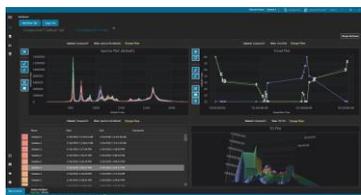


# 技術仕様書

## Raman data library

スペクトルの保存、整理、分析、マルチアナライザのデータ収集により、ラボから cGxP への移行を支援



### アプリケーション

Endress+Hauser の Raman data library は、Raman Rxn スペクトルデータの整理、読み取り、分析、レポート作成のために設計されたソフトウェアです。Raman data library は、Endress+Hauser の Raman RunTime 組込みソフトウェアを補完するものであり、スペクトルの保存、整理、分析、マルチアナライザのデータ収集機能を提供し、ラボから cGxP への移行を支援します。

Raman data library は、ラマンスペクトルを視覚化し、それをリファレンスデータに関連付けて単変量ピークモデルを作成する必要があるユーザー向けに作成されました。また、外部の多変量モデリング用に作成されたデータをエクスポートすることもできます。さらに、Raman data library は、ラマン分光に基づく分析モデルの作成および実行時に、FDA 21 CFR part 11 のトレーサビリティ要件に従ってラマンスペクトルを収集および保存する必要があるユーザーにも対応するよう開発されました。

### 特長

- **データ整理機能**：スペクトルとリファレンス値のマッチング、ケモメトリクスモデリング前のデータ準備、検索可能なデータ保存、データの整合性確保
- **データ分析機能**：スペクトルの視覚化と、ピークトレンドやモデリングなどの簡易分析
- **cGxP オプション**：スペクトルデータのトレーサビリティ、保存、アーカイブ保存に関する業界標準に適合



## 目次

### アプリケーション ..... 4

図： Raman data library の推奨ワークフロー ..... 4

使用事例 ..... 4

### バージョン ..... 5

Raman data library – コアバージョン ..... 5

Raman data library – cGxP バージョン ..... 6

### システム要件 ..... 7

Raman data library – コアバージョン ..... 7

Raman data library – cGxP バージョン ..... 7

### 仕様 ..... 8

通信 ..... 8

データベース ..... 8

### インストール ..... 8

インストール ..... 8

### 補足資料 ..... 8

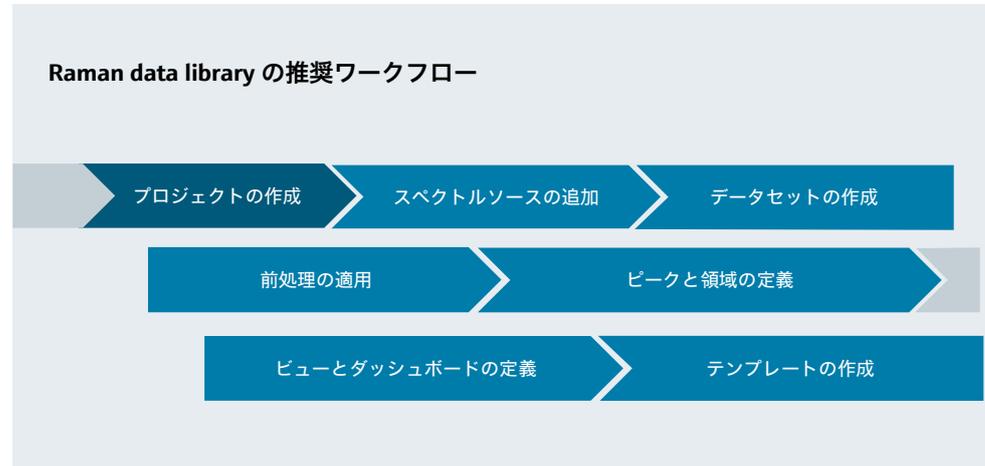
クイックスタートガイド ..... 8

取扱説明書 ..... 8

### 登録商標 ..... 8

## アプリケーション

図：  
Raman data library の  
推奨ワークフロー



### 使用事例

このソフトウェアは、複数の産業に共通する使用事例のニーズに適合するように設計されています。

- Raman RunTime からのリアルタイムのデータインポート
- プロジェクト指向のデータ整理機能
- データマッチングによるモデリング準備
- スペクトル変化の視覚化
- ピーク/領域分析と単変量モデリング
- ケモメトリクスプログラムへのエクスポート

**cGxP バージョンの用途**：FDA 21 CFR Part 11 の要件に準拠してデータを収集、表示、保存、取得、アーカイブ保存します。

- ユーザーアクションのトレーサビリティとデータの整合性を確保
- 複数のアナライザ/プローブのデータを表示および保存
- データの検索、取得、および（基本）レポート作成による監査サポート

## バージョン

### Raman data library – コアバージョン

#### Raman Rxn アナライザの管理

- Raman data library の Rxn Control (Rxn の管理) エリアは、Raman RunTime のユーザインタフェースに似ています。
- Rxn Control (Rxn の管理) エリアのインタフェースはアナライザ構成に対応しており、シングルチャンネル、マルチチャンネル、Hybrid アナライザで外観が異なります。
- 中央の 1 ヶ所の拠点から複数のアナライザを接続して監視および制御できます。
- Raman data library は Raman RunTime 用のインタフェースを提供し、そのインタフェースから Raman Rxn アナライザの校正と検証を実行できます。
- アナライザの校正レポートにアクセスすることや、モデルファイルをアナライザに送信することができます。
- Rxn Control (Rxn の管理) 機能により、ラマンデータ収集の実行と管理を簡素化できます。

#### データ収集

- Raman data library では、ユーザー入力なしで Raman RunTime およびそれがサポートするすべてのプレディクタのスペクトルとモデル結果を表示できます。
- Raman data library は、OPC UA を使用して Raman RunTime に接続します。
- Raman data library は、暗号化され、検索が可能なデータ保存とアーカイブを提供します。

#### データフィールド

- データフィールドは、スペクトルにタグ付けされた定性的/定量的情報です。
- 定量分析の場合、ユーザーは精度、単位、主要なメソッドの詳細などを指定できます。
- 別名を追加して、インポートにおけるユーザーエラーを低減できます (例: Glucose = glucose)。
- データフィールド名はすべてモデルに準拠します。

#### 前処理

- ベースライン補正メソッド、正規化、およびその他のスペクトル前処理を適用できます。
- ユーザーは前処理のシーケンスを定義します。

#### ピーク、領域、ピークモデル

- ピークは、高さ、面積、または中心に基づいたトレンドを示すことができます。
- ピークをデータフィールドに割り当ててモデルを作成できます。
- 主成分分析 (PCA) または多変量曲線分解 (MCR) 分析用に領域を選択できるため、特定のピークに注目しなくても異常値やスペクトルトレンドを適切に把握できます。これは、スペクトル分析のための「モデルなし」のアプローチです。

#### ビュー

- ビューは、各ユーザーまたはユースケースに最も関連性の高いプロットを定義します。
- 単純なデータセットの場合でも、プロットには多数のオプションがあります。
- トレンドプロットオプションには、すべてのデータフィールドとピークに関する RunTime のモデル予測、Raman data library のピークモデル予測、測定されたりファレンスデータなどが含まれます。

#### ダッシュボード

- ダッシュボードはプロット/ビューのコレクションです。
- ユーザーは、1~4 つのプロット象限を表示する最適なダッシュボードタブを作成できます。
- ダッシュボードは、一目で確認できるルーチン分析用のメイン画面となるように作られています。

#### テンプレート

- テンプレートには、すべての前処理、分析、ビューの設定が記憶されており、新しいデータセットに適用することができます。
- 前処理、ピーク分析、ビューがテンプレートに保存されている場合、データセットの作成 (新しい Raman RunTime バッチまたは SPC インポート) からダッシュボードに直接移動して結果を表示できます。

#### データセット分析

- ユーザーはスペクトルとリファレンスデータをインポートし、タブ付きワークフローを使用して作成されたデータセットを分析できます。
- リアルタイムで分析することも、データをエクスポートして処理後に分析することもできます。

- データセットを組み合わせ、Raman data library 内で分析やモデリングを行うことや、外部の多変量データ解析 (MVDA) ソフトウェアにエクスポートすることができます。
- 汎用エクスポート (.csv および .spc) 、GRAMS IQ™ (.cfl) 、および SIMCA® (.usp) がサポートされています。
- すべてのスペクトルは、前処理なし (初期設定) または前処理ありでエクスポートできます。
- 時間ベースのトレンドについては、一部のデータセットには適用できません。
- 異常値は、ボックスプロットとトレンドプロットから選択できます。

#### 多変量曲線分解 (MCR)

- MCR は、元データを純粋成分情報の推定値として表すことにより、混合物分析用に設計されたさまざまなアルゴリズムに対応します。
- 計算された純粋成分スペクトルとトレンドを Raman data library 内に表示できます。

#### 主成分分析 (PCA)

- PCA は、可能な限り多くの情報を保持しながら、大規模データセットの変数の数を減らすために使用されます。
- Raman data library における PCA の主要機能は、スペクトルプロットや個々のピークトレンドを確認するだけではわかりにくいデータセットのトレンドを監視することです。また、異常値を特定して除外するためにも使用できます。
- PCA モデルは Raman data library モデル (Raman RunTime での実装) には保存できませんが、PCA 分析はデータセットテンプレートの一部として保存されます。

### Raman data library – cGxP バージョン

Raman data library は、cGxP セットアップインストーラを使用してインストールし、IQ/OQ (Endress+Hauser が実施) および PQ (ユーザーが実施) により適格性評価を行うことで、FDA 21 CFR Part 11 に準拠させることができます。cGxP モードでインストールすると、本プログラムによりラマンスペクトルの収集、保存、整理を簡素化でき、スペクトルは以下のように機能します。

- 検証済み分析ソリューションの一部として、定量的ラマンモデル開発用のキャリブレーションデータセットとして機能します。あるいは
- プロセスまたはサンプルの特性予測に使用される検証済みモデルへの入力データとして機能します。

Raman data library を使用すると、スペクトルデータを安全なデータベースに保存して、スペクトルデータに関する計算を行い、スペクトルデータとそれに関連するメタデータを表示することができます。

- 標準 (コア) バージョンで利用可能なすべての機能は、cGxP バージョンでも利用できます。
- cGxP バージョンでは、すべてのアクションがトレーサブルなため、サインイン、サインアウト、およびユーザー管理が必要になります。

Raman data library をコアバージョンから cGxP バージョンに変更するには、プログラムを再インストールする必要があります。

#### 役割ベースのユーザーアクセス

Raman data library cGxP バージョンは、ネイティブ機能としてユーザー管理機能を備えます。Users Manager (ユーザー管理者) の役割を持つ管理者は、ユーザーの役割の割当てを含め、ユーザーを作成および管理できます。ユーザー認証情報は、Microsoft Active Directory に関連付けることができます。

ユーザーには所定の複数の役割を割り当てることができ、ユーザーの役割機能により、サイトベースのユーザーグループを柔軟に実装できます。

役割	許容されるアクション
Data Remover (データ削除者)	データセット、スペクトル、データフィールド、プロジェクトの削除
Data Operator (データオペレータ)	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ データのインポート、エクスポート、編集</li> <li>▪ スペクトルの検索</li> <li>▪ モデルの適用とエクスポート</li> <li>▪ コメントの追加</li> </ul>
Data Approver (データ承認者)	データセットの承認
System Settings Manager (システム設定管理者)	システム設定の変更

役割	許容されるアクション
Spectral Sources Manager (スペクトルソース管理者)	<ul style="list-style-type: none"> <li>■ スペクトルソースの追加と編集</li> <li>■ アナライザの再起動とシャットダウン</li> </ul>
Projects Manager (プロジェクト管理者)	プロジェクトの追加と編集
Users Manager (ユーザー管理者)	ユーザーの追加、編集、無効化
Analyzer Calibrator (アナライザ校正者)	Raman Rxn アナライザの校正
Analyzer Verifier (アナライザ検証者)	Raman Rxn アナライザの検証
Analyzer Operator (アナライザオペレータ)	データセット収集の開始、停止、中断
Analyzer Collection Settings Manager (アナライザ収集設定管理者)	データセット収集設定の変更
Analyzer Settings Manager (アナライザ設定管理者)	<ul style="list-style-type: none"> <li>■ モデルファイルの追加と変更</li> <li>■ 強度校正ファイルの変更</li> <li>■ 検証基準の変更</li> </ul>

## システム要件

Raman data library は、Microsoft Windows™ 10 Professional 上で動作する 64 ビット Microsoft Windows 用プログラムです。

### Raman data library – コアバージョン

#### オペレーティングシステム

Microsoft Windows 10 (Professional 64 ビット)

#### ハードウェア

- プロセッサタイプ：Intel Core i5 または同等のプロセッサ
- メインメモリ (RAM)：16 GB
- ハードディスク空き容量：10 GB 以上 (データベースサイズに応じて異なる)
- 画面サイズ (デスクトップ)：24" 以上、解像度 1920 x 1080 以上、および適切なディスプレイスケール設定
- 画面サイズ (ノートパソコン)：13" 以上、解像度 1920 x 1080 以上、および適切なディスプレイスケール設定

Microsoft .NET Framework バージョン 4.7.2 も必要です。

### Raman data library – cGxP バージョン

#### オペレーティングシステム

Microsoft Windows 10 (Professional 64 ビット)

#### ハードウェア

- プロセッサタイプ：Intel Core i5 または同等のプロセッサ
- メインメモリ (RAM)：16 GB
- ハードディスク空き容量：10 GB 以上 (データベースサイズに応じて異なる)
- 画面サイズ (デスクトップ)：24" 以上、解像度 1920 x 1080 以上、および適切なディスプレイスケール設定
- 画面サイズ (ノートパソコン)：13" 以上、解像度 1920 x 1080 以上、および適切なディスプレイスケール設定

Microsoft .NET Framework バージョン 4.7.2 も必要です。

---

## 仕様

---

### 通信

Raman RunTime との通信には OPC UA が使用されます。また、Raman RunTime と Raman data library 間で特定のファイル（モデルファイルなど）を転送するために、HTTPS プロトコルも使用されます。

---

### データベース

Raman data library は、安全な組み込みデータベースを使用します。データベース SQLite（他社製）は、フル機能搭載のリレーショナルデータベース管理システム（RDBMS）を提供します。

---

## インストール

---

### インストール

Raman data library のインストールと設定を行うには、管理者権限が必要です。

---

## 補足資料

---

### クイックスタートガイド

KA01717C Raman data library 簡易取扱説明書

---

### 取扱説明書

BA02367C Raman data library ユーザー用取扱説明書

BA02349C Raman data library 管理者用取扱説明書

---

## 登録商標

---

- Microsoft™ は、Microsoft Corporation の米国およびその他の国における登録商標または商標です。
- Windows™ は、Microsoft Corporation の米国およびその他の国における登録商標または商標です。
- 本書に記載されるその他すべての登録商標は、それぞれの所有者に帰属します。

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

---