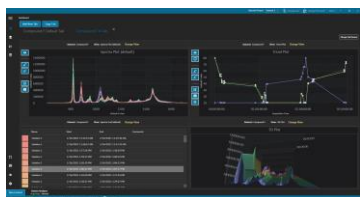


Technische Information

Raman Data Library

Speicherung, Organisation und Analyse von Spektren sowie Datenerfassung von mehreren Analysatoren – von der Laborebene bis cGxP



Anwendungsbereich

Raman Data Library von Endress+Hauser ist eine Software, die für das Organisieren, Lesen und Analysieren von Raman Rxn-Spektraldaten sowie die Berichterstellung dazu konzipiert wurde. Raman Data Library ergänzt die integrierte Raman RunTime-Software von Endress+Hauser, indem es Speicherung, Organisation und Analyse von Spektren sowie die Datenerfassung von mehreren Analysatoren von der Laborebene bis cGxP bietet.

Raman Data Library wurde für Benutzer entwickelt, die Raman-Spektren visualisieren, mit Referenzdaten verknüpfen und univariate Peak-Modelle erzeugen müssen. Benutzer können außerdem vorbereitete Daten für eine externe multivariate Modellerstellung exportieren. Darüber hinaus wurde Raman Data Library für Benutzer konzipiert, die Raman-Spektren gemäß Anforderungen der FDA 21 CFR Part 11 hinsichtlich der Rückführbarkeit während Erzeugung und Ausführung von Raman-basierten Analysemodellen erfassen und speichern müssen.

Ihre Vorteile

- **Funktionen zur Datenorganisation:** Zuordnung von Spektren zu Referenzwerten, Datenvorbereitung vor chemometrischer Modellerzeugung, Durchsuchen des Datenspeichers, Datenintegrität
- **Funktionen zur Datenanalyse:** Visualisierung von Spektren und einfache Analyse wie Peak-Trends und Modellierung
- **cGxP-Option:** Erfüllung von Industriestandards für Rückführbarkeit, Speicherung und Archivierung von Spektraldaten

Inhaltsverzeichnis

Anwendungsbereich..... 4

Grafische Darstellung des vorgeschlagenen Workflows für Raman Data Library.....	4
Anwendungsfälle	4

Versionen 5

Raman Data Library – Core-Version.....	5
Raman Data Library – cGxP-Version.....	7

Systemvoraussetzungen..... 8

Raman Data Library – Core.....	8
Raman Data Library – cGxP-Version.....	8

Spezifikationen..... 9

Kommunikation.....	9
Datenbank	9

Installation 9

Installation.....	9
-------------------	---

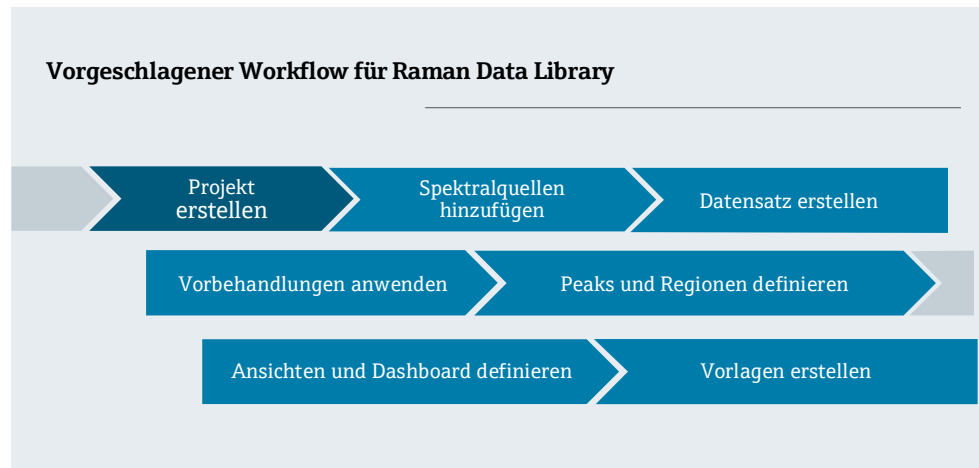
Ergänzende Dokumentation 9

Schnelleinstieg.....	9
Betriebsanleitung	9

Eingetragene Marken 9

Anwendungsbereich

Grafische Darstellung des vorgeschlagenen Workflows für Raman Data Library



Anwendungsfälle

Diese Software wurde dafür konzipiert, die Anforderungen typischer Anwendungsfälle zu erfüllen, wie sie in zahlreichen Industrien vorkommen:

- Echtzeit-Datenimport aus Raman RunTime
- Projektorientierte Datenorganisation
- Datenabgleich für Modellvorbereitung
- Visualisierung von spektralen Änderungen
- Analyse von Peaks und Regionen sowie univariate Modellerzeugung
- Export in chemometrische Programme

cGxP-Verwendung: Erfassen, Anzeigen, Speichern, Abrufen und Archivieren von Daten gemäß Anforderungen der FDA 21 CFR Part 11:

- Rückführbarkeit von Benutzeraktionen und Datenintegrität
- Anzeige der Daten von mehreren Analysatoren und Sonden sowie Datenspeicherung
- Datensuche und -abruf sowie Erstellung von (grundlegenden) Berichten zur Audit-Unterstützung

Versionen

Raman Data Library – Core-Version

Raman Rxn-Analysatorsteuerung

- Der von Raman Data Library bereitgestellte Bereich zur Rxn-Steuerung ähnelt der Benutzeroberfläche für Raman RunTime.
- Die Schnittstelle des Rxn-Steuerungsbereichs erkennt die Analysatorkonfiguration und stellt einkanalige, mehrkanalige und Hybridanalysatoren unterschiedlich dar.
- Mehrere Analysatoren können angeschlossen, überwacht und von einer zentralen Stelle aus gesteuert werden.
- Raman Data Library stellt eine Schnittstelle für Raman RunTime bereit, über die Raman Rxn-Analysatoren kalibriert und verifiziert werden können.
- Berichte zur Analysatorkalibrierung können aufgerufen und Modelldateien an den Analysator gesendet werden.
- Die Rxn-Steuerungsfunktion erleichtert Initialisierung und Steuerung der Raman-Datenerfassung.

Datenerfassung

- Raman Data Library kann, ganz ohne Benutzereingabe, Spektren und Modellergebnisse von Raman RunTime und allen unterstützten Software Add-ons zur Datenberechnung anzeigen.
- Raman Data Library wird über OPC UA mit Raman RunTime verbunden.
- Raman Data Library stellt eine verschlüsselte und durchsuchbare Datenspeicherung und -archivierung bereit.

Datenfelder

- Datenfelder sind qualitative und quantitative Informationen, die mit einem Spektrum verknüpft sind.
- Für quantitative Analysen kann der Benutzer Präzision, Einheiten, primäre Methodendetails etc. festlegen.
- Zudem können Aliase hinzugefügt werden, um Benutzerfehler beim Import zu verringern, z. B. Glukose = glukose.
- Die Datenfelder müssen die gleichen Namen haben, die auch für die Komponenten in den Modelldateien verwendet werden.

Vorbehandlungen

- Methoden zur Basislinienkorrektur, Normalisierung und andere besondere Vorbehandlungen können angewendet werden.
- Der Benutzer definiert die Abfolge der Vorbehandlungen.

Peaks, Regionen und Peak-Modelle

- Für Peaks können Trends anhand von Höhe, Bereich oder Mittelpunkt erstellt werden.
- Peaks können Datenfeldern zugeordnet und modelliert werden.
- Für eine Hauptkomponentenanalyse (PCA) oder eine Multivariate Curve Resolution (MCR) können Regionen ausgewählt werden, wodurch der Benutzer Einblicke in Abweichungen oder Spektrentrends erhält, ohne dass der Schwerpunkt auf spezifischen Peaks liegt. Hierbei handelt es sich um einen modelllosen Ansatz zur Spektrenanalyse.

Ansichten

- Ansichten definieren die relevantesten Darstellungen für jeden Benutzer oder Anwendungsfall.
- Es gibt zahlreiche Darstellungsoptionen, selbst für einfache Datensätze.
- Zu den Optionen für Trenddarstellungen gehören Modellvorhersagen von RunTime, Peak-Modellvorhersagen von Raman Data Library, gemessene Referenzdaten und vieles mehr für alle Datenfelder und Peak-Auswahlen.

Dashboards

- Bei einem Dashboard handelt es sich um eine Sammlung von Darstellungen/Ansichten.
- Benutzer können bevorzugte Dashboard-Registerkarten erzeugen, die 1 bis 4 Quadranten mit Darstellungen enthalten.
- Das Dashboard ist die Hauptansicht, in der der Benutzer mit nur einem Blick Routineanalysen durchführen kann.

Vorlagen

- In Vorlagen sind alle Vorbehandlungen, Analysen und Ansichtseinstellungen gespeichert, sodass sie auf neue Datensätze angewendet werden können.
- Wenn Vorbehandlungen, Peak-Analysen und Ansichten in einer Vorlage gespeichert werden, kann der Benutzer direkt von der Datensatzerstellung (neue Raman RunTime-Charge oder SPC-Import) zum Dashboard wechseln, um die Ergebnisse anzuzeigen.

Datensatzanalyse

- Benutzer können Spektren und Referenzdaten importieren und die erzeugten Datensätze über einen auf Registerkarten basierenden Workflow analysieren.
- Analysen können in Echtzeit vorgenommen werden, oder die Daten können für eine Nachbehandlungsanalyse exportiert werden.
- Datensätze können zur Analyse oder Modellerstellung in Raman Data Library oder für den Export an eine externe MVDA-Software (Multivariate Data Analysis) kombiniert werden.
- Generische Exporte (.csv und .spc), GRAMS IQ™ (.cfl) und SIMCA® (.usp) werden unterstützt.
- Alle Spektren können ohne Vorbehandlungen (Standard) oder mit Vorbehandlungen exportiert werden.
- Zeitbasierte Trends können nicht für alle Datensätze angewendet werden.
- Abweichungen können im Feld und in den Trenddarstellungen ausgewählt werden.

Multivariate Curve Resolution (MCR)

- MCR deckt eine große Bandbreite von Algorithmen ab, die für eine Gemischanalyse konzipiert wurden, indem sie bei Peak-Veränderungen über einen definierten Bereich die Trends berechnet und vorhersagt, wie die Spektren der einzelnen Komponenten aussehen würden, wenn sie sich nicht mit anderen überlappen würden.
- Diese berechneten Spektren der einzelnen Komponenten und die Trends können in Raman Data Library angezeigt werden.

Hauptkomponentenanalyse (PCA)

- Mit PCA wird die Anzahl der Variablen eines großen Datensatzes reduziert, während gleichzeitig so viele Informationen wie möglich beibehalten werden.
- In Raman Data Library besteht die primäre Funktion von PCA darin, dass der Benutzer Trends in Datensätzen beobachten kann, die bei Ansicht der Spektrendarstellungen oder individuellen Peak-Trends möglicherweise nicht sichtbar sind. PCA kann außerdem dazu verwendet werden, Abweichungen zu identifizieren und auszuschließen.
- *PCA-Modelle können nicht in einem Raman Data Library-Modell gespeichert werden (zur Implementierung in Raman RunTime), aber die PCA-Analyse wird als Teil einer Datensatzvorlage gespeichert.*

Raman Data Library – cGxP-Version

Raman Data Library bietet Konformität mit FDA 21 CFR Part 11, wenn es mit dem cGxP Setup Installer installiert und über IQ/OQ (von Endress+Hauser durchgeführt) sowie PQ (vom Kunden durchgeführt) qualifiziert wird. Wenn im cGxP-Modus installiert, ermöglicht das Programm Erfassung, Speicherung und Organisation von Raman-Spektren, sodass die Spektren:

- Als Kalibrierdatensatz für eine quantitative Raman-Modellentwicklung als Teil einer validierten Analyselösung dienen können, oder
- Als Eingabedaten für validierte Modelle dienen können, die zur Vorhersage von Prozess- oder Probeneigenschaften verwendet werden.

Raman Data Library ermöglicht das Speichern von Spektraldaten in einer sicheren Datenbank, das Durchführen von Berechnungen zu den Spektraldaten sowie die Anzeige von Spektraldaten und ihren zugehörigen Metadaten.

- Alle in der regulären Version verfügbaren Funktionen stehen auch in der cGxP-Version zur Verfügung.
- Bei der cGxP-Version sind alle Aktionen rückführbar, daher sind An- und Abmeldung sowie eine Benutzerverwaltung erforderlich.

Wenn der Benutzer von der Raman Data Library Core-Version auf die cGxP-Version umsteigen möchte, muss das Programm neu installiert werden.

Rollenabhängiger Benutzerzugang

Raman Data Library cGxP verfügt über eine native Benutzerverwaltung. Ein Administrator mit der Rolle Users Manager kann Benutzer anlegen und verwalten sowie Benutzerrollen zuweisen. Die Authentifizierung der Benutzeranmeldedaten kann mit Microsoft Active Directory verknüpft werden.

Ein Benutzer kann mehrere Rollen erhalten, und die Benutzerrollenfunktionalität bietet Flexibilität, um standortbasierte Benutzergruppen zu implementieren.

Rolle	Zulässige Aktionen
Data Remover	Entfernen von Datensätzen, Spektren, Datenfeldern und Projekten
Data Operator	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Importieren, Exportieren und Bearbeiten von Daten ▪ Suche nach Spektren ▪ Anwenden und Exportieren von Modellen ▪ Hinzufügen von Kommentaren
Data Approver	Genehmigung von Datensätzen
System Settings Manager	Bearbeiten der Systemeinstellungen
Spectral Sources Manager	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Hinzufügen und Bearbeiten von Spektralquellen ▪ Neustarten und Herunterfahren des Analysators
Projects Manager	Hinzufügen und Bearbeiten von Projekten
Users Manager	Hinzufügen, Bearbeiten und Deaktivieren von Benutzern
Analyzer Calibrator	Kalibrierung von Raman Rxn-Analysatoren
Analyzer Verifier	Verifizierung von Raman Rxn-Analysatoren
Analyzer Operator	Starten, Stoppen und Anhalten von Datensatzerfassungen
Analyzer Collection Settings Manager	Ändern der Einstellungen für die Datensatzerfassung
Analyzer Settings Manager	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Hinzufügen und Ändern von Modelldateien ▪ Ändern der Kalibrierdateien für die Intensität ▪ Ändern der Verifizierungsstandards

Systemvoraussetzungen

Raman Data Library ist ein 64-Bit Microsoft Windows-Programm, das mit Microsoft Windows™ 10 Professional läuft.

Raman Data Library – Core

Betriebssystem

Microsoft Windows 10 (Professional 64-Bit)

Hardware

- Prozessortyp: Intel Core i5 oder äquivalenter Prozessor
- Hauptspeicher (RAM): 16 GB
- Festplattenplatz: 10 GB oder mehr, je nach Datenbankgröße
- Bildschirmgröße (Desktops): 24" oder mehr mit einer Auflösung von 1920 x 1080 oder höher und geeigneten Einstellungen zur Displayskalierung
- Bildschirmgröße (Laptops): 13" oder mehr mit einer Auflösung von 1920 x 1080 oder höher und geeigneten Einstellungen zur Displayskalierung

Microsoft .NET Framework Version 4.7.2 ist ebenfalls erforderlich.

Raman Data Library – cGxP-Version

Betriebssystem

Microsoft Windows 10 (Professional 64-Bit)

Hardware

- Prozessortyp: Intel Core i5 oder äquivalenter Prozessor
- Hauptspeicher (RAM): 16 GB
- Festplattenplatz: 10 GB oder mehr, je nach Datenbankgröße
- Bildschirmgröße (Desktops): 24" oder mehr mit einer Auflösung von 1920 x 1080 oder höher und geeigneten Einstellungen zur Displayskalierung
- Bildschirmgröße (Laptops): 13" oder mehr mit einer Auflösung von 1920 x 1080 oder höher und geeigneten Einstellungen zur Displayskalierung

Microsoft .NET Framework Version 4.7.2 ist ebenfalls erforderlich.

Spezifikationen

Kommunikation

Die Kommunikation mit Raman RunTime erfolgt über OPC UA. Zudem wird das HTTPS-Protokoll für die Übertragung bestimmter Dateien zwischen Raman RunTime und Raman Data Library, wie z. B. Modelldateien, verwendet.

Datenbank

Raman Data Library nutzt eine sichere eingebettete Datenbank. Die von einem Drittanbieter bereitgestellte Datenbank SQLite liefert ein mit allen Funktionen ausgestattetes RDBMS (Relational Database Management System).

Installation

Installation

Für die Installation und Konfiguration von Raman Data Library sind Administratorrechte erforderlich.

Ergänzende Dokumentation

Schnelleinstieg

KA01717C Raman Data Library Kurzanleitung

Betriebsanleitung

BA02367C Raman Data Library Benutzerbetriebsanleitung

BA02349C Raman Data Library Administratorbetriebsanleitung

Eingetragene Marken

- Microsoft™ ist entweder eine eingetragene Marke oder eine Marke der Microsoft Corporation in den Vereinigten Staaten, anderen Ländern oder beiden.
- Windows™ ist entweder eine eingetragene Marke oder eine Marke der Microsoft Corporation in den Vereinigten Staaten, anderen Ländern oder beiden.
- Alle übrigen in diesem Dokument aufgeführten Marken sind Eigentum ihrer jeweiligen Inhaber.

www.addresses.endress.com
