

Information technique

Raman data library

Stockage, gestion ainsi qu'analyse de spectres et collecte de données de plusieurs analyseurs entre laboratoire et cGxP



Domaine d'application

Raman data library, d'Endress+Hauser, est un logiciel conçu pour la gestion, la lecture et l'analyse de données spectrales de Rxn Raman ainsi que la création de rapports sur ces dernières. Raman data library complète le logiciel intégré Raman RunTime d'Endress+Hauser en permettant le stockage, la gestion ainsi que l'analyse de spectres et la collecte de données de plusieurs analyseurs entre laboratoire et cGxP.

Le logiciel Raman data library a été créé pour les utilisateurs qui ont besoin de visualiser les spectres Raman, les associer à des données de référence et créer des modèles de pic univariés. Les utilisateurs peuvent également exporter des données préparées pour la modélisation multivariée externe. En outre, le logiciel Raman data library a été créé pour les utilisateurs qui souhaitent collecter et stocker des spectres Raman conformément aux exigences de FDA 21 CFR partie 11, pour assurer la traçabilité durant la création et l'exécution de modèles analytiques basés sur Raman.

Principaux avantages

- **Fonctions de gestion des données** : regroupement des spectres et valeurs de référence, préparation des données avant la modélisation chimométrique, stockage de données consultables, intégrité des données
- **Fonctions d'analyse des données** : visualisation des spectres et analyse simple comme la tendance des pics et la modélisation
- **Option cGxP** : satisfait aux normes sectorielles pour la traçabilité, le stockage et l'archivage des données spectrales

Sommaire

Domaine d'application 4

Visualisation graphique du flux de travail suggéré avec
Raman data library 4

Cas d'utilisation 4

Versions 5

Raman data library – version de base 5

Raman data library – version cGxP 6

Exigences du système 8

Raman data library – version de base 8

Raman data library – version cGxP 8

Spécifications 9

Communication 9

Base de données 9

Installation 9

Installation 9

Documentation complémentaire 9

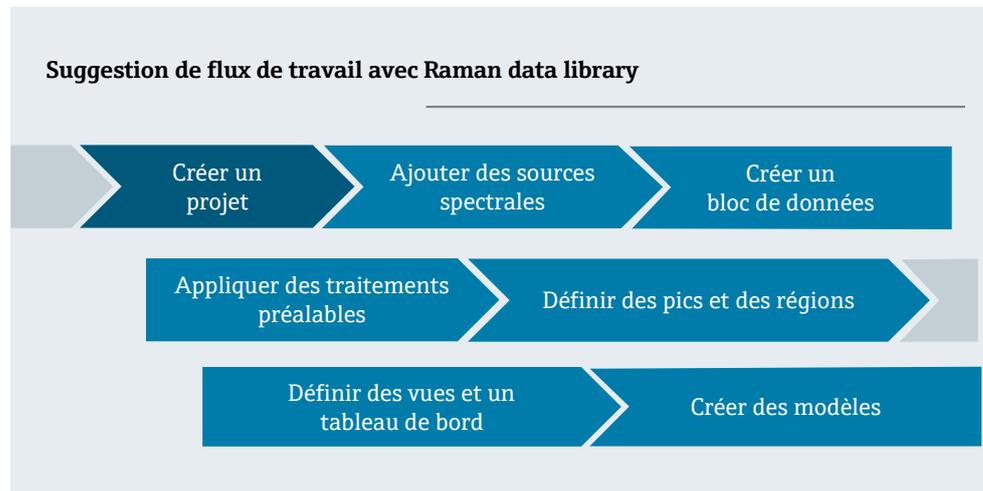
Démarrage rapide 9

Manuel de mise en service 9

Marques déposées 9

Domaine d'application

Visualisation graphique du flux de travail suggéré avec Raman data library



Cas d'utilisation

Ce logiciel est conçu pour répondre aux besoins des cas d'utilisation communs à plusieurs secteurs :

- Importation de données en temps réel depuis Raman RunTime
- Gestion des données axée sur les projets
- Regroupement des données pour la préparation de la modélisation
- Visualisation des changements des spectres
- Analyse des pics et des régions ainsi que modélisation univariée
- Exportation vers des programmes chimométriques

Utilisation de cGxp : collecter, afficher, stocker, restaurer et archiver des données conformément à FDA 21 CFR partie 11 :

- Traçabilité des opérations effectuées par l'utilisateur et intégrité des données
- Visualiser et stocker des données provenant de plusieurs analyseurs et sondes
- Recherche et restauration de données, rapports (de base) pour étayer les audits

Versions

Raman data library – version de base

Commande de l'analyseur Rxn Raman

- La section de commande Rxn de Raman data library ressemble à l'interface utilisateur de Raman RunTime.
- L'interface de la section de commande Rxn réagit à la configuration des analyseurs, en adaptant la présentation pour une seule voie, plusieurs voies et des analyseurs hybrides.
- Il est possible de raccorder plusieurs analyseurs pour en assurer la surveillance et la commande depuis un point central.
- Raman data library offre une interface pour Raman RunTime dans laquelle les analyseurs Rxn Raman peuvent être étalonnés et vérifiés.
- Les rapports d'étalonnage de l'analyseur peuvent être consultés et des fichiers de modèle peuvent être envoyés à l'analyseur.
- La fonction de commande Rxn facilite le déclenchement et la gestion de la collecte de données Raman.

Collecte de données

- Sans aucune entrée de l'utilisateur, Raman data library peut afficher des spectres et des résultats de modèle provenant de Raman RunTime ainsi que tous ses prédicteurs pris en charge.
- Raman data library se connecte à Raman RunTime via OPC UA.
- Raman data library fournit des fonctions de stockage et d'archivage de données cryptées et consultables.

Champs de données

- Les champs de données sont des informations qualitatives et quantitatives reliées à un spectre.
- Pour l'analyse quantitative, l'utilisateur peut spécifier la précision, les unités, les données de méthode primaire, etc.
- Des alias peuvent être ajoutés afin de réduire l'erreur utilisateur pour les importations, par exemple, *Glucose* = *glucose*.
- Les noms des champs de données suivent les modèles jusqu'au bout.

Prétraitements

- Il est possible d'appliquer des méthodes de correction de ligne de base, une normalisation ainsi que d'autres prétraitements de spectre.
- L'utilisateur définit la séquence des prétraitements.

Pics, régions et modèles de pic

- Il est possible d'établir pour les pics des tendances de hauteur, zone ou centre.
- Les pics peuvent être affectés aux champs de données et modélisés.
- Des régions peuvent être sélectionnées pour l'analyse en composantes principales (PCA) ou l'analyse par résolution de courbes multivariées (MCR), ce qui permet d'obtenir un aperçu des valeurs aberrantes ou des tendances des spectres sans se concentrer sur des pics spécifiques. Il s'agit d'une approche "sans modèle" pour l'analyse des spectres.

Vues

- Les vues définissent les graphes les plus pertinents pour chaque utilisateur ou cas d'utilisation.
- Il existe plusieurs options pour les graphes, y compris pour les blocs de données simples.
- Les options des graphes de tendance comprennent des prédictions de modèle provenant de RunTime, des prédictions de modèle de pic de Raman data library, des données de référence mesurées, etc. pour tous les champs de données et les pics sélectionnés.

Tableaux de bord

- Un tableau de bord est un ensemble de graphes/vues.
- Les utilisateurs peuvent créer des onglets de tableau de bord favoris qui affichent des quadrants de 1 à 4 graphes.
- Le tableau de bord est conçu comme vue principale pour l'analyse de routine en un seul coup d'œil.

Modèles

- Les modèles conservent tous les prétraitements, analyses ainsi que réglages des vues et peuvent être appliqués aux nouveaux blocs de données.
- Si des prétraitements, une analyse des pics et des vues sont enregistrés dans un modèle, l'utilisateur peut passer directement de la création d'un bloc de données (nouveau lot Raman RunTime ou importation SPC) au tableau de bord pour visualiser les résultats.

Analyse des blocs de données

- Les utilisateurs peuvent importer des spectres ainsi que des données de référence et analyser les blocs de données créés via un flux de travail réparti sur des onglets.
- Une analyse peut être effectuée en temps réel, ou les données peuvent être exportées en vue d'une analyse post-traitement.
- Les blocs de données peuvent être combinés pour l'analyse ou la modélisation dans Raman data library, ou pour l'exportation vers un logiciel externe d'analyse de données multivariées (MVDA).
- Les exportations génériques (.csv et .spc), GRAMS IQ™ (.cfl), et SIMCA® (.usp) sont prises en charge.
- Tous les spectres peuvent être exportés sans prétraitements (par défaut) ou avec des prétraitements.
- Les tendances basées sur le temps ne sont pas applicables à tous les blocs de données.
- Les valeurs aberrantes peuvent être sélectionnées dans la case et les graphes des tendances.

Résolution de courbes multivariées (MCR)

- La MCR couvre une large gamme d'algorithmes conçus pour l'analyse des mélanges en exprimant les données d'origine sous forme d'estimation des informations relatives aux composantes pures.
- Les spectres et les tendances calculés pour les composantes pures peuvent être affichés dans Raman data library.

Analyse en composantes principales (PCA)

- La PCA est utilisée pour réduire le nombre de variables des grands blocs de données tout en préservant autant d'informations que possible.
- Dans Raman data library, la fonction primaire de l'ACP est de permettre à l'utilisateur d'observer des tendances dans les blocs de données qui peuvent passer inaperçues lors de l'examen des graphes des spectres ou des tendances individuelles de pic. Elle peut également être utilisée pour identifier et exclure les valeurs aberrantes.
- *Les modèles de PCA ne peuvent pas être enregistrés dans un modèle Raman data library (pour la mise en œuvre dans Raman RunTime), mais l'analyse de PCA est enregistrée dans les modèles de bloc de données.*

Raman data library – version cGxP

Le logiciel Raman data library peut être conforme aux exigences de FDA 21 CFR partie 11 lorsqu'il est installé avec le programme d'installation cGxP et qualifié via IQ/OQ (exécuté par Endress+Hauser) et PQ (exécuté par le client). Lorsqu'il est installé en mode cGxP, le logiciel facilite la collecte, le stockage et la gestion des spectres Raman de sorte que les spectres puissent :

- Agir comme des blocs de données d'étalonnage pour l'élaboration de modèles Raman quantitatifs dans le cadre d'une solution analytique validée, ou
- Agir comme une entrée de données dans des modèles validés utilisés pour les prédictions des propriétés de process ou d'échantillons.

Raman data library permet de stocker des données spectrales dans une base de données sécurisée, d'effectuer des calculs sur les données spectrales et d'afficher ces dernières ainsi que les métadonnées associées.

- Toutes les fonctionnalités disponibles dans la version standard sont également disponibles dans la version cGxP.
- Pour la version cGxP, toutes les opérations sont traçables de sorte que la connexion, la déconnexion et la gestion des utilisateurs sont nécessaires.

Pour passer de la version de base de Raman data library à la version cGxP, le logiciel doit être réinstallé.

Accès utilisateur basé sur des rôles

Raman data library cGxP fait appel à la gestion native des utilisateurs. Un administrateur avec le rôle Users Manager peut créer et gérer des utilisateurs, y compris leur affecter des rôles. L'authentification des données d'identification des utilisateurs peut être liée à Microsoft Active Directory.

Un utilisateur peut obtenir plusieurs rôles, et la fonctionnalité de rôle utilisateur offre la possibilité de mettre en œuvre des groupes d'utilisateurs basés sur des sites.

Rôle	Opérations autorisées
Data Remover	Supprimer des blocs de données, des spectres, des champs de données et des projets
Data Operator	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Importer, exporter et modifier des données ▪ Rechercher des spectres ▪ Appliquer et exporter des modèles ▪ Ajouter des commentaires
Data Approver	Valider des blocs de données
System Settings Manager	Modifier les paramètres système
Spectral Sources Manager	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Ajouter et modifier des sources spectrales ▪ Redémarrer et arrêter un analyseur
Projects Manager	Ajouter et modifier des projets
Users Manager	Ajouter, modifier et désactiver des utilisateurs
Analyzer Calibrator	Étalonner un analyseur Rxn Raman
Analyzer Verifier	Vérifier un analyseur Rxn Raman
Analyzer Operator	Démarrer, arrêter et interrompre les acquisitions de blocs de données
Analyzer Collection Settings Manager	Modifier les paramètres d'acquisition de blocs de données
Analyzer Settings Manager	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Ajouter et modifier des fichiers de modèle ▪ Modifier les fichiers d'étalonnage d'intensité ▪ Modifier les normes de vérification

Exigences du système

Raman data library est un logiciel pour Microsoft Windows 64 bits qui fonctionne avec Microsoft Windows™ 10 Professional.

Raman data library – version de base

Système d'exploitation

Microsoft Windows 10 (Professional 64 bits)

Hardware

- Type de processeur : processeur Intel Core i5 ou équivalent
- Mémoire principale (RAM) : 16 Go
- Capacité du disque dur : 10 Go ou plus, selon la taille de la base de données
- Taille de l'écran (ordinateurs de bureau) : 24" ou plus avec une résolution de 1920 x 1080 ou plus, et réglages de mise à l'échelle de l'affichage appropriés
- Taille de l'écran (ordinateurs portables) : 13" ou plus avec une résolution de 1920 x 1080 ou plus, et réglages de mise à l'échelle de l'affichage appropriés

La version Microsoft .NET Framework 4.7.2 est également requise.

Raman data library – version cGxP

Système d'exploitation

Microsoft Windows 10 (Professional 64 bits)

Hardware

- Type de processeur : processeur Intel Core i5 ou équivalent
- Mémoire principale (RAM) : 16 Go
- Capacité du disque dur : 10 Go ou plus, selon la taille de la base de données
- Taille de l'écran (ordinateurs de bureau) : 24" ou plus avec une résolution de 1920 x 1080 ou plus, et réglages de mise à l'échelle de l'affichage appropriés
- Taille de l'écran (ordinateurs portables) : 13" ou plus avec une résolution de 1920 x 1080 ou plus, et réglages de mise à l'échelle de l'affichage appropriés

La version Microsoft .NET Framework 4.7.2 est également requise.

Spécifications

Communication

La communication avec Raman RunTime est assurée via OPC UA. Le protocole HTTPS est également utilisé pour transférer certains fichiers entre Raman RunTime et Raman data library, par exemple des fichiers de modèle.

Base de données

Raman data library utilise une base de données sécurisée intégrée. La base de données SQLite, fournie par un tiers, est un système de gestion de base de données relationnelle (SGBDR) complet.

Installation

Installation

Les privilèges d'administrateur sont nécessaires pour l'installation et configuration de Raman data library.

Documentation complémentaire

Démarrage rapide

Instructions condensées Raman data library KA01717C

Manuel de mise en service

Manuel utilisateur Raman data library BA02367C

Manuel administrateur Raman data library BA02349C

Marques déposées

- Microsoft™ est une marque déposée ou une marque de Microsoft Corporation aux États-Unis, dans d'autres pays ou les deux.
- Windows™ est une marque déposée ou une marque de Microsoft Corporation aux États-Unis, dans d'autres pays ou les deux.
- Toutes les autres marques répertoriées dans ce document sont la propriété de leur propriétaire respectif.

www.addresses.endress.com
