation von R 3.6.3 oder höher erforderlich, welche auf der offiziellen Website von R (<https://cran.r-project.org/bin/windows/base/>) heruntergeladen werden kann. Anschließend erfolgt die Einrichtung von *ASPEX-Auswertung*. Eine Schritt für Schritt Anweisung ist im Folgenden gegeben.

- Download und Installation der neusten Version von R unter <https://cran.r-project.org/bin/windows/base/>.
- Kopieren des Ordners *ASPEX-Auswertung\_v1.0* an einen beliebigen Ort, beispielsweise C:/User. Es besteht nun ein Verzeichnis C:/User/ASPEX-Auswertung\_v1.0
- Installation benötigter Pakete
  - Bearbeiten der Datei *install\_packages.bat* mittels rechter Maustaste -> Bearbeiten
  - Pfad "C:\Program Files\R\R-4.1.0\bin\Rscript.exe"-e muss auf das Installationsverzeichnis der aktuellen Version von R zeigen; Versionsnummer und Verzeichnis gegebenenfalls anpassen; der Teil, welcher nach *R-4.1.0* folgt sollte unverändert bleiben
  - **Achtung:** zur Verzeichnisangabe \ nutzen, da es sich um einen Windows-Befehl handelt
  - Datei *install\_packages.bat* speichern und schließen
  - Datei *install\_packages.bat* mittels Doppelklick ausführen
- Einrichten einer Verknüpfung zum Programmstart
  - Bearbeiten der Datei *Run\_desktop.bat* mittels rechter Maustaste -> Bearbeiten
  - Pfad "C:\Program Files\R\R-4.1.0\bin\R.exe"-e muss auf das Installationsverzeichnis der aktuellen Version von R zeigen; Versionsnummer und Verzeichnis gegebenenfalls anpassen; der Teil, welcher nach *R-4.1.0* folgt sollte unverändert bleiben
  - Pfad "shiny::runApp('F:/ASPEX-Auswertung\_v1.0', launch.browser = TRUE)" muss dem Verzeichnis des Ordners *ASPEX\_Auswertung\_v1.0* entsprechen und muss gegebenenfalls angepasst werden.
  - **Achtung:** zur Verzeichnisangabe / nutzen, da es sich um einen R-Befehl handelt

- für das oben gegeben Beispiel muss der Pfad wie folgt geändert werden:  
`"shiny::runApp('C:/User/ASPEX-Auswertung_v1.0', launch.browser = TRUE)"`
  - Datei *Run\_desktop.bat* speichern und schließen
  - Verknüpfung von *Run\_desktop* erstellen mittels rechter Maustaste → Verknüpfung erstellen
  - Verknüpfung mittels Drag&Drop auf den Desktop oder einen beliebigen Ort bewegen
  - Verknüpfung umbenennen mittels rechter Maustaste → Umbenennen in beispielsweise *ASPEX-Auswertung*
- Programm kann nun über die Verknüpfung gestartet werden und öffnet sich in einem neuen Tab im standardmäßig festgelegten Browser

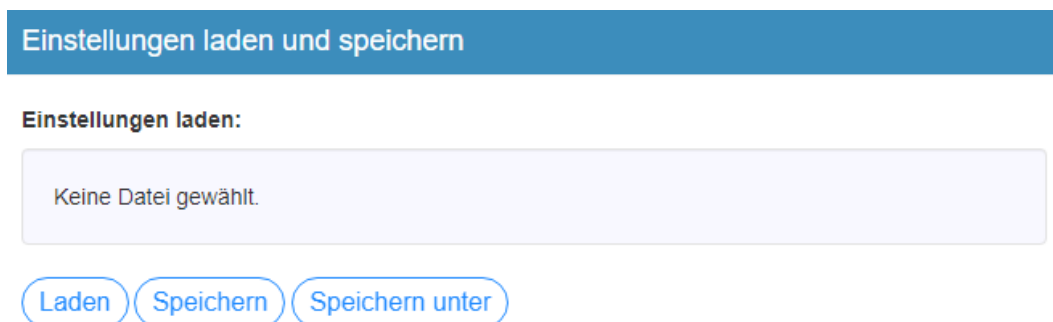
Nach erfolgreicher Ausführung ist das Programm nun einsatzbereit. Die Handhabung wird in den folgenden Kapiteln erläutert.

## 2 Allgemeine Einstellungen

Zu Beginn jeder Auswertung müssen Einstellungen, wie das aktuelle Projekt, die zu verwendenden Messwerte und das zu verwendende Rulefile vorgenommen werden. Diese Voreinstellungen werden im Folgenden beschrieben.

### 2.1 Einstellungen aus Datei

Alle vorgenommenen Einstellungen können als Parameterset abgespeichert und später wieder geladen werden. Dafür dient der Button *Speichern* im Einstellungsfeld *Parameterset* (siehe Abbildung 1). Die Funktion *Speichern* ist nur verfügbar, wenn bereits vorher eine Einstellungsdatei geladen wurde, die dann überschrieben wird. Andernfalls muss die Funktion *Speichern unter* genutzt werden, die es ermöglicht, einen neuen Dateinamen für das aktuelle Parameterset anzugeben. Einstellungsdateien werden immer in dem Ordner *03 - Einstellungen* im Ordner des Programmes gespeichert.



**Abb. 1:** Einstellungen laden und speichern

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

## 2.2 Bezeichnung

Die Bezeichnung der jeweiligen Auswertung wird in dem in Abbildung 2 gezeigten Feld vorgenommen.

**Abb. 2:** Bezeichnungen

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 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 *Ordner erstellen* die jeweiligen Ordner erzeugt werden, falls diese noch nicht vorhanden sind. Im gegebenen Beispiel wird ein Ordner *Projekt A/Testcharge* angelegt. Innerhalb des Ordners *Testcharge* werden zwei Ordner bereitgestellt: *Messwerte*, in welchem später die auszuwertenden Datensätze abgespeichert werden können und *Ergebnisse*, welcher wiederum den Versionsordner *v1.0* enthält in welchem später alle Ergebnisse zur Auswertung dieser Charge abgespeichert werden. Sollte für die gleiche Charge eine zweite Version, beispielsweise *v1.1* erzeugt werden, so wird dieser Ordner ebenfalls unter *Projekt A/Testcharge/Ergebnisse* erstellt.

## 2.3 Messwerte

Alle durchführbaren Funktionen des Programms benötigen mindestens einen Datensatz, wie er durch die AFA-Analyse mittels ASPEX generiert wird. Innerhalb der Box *Messwerte* werden die zu verwenden Messwerte angegeben, siehe Abbildung 3.

Auszuwertende Datensätze können einen beliebigen Speicherort haben. Für jede Charge wird jedoch ein Ordner *Messwerte* für die Ablage von Datensätzen angeboten. Der tatsächliche Speicherort der Datensätze sowie die jeweilige Messfläche wird in sogenannten Datentitel-Dateien festgehalten. Sollte bereits eine Datentitel-Datei zu den Messwerten vorhanden sein, so kann diese über die Schaltfläche *Durchsuchen* geladen werden. Die in der Datentitel-Datei enthaltenen Datensätze mit den zugehörigen Messwerten werden aufgelistet.

Sollte noch keine Datentitel-Datei zu den auszuwertenden Datensätzen angelegt worden sein, so kann das Hinzufügen von Datensätzen über die Schaltfläche *Datensätze hinzufügen* erfolgen. Dafür muss zum jeweiligen Speicherort der Datensätze navigiert werden. Es können beliebig

Messwerte

Datentitel der Messwerte laden:
 

Keine Datentitel-Datei ausgewählt.

Durchsuchen

Referenzfläche in mm²: 100

Datensätze bearbeiten
 

Datensätze hinzufügen

aktuelle Datensätze entfernen

Speichern unter

Speichern

Zu Datentiteldatei hinzufügen

Verfügbare Datensätze:
 

Titel:	Messfläche in mm²:
<div>Aktiv</div> Messung_1	150
<div>Aktiv</div> Messung_2	150
Messung_3 <div>Nicht Aktiv</div>	150
<div>Aktiv</div> Messung_4	150

Abb. 3: Verwalten von Messwerten

viele Datensätze ausgewählt und hinzugefügt werden. Der Speicherort kann der Ordner *Projekt A/Testcharge/Messwerte* sein, kann jedoch auch ein beliebiger anderer sein. Nachdem mindestens ein Datensatz hinzugefügt wurde, muss die zugehörige Messfläche des Datensatzes angegeben werden. Um ein wiederholtes Auswählen von Datensätzen und Angeben von Messflächen zu vermeiden, müssen die ausgewählten Datensätze mit zugehöriger Messfläche in einer sogenannten Datentitel-Datei gespeichert werden. Dafür stehen drei Optionen zur Verfügung:

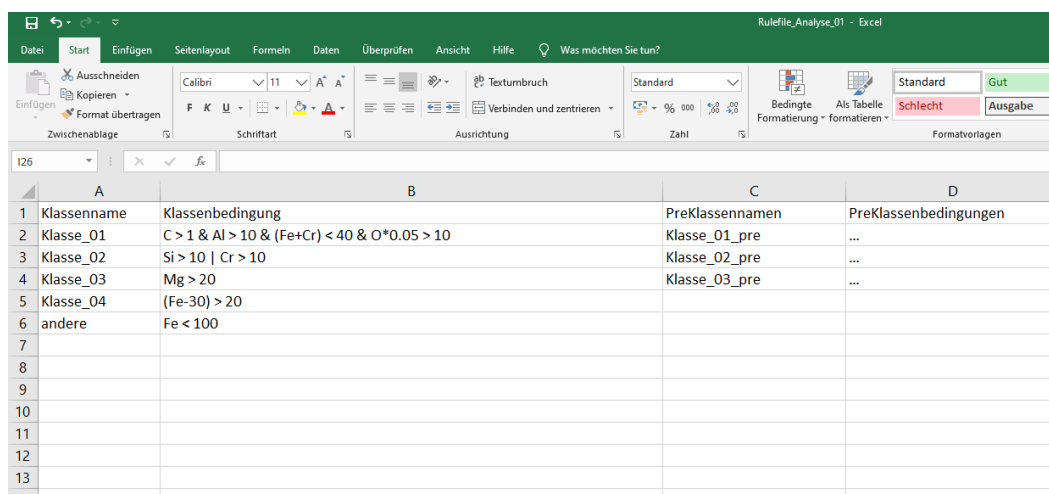
- *Speichern unter* erzeugt eine neue Datei. Es muss ein Dateiname angegeben werden und anschließend ein beliebiger Speicherort gewählt werden. Es empfiehlt sich, die Datei im zugehörigen Ordner *Messwerte* abzuspeichern.
- *Speichern* ist nur möglich, wenn bereits eine Datentitel-Datei ausgewählt war. Bei dieser Funktion werden die aktuell geladenen Datensätze unter dem Pfad und Namen der aktuell geladenen Datentitel-Datei gespeichert, d.h. die Datentitel-Datei wird überschrieben.
- *Zu Datentiteldatei hinzufügen* ermöglicht die Auswahl einer beliebigen Datentitel-Datei. Die aktuell geladenen Datensätze werden zu den in der Datei bereits eingetragenen Datensätzen mit hinzugefügt.

Weiterhin können Datensätze *Aktiv* sein, d.h. in der Auswertung berücksichtigt werden und *Nicht Aktiv* sein, d.h. nicht in der Auswertung berücksichtigt werden. Das Umschalten erfolgt durch ein Klicken auf den jeweiligen Namen des Datensatzes. Nachdem Änderung am Status der Datensätze oder an der Messfläche vorgenommen wurden, müssen diese gespeichert werden. Die dafür verfügbaren Optionen wurden bereits erläutert.

Außerdem wird eine *Referenzfläche* in  $\text{mm}^2$  festgelegt, auf welche die Auswertung der Datensätze normiert wird, sodass eine Vergleichbarkeit untereinander gewährleistet wird.

## 2.4 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. Dabei ist darauf zu achten, dass die Spaltennamen exakt denen der im Beispiel gegebenen Spaltennamen entsprechen. Alternativ kann der Rulefile-Editor zum Erstellen und Anpassen von Rulefiles genutzt werden, welcher sich unter dem Abschnitt *Tools* befindet. Nähere Erläuterungen folgen in Kapitel 4.2. In Abbildung 4 ist ein Beispiel für das Format eines Rulefiles gegeben.



	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				

Abb. 4: Rulefile

Dieses setzt sich zusammen aus den Spalten *Klassenname* und *Klassenbedingung* für die Hauptklassen der Partikelklassierung und den Spalten *PreKlassennamen* und *PreKlassenbedingungen* für eine eventuelle Vorklassierung. Näheres zur Vorklassierung folgt in Kapitel 3.1.4

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 die Bedingungen einer Klasse erfüllt, 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 durch Klicken von *Durchsuchen* ausgewählt.

## 3 Auswertung

Für die Auswertung stehen die im Folgenden erläuterten Funktionen zu Verfügung.

### 3.1 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 5 dargestellt sind und in den folgenden Unterkapiteln erläutert werden. Nachdem alle Einstellungen vorgenommen wurden, kann die Partikelklassierung mit dem Button *Partikelklassierung starten* gestartet werden.

Abb. 5: Partikelklassierung

#### 3.1.1 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 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 zueinander. 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, um diese als separate Partikel zu betrachten. Andernfalls wird nur einer der Partikel berücksichtigt, wobei dann die Partikelfläche dieses Partikels 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 Flächen aller weiteren Partikel zu der des berücksichtigten Partikels addiert werden.

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 zwi-



schen 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 durch das zeilenweise Messen Konstellationen von detektierten Partikeln auftreten können, bei denen eine eigentliche Doppelbestimmung nicht erkannt wird, wenn nur der Abstand zwischen zwei nacheinander detektierten Partikel überprüft wird. Beispielhaft ist eine solche Konstellation in Abbildung 6 dargestellt. Bei Punkt 1 und 3 handelt es sich um eine Doppelbestimmung. Gleichzeitig befindet sich auf der y-Koordinate von Punkt 1 noch ein Punkt 2 mit stark abweichendem x-Wert, deutlich oberhalb der Grenze für den festgelegten minimalen Abstand zweier Partikel. Da die Partikel aufgrund der zeilenweisen Detektion in der Reihenfolge 1-2-3 detektiert werden, würde der Abstand zwischen Punkt 1 und 2, nicht aber zwischen Punkt 1 und 3 überprüft werden. Die Abstandsüberprüfung 1-2 würde korrekterweise zu zwei separaten Partikeln führen. Durch die fehlende Überprüfung zwischen 1-3 würde jedoch die Doppelbestimmung nicht erkannt werden. In einem solche Fall würde die ausführliche Überprüfung trotzdem das doppelt bestimmte Partikel erkennen, da die Abstandsüberprüfung von Punkt 1 zu den nächsten 10 Punkten durchgeführt wird.



Abb. 6: Zeilenweise Detektion von Partikeln

### 3.1.2 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 absoluten 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.

### 3.1.3 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 der Matrix enthalten ist. Diese ist jedoch nicht tatsächlich Teil der Partikelzusammensetzung und kann somit zu verfälschten Ergebnissen führen. Deshalb kann es sinnvoll sein, diese 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.

### 3.1.4 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 Vorklassen werden ebenfalls im Rulefile in den Spalten *PreKlassennamen* und *PreKlassenbedingungen* definiert.

### 3.1.5 Berechnung der Flächenanteile

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

### 3.1.6 Clusterprüfung

Weiterhin besteht die Möglichkeit, die Messfläche auf Clusterbildung der Partikel einer Klasse zu untersuchen. Es muss eine Raster an Feldern festgelegt werden, in welches 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 *Quadratische Feldgeometrie* 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 *Quadratische Feldgeometrie* 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.

### 3.1.7 Automatische Partikelgrößenbestimmung

Durch Aktivieren dieser Funktion wird im Anschluss an die Partikelklassierung automatisch eine Partikelgrößenbestimmung vorgenommen. Zu beachten ist, dass alle notwendigen Einstellungen deshalb bereits vor dem Start der Partikelklassierung unter dem Abschnitt *Partikelgrößenbestimmung* vorgenommen werden müssen. Näheres dazu wird im Kapitel 3.2 erläutert.

### 3.1.8 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. Im Unterordner *Zusammenfassung* werden die Ergebnisse von Partikelklassierung und Partikelgrößenbestimmung gemeinsam einmal je Probe für alle Klassen und einmal je Klasse für alle Proben in den jeweiligen Unterordnern *nach Proben* bzw. *nach Klassen* abgespeichert.

## 3.2 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 3.1 beschrieben wird, durchgeführt werden muss. Die Vorgehensweise und alle Einstellungsmöglichkeiten, wie sie in Abbildung 7 gezeigt sind, sollen in den folgenden Unterkapiteln erläutert werden. Nachdem alle Einstellungen vorgenommen wurden, wird die Partikelgrößenbestimmung durch den Button *Partikelgrößenbestimmung starten*

Obergrenze Klasse 1:	Obergrenze Klasse 2:
1	3
Obergrenze Klasse 3:	Obergrenze Klasse 4:
5	10
Obergrenze Klasse 5:	Obergrenze Klasse 6:
20	30
Obergrenze Klasse 7:	Obergrenze Klasse 8:
50	80
Obergrenze Klasse 9:	Obergrenze Klasse 10:
130	200

Klasse 11: >200  
Einheit: µm²

Abb. 7: Partikelgrößenbestimmung

### 3.2.1 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 Äquivalentdurchmessers*, 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. Diese 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 Größe, 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 Äquivalentdurchmessers* 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.

### 3.2.2 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 7 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.

### 3.2.3 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.

### 3.2.4 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.

### 3.3 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. 8: Darstellungen

#### 3.3.1 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 dem Abschnitt *Allgemeine Einstellungen* 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. Diese Auswahl entfällt bei der Darstellung *nach Klassen*, da dabei jeweils die Daten aus den Dateien im Unterordner *Ergebnisse/Version/Klassierung/all* genutzt, d.h. es muss im Voraus eine Partikelklassierung durchgeführt worden sein. Je nachdem ob bei dieser eine Normierung vorgenommen wurde oder nicht, werden die entsprechenden Zusammensetzungen dargestellt. 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 werden dafür die ersten Datensätze aus der aktuell ausgewählten Charge gewählt. Es werden so viele Datensätze gewählt, wie für das vollständige Füllen einer Seite entsprechend den Spalten und Zeileneinstellungen benötigt werden. Voraussetzung dafür ist, dass alle Einstellungen in dem Abschnitt *Allgemeine Einstellungen* korrekt vorgenommen wurden.

### 3.3.2 Ausgabeeinstellungen

Dargestellt werden immer alle Datensätze, d.h. die Anzahl der Plots entspricht der Anzahl der aktiv geschalteten Datensätze in der geladenen Datentitel-Datei. 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.

### 3.3.3 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*.

## 4 Tools

Neben den Auswertefunktionen stehen noch weitere Tools zur Verfügung, die im Folgenden beschrieben werden.

### 4.1 Datenbank

Unter dem Abschnitt *Datenbank* können Ergebnisse der Partikelklassierung von allen bereits durchgeführten Auswertungen abgerufen und miteinander verglichen werden. Die Anzahl der miteinander zu vergleichenden Ergebnistabellen kann unter *Anzahl Tabellen* angegeben werden (max. 5). Nachdem eine zu ladende Ergebnistabelle ausgewählt wurde, kann diese über den Button *Tabelle 1* in den Tabellen Platz 1 geladen werden. Danach kann eine andere Ergebnistabelle ausgewählt werden und in einen beliebigen anderen Tabellenplatz mithilfe des entsprechenden Buttons *Tabelle x* geladen werden. Sollte erneut *Tabelle 1* gewählt werden, so wird die dort bereits geladene Tabelle durch die neu ausgewählte ersetzt.

### 4.2 Rulefile-Editor

Unter dem Abschnitt *Rulefile-Editor* können bereits vorhandene Rulefiles bearbeitet oder neue Rulefiles erstellt werden. Über den Button *Öffnen* kann ein beliebiges Rulefile geladen werden. Die Anzahl der Vor- und Hauptklassen wird automatisch ermittelt und aktualisiert. Sollen Klassen hinzugefügt werden, so kann die Anzahl der jeweiligen Klassen erhöht werden. Es erscheint eine neue Zeile in der jeweiligen Kategorie am unteren Ende der Liste. Nach Eintragen von Klassennamen und Bedingungen kann die Position der Klasse innerhalb des Rulefiles angepasst werden. Unter der Option *Reihenfolge anpassen* werden alle Klassen des aktuellen Rulefiles aufgelistet. Nach dem Hinzufügen einer Klasse bzw. dem Laden eines Rulefiles muss die Auswahl aktualisiert werden. Nun kann die Klasse, welche an eine andere Position verschoben werden soll, ausgewählt werden und über die entsprechenden Schaltflächen bewegt werden.

Nachdem alle Änderungen vorgenommen wurden, kann das aktualisierte Rulefile gespeichert werden. Dafür stehen die Funktionen *Speichern* und *Speichern unter* zur Verfügung, wobei *Speichern* nur zur Verfügung steht, wenn vorher eine Rulefile-Datei geladen wurde, welche dann durch diese Funktion überschrieben wird.

## 5 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.