

# README für die Pilotstudie Farchant - Datenkontrolle, -aufbereitung und -auswertung

## Projektbeschreibung

Dieses Projekt befasst sich mit der Datenkontrolle, -aufbereitung und -auswertung der Proben der Pilotstudie Farchant. Es umfasst verschiedene R-Skripte und Datendateien, die zur Analyse und Visualisierung der Ergebnisse verwendet werden.

## Verzeichnisstruktur

Um den R-Code fehlerfrei ausführen zu können, muss die Ordner- und Dateistruktur sowie die Benennung beibehalten werden. Das R-Projekt sollte mit einem Doppelklick geöffnet werden, da die Dateipfade des R-Skripts ab dem Ordner, in welchem diese Datei liegt definiert ist.

## Verzeichnisinhalte

- **Skripte/:** Enthält das R-Quarto-Skript (PILOTSTUDIE\_FARCHANT\_DATENVERARBEITUNG.QMD) und eine HTML-Datei (PILOTSTUDIE\_FARCHANT\_DATENVERARBEITUNG.HTML) der Berechnungen.
- **Rohdaten/:** Beinhaltet die MUDROCKDUAL-, MUDROCKTRACE- und MUDROCKMAJOR-SPEKTREN sowie die durch den MudrockDual-Modul generierten analytischen Daten (RESULTS.CSV).
- **Daten/:** Hier befinden sich alle weiter verarbeiteten Daten.
  - FARCHANT\_BRUKER\_GESAMT.CSV: Grundlagendaten, aus denen die Datenprüfung erfolgt.
  - FARCHANT\_BRUKER\_RU\_FARBKODIERT/ZAHLEKODIERT.CSV: Enthalten die Ergebnisse der Datenprüfung.
  - FARCHANT\_ARTAXPROJECT.RTX: Das in Artax erstellte Projekt zur Durchführung der Bayesschen Dekonvolution.
  - FARCHANT\_BRUKERARTAX\_MAJOR\_ARTAXINFORMATION.XLSX und FARCHANT\_BRUKERARTAX\_TRACE\_ARTAXINFORMATION.XLSX: Exportdatei mit Informationen zur Methode für MudrockMajor bzw. Mudrock Trace.
  - FARCHANT\_BRUKERARTAX\_MAJOR.CSV und FARCHANT\_BRUKERARTAX\_TRACE.CSV: Dateien aus den jeweiligen Mappen 'points' zur Normierung.
  - FARCHANT\_BRUKERARTAX\_MAJOR\_NORM.CSV und FARCHANT\_BRUKERARTAX\_TRACE\_NORM.CSV: Dateien, die durch die Normierung erstellt wurden und als Grundlage zur Erstellung der Abbildungen dienen.
  - FARCHANT\_NOMINALWERTKONTROLLE.XLSX: Nachweis der Kontrolle der Nominalwerte
- **Abbildungen/:** Enthält alle erstellten Abbildungen basierend auf den normierten Daten.

## Anweisungen zur Nutzung

1. **Öffnen des Projekts:** Öffnen Sie das R-Projekt durch Doppelklick auf die Projektdatei, damit alle Dateipfade korrekt geladen werden.
2. **Datenprüfung und -aufbereitung:** Die Datenprüfung erfolgt ausgehend von FARCHANT\_BRUKER\_GESAMT.CSV. Weitere Analysen basieren auf den exportierten bzw. normierten Daten.
3. **Ausführung der Skripte:** Verwenden Sie das R-Quarto-Skript (PILOTSTUDIE\_FARCHANT\_DATENVERARBEITUNG.QMD) zur Durchführung der Berechnungen. Die Ergebnisse sind in der HTML-Datei (PILOTSTUDIE\_FARCHANT\_DATENVERARBEITUNG.HTML) dokumentiert.

## Kontakt

Bei Fragen oder Problemen wenden Sie sich bitte an [michaela.schauer@univie.ac.at](mailto:michaela.schauer@univie.ac.at).