

Informações técnicas

Raman Data Library

Armazenamento, organização e análise de espectros e coleta de dados de múltiplos analisadores do laboratório para o cGxP



Aplicação

O Raman Data Library da Endress+Hauser é um software projetado para organizar, ler, analisar e gerar relatórios sobre dados espectrais Raman Rxn. O Raman Data Library complementa o Raman RunTime embarcado da Endress+Hauser, fornecendo armazenamento, organização e análise de espectros e coleta de dados de múltiplos analisadores do laboratório para o cGxP.

O Raman Data Library foi criado para usuários que precisam visualizar espectros Raman, associá-los a dados de referência e criar modelos de pico univariados. Os usuários também podem exportar dados preparados para modelagem multivariada externa. Além disso, o O Raman Data Library foi criada para usuários que precisam coletar e armazenar espectros Raman de acordo com os requisitos da FDA 21 CFR parte 11 para rastreabilidade durante a criação e execução de modelos analíticos baseados em Raman.

Seus benefícios

- **Recursos de organização de dados:** Combina espectros com valores de referência, preparação de dados antes da modelagem quimiométrica, pesquisa no armazenamento de dados, integridade de dados
- **Recursos de análise de dados:** Visualização de espectros e análise simples, como tendências e modelagem de picos
- **Opção cGxP:** Atende às normas da indústria para rastreabilidade, armazenamento e arquivamento de dados espectrais

Sumário

Aplicação 4

Visualização gráfica do fluxo de trabalho sugerido do Raman Data Library	4
Casos de uso	4

Versões..... 5

Raman Data Library – Versão básica	5
Raman Data Library – versão cGxP	6

Requisitos de sistema 7

Raman Data Library – Básico.....	7
Raman Data Library – Versão cGxP	8

Especificações 9

Comunicação	9
Banco de dados	9

Instalação 9

Instalação	9
------------------	---

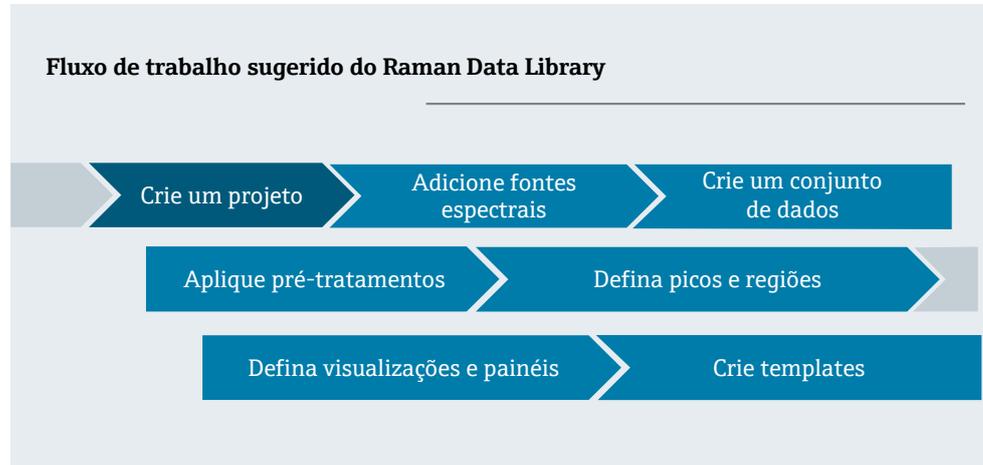
Documentação complementar 9

Início rápido.....	9
Instruções de operação.....	9

Marcas registradas 9

Aplicação

Visualização gráfica do fluxo de trabalho sugerido do Raman Data Library



Casos de uso

Esse software foi projetado para atender às necessidades de casos de uso comuns a diversas indústrias:

- Importação de dados em tempo real do Raman RunTime
- Organização de dados orientada aos projetos
- Compatibilidade de dados para preparação de modelos
- Visualização de alterações espectrais
- Análise de picos e regiões e modelagem univariada
- Exportação para programas quimiométricos

Uso de cGxP: Colete, visualize, armazene, recupere e archive dados de acordo com os requisitos da FDA 21 CFR Parte 11:

- Rastreabilidade das ações do usuário e integridade dos dados
- Visualize e armazene dados de múltiplos analisadores e sondas
- Pesquisa, recuperação e relatórios (básicos) de dados para suporte à auditoria

Versões

Raman Data Library – Versão básica

Controle de analisadores Raman Rxn

- A área de controle Rxn do Raman Data Library se assemelha à interface de usuário do Raman RunTime.
- A interface da área de controle Rxn responde à configuração do analisador, com apresentações diferentes para analisadores de canal único, multicanal e híbrido.
- Múltiplos analisadores podem ser conectados, monitorados e controlados a partir de um local central.
- O Raman Data Library fornece uma interface para o Raman Runtime, na qual os analisadores Raman Rxn podem ser calibrados e verificados.
- Os relatórios de calibração do analisador podem ser acessados e os arquivos de modelo podem ser enviados ao analisador.
- O recurso de controle Rxn facilita o início e o controle da coleta de dados Raman.

Coleta de dados

- Sem nenhuma entrada do usuário, o Raman Data Library pode exibir espectros e resultados de modelos do Raman RunTime e todos os seus preditores suportados.
- O Raman Data Library se conecta ao Raman RunTime via OPC UA.
- O Raman Data Library oferece armazenamento e arquivamento de dados criptografados com função de pesquisa.

Campos de dados

- Os campos de dados são informações qualitativas e quantitativas marcadas em um espectro.
- Para análises quantitativas, o usuário pode especificar precisão, unidades, detalhes do método primário, etc.
- Apelidos podem ser adicionados para reduzir o erro do usuário nas importações, por exemplo, Glucose = glucose.
- Os nomes dos campos de dados são usados com os modelos por todo o processo.

Pré-tratamentos

- Métodos de correção de linha de base, normalização e outros pré-tratamentos espectrais podem ser aplicados.
- O usuário define a sequência de pré-tratamentos.

Picos, regiões e modelos de picos

- Os picos podem ser classificados por altura, área ou centro.
- Os picos podem ser atribuídos a campos de dados e modelados.
- As regiões podem ser selecionadas para a análise de componentes principais (PCA) ou para a análise de resolução multivariada de curvas (MCR), fornecendo informações sobre discrepâncias ou tendências de espectros sem se concentrar em picos específicos. Essa é uma abordagem “sem modelo” para analisar espectros.

Visualizações

- As visualizações definem os gráficos mais relevantes para cada usuário ou caso de uso.
- Há muitas opções de gráficos, mesmo para conjuntos de dados simples.
- As opções de gráfico de tendência incluem previsões de modelo do RunTime, previsões de modelo de pico do Raman Data Library, dados de referência medidos e muito mais, para todos os campos de dados e seleções de pico.

Painéis

- Um painel é uma coleção de gráficos/visualizações.
- Os usuários podem criar abas preferidas no painel que exibem quadrantes com 1 a 4 gráficos.
- O painel deve ser a visualização principal para análises de rotina rápidas.

Templates

- Os templates lembram todas as configurações de pré-tratamento, análise e visualização e podem ser aplicados a novos conjuntos de dados.
- Se os pré-tratamentos, análises de pico e visualizações forem salvos em um template, o usuário poderá ir direto da criação do conjunto de dados (novo lote do Raman RunTime ou importação do SPC) para o painel para visualizar os resultados.

Análise do conjunto de dados

- Os usuários podem importar espectros e dados de referência e analisar os conjuntos de dados criados por meio de um fluxo de trabalho com abas.
- A análise pode ser feita em tempo real ou os dados podem ser exportados para análise pós-tratamento.
- Os conjuntos de dados podem ser combinados para análise ou modelagem no Raman Data Library, ou para exportação para um software externo de análise multivariada de dados (MVDA).
- Há suporte para exportações genéricas (.csv e .spc), GRAMS IQ™ (.cfl) e SIMCA® (.usp).
- Todos os espectros podem ser exportados sem pré-tratamentos (padrão) ou com pré-tratamentos.
- Tendências baseadas no tempo não são aplicáveis a todos os conjuntos de dados.
- Os valores atípicos podem ser selecionados nos gráficos boxplot e de tendência.

Resolução multivariada de curvas (MCR)

- A MCR abrange uma ampla variedade de algoritmos projetados para análise de mistura ao expressar os dados originais como uma estimativa de informações de componentes puros.
- Os espectros e as tendências de componentes puros calculados podem ser exibidos no Raman Data Library.

Análise de componentes principais (PCA)

- A PCA é usada para reduzir o número de variáveis de um conjunto de dados grande, preservando o máximo de informações possível.
- No Raman Data Library, a principal função da PCA é permitir que o usuário observe tendências em conjuntos de dados que podem não ser óbvias ao visualizar os gráficos de espectros ou as tendências de picos individuais. Ela também pode ser usada para identificar e excluir valores atípicos.
- *Os modelos de PCA não podem ser salvos em um modelo do Raman Data Library (para implementação no Raman RunTime), mas a análise de PCA é salva como parte de um modelo de conjunto de dados.*

Raman Data Library – versão cGxP

O Raman Data Library pode estar em conformidade com a norma FDA 21 CFR Parte 11 quando instalada com o instalador cGxP Setup e qualificada via IQ/OQ (executado pela Endress+Hauser) e PQ (executado pelo cliente). Quando instalado no modo cGxP, o programa facilita a coleta, armazenamento e organização dos espectros Raman, de modo que os espectros possam:

- Atuar como conjunto de dados de calibração para o desenvolvimento de modelos Raman quantitativos como parte de uma solução analítica validada, ou
- Atuar como entrada de dados em modelos validados usados para previsões de propriedades de processos ou amostras.

O Raman Data Library permite armazenar dados espectrais em um banco de dados seguro, realizar cálculos nos dados espectrais e exibir dados espectrais e seus metadados associados.

- Todos os recursos disponíveis na versão básica estão disponíveis na versão cGxP.
- Para a versão cGxP, todas as ações são rastreáveis, portanto é necessário realizar o login, logout e gerenciamento de usuários.

Para mudar da versão básica do Raman Data Library para a versão cGxP, o programa deve ser reinstalado.

Acesso do usuário baseado em funções

O Raman Data Library cGxP apresenta gerenciamento de usuários nativo. Um administrador com a função de Gestor de Usuários pode criar e gerenciar usuários, incluindo a atribuição de funções de usuário. A autenticação de credenciais do usuário pode ser vinculada ao Microsoft Active Directory.

Um usuário pode receber múltiplas funções, e a funcionalidade de função de usuário oferece flexibilidade para implementar grupos de usuários de acordo com cada local.

Papel	Ações permitidas
Removedor de dados	Remover conjuntos de dados, espectros, campos de dados e projetos
Operador de dados	<ul style="list-style-type: none"> ■ Importar, exportar e editar dados ■ Pesquisar espectros ■ Aplicar e exportar modelos ■ Adicionar comentários
Aprovador de dados	Aprovar conjuntos de dados
Gestor de configurações do sistema	Modificar as configurações do sistema
Gestor de fontes espectrais	<ul style="list-style-type: none"> ■ Adicionar e editar fontes espectrais ■ Reiniciar e desligar um analisador
Gestor de projetos	Adicionar e editar projetos
Gestor de usuários	Adicionar, editar e desativar usuários
Calibrador de analisadores	Calibrar um analisador Raman Rxn
Verificador de analisadores	Verificar um analisador Raman Rxn
Operador de analisadores	Iniciar, parar e pausar aquisições de conjuntos de dados
Gestor de configurações de coleta dos analisadores	Alterar as configurações de aquisição do conjunto de dados
Gestor de configurações do analisador	<ul style="list-style-type: none"> ■ Adicionar e alterar arquivos de modelo ■ Alterar arquivos de calibração de intensidade ■ Alterar padrões de verificação

Requisitos de sistema

O Raman Data Library é um programa do Microsoft Windows de 64 bits que é executado no Microsoft Windows™ 10 Professional.

Raman Data Library – Básico

Sistema operacional

Microsoft Windows 10 (Professional 64-bit)

Hardware

- Tipo de processador: Intel Core i5 ou processador equivalente
- Memória principal (RAM): 16 GB
- Capacidade do disco rígido: 10 GB ou superior, dependendo do tamanho do banco de dados
- Tamanho da tela (desktops): 24" ou maior com uma resolução de 1920 x 1080 ou superior e configurações de escala de exibição apropriadas
- Tamanho da tela (notebooks): 13" ou maior com uma resolução de 1920 x 1080 ou superior e configurações de escala de exibição apropriadas

O Microsoft .NET Framework versão 4.7.2 também é necessário.

**Raman Data Library –
Versão cGxP****Sistema operacional**

Microsoft Windows 10 (Professional 64-bit)

Hardware

- Tipo de processador: Intel Core i5 ou processador equivalente
- Memória principal (RAM): 16 GB
- Capacidade do disco rígido: 10 GB ou superior, dependendo do tamanho do banco de dados
- Tamanho da tela (desktops): 24” ou maior com uma resolução de 1920 x 1080 ou superior e configurações de escala de exibição apropriadas
- Tamanho da tela (notebooks): 13” ou maior com uma resolução de 1920 x 1080 ou superior e configurações de escala de exibição apropriadas

O Microsoft .NET Framework versão 4.7.2 também é necessário.

Especificações

Comunicação

A comunicação com o Raman RunTime é feita via OPC UA. O protocolo HTTPS também é usado para transferir certos arquivos entre o Raman RunTime e o Raman Data Library, como arquivos de modelo.

Banco de dados

O Raman Data Library usa um banco de dados embarcado seguro. O banco de dados SQLite, fornecido por terceiros, oferece um sistema de gerenciamento de banco de dados relacional (RDBMS) com todos os recursos.

Instalação

Instalação

São necessários privilégios de administrador para a instalação e a configuração do Raman Data Library.

Documentação complementar

Início rápido

Resumo das instruções de operação do Raman Data Library KA01717C

Instruções de operação

Instruções de operação para usuários do Raman Data Library BA02367C

Instruções de operação para administradores do Raman Data Library BA02349C

Marcas registradas

- Microsoft™ é uma marca registrada ou uma marca comercial da Microsoft Corporation nos Estados Unidos, em outros países ou em ambos.
- Windows™ é uma marca registrada ou uma marca comercial da Microsoft Corporation nos Estados Unidos, em outros países ou em ambos.
- Todas as outras marcas comerciais listadas neste documento são de propriedade de seus respectivos proprietários.

www.addresses.endress.com
