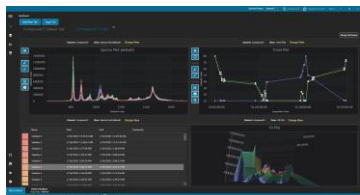


Техническое описание

Библиотека данных рамановской спектроскопии

Хранение, организация, анализ спектров и сбор данных с нескольких анализаторов от лабораторного этапа до cGxP



Область применения

Библиотека данных рамановской спектроскопии Endress+Hauser – это программное обеспечение, предназначенное для организации, чтения, анализа и составления отчетов по спектральным данным спектрометров Raman Rxn. Библиотека данных рамановской спектроскопии дополняет встроенное в Endress+Hauser программное обеспечение Raman RunTime, обеспечивая хранение, организацию и анализ спектров, а также сбор данных с нескольких анализаторов от лабораторного уровня до cGxP.

Библиотека данных рамановской спектроскопии была создана для пользователей, которым необходимо визуализировать спектры рамановской спектроскопии, связывать их с контрольными данными и создавать унивариантные модели пиков. Пользователи также могут экспортировать подготовленные данные для внешнего многовариантного моделирования. Кроме того, библиотека данных рамановской спектроскопии была создана для пользователей, которым необходимо собирать и хранить спектры рамановской спектроскопии в соответствии с требованиями FDA 21 CFR часть 11 для обеспечения прослеживаемости при создании и выполнении аналитических моделей на основе рамановской спектроскопии.

Преимущества

- **Возможности организации данных:** Сопоставление спектров с контрольными значениями, подготовка данных перед хемометрическим моделированием, поиск в хранилище данных, обеспечение целостности данных.
- **Возможности анализа данных:** Визуализация спектров и простой анализ, такой как отслеживание трендов пиков и моделирование.
- **Опция cGxP:** Соответствие отраслевым стандартам прослеживаемости, хранения и архивирования спектральных данных.

Содержание

Область применения 4

Графическая визуализация предлагаемого рабочего
процесса библиотеки данных рамановской
спектроскопии..... 4

Примеры использования 4

Исполнения 5

Библиотека данных рамановской спектроскопии –
основная версия..... 5

Библиотека данных рамановской спектроскопии –
версия cGxP 6

Требования, предъявляемые к системе 8

Библиотека данных рамановской спектроскопии –
основная версия..... 8

Библиотека данных рамановской спектроскопии –
версия cGxP 8

Технические характеристики 9

Тип связи..... 9

База данных 9

Монтаж 9

Монтаж 9

Сопроводительная документация 9

Быстрый старт 9

Руководство по эксплуатации..... 9

Зарегистрированные товарные знаки .. 9

Область применения

Графическая визуализация предлагаемого рабочего процесса библиотеки данных рамановской спектроскопии



Примеры использования

Это программное обеспечение разработано с учетом потребностей сценариев использования, характерных для различных отраслей:

- Импорт данных в реальном времени из Raman RunTime
- Проектно-ориентированная организация данных
- Сопоставление данных для подготовки к моделированию
- Визуализация спектральных изменений
- Анализ пиков и регионов и одновариантное моделирование
- Экспорт в хеометрические программы

Использование cGxP: Сбор, просмотр, хранение, извлечение и архивация данных в соответствии с требованиями FDA 21 CFR часть 11:

- Отслеживаемость действий пользователя и целостность данных
- Просмотр и сохранение данных с нескольких анализаторов и зондов
- Поиск данных, извлечение и (базовые) отчеты для поддержки аудита

Исполнения

Библиотека данных рамановской спектроскопии – основная версия

Управление анализатором Raman Rxn

- Область управления Rxn библиотеки данных рамановской спектроскопии напоминает пользовательский интерфейс Raman RunTime.
- Интерфейс области управления Rxn адаптируется к конфигурации анализатора, обеспечивая различное отображение для одно- и многоканальных, а также гибридных анализаторов.
- Несколько анализаторов можно подключать, контролировать и управлять ими из одного центрального места.
- Библиотека данных рамановской спектроскопии предоставляет интерфейс для Raman Runtime, в котором можно калибровать и проверять анализаторы Raman Rxn.
- Возможен доступ к отчетам калибровки анализатора, а также отправка файлов моделей в анализатор.
- Функция управления Rxn Control облегчает запуск и управление сбором данных рамановской спектроскопии.

Сбор данных

- Без какого-либо ввода со стороны пользователя библиотека данных рамановской спектроскопии может отображать спектры и результаты моделей из Raman RunTime и всех его поддерживаемых предикторов.
- Библиотека данных рамановской спектроскопии подключается к Raman RunTime через OPC UA.
- Библиотека данных рамановской спектроскопии обеспечивает зашифрованное и доступное для поиска хранение и архивирование данных.

Поля данных

- Поля данных представляют собой качественную и количественную информацию, привязанную к спектру.
- Для количественного анализа пользователь может указать точность, единицы измерения, основные сведения о методе и т. д.
- Для уменьшения количества ошибок пользователя при импорте можно добавлять псевдонимы, например, `Glucose = glucose`.
- Названия полей данных полностью соответствуют моделям.

Предварительная обработка

- Могут применяться методы коррекции базовой линии, нормализации и другие виды предварительной обработки спектров.
- Пользователь определяет последовательность предварительной обработки.

Пики, регионы и модели пиков

- Пики можно анализировать по высоте, площади или центру.
- Пики можно назначать полям данных и моделировать.
- Можно выбирать области для анализа методом главных компонент (PCA) или разрешения многомерных кривых (MCR), что позволяет выявлять выбросы или тенденции спектров без акцента на конкретные пики. Это подход к анализу спектров без использования моделей.

Представления

- Представления определяют наиболее актуальные графики для каждого пользователя или сценария использования.
- Существует множество вариантов графиков, даже для простых наборов данных.
- Варианты построения графиков трендов включают прогнозы моделей из RunTime, прогнозы моделей пиков библиотеки данных рамановской спектроскопии, измеренные контрольные данные и другие данные для всех полей и выбранных пиков.

Панели управления

- Панель управления представляет собой набор графиков/представлений.
- Пользователи могут создавать предпочтительные вкладки панели управления, отображающие от 1 до 4 квадрантов графика.

- Панель управления предназначена для использования в качестве основного представления для быстрого анализа текущих данных.

Шаблоны

- Шаблоны запоминают все предварительные обработки, анализ и настройки представления и могут применяться к новым наборам данных.
- Если предобработки, анализ пиков и представления сохранены в шаблон, пользователь может сразу перейти от создания набора данных (новая партия Raman RunTime или импорт SPC) к панели управления для просмотра результатов.

Анализ набора данных

- Пользователи могут импортировать спектры и контрольные данные, а также анализировать созданные наборы данных через пошаговый процесс на вкладках.
- Анализ можно проводить в режиме реального времени, или данные можно экспортировать для анализа после обработки.
- Наборы данных можно объединять для анализа или моделирования в библиотеке данных рамановской спектроскопии или для экспорта во внешнее программное обеспечение для многомерного анализа данных (MVDA).
- Поддерживаются стандартные форматы экспорта (.csv и .spc), GRAMS IQ™ (.cfl) и SIMCA® (.usp).
- Все спектры можно экспортировать без предварительной обработки (по умолчанию) или с предварительной обработкой.
- Тренды, основанные на времени, неприменимы ко всем наборам данных.
- Аномальные значения можно выбирать из блочных диаграмм и графиков трендов.

Разрешение многомерных кривых (MCR)

- MCR охватывает широкий спектр алгоритмов, предназначенных для анализа смесей путем представления исходных данных в виде оценок информации о чистых компонентах.
- Рассчитанные спектры чистых компонентов и их тренды могут отображаться в библиотеке данных рамановской спектроскопии.

Анализ главных компонент (PCA)

- PCA используется для сокращения количества переменных в большом наборе данных, сохраняя при этом как можно больше информации.
- В библиотеке данных рамановской спектроскопии основная функция PCA заключается в том, чтобы пользователи могли выявлять тренды в наборах данных, которые могут быть неочевидны при просмотре спектральных графиков или трендов отдельных пиков. PCA также может использоваться для выявления и исключения аномальных значений.
- *Модели PCA не могут быть сохранены в библиотеке данных рамановской спектроскопии (для использования в Raman RunTime), но анализ PCA сохраняется как часть шаблона набора данных.*

Библиотека данных рамановской спектроскопии – версия cGxP

Библиотека данных рамановской спектроскопии может соответствовать требованиям FDA 21 CFR часть 11 при установке с помощью установщика cGxP Setup и квалификации через IQ/OQ (выполняется Endress+Hauser) и PQ (выполняется заказчиком). При установке в режиме cGxP программа упрощает сбор, хранение и организацию спектров рамановской спектроскопии, чтобы спектры могли:

- Выступать в качестве данных калибровочного набора для разработки количественных моделей рамановской спектроскопии в рамках валидированного аналитического решения, или
- Выступать в качестве входных данных для проверенных моделей, используемых для прогнозирования свойств процесса или образца.

Библиотека данных рамановской спектроскопии позволяет хранить спектральные данные в защищенной базе данных, выполнять расчеты на основе спектральных данных, а также отображать спектральные данные и связанные с ними метаданные.

- Все функции, доступные в обычной версии, доступны и в версии cGxP.
- В версии cGxP все действия отслеживаются, поэтому требуется вход в систему, выход из системы и управление пользователями.

Чтобы перейти с основной версии библиотеки данных рамановской спектроскопии на версию cGxP, программу необходимо переустановить.

Доступ пользователей на основе ролей

Версия cGxP библиотеки данных рамановской спектроскопии включает встроенную систему управления пользователями. Администратор с ролью "Менеджер пользователей" может создавать и управлять пользователями, включая назначение ролей. Аутентификация учетных данных пользователей может быть интегрирована с Microsoft Active Directory.

Пользователю можно назначить несколько ролей, а функциональность пользовательских ролей обеспечивает гибкость для создания групп пользователей на основе мест эксплуатации.

| Роль | Разрешенные действия |
|--|--|
| Удаление данных | Удаление наборов данных, спектров, полей данных и проектов |
| Оператор данных | <ul style="list-style-type: none"> ■ Импорт, экспорт и редактирование данных ■ Поиск спектров ■ Применение и экспорт моделей ■ Добавление комментариев |
| Утверждающий данных | Утверждение наборов данных |
| Менеджер системных настроек | Изменение настроек системы |
| Менеджер спектральных источников | <ul style="list-style-type: none"> ■ Добавление и редактирование спектральных источников ■ Перезапуск и выключение анализатора |
| Менеджер проектов | Добавление и редактирование проектов |
| Менеджер пользователей | Добавление, редактирование и отключение пользователей |
| Калибровщик анализатора | Калибровка анализатора Raman Rxn |
| Проверяющий анализатора | Проверка анализатора Raman Rxn |
| Оператор анализатора | Запуск, остановка и приостановка сбора данных |
| Менеджер настроек сбора данных анализатора | Изменение настроек получения набора данных |
| Менеджер настроек анализатора | <ul style="list-style-type: none"> ■ Добавление и изменение файлов моделей ■ Изменение файлов калибровки интенсивности ■ Изменение стандартов проверки |

Требования, предъявляемые к системе

Библиотека данных рамановской спектроскопии – это 64-разрядная программа для Microsoft Windows, работающая на Microsoft Windows™ 10 Professional.

Библиотека данных рамановской спектроскопии – основная версия

Операционная система

Microsoft Windows 10 (профессиональная 64-разрядная версия)

Аппаратное обеспечение

- Тип процессора: Intel Core i5 или эквивалентный процессор
- Основная память (ОЗУ): 16 ГБ
- Емкость жесткого диска: 10 ГБ или больше, в зависимости от размера базы данных
- Размер экрана (настольные компьютеры): 24 дюймов или более с разрешением 1920 x 1080 или выше и соответствующими настройками масштабирования дисплея
- Размер экрана (ноутбуки): 13 дюймов или более с разрешением 1920 x 1080 или выше и соответствующими настройками масштабирования дисплея

Также требуется Microsoft .NET Framework версии 4.7.2.

Библиотека данных рамановской спектроскопии – версия cGxP

Операционная система

Microsoft Windows 10 (профессиональная 64-разрядная версия)

Аппаратное обеспечение

- Тип процессора: Intel Core i5 или эквивалентный процессор
- Основная память (ОЗУ): 16 ГБ
- Емкость жесткого диска: 10 ГБ или больше, в зависимости от размера базы данных
- Размер экрана (настольные компьютеры): 24 дюймов или более с разрешением 1920 x 1080 или выше и соответствующими настройками масштабирования дисплея
- Размер экрана (ноутбуки): 13 дюймов или более с разрешением 1920 x 1080 или выше и соответствующими настройками масштабирования дисплея

Также требуется Microsoft .NET Framework версии 4.7.2.

Технические характеристики

Тип связи

Связь с Raman RunTime осуществляется через OPC UA. Протокол HTTPS также используется для передачи некоторых файлов между Raman RunTime и библиотекой данных рамановской спектроскопии, например файлов моделей.

База данных

Программа Raman Data Library использует безопасную встроенную базу данных. База данных SQLite, предоставленная третьей стороной, представляет собой полнофункциональную систему управления реляционными базами данных (СУРБД).

Монтаж

Монтаж

Для установки и настройки библиотеки данных рамановской спектроскопии требуются права администратора.

Сопроводительная документация

Быстрый старт

KA01717C Краткое руководство по эксплуатации библиотеки данных рамановской спектроскопии

Руководство по эксплуатации

BA02367C Руководство пользователя по эксплуатации библиотеки данных рамановской спектроскопии

BA02349C Руководство администратора по эксплуатации библиотеки данных Рамановской спектроскопии

Зарегистрированные товарные знаки

- Microsoft™ является зарегистрированным товарным знаком или товарным знаком корпорации Microsoft в Соединенных Штатах, других странах или и там, и там.
- Windows™ является зарегистрированным товарным знаком или товарным знаком корпорации Microsoft в Соединенных Штатах, других странах или и там, и там.
- Все другие товарные знаки, упомянутые в настоящем документе, являются собственностью соответствующих владельцев.

www.addresses.endress.com
