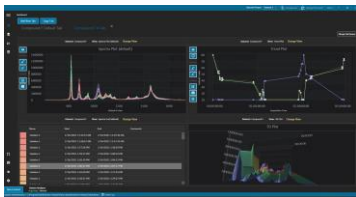


Información técnica

Biblioteca de datos Raman

Almacenamiento de espectros, organización, análisis y recopilación de datos de varios analizadores del laboratorio a cGxP



Aplicación

La biblioteca de datos Raman de Endress+Hauser es un software diseñado para organizar, leer, analizar y elaborar informes sobre los datos espectrales del Raman Rxn. La biblioteca de datos Raman complementa el Raman RunTime integrado de Endress+Hauser al proporcionar almacenamiento de espectros, organización, análisis y recopilación de datos de varios analizadores del laboratorio a cGxP.

La biblioteca de datos Raman se ha creado para los usuarios que necesitan visualizar espectros Raman, asociarlos con datos de referencia y crear modelos de picos univariantes. Asimismo, los usuarios pueden exportar datos preparados para el modelado multivariable externo. Además, la biblioteca de datos Raman se ha creado para los usuarios que necesitan recopilar y almacenar espectros Raman conforme a los requisitos de FDA 21 CFR parte 11 sobre trazabilidad durante la creación y ejecución de los modelos analíticos basados en tecnología Raman.

Ventajas

- **Características de organización de datos:** Relación de espectros con valores de referencia, preparación de datos antes del modelado quimiométrico, almacenamiento de datos que se pueden buscar, integridad de los datos
- **Características de análisis de datos:** Visualización de espectros y análisis simples, como las tendencias de picos y el modelado
- **Opción cGxP:** Cumple los requisitos del sector sobre trazabilidad, almacenamiento y archivado de datos espectrales

Índice de contenidos

Aplicación	4	Especificaciones.....	9
Visualización gráfica del flujo de trabajo sugerido de la biblioteca de datos Raman	4	Comunicación	9
Ejemplos de uso.....	4	Base de datos.....	9
Versiones	5	Instalación	9
Biblioteca de datos de Raman: versión básica	5	Instalación	9
Biblioteca de datos Raman: versión cGxP	6	Documentación complementaria	9
Requisitos del sistema.....	8	Inicio rápido.....	9
Biblioteca de datos Raman: versión básica	8	Manual de instrucciones	9
Biblioteca de datos Raman: versión cGxP	8	Marcas registradas.....	9

Aplicación

Visualización gráfica del flujo de trabajo sugerido de la biblioteca de datos Raman



Ejemplos de uso

Este software está diseñado para satisfacer las necesidades de los casos de uso habituales en varios sectores:

- Importación de datos en tiempo real de Raman RunTime
- Organización de datos orientada a proyectos
- Relación de datos para la preparación de modelos
- Visualización de cambios espectrales
- Análisis de picos y regiones y modelado univariable
- Exportación a programas quimiométricos

Uso de cGxP: Requisitos de FDA 21 CFT parte 11 sobre recopilación, visualización, almacenamiento, recuperación y archivado de datos:

- Trazabilidad de las acciones de los usuarios e integridad de los datos
- Visualización y almacenamiento de datos de varios analizadores y sondas
- Búsqueda y recuperación de datos y elaboración (básica) de informes para asistencia a las auditorías

Versiones

Biblioteca de datos de Raman: versión básica

Control del analizador Raman Rxn

- El área Control Rxn de la biblioteca de datos Raman se parece a la interfaz de usuario de Raman RunTime.
- La interfaz del área Control Rxn varía según la configuración del analizador; su presentación difiere para los analizadores de canal único, varios canales e híbridos.
- Permite conectar, monitorizar y controlar varios analizadores desde un solo lugar.
- La biblioteca de datos Raman proporciona una interfaz para Raman RunTime en la que se pueden calibrar y verificar los analizadores Raman Rxn.
- Permite acceder a los informes de calibración, y se pueden enviar archivos de modelos al analizador.
- La característica de Control Rxn permite el inicio y control de la recopilación de datos Raman.

Recopilación de datos

- Sin que el usuario introduzca datos, la biblioteca de datos Raman puede visualizar espectros y modelar resultados de Raman RunTime y todos sus indicadores compatibles.
- La biblioteca de datos Raman se conecta con Raman RunTime mediante OPC UA.
- La biblioteca de datos Raman proporciona almacenamiento y archivado de datos encriptado en el que se pueden realizar búsquedas.

Campos de datos

- Los campos de datos son información cualitativa y cuantitativa etiquetada en un espectro.
- Para el análisis cuantitativo, el usuario puede especificar la precisión, unidades, detalles del método primario, etc.
- Se pueden añadir alias para reducir el error de los usuarios en las importaciones, por ejemplo, Glucosa = glucosa.
- Los nombres de los campos de datos siguen los modelos hasta el final.

Tratamientos previos

- Se pueden aplicar métodos de corrección de la base de referencia, normalización y otros tratamientos previos espectrales.
- El usuario define el orden de los tratamientos previos.

Picos, regiones y modelos de picos

- La tendencia de los picos se puede organizar por altura, área o centro.
- Los picos se pueden asignar a los campos de datos y modelar.
- Las regiones se pueden seleccionar para el análisis de los componentes principales (PCA) o análisis de resolución curva multivariable (MCR), lo que permite conocer los valores atípicos o tendencias de los espectros sin centrarse en picos específicos. Se trata de un enfoque de análisis de espectros "sin modelo".

Vistas

- Las vistas definen los gráficos más relevantes para cada usuario o caso de uso.
- Existen muchas opciones de gráficos, incluso para conjuntos de datos simples.
- Las opciones de gráficos de tendencias incluyen predicciones de modelos de RunTime, predicciones de modelos de picos de la biblioteca de datos Raman, datos de referencia medidos y mucho más para todos los campos de datos y selecciones de picos.

Tableros de instrumentos

- Un tablero de instrumentos es un conjunto de gráficos/vistas.
- Los usuarios pueden crear pestañas favoritas en el tablero de instrumentos que muestren de 1 a 4 cuadrantes del gráfico.
- El tablero de instrumentos es la vista principal para consultar de un vistazo los análisis rutinarios.

Plantillas

- Las plantillas recuerdan todos los tratamientos previos, análisis y ajustes de visualización, y se pueden aplicar a nuevos conjuntos de datos.

- Si los tratamientos, análisis de picos y vistas se guardan en una plantilla, un usuario puede pasar directamente de la creación de conjuntos de datos (nuevo lote de Raman RunTime o importación SPC) al tablero de instrumentos para ver los resultados.

Análisis de los conjuntos de datos

- Los usuarios pueden importar espectros y datos de referencia y pueden analizar los conjuntos de datos creados a través de un flujo de datos con pestañas.
- Los análisis se pueden realizar en tiempo real, o se pueden exportar los datos para su análisis posterior al tratamiento.
- Los conjuntos de datos se pueden combinar para su análisis o modelado dentro de la biblioteca de datos Raman, o exportar a software externos de análisis de datos multivariable (MVDA).
- Se admiten las exportaciones genéricas (.csv y .spc), GRAMS IQ™ (.cfl) y SIMCA® (.usp).
- Todos los espectros se pueden exportar sin tratamientos previos (por defecto) o con tratamientos previos.
- Las tendencias de base temporal no se aplican a todos los conjuntos de datos.
- Los valores atípicos se pueden seleccionar de los gráficos de caja y tendencia.

Resolución de la curva multivariable (MCR)

- MCR abarca una amplia gama de algoritmos diseñados para el análisis de mezclas al expresar los datos originales como estimación de la información sobre componentes puros.
- Los espectros y tendencias de los componentes puros calculados se pueden visualizar dentro de la biblioteca de datos Raman.

Análisis de componentes principales (PCA)

- PCA se utiliza para reducir el número de variables de un conjunto de datos grande, a la vez que se conserva la mayor cantidad de información posible.
- En la biblioteca de datos Raman, la función principal de PCA es que el usuario observe tendencias en conjuntos de datos que podrían no ser evidentes al consultar los gráficos de espectros o tendencias de picos individuales. También se puede utilizar para identificar y excluir valores atípicos.
- *Los modelos PCA no se pueden guardar en un modelo de biblioteca de datos Raman (para implementarlos en Raman RunTime), pero el análisis PCA se guarda como parte de una plantilla de conjunto de datos.*

Biblioteca de datos Raman: versión cGxP

La biblioteca de datos Raman puede cumplir FDA 21 CFR Parte 11 al instalarse con el instalador de configuración cGxP y calificarse mediante IQ/PP (lo lleva a cabo Endress+Hauser) y PQ (lo lleva a cabo el cliente). Al instalarse en modo cGxP, el programa permite la recopilación, almacenamiento y organización de espectros Raman para que estos puedan:

- Actuar como datos de set para calibración para el desarrollo de modelos Raman cuantitativos, como parte de una solución analítica validada, o
- actuar como datos de entrada en modelos validados que se utilizan para la predicción de propiedades de proceso o muestras.

La biblioteca de datos Raman permite almacenar datos espectrales en una base de datos segura, llevar a cabo cálculos sobre los datos espectrales y mostrar datos espectrales y sus metadatos asociados.

- Todas las características disponibles en la versión normal están disponibles en la cGxP.
- Para la versión cGxP, todas las acciones son trazables, así que se requiere iniciar sesión, cerrar sesión y gestión de usuarios.

Para cambiar de la versión básica de la biblioteca de datos Raman a la versión cGxP, el programa debe instalarse de nuevo.

Acceso de usuario basado en roles

La biblioteca de datos Raman cGxP cuenta con gestión de usuarios nativa. Un administrador con el rol Administrador de usuarios puede crear y gestionar usuarios, además de asignar roles de usuario. La autenticación de las credenciales de los usuarios se puede vincular a Microsoft Active Directory.

Un usuario puede tener varios roles, y la funcionalidad de rol de usuario ofrece flexibilidad para implementar grupos de usuarios por ubicación.

Función	Acciones permitidas
Eliminación de datos	Eliminar conjuntos de datos, espectros, campos de datos y proyectos
Manejo de datos	<ul style="list-style-type: none">■ Importar, exportar y editar datos■ Búsqueda de espectros■ Aplicación y exportación de modelos■ Adición de comentarios
Aprobación de datos	Aprobación de conjuntos de datos
Gestión de los ajustes del sistema	Modificación de la configuración del sistema
Gestión de fuentes espectrales	<ul style="list-style-type: none">■ Adición y edición de fuentes espectrales■ Reinicio y apagado de un analizador
Administración de proyectos	Adición y edición de proyectos
Administración de usuarios	Adición, edición y desactivación de usuarios
Calibración del analizador	Calibración de un analizador Raman Rxn
Verificación del analizador	Verificación de un analizador Raman Rxn
Manejo del analizador	Inicio, detención y pausa de las adquisiciones de conjuntos de datos
Gestión de los ajustes de recopilación del analizador	Cambio de la configuración de adquisición de los conjuntos de datos
Gestión de los ajustes del analizador	<ul style="list-style-type: none">■ Adición y cambio de archivos de los modelos■ Cambio de los ficheros de calibración de la intensidad■ Cambio de los estándares de verificación

Requisitos del sistema

La biblioteca de datos de Raman es un programa de Microsoft Windows de 64 bits que se ejecuta en Microsoft Windows™ 10 Professional.

Biblioteca de datos Raman: versión básica

Sistema operativo

Microsoft Windows 10 (Professional 64 bits)

Hardware

- Tipo de procesador: Intel Core i5 o procesador equivalente
- Memoria principal (RAM): 16 GB
- Capacidad del disco duro: 10 GB o más, en función del tamaño de la base de datos
- Tamaño de la pantalla (sobremesa): 24" o más con una resolución de 1920 x 1080 o superior, y la correspondiente configuración de escalado de la pantalla
- Tamaño de la pantalla (portátiles): 13" o más con una resolución de 1920 x 1080 o superior, y la correspondiente configuración de escalado de la pantalla

También se requiere Microsoft .NET Framework versión 4.7.2.

Biblioteca de datos Raman: versión cGxP

Sistema operativo

Microsoft Windows 10 (Professional 64 bits)

Hardware

- Tipo de procesador: Intel Core i5 o procesador equivalente
- Memoria principal (RAM): 16 GB
- Capacidad del disco duro: 10 GB o más, en función del tamaño de la base de datos
- Tamaño de la pantalla (sobremesa): 24" o más con una resolución de 1920 x 1080 o superior, y la correspondiente configuración de escalado de la pantalla
- Tamaño de la pantalla (portátiles): 13" o más con una resolución de 1920 x 1080 o superior, y la correspondiente configuración de escalado de la pantalla

También se requiere Microsoft .NET Framework versión 4.7.2.

Especificaciones

Comunicación

La comunicación con Raman RunTime se establece a través de OPC UA. También se utiliza el protocolo HTTPS para transferir determinados archivos entre Raman RunTime y la biblioteca de datos Raman, por ejemplo, archivos de modelos.

Base de datos

La biblioteca de datos Raman utiliza una base de datos segura integrada. La base de datos SQLite, suministrada por un tercero, proporciona un sistema de gestión de bases de datos relacionales (RDBMS) con todas las funciones.

Instalación

Instalación

Se necesitan permisos de administrador para instalar y configurar la biblioteca de datos Raman.

Documentación complementaria

Inicio rápido

Manual de instrucciones abreviado de la biblioteca de datos Raman KA01717C

Manual de instrucciones

Manual de instrucciones del usuario de la biblioteca de datos Raman BA02367C

Manual de instrucciones del administrador de la biblioteca de datos Raman BA02349C

Marcas registradas

- Microsoft™ es una marca registrada o una marca comercial de Microsoft Corporation en Estados Unidos, en otros países o en ambos.
- Windows™ es una marca registrada o una marca comercial de Microsoft Corporation en Estados Unidos, en otros países o en ambos.
- Todas las marcas registradas enumeradas en este documento son propiedad de sus respectivos dueños.

www.addresses.endress.com
