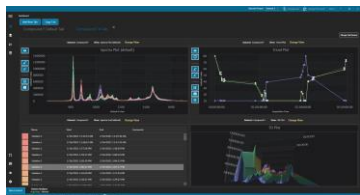


# 技术资料

## 拉曼光谱数据库

从实验室涵盖到 cGxP 法规认证:

实现光谱数据存储、整理、分析和多分析仪数据收集



### 应用

Endress+Hauser 的拉曼光谱数据库是用于整理、读取、分析和报告 Rxn 拉曼光谱数据的软件。拉曼光谱数据库提供光谱数据存储、整理、分析和多分析仪数据收集功能，从实验室涵盖到 cGxP 法规认证，为 Endress+Hauser Raman RunTime 嵌入式软件提供补充。

拉曼光谱数据库适用于需要可视化拉曼光谱、将拉曼光谱与参考数据相关联并创建单变量峰值模型的用户。用户还可导出准备好的数据用于外部多变量建模。此外，拉曼光谱数据库还适用于在创建和执行基于拉曼光谱的分析模型期间，需要根据 FDA 21 CFR Part 11 的溯源性要求收集和存储拉曼光谱数据的用户。

### 优势

- **数据整理功能:** 光谱与参考值匹配、化学计量学建模前的数据准备、可搜索的数据存储、保证数据完整性
- **数据分析功能:** 光谱可视化和简单分析，例如峰值趋势和建模
- **cGxP 选项:** 满足行业标准规定的光谱数据溯源性、存储和归档要求



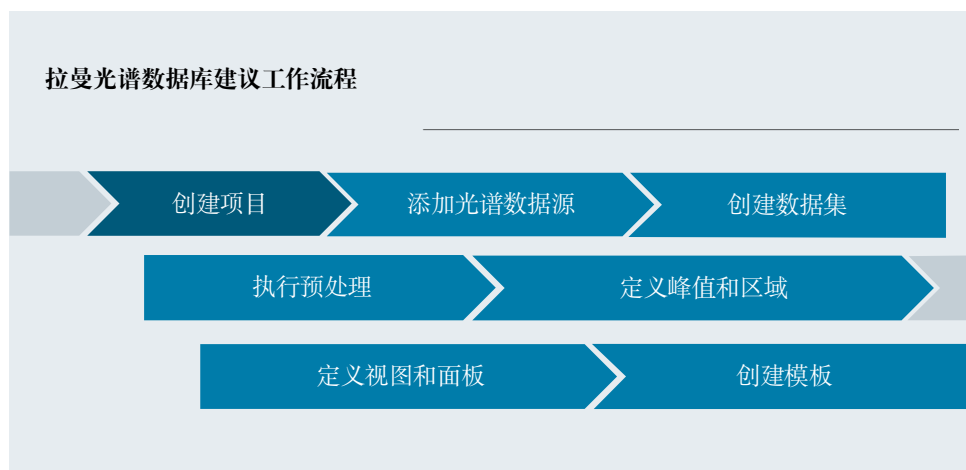
## 目录

|                        |          |                     |          |
|------------------------|----------|---------------------|----------|
| <b>应用.....</b>         | <b>4</b> | <b>规格参数 .....</b>   | <b>8</b> |
| 拉曼光谱数据库建议工作流程示意图 ..... | 4        | 通信 .....            | 8        |
| 用例 .....               | 4        | 数据库.....            | 8        |
| <b>版本.....</b>         | <b>5</b> | <b>安装 .....</b>     | <b>8</b> |
| 拉曼光谱数据库 – 核心版本 .....   | 5        | 安装 .....            | 8        |
| 拉曼光谱数据库 – cGxP 版本..... | 6        | <b>补充文档资料 .....</b> | <b>8</b> |
| <b>系统要求 .....</b>      | <b>7</b> | 快速入门 .....          | 8        |
| 拉曼光谱数据库 – 核心版本 .....   | 7        | 操作手册 .....          | 8        |
| 拉曼光谱数据库 – cGxP 版本..... | 7        | <b>注册商标 .....</b>   | <b>8</b> |

## 应用

### 拉曼光谱数据库建议

#### 工作流程示意图



#### 用例

软件旨在满足多个行业常见用例的需求:

- 从 Raman RunTime 实时导入数据
- 以项目为导向的数据整理
- 用于建模准备的数据匹配
- 可视化光谱变化
- 峰值和区域分析以及单变量建模
- 导出到化学计量学程序

**cGxP 用途:** 根据 FDA 21 CFR Part 11 法规要求收集、查看、存储、检索和归档数据:

- 用户行为溯源性和数据完整性
- 查看和存储来自多个分析仪和探头的数据
- 通过数据搜索、检索和 (基本) 报告提供审计支持

# 版本

## 拉曼光谱数据库 – 核心版本

### Rxn 拉曼光谱分析仪控制

- 拉曼光谱数据库的 Rxn 控制区域与 Raman RunTime 的用户界面相类似。
- Rxn 控制区域界面对分析仪配置做出响应，区分性地呈现单通道型、多通道型和混合型分析仪。
- 可以从一个中央位置连接、监测和控制多台分析仪。
- 拉曼光谱数据库为 Raman Runtime 提供了一个可用于校准和验证 Rxn 拉曼光谱分析仪的界面。
- 可以访问分析仪校准报告，并将模型文件发送至分析仪。
- Rxn 控制功能便于用户启动和控制拉曼数据收集。

### 数据收集

- 拉曼光谱数据库可以显示 Raman Runtime 及其所有支持的预测工具的光谱和模型结果，无需任何用户输入。
- 拉曼光谱数据库通过 OPC UA 连接至 Raman Runtime。
- 拉曼光谱数据库提供加密、可搜索的数据存储和归档。

### 数据字段

- 数据字段是标记在光谱上的定性和定量信息。
- 进行定量分析时，用户可以指定精度、单位、主要方法细节等。
- 可以添加别名以减少导入时的用户差错，例如，Glucose = glucose。
- 数据字段名称始终遵循模型。

### 预处理

- 可以执行基线校正方法、归一化和其他光谱预处理。
- 预处理顺序由用户定义。

### 峰值、区域和峰值模型

- 峰值可以按高度、面积或中心进行趋势分析。
- 峰值可以分配给数据字段并进行建模。
- 可以选择区域进行主成分分析 (PCA) 或多变量曲线分辨率 (MCR) 分析，从而在不关注特定峰值的情况下洞察异常值或光谱趋势。这是一种用于光谱分析的“无模型”方法。

### 视图

- 视图为每个用户或用例定义最相关的绘图。
- 即使是简单数据集，也提供大量绘图选项。
- 趋势绘图选项包括 RunTime 的模型预测、拉曼光谱数据库峰值模型预测、测量参考数据等，适用于所有数据字段和峰值选择。

### 面板

- 面板是一系列绘图/视图的集合。
- 用户可以创建显示 1 到 4 个象限的首选面板标签页。
- 面板作为日常分析的主视图。

### 模板

- 模板可以保存所有预处理、分析和视图设置，并应用于新数据集。
- 如果将预处理、峰值分析和视图保存到模板中，则用户可以直接从数据集创建过程（新的 Raman Runtime 批处理或 SPC 导入）转至仪表板查看结果。

### 数据集分析

- 用户可以导入光谱和参考数据，并通过标签式工作流程分析创建的数据集。
- 分析可以实时执行，也可以导出数据进行后处理分析。
- 数据集可以组合在拉曼光谱数据库中进行分析或建模，或者也可导出至外部多变量数据分析 (MVDA) 软件。
- 支持通用导出 (.csv 和 .spc)、GRAMS IQ™ (.cfl) 和 SIMCA® (.usp)。
- 所有光谱数据均可在不进行预处理 (默认设置) 或进行预处理的情况下导出。
- 基于时间的趋势并非适用于所有数据集。
- 可以从箱形图和趋势图中选择异常值。

### 多变量曲线分辨率 (MCR)

- 通过将原始数据表示为估算的纯组分信息，MCR 涵盖了为混合物分析而设计的广泛算法。
- 计算出的纯组分光谱和趋势可以在拉曼光谱数据库中显示。

### 主成分分析 (PCA)

- PCA 用于减少大型数据集的变量数量，同时保留尽可能多的信息。
- 在拉曼光谱数据库中，PCA 的主要功能是让用户观察数据集中的趋势，而在查看光谱图或单一峰值趋势时，这些趋势可能不明显。PCA 还可用于识别和排除异常值。
- *PCA 模型不能保存至拉曼光谱数据库模型 (用于在 Raman Runtime 中实施)，但 PCA 分析可以保存至数据集模板。*

## 拉曼光谱数据库 – cGxP 版本

当与 cGxP 安装程序一起安装并通过 IQ/OQ (由 Endress+Hauser 执行) 和 PQ (由用户执行) 进行资质验证后，拉曼光谱数据库即符合 FDA 21 CFR Part 11 法规要求。当以 cGxP 模式安装时，程序便于用户收集、存储和整理拉曼光谱数据，以便将光谱：

- 纳入已验证分析解决方案，从而作为定量拉曼模型开发的校准集数据，或者
- 作为数据输入至已验证模型，用于预测过程或样本属性。

拉曼光谱数据库允许将光谱数据存储存储在安全的数据库中，对光谱数据进行计算，并显示光谱数据及其相关元数据。

- cGxP 版本包含常规版本中的所有可用功能。
- 使用 cGxP 版本时，所有操作均可溯源，因此需要进行登陆、注销和用户管理。

如需从拉曼光谱数据库核心版本切换至 cGxP 版本，必须重新安装程序。

### 基于角色的用户访问

拉曼光谱数据库 cGxP 版本具备本地用户管理功能。具有“用户管理员”角色的管理员可以创建和管理用户，包括分配用户角色。用户凭据验证可以绑定至 Microsoft Active Directory。

用户可以被赋予多个角色，而用户角色功能有助于灵活部署基于现场的用户组。

| 角色       | 允许的操作   |
|----------|---|
| 数据删除员    | 删除数据集、光谱、数据字段和项目  |
| 数据操作员    | <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ 导入、导出和编辑数据</li> <li>▪ 搜索光谱</li> <li>▪ 应用和导出模型</li> <li>▪ 添加注释</li> </ul> |
| 数据审批员    | 审批数据集   |
| 系统设置管理员  | 修改系统设置  |
| 光谱数据源管理员 | <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ 添加和编辑光谱数据源</li> <li>▪ 重启和关闭分析仪</li> </ul>                                |
| 项目管理员    | 添加和编辑项目   |

| 角色               | 允许的操作   |
|------------------|---|
| 用户管理员            | 添加、编辑和禁用用户  |
| 分析仪校准员           | 校准 Rxn 拉曼光谱分析仪  |
| 分析仪验证员           | 验证 Rxn 拉曼光谱分析仪  |
| 分析仪操作员           | 启动、停止和暂停数据集采集   |
| 分析仪数据收集<br>设置管理员 | 更改数据集采集设置   |
| 分析仪设置管理员         | <ul style="list-style-type: none"> <li>■ 添加和更改模型文件</li> <li>■ 更改强度校准文件</li> <li>■ 更改验证标准</li> </ul> |

## 系统要求

拉曼光谱数据库是基于 Microsoft Windows™10 Professional 操作系统运行的 64 位 Microsoft Windows 程序。

### 拉曼光谱数据库 – 核心版本

#### 操作系统

Microsoft Windows 10 (64 位专业版)

#### 硬件

- 处理器类型: Intel Core i5 或同等处理器
- 主存储器 (RAM) : 16 GB
- 硬盘容量: 10 GB 或更大, 取决于数据库大小
- 屏幕尺寸 (台式机) : 24 英寸或更大, 分辨率 1920 x 1080 或更高, 并具有合适的显示缩放比例设置
- 屏幕尺寸 (笔记本电脑) : 13 英寸或更大, 分辨率 1920 x 1080 或更高, 并具有合适的显示缩放比例设置

还需要 Microsoft .NET Framework 4.7.2 版本。

### 拉曼光谱数据库 – cGxP 版本

#### 操作系统

Microsoft Windows 10 (64 位专业版)

#### 硬件

- 处理器类型: Intel Core i5 或同等处理器
- 主存储器 (RAM) : 16 GB
- 硬盘容量: 10 GB 或更大, 取决于数据库大小
- 屏幕尺寸 (台式机) : 24 英寸或更大, 分辨率 1920 x 1080 或更高, 并具有合适的显示缩放比例设置
- 屏幕尺寸 (笔记本电脑) : 13 英寸或更大, 分辨率 1920 x 1080 或更高, 并具有合适的显示缩放比例设置

还需要 Microsoft .NET Framework 4.7.2 版本。

---

## 规格参数

---

### 通信

通过 OPC UA 与 Raman Runtime 进行通信。同时通过 HTTPS 协议在 Raman Runtime 和拉曼光谱数据库之间传输某些文件，例如模型文件。

---

### 数据库

拉曼光谱数据库使用安全嵌入式数据库。来自第三方的 SQLite 数据库提供了一个全功能 RDBMS（关系数据库管理系统）。

## 安装

---

### 安装

安装和设置拉曼光谱数据库需要管理员权限。

## 补充文档资料

---

### 快速入门

拉曼光谱数据库《简明操作指南》KA01717C

---

### 操作手册

拉曼光谱数据库用户《操作手册》BA02367C

拉曼光谱数据库管理员《操作手册》BA02349C

## 注册商标

---

- Microsoft™是微软公司在美国和/或其他国家的注册商标或商标。
- Windows™是微软公司在美国和/或其他国家的注册商标或商标。
- 本文档中列出的所有其他商标均为各自所有者的财产。



[www.addresses.endress.com](http://www.addresses.endress.com)

---