

Informazioni tecniche

Raman data library

Archiviazione, organizzazione, analisi e raccolta dei dati spettrali di diversi analizzatori dal laboratorio a cGxP



Applicazione

La Raman data library di Endress+Hauser è stata sviluppata per organizzare, leggere, analizzare e riportare i dati spettrali di Raman Rxn. La Raman data library è di complemento all'incorporato Raman RunTime di Endress+Hauser, fornendo archiviazione, organizzazione, analisi e raccolta per i dati spettrali di diversi analizzatori, dal laboratorio a cGxp.

La Raman data library è stata creata per gli utenti, che hanno bisogno di visualizzare lo spettro di Raman, associarlo con i dati di riferimento e creare modelli di picco uniformi. Gli utenti possono anche esportare dati preparati per la modellazione multivariata esterna. Inoltre, la Raman data library è stata creata per gli utenti, che devono raccogliere e archiviare spettri di Raman secondo i requisiti FDA CFR 21 parte 11 per la tracciabilità, durante la creazione e l'esecuzione di modelli analitici basati su Raman.

Vantaggi

- **Caratteristiche di organizzazione dei dati:** Abbinamento degli spettri ai valori di riferimento, preparazione dei dati prima della modellazione chemiometrica, archiviazione dei dati ricercabili, integrità dei dati
- **Caratteristiche di analisi dei dati:** Visualizzazione degli spettri e analisi semplici come andamento del picco e modellazione
- **Opzione cGxP:** Rispetta gli standard industriali per la tracciabilità, memorizzazione e archiviazione dei dati spettrali

Indice

Applicazione 4

- Visualizzazione grafica del flusso di lavoro consigliato per i dati della libreria Raman 4
- Casi di utilizzo 4

Versioni..... 5

- Raman data library– versione core 5
- Raman data library– versione cGxp 6

Requisiti di sistema 8

- Raman data library– core..... 8
- Raman data library– versione cGxp 8

Specifiche..... 9

- Comunicazione..... 9
- Database 9

Installazione..... 9

- Installazione 9

Documentazione supplementare 9

- Avvio rapido 9
- Istruzioni di funzionamento 9

Marchi registrati..... 9

Applicazione

Visualizzazione grafica del flusso di lavoro consigliato per i dati della libreria Raman



Casi di utilizzo

Questo software è stato sviluppato per soddisfare le esigenze di casi d'uso comuni a molte industrie:

- Importazione di dati in tempo reale da Raman Runtime
- Organizzazione dei dati orientata al progetto
- Abbinamento dei dati per preparare la modellazione
- Visualizzare delle modifiche spettrali
- Analisi di picco e area e modellazione uniforme
- Esportazione in programmi chemiometrici

Uso di cGxP: Raccogliere, visualizzare, memorizzare, richiamare e archiviare i dati per i requisiti FDA CFR 21 parte 11:

- Tracciabilità dell'azione dell'utente e integrità dei dati
- Visualizzare e memorizzare i dati da diversi analizzatori e sonde
- Ricerca, recupero e report (di base) dei dati per il supporto di audit

Versioni

Raman data library – versione core

Controllo dell'analizzatore Raman Rxn

- L'area di controllo Rxn della Raman data library assomiglia all'interfaccia utente per Raman Runtime.
- L'interfaccia per l'area di controllo Rxn è responsabile della configurazione dell'analizzatore, differenziando la presentazione di un canale singolo, di vari canali e analizzatori ibridi.
- Diversi analizzatori possono essere collegati, monitorati e controllati da una postazione centrale.
- La Raman data library fornisce un'interfaccia per Raman Runtime, che consente di tarare e verificare gli analizzatori Raman Rxn.
- I report di taratura dell'analizzatore sono accessibili e file di modello possono essere inviati all'analizzatore.
- La funzione di controllo Rxn facilita l'iniziazione e il controllo della raccolta dei dati Raman.

Raccolta dati

- Senza alcun inserimento dell'utente, la Raman data library può visualizzare gli spettri e i risultati del modello da Raman Runtime e da tutti i relativi predittori supportati.
- La Raman data library si collega a Raman Runtime mediante OPC UA.
- La Raman data library fornisce archiviazione e memorizzazione di dati crittografati e ricercabili.

Campi di dati

- I campi di dati sono informazioni qualitative e quantitative etichettate in uno spettro.
- Per l'analisi quantitativa, l'utente può specificare precisione, unità, dettagli del metodo primario, ecc.
- Gli alias possono essere aggiunti per ridurre gli errori dell'utente nell'importazione, ad es. Glucosio = glucosio.
- I nomi di Data Field seguono sempre i modelli.

Pretrattamenti

- Si possono applicare metodi di correzione della linea di base, normalizzazione e altri pretrattamenti spettrali.
- L'utente definisce la sequenza dei pretrattamenti.

Picchi, aree e modelli di picco

- I picchi possono essere visualizzati per altezza, area o centro.
- I picchi possono essere assegnati ai campi di dati e modellati.
- Le aree possono essere selezionate per l'analisi dei componenti principali (PCA) o la risoluzione di curve multivariate (MCR), fornendo informazioni su anomalie o andamenti degli spettri senza concentrarsi su picchi specifici. Questo è un approccio "senza modello" per analizzare gli spettri.

Visualizzazioni

- Le visualizzazioni definiscono i grafici più rilevanti per ogni utente o per ogni caso di utilizzo.
- Molte sono le opzioni per i grafici, anche per semplici set di dati.
- Le opzioni dei tracciati di tendenza includono previsioni del modello da Runtime, previsioni del modello di picco per la Raman data library, dati di riferimento misurati e altro ancora per tutte le selezioni di campi dati e picchi.

Dashboard

- Una dashboard è una collezione di tracciati/visualizzazioni.
- Gli utenti possono creare schede di dashboard preferite, che visualizzano tracciati con da 1 a 4 quadranti.
- Dashboard è destinato ad essere la vista principale per analisi di routine in un colpo d'occhio.

Modelli

- I modelli ricordano tutti i pretrattamenti, l'analisi e le impostazioni di visualizzazione e possono essere applicati a nuovi set di dati.
- Se pretrattamenti, analisi dei picchi e visualizzazioni sono salvati in un modello, l'utente può andare direttamente dalla creazione del set di dati (importazione di nuovo batch di Raman RunTime o CSP) a Dashboard per visualizzare i risultati.

Analisi del set di dati

- Gli utenti possono importare i dati spettrali e di riferimento e possono analizzare i set di dati creati attraverso un flusso di lavoro a schede.
- L'analisi può essere eseguita in tempo reale o i dati possono essere esportati per un'analisi post-trattamento.
- I set di dati possono essere combinati per l'analisi o la modellazione all'interno della Raman data library o per esportarli a un software di analisi multivariata dei dati esterna (MVDA).
- Sono supportate esportazioni generiche (.csv e .spc), GRAMMI IQ™ (.cfl) e SIMCA® (.usp).
- Tutti gli spettri possono essere esportati senza pretrattamenti (predefinito) o con pretrattamenti.
- Le tendenze in funzione del tempo non sono applicabili per tutti i set di dati.
- I valori anomali possono essere selezionati da box e tracciati di tendenza.

Risoluzione multivariata della curva (MCR)

- MCR copre un'ampia gamma di algoritmi sviluppati per l'analisi della miscela e mostra i dati originali come stima di informazioni su componenti puri.
- Gli spettri e le tendenze dei componenti puri calcolati possono essere visualizzati nella Raman data library.

Analisi dei componenti principali (PCA)

- PCA è utilizzata per ridurre il numero di variabili di un ampio set di dati, conservando tuttavia il maggior numero possibile di informazioni.
- Nella Raman data library, la funzione primaria di PCA per l'utente è l'osservazione di tendenze non evidenti nei set di dati, visualizzando i tracciati degli spettri o le tendenze di singoli picchi. Può essere utilizzata anche per identificare ed escludere anomalie.
- *I modelli di PCA non possono essere salvati in un modello della Raman data library (per l'implementazione in Raman Runtime), ma l'analisi PCA è salvata come parte di un modello di set di dati.*

Raman data library – versione cGxp

La Raman data library rispetta FDA CFR 21 parte 11, se installata con cGxP Setup installer e qualificata mediante IQ/OQ (eseguito da Endress+Hauser) e PQ (eseguito dal cliente). Quando installato in modalità cGxp, il programma semplifica la raccolta, l'archiviazione e l'organizzazione di spettri Raman in modo che gli spettri possano:

- Agire come set di dati di taratura per lo sviluppo quantitativo del modello Raman nell'ambito di una soluzione analitica validata o
- Agire come input di dati in modelli validati utilizzati per le previsioni delle proprietà del processo o del campione.

La Raman data library consente di memorizzare i dati spettrali in un database sicuro, eseguendo calcoli sui dati spettrali e visualizzando i dati spettrali con i metadati associati.

- Tutte le caratteristiche disponibili nella versione regolare sono disponibili in quella cGxp.
- Per la versione cGxp, tutte le azioni sono tracciabili, ad es. accesso o disconnessione, ed è richiesta la gestione degli utenti.

Per passare dal sistema della Raman data library alla versione cGxP, si deve reinstallare il programma.

Accesso utente in base al ruolo

La Raman data library cGxp dispone di una gestione utente nativa. Un amministratore con ruolo Users Manager può creare e gestire gli utenti, assegnando anche i ruoli. L'autenticazione delle credenziali dell'utente può essere associata in Microsoft Active Directory.

Un utente può ricevere più ruoli e la funzionalità basata sul ruolo utente offre flessibilità per implementare gruppi di utenti in base al luogo.

Ruolo	Azioni consentite
Data Remover	Rimuovere i set di dati, gli spettri, i campi dati e i progetti
Data Operator	<ul style="list-style-type: none"> ■ Importazione, esportazione e modifica dei dati ■ Ricerca degli spettri ■ Applicare ed esportare modelli ■ Aggiungere commenti
Data Approver	Approvare i set di dati
System Settings Manager	Modificare le impostazioni del sistema
Spectral Sources Manager	<ul style="list-style-type: none"> ■ Aggiungere e modificare le sorgenti spettrali ■ Riavviare e disattivare un analizzatore
Projects Manager	Aggiungere e modificare progetti
Users Manager	Aggiungere, modificare e disabilitare gli utenti
Analyzer Calibrator	Tarare un analizzatore Raman Rxn
Analyzer Verifier	Verificare un analizzatore Raman Rxn
Analyzer Operator	Avviare, arrestare e mettere in pausa le acquisizioni di dati
Analyzer Collection Settings Manager	Modificare le impostazioni di acquisizione dei set di dati
Analyzer Settings Manager	<ul style="list-style-type: none"> ■ Aggiungere e modificare i file di modello ■ Modificare i file di taratura dell'intensità ■ Modificare gli standard di verifica

Requisiti di sistema

La Raman data library è un programma Microsoft Windows a 64 bit, che funziona con Microsoft Windows™ 10 Professional.

Raman data library – core

Sistema operativo

Microsoft Windows 10 (Professional a 64 bit)

Hardware

- Tipo di processore: Processore Intel Core i5 o equivalente
- Memoria principale (RAM): 16 GB
- Capacità del disco rigido: 10 GB o superiore, a seconda delle dimensioni del database
- Dimensioni dello schermo (desktop): 24" o più con risoluzione 1920x1080 o superiore e adatte impostazioni di ridimensionamento del display
- Dimensioni dello schermo (laptop): 13" o più con risoluzione 1920x1080 o superiore e adatte impostazioni di ridimensionamento del display

È richiesto anche Microsoft .NET Framework versione 4.7.2.

Raman data library – versione cGxp

Sistema operativo

Microsoft Windows 10 (Professional a 64 bit)

Hardware

- Tipo di processore: Processore Intel Core i5 o equivalente
- Memoria principale (RAM): 16 GB
- Capacità del disco rigido: 10 GB o superiore, a seconda delle dimensioni del database
- Dimensioni dello schermo (desktop): 24" o più con risoluzione 1920x1080 o superiore e adatte impostazioni di ridimensionamento del display
- Dimensioni dello schermo (laptop): 13" o più con risoluzione 1920x1080 o superiore e adatte impostazioni di ridimensionamento del display

È richiesto anche Microsoft .NET Framework versione 4.7.2.

Specifiche

Comunicazione

La comunicazione con Raman Runtime è stabilita mediante OPC UA. Inoltre, è utilizzato il protocollo HTTPS per trasferire alcuni file tra Raman RunTime e la Raman data library, ad es. file di modello.

Database

La Raman data library utilizza un database sicuro incorporato. Il database SQLite, fornito da terzi, offre un sistema di gestione del database relazionale e completo di funzionalità (RDBMS).

Installazione

Installazione

Sono richiesti privilegi di amministratore per installare e configurare la Raman data library.

Documentazione supplementare

Avvio rapido

KA01717C Raman data library Istruzioni di funzionamento brevi

Istruzioni di funzionamento

BA02367C Utente della Raman data library Istruzioni di funzionamento

BA02349C Amministratore della Raman data library Istruzioni di funzionamento

Marchi registrati

- Microsoft™ è un marchio o un marchio registrato di Microsoft Corporation negli Stati Uniti, altri paesi o in entrambi.
- Windows™ è un marchio o un marchio registrato di Microsoft Corporation negli Stati Uniti, altri paesi o in entrambi.
- Tutti gli altri marchi elencati nel presente documento sono di proprietà dei rispettivi proprietari.

www.endress.com
