

MIRA Cal P



Cours de maniement

8.0105.8004FR / v6 / 2024-09-24



Metrohm Raman
407 South 2nd Street
Laramie, WY 82070
USA
+1 307 460 2089
info@metrohm.com
www.metrohm.com

MIRA Cal P

4.2.XXX

Cours de maniement

8.0105.8004FR / v6 /
2024-09-24

Technical Communication
Metrohm Raman
Laramie, WY 82070

Cette documentation a été préparée avec le plus grand soin. Toutefois, les erreurs ne peuvent jamais être totalement exclues. Veuillez envoyer vos commentaires concernant d'éventuelles erreurs à l'adresse ci-dessus.

Cette documentation est un document original.

Copyright

Cette documentation est protégée par le copyright. Tous droits réservés.

À propos des marques

Windows® est une marque déposée de Microsoft Corporation aux États-Unis et dans d'autres pays.

Toutes les autres marques sont la propriété de leurs détenteurs respectifs.

Table des matières

1	Aperçu	1
1.1	Description du logiciel	1
1.2	Versions des produits	2
1.3	Informations concernant la documentation	2
1.4	Information supplémentaire – Modes d'emploi relatifs au matériel	3
2	Sécurité	4
2.1	Responsabilité de l'exploitant	4
2.2	Exigences relatives au personnel d'exploitation	4
2.3	Consignes de sécurité	5
2.3.1	Dangers liés au potentiel électrique	5
2.3.2	Risques liés aux rayonnements	6
2.4	Présentation des avertissements	6
2.5	Signification des symboles d'avertissement	7
3	Description fonctionnelle	8
3.1	MIRA Cal P – Aperçu général	8
3.2	MIRA Cal P – Aide contextuelle	9
3.3	Identification d'échantillons à l'aide de bibliothèques	9
3.4	Vérification des échantillons à l'aide des ensembles d'apprentissage	10
3.5	Procédures de fonctionnement	11
3.6	Menus déroulants	11
3.7	Onglets de fonctions et vues des fonctionnalités	14
3.8	Browser échantillons	19
4	Installation	20
4.1	Exigences relatives au système	20
4.2	Installation de Mira Cal P	21
4.3	Mise à jour du firmware	21
5	Mise en service	23
5.1	Conversion de la base de données	23
5.2	Démarrage de MIRA Cal P	23

1 Aperçu

1.1 Description du logiciel

Le logiciel MIRA Cal P est mis en œuvre sur les Metrohm Instant Raman Analyzers MIRA P et MIRA M-3.

- **Logiciel MIRA Cal P**
Administration (par exemple des utilisateurs, des procédures de fonctionnement), visualisation des résultats, génération des rapports, sauvegarde de toutes les données
- **Appareils Mira**
Analyse d'échantillons

Synchronisation entre Mira P/Mira M-3 et Mira Cal P

Le processus de synchronisation permet de synchroniser toutes les données nécessaires entre MIRA Cal P et MIRA P/MIRA M-3.

La synchronisation de MIRA P/MIRA M-3 vers MIRA Cal P garantit que l'appareil est toujours à jour. Les versions actuelles des procédures de travail actives, des ensembles de spectres d'apprentissage, des bibliothèques et des comptes utilisateurs sont transférées vers l'appareil, tandis que les échantillons et l'Audit Trail sont sauvegardés dans la base de données.

Il est possible d'utiliser plusieurs appareils, mais ceux-ci doivent être synchronisés vers la même base de données afin de permettre une gestion des données transparente.

Évaluation

Le logiciel MIRA Cal P propose 2 options d'évaluation°:

- Identification d'échantillon
Le spectre mesuré d'une substance est comparé aux spectres figurant dans la bibliothèque. Le spectre le plus approchant est rapporté.
- Vérification de l'échantillon
Cette option permet de vérifier si la substance mesurée correspond à ce qui était attendu.

Il est également possible de combiner les deux options.

Logiciel conforme aux exigences du secteur pharmaceutique

- Administration des utilisateurs
- Signatures électroniques des objets
- Audit Trail

1.2 Versions des produits


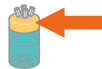

Le produit est disponible dans les versions suivantes :

Tableau 1 Versions des produits

Numéro de commande	Désignation	Numéro de version
6.0607.1010	Logiciel MIRA Cal P	4.2.XXX

1.3 Informations concernant la documentation

Représentations possibles dans la documentation :

Représentation	Signification
(5-12)	Renvoi aux légendes des figures (Numéro de la figure - <i>élément dans la figure</i>)
1	Étape d'instruction
Méthode	Paramètres, lignes de menu, onglets et boîtes de dialogue
Fichier ► Nouveau	Chemin de menu
[Suivant]	Bouton ou touche
	Informations complémentaires au texte descriptif
	Remarque Dans les graphiques, des flèches ou des cadres orange indiquent le lien avec le texte descriptif. Les éléments concernés peuvent en outre être colorés en orange.
	Mouvement Dans les graphiques, des flèches bleues indiquent la direction du mouvement. Les éléments à déplacer peuvent en outre être colorés en bleu.

1.4 Information supplémentaire – Modes d'emploi relatifs au matériel

Veillez vous référer aux modes d'emploi relatifs au matériel ci-après pour obtenir de plus amples informations concernant les appareils :

- Mode d'emploi MIRA P : 8.0924.8001EN
- Mode d'emploi MIRA M-3 : 8.924.8010EN

- Avoir lu et assimilé la documentation de l'utilisateur. Utiliser le produit conformément aux instructions de la documentation de l'utilisateur.
ATTENTION – Les opérations, réglages ou procédures différents de ceux spécifiés dans la documentation de l'utilisateur peuvent entraîner une exposition à des rayonnements dangereux.

2.3 Consignes de sécurité

2.3.1 Dangers liés au potentiel électrique

Le contact avec une tension électrique peut provoquer des blessures graves voire la mort. Pour écarter les risques liés au potentiel électrique, respecter les points ci-dessous.

- N'utiliser le produit que lorsqu'il est en parfait état. Le boîtier doit également être intact.
- N'utiliser le produit que si les capots sont en place. Si les capots sont endommagés ou manquants, déconnecter le produit de la source de courant et contacter le technicien service Metrohm local.
- Protégez les composants sous tension (par ex. le bloc d'alimentation, le câble secteur, les prises de connexion) de l'humidité.
- Toujours faire effectuer les travaux de maintenance et les réparations sur les composants électriques par un technicien service Metrohm local.
- Déconnecter immédiatement le produit de la source de courant si l'un au moins des cas suivants se produit :
 - Le boîtier est endommagé ou ouvert.
 - Des parties sous tension sont endommagées.
 - De l'humidité pénètre.

2.3.2 Risques liés aux rayonnements



AVERTISSEMENT

Risque de blessure par rayonnement laser

Blessures oculaires graves dues au rayonnement laser.

- Suivre les mesures et instructions de sécurité.
- Les appareils doivent être utilisés uniquement par un personnel formé.
- Les appareils à laser de classe 3B doivent être utilisés dans des espaces protégés et équipés de la signalisation appropriée.
- Des lunettes de protection appropriées conformes aux caractéristiques techniques (voir le manuel d'utilisation MIRA P, 8.0924.8001) sont nécessaires pour travailler avec des faisceaux laser en milieu ouvert (Smart Tips classe de laser 3B).
- Respecter la distance nominale de risque oculaire (DNRO).
- Respecter les dispositions de la norme CEI 60825-1 « Sécurité des équipements laser » ainsi que les réglementations relatives à la mise en œuvre de systèmes laser dans votre pays.

2.4 Présentation des avertissements

La présente documentation utilise des avertissements de la manière suivante.

Structure

1. Gravité du danger (mention d'avertissement)
2. Type et source du danger
3. Conséquence en cas de négligence du danger
4. Mesures pour écarter le danger

Niveaux de risque

La couleur et la mention d'avertissement indiquent le niveau de risque.



DANGER

Désigne un danger immédiat. S'il n'est pas évité, il en résulte la mort ou des blessures majeure.



AVERTISSEMENT

Désigne un danger potentiellement imminent. S'il n'est pas évité, il peut en résulter la mort ou des blessures majeures.

ATTENTION

Désigne un danger potentiellement imminent. S'il n'est pas évité, il peut en résulter des blessures mineures ou majeures.

AVIS












Désigne une situation potentiellement préjudiciable. Si elle n'est pas évitée, le produit ou quelque chose dans l'environnement peut être endommagé.

2.5 Signification des symboles d'avertissement

Les symboles d'avertissement sur le produit ou dans la documentation indiquent des dangers potentiels ou attirent l'attention sur des comportements spécifiques afin d'éviter des accidents ou des dommages.

Selon l'utilisation prévue, l'exploitant appose des symboles d'avertissement supplémentaires sur le produit. Les instructions correspondantes de l'exploitant doivent être respectées.

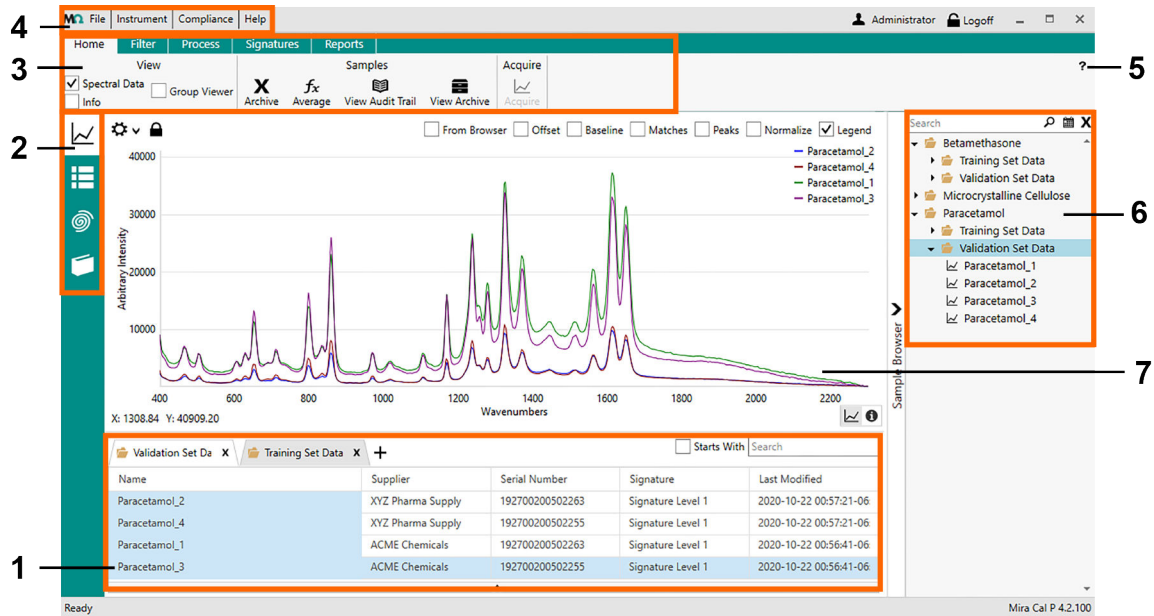
Tableau 2 Symboles d'avertissement conformes à la norme ISO 7010 (exemples)

Symboles d'avertissement/Signification	Symboles d'avertissement/Signification
 Symbole d'avertissement général	 Avertissement concernant les surfaces brûlantes
 Avertissement concernant les objets pointus (coupure/piqûre)	 Avertissement concernant les blessures aux mains (écrasement)
 Avertissement concernant la tension électrique	 Avertissement concernant les substances caustiques
 Avertissement concernant le rayonnement optique	 Avertissement concernant les faisceaux laser
 Avertissement concernant les substances inflammables	 Avertissement concernant le risque biologique
 Avertissement concernant les substances toxiques	



3 Description fonctionnelle

3.1 MIRA Cal P – Aperçu général



1 Visualisation des échantillons avec tables d'échantillons

2 Onglets de fonctions
 Vue Sample
 Vue Library
 Vue Training set
 Vue Operating procedure

3 Ruban

4 Barre de menus


5 Aide contextuelle

6 Browser échantillons

7 Diagramme du spectre et info



3.2 MIRA Cal P – Aide contextuelle

Les utilisateurs peuvent trouver des informations d'aide directement dans le logiciel en cliquant sur  dans le coin supérieur droit de la fenêtre aux endroits suivants :

- Vue **Sample**
- Vue **Library**
- Vue **Training set**
- **Configuration de conformité**

3.3 Identification d'échantillons à l'aide de bibliothèques

Le spectre mesuré d'une substance est comparé aux spectres existants dans une bibliothèque chargée dans le MIRA P/MIRA M-3.

Les bibliothèques peuvent être créées par l'utilisateur ou achetées dans le commerce.

Création d'une bibliothèque

Les utilisateurs peuvent créer une bibliothèque dans MIRA Cal P et l'utiliser ensuite pour identifier des échantillons. Les bibliothèques d'identification sont produites dans MIRA Cal P à partir des acquisitions de substances connues auxquelles l'utilisateur a accès (*voir « Création et modification de bibliothèques », page 25*).

Achat de bibliothèques commerciales

En plus des bibliothèques créées par l'utilisateur, Metrohm Raman propose différents ensembles de bibliothèques prêtes à l'emploi.

Identification d'une substance

Les bibliothèques de comparaison sont sélectionnées lors de la création des procédures de fonctionnement.

Lors de l'analyse d'un échantillon, son spectre sera comparé à l'ensemble des spectres de la bibliothèque sélectionnée. L'échantillon mesuré sera identifié comme l'un des échantillons de la bibliothèque et affiché en tant que **résultat d'identification**. S'il n'existe aucune correspondance entre l'échantillon et une bibliothèque, le message **Inconclusive** s'affiche.

Lorsqu'un ensemble d'apprentissage est associé à une procédure de fonctionnement, l'intervalle de confiance peut être configuré.

Vérification d'une substance

La substance mesurée sera évaluée afin de déterminer si elle se situe dans l'intervalle de confiance. Si c'est le cas, l'identité est confirmée – un résultat d'acceptation s'affichera.

3.5 Procédures de fonctionnement

MIRA P/MIRA M-3 utilisent des procédures de fonctionnement bien définies de MIRA Cal P.

Tous les paramètres affectant l'acquisition et l'évaluation des spectres sont définis dans les procédures de fonctionnement. Cela permet de garantir que les mesures sont réalisées d'une manière testée et reproductible.

L'utilisateur crée des procédures de fonctionnement sous MIRA Cal P et les synchronise avec l'appareil avant de les utiliser. Les procédures de fonctionnement peuvent être partagées entre les appareils MIRA P/MIRA-M3 (voir « *Création et édition des procédures de travail* », page 34).

3.6 Menus déroulants

Fichier	
Open ►	
Samples	Importer des échantillons.
Libraries	Importer des bibliothèques.
Training Sets	Importer des ensembles d'apprentissage.
Operating Procedures	Importer des procédures de fonctionnement.
Save As ►	
Samples	Enregistrer des échantillons à l'emplacement sélectionné.
Libraries	Enregistrer des bibliothèques à l'emplacement sélectionné.
Training Sets	Enregistrer des ensembles d'apprentissage à l'emplacement sélectionné.
Operating Procedures	Enregistrer des procédures de fonctionnement à l'emplacement sélectionné.



<p>Advanced ▶</p> <p>Database</p>	<p>Info</p> <p>Affiche des statistiques sur la base de données, notamment :</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ Nombre d'échantillons, procédures de fonctionnement, ensembles d'apprentissage, bibliothèques ▪ Taille de la base de données ▪ Emplacement <p>Help</p> <p>Afficher des informations sur Database Info et Database Reset.</p> <p>Back Up</p> <p>Effectuer une copie de sauvegarde de la base de données.</p> <p>Restore</p> <p>Restaurer la base de données.</p> <p>Set Location</p> <p>Définir l'emplacement de la base de données.</p> <p>Import Licensed Libraries</p> <p>Importer des bibliothèques sous licence.</p> <p>Reset</p> <p>Effacer une base de données sans supprimer les utilisateurs, les procédures de fonctionnement, les ensembles de spectres d'apprentissage, les bibliothèques ou la configuration de la conformité. L'Audit Trail reste intact, à l'exception des événements liés à l'échantillon. Les droits administrateur sont nécessaires.</p>
<p>Change Language</p>	<p>Choisir la langue souhaitée.</p>
<p>Service Portal</p>	<p>Permet l'accès au technicien service Metrohm local.</p>
<p>Exit</p>	<p>Fermer le logiciel MIRA Cal P.</p>

<p>Instrument</p>	
<p>Connect</p>	<p>Connecter MIRA P/MIRA M-3 à MIRA Cal P.</p>
<p>Disconnect</p>	<p>Déconnecter MIRA P/MIRA M-3 de MIRA Cal P.</p>
<p>Permissions</p>	<p>Voir, ajouter, supprimer ou modifier des autorisations pour un appareil.</p>
<p>System Suitability Test Archive</p>	<p>Sauvegarder et visualiser les tests d'aptitude du système effectués.</p>
<p>Info</p>	<p>Liste les informations d'identification de l'appareil et du système d'exploitation.</p>

Rename	Modifier le nom de MIRA P/MIRA M-3.
Execute Script	Exécute un fichier de script importé.
Calibrate Instrument	Calibrer l'appareil. Le test d'aptitude du système (System Suitability Test) peut être exécuté immédiatement après le calibrage.
System Suitability Test	Effectuer un test d'aptitude du système. Les tests d'aptitude du système peuvent être effectués indépendamment de la procédure de calibrage. Suivre les invites.
Updates ►	
Firmware Update	Mettre à jour le firmware.
Update Licensed Libraries	Mettre à jour les bibliothèques sous licence.
Upload Language Package	Télécharger un package de langues.
Import Certificate Package	Importer un package de certificats.
Advanced ►	
Upload Encrypted Library	Télécharger (envoyer) une bibliothèque cryptée.
Upload Library Access File	Télécharger (envoyer) un fichier d'accès à la bibliothèque.
Upload S.T. Japan Library	Télécharger une bibliothèque Japonaise .S.T.
Conformité	
Audit Trail	Ouvrir l'Audit Trail.
Revert Objects	Ouvrir l'archive pour restaurer des objets.
Change Password	Modifier le mot de passe.
User Management	Ouvrir la section relative à l'administration des utilisateurs.
Compliance Configuration	Ouvrir la section relative aux paramètres.



Aide	
About	Affiche la version et le copyright du MIRA Cal P.
Create Support File	Créer un fichier ZIP pour le fabricant afin de résoudre les problèmes potentiels. Ce fichier d'aide contient des informations sur MIRA Cal P et MIRA P/MIRA M-3 s'il est connecté.
<hr/>	
Connecté	S'affiche lorsque MIRA P/MIRA M-3 est connecté à MIRA Cal P.

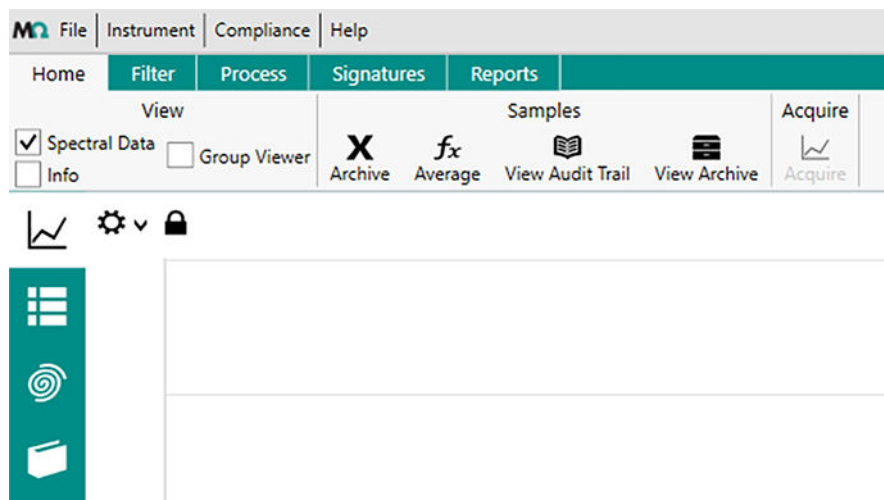
3.7 Onglets de fonctions et vues des fonctionnalités

Les fonctionnalités affichées sous les onglets Fonctions dépendent de la vue que l'utilisateur a sélectionnée dans le menu de gauche. Les vues ci-dessous sont disponibles.

- Vue **Sample**
- Vue **Library**
- Vue **Training Sets**
- Vue **Operating Procedure**

Selon le type d'utilisateur, toutes les vues peuvent ne pas apparaître.

Vue Sample



Sample
Home ▶

View

Sélectionner **[Spectral Data]** pour afficher les données spectrales.

Sélectionner **[Group Viewer]** pour regrouper les spectres et les visualiser comme un groupe de couleurs. Cette fonction est utile pour comparer différents fournisseurs, contenants, lots, etc.

Sélectionner **[Info]** pour obtenir des informations sur les métadonnées, les résultats d'identification, les résultats de vérification, les références ou les signatures.

Sous **Info ► Metadata** copier le GUID pour pouvoir rechercher l'audit trail par le GUID.











Remplir les métadonnées **Product ID, Lot ID, Batch ID, Container, Supplier** pour les afficher en différentes couleurs dans les diagrammes de modèle de l'ensemble d'apprentissage.

Samples

Cliquer sur un échantillon sur la table d'échantillons :

- Archiver des échantillons
- Créer des spectres moyennés à l'aide d'une fonction de moyenne entièrement traçable sans perte d'informations
- Voir l'Audit Trail
- Voir l'archive

Effectuer un clic droit sur un échantillon sélectionné pour ouvrir un menu de fonctions.

	Save as	Ctrl+S
	Open	Ctrl+O
	Save Grid Data	
	Archive	Del
	Rename	Ctrl+R
	Set Supplier	
	Average	
	Toggle View	Dbf Click
	ID Search	Ctrl+I
	Cut	Ctrl+C
	Paste	Ctrl+V
	Reports	►
	Signatures	►
	Columns	►


Cliquer sur **[Set Supplier]** pour sélectionner plusieurs échantillons et en définir le fournisseur en même temps.

Acquisition d'un ensemble de données

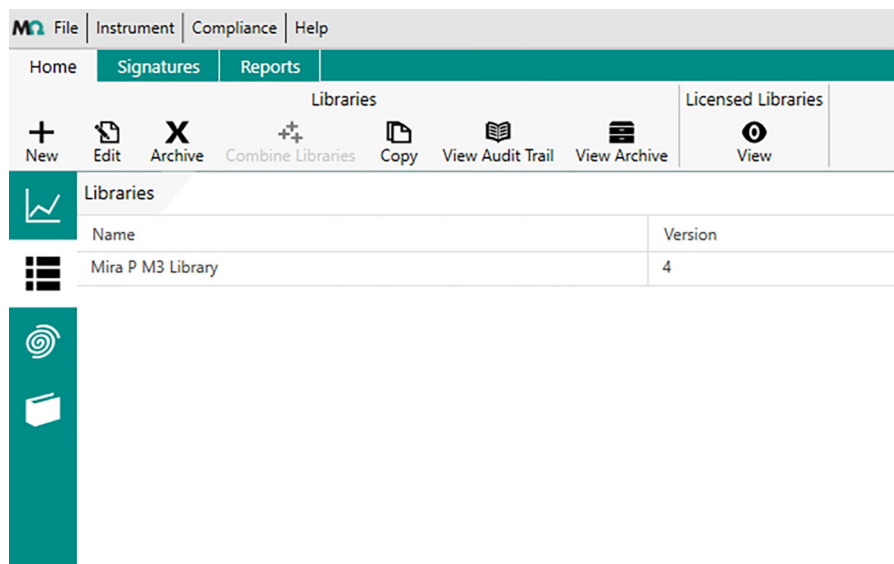
Acquérir un nombre donné de scans avec des paramètres variés.










Filter	Sélectionner les paramètres de tri des échantillons.
Process	Exécuter l'identification, la concordance de mélange ou la vérification à l'aide de bibliothèques ou d'ensemble d'apprentissage non définis dans l'OP d'origine.
Signatures	<p>Signer un échantillon afin de confirmer par exemple qu'il a été approuvé ou vérifié.</p> <p>Retirer une signature afin de confirmer par exemple que l'échantillon a été rejeté ou que les données d'échantillon sont incorrectes.</p>
Reports	Générer des rapports pour les spectres sélectionnés.

 Le bouton **[Acquire]** est activé seulement si MIRA P/MIRA M-3 est connecté à MIRA Cal P.

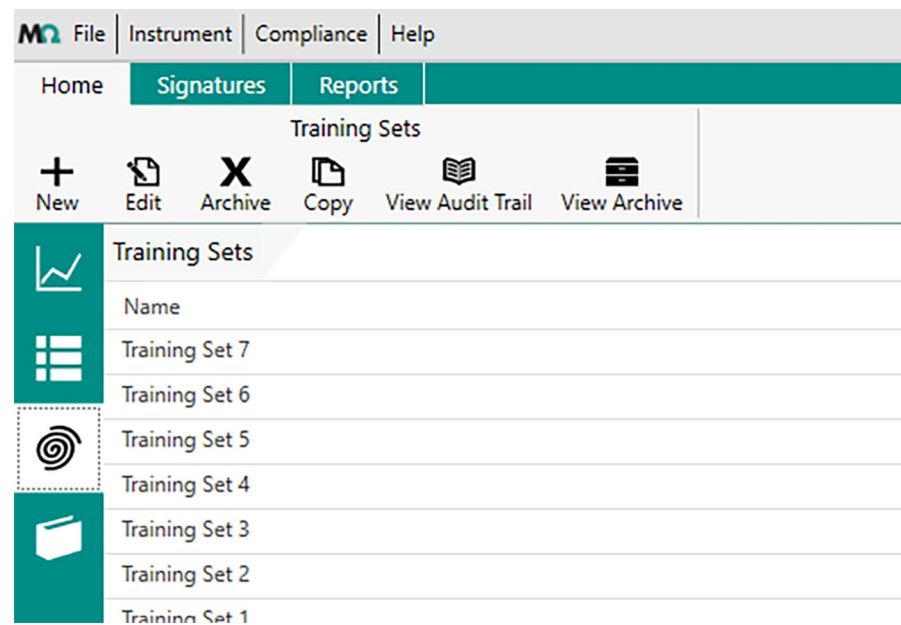
Vue Library



Library	
Home	<p>Cliquer sur une bibliothèque pour effectuer des opérations telles que modifier des bibliothèques, visualiser des bibliothèques archivées ou visualiser des bibliothèques sous licence.</p> <p>Effectuer un clic droit sur une bibliothèque sélectionnée pour ouvrir un menu de fonctions.</p>

	 Save as Ctrl+S  Open Ctrl+O <hr/>  Edit Dbl Click  New Ctrl+N  Archive Del  Combine Libraries  Copy <hr/> Reports ▶ Signatures ▶
Combine Libraries	Fusionner plusieurs bibliothèques. Conserver la bibliothèque d'origine et en ajouter une nouvelle. La fonction est disponible après avoir sélectionné plusieurs bibliothèques dans la fenêtre Libraries .
Reports	Générer des rapports pour les bibliothèques sélectionnées.
Signatures	<p>Signer une bibliothèque afin de confirmer par exemple qu'elle a été approuvée ou vérifiée.</p> <p>Retirer une signature afin de confirmer par exemple que la bibliothèque a été rejetée ou que les données d'échantillon sont incorrectes.</p>

Vue Training Sets









The screenshot shows the 'Training Sets' view in the software. The top navigation bar includes 'File', 'Instrument', 'Compliance', and 'Help'. Below this, there are tabs for 'Home', 'Signatures', and 'Reports'. The 'Signatures' tab is active, and the 'Training Sets' section is expanded. The 'Training Sets' section contains a list of training sets, each with a unique icon and a name:

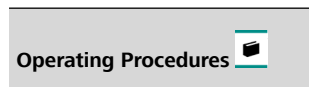
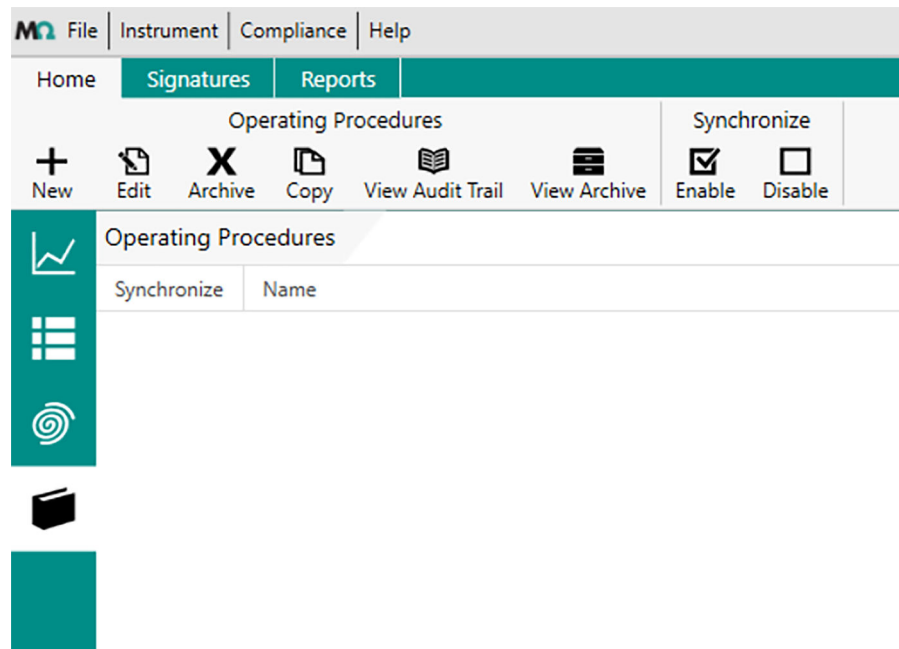
- Training Set 7 (Icon: Grid)
- Training Set 6 (Icon: Grid)
- Training Set 5 (Icon: Target)
- Training Set 4 (Icon: Target)
- Training Set 3 (Icon: Folder)
- Training Set 2 (Icon: Folder)
- Training Set 1 (Icon: Folder)





Home	<p>Cliquer sur un ensemble d'apprentissage pour effectuer des opérations telles que modifier des ensembles d'apprentissage, archiver des ensembles d'apprentissage ou visualiser l'Audit Trail.</p> <p>Effectuer un clic droit sur un ensemble d'apprentissage sélectionné pour ouvrir un menu de fonctions.</p> <div style="border: 1px solid #ccc; padding: 5px; margin: 10px 0;"> <ul style="list-style-type: none">  Save as Ctrl+S  Open Ctrl+O  Edit Dbl Click  New Ctrl+N  Archive Del  Copy Reports ▶ Signatures ▶ </div>
Signatures	<p>Signer un ensemble d'apprentissage afin de confirmer par exemple qu'il a été approuvé ou vérifié.</p> <p>Retirer une signature afin de confirmer par exemple que l'ensemble d'apprentissage a été rejeté ou que les données d'échantillon sont incorrectes.</p>
Reports	<p>Générer des rapports pour les ensembles d'apprentissage sélectionnés.</p>

Vue Procédures de fonctionnement



Home ▶	
Operating Procedures	<p>Cliquer sur une procédure de fonctionnement pour effectuer des opérations telles que modifier une procédure de fonctionnement, archiver des procédures de fonctionnement ou visualiser l'Audit Trail.</p> <p>Aucune action ne peut être effectuée sur la procédure de fonctionnement par défaut.</p> <p>Effectuer un clic droit sur une procédure de fonctionnement sélectionnée pour ouvrir un menu de fonctions.</p> 
Synchronize	<p>Active ou désactive la synchronisation entre MIRA P/MIRA M-3 et MIRA Cal P.</p>
Signatures	<p>Signer une procédure de fonctionnement afin de confirmer par exemple qu'elle a été approuvée ou vérifiée.</p> <p>Retirer une signature afin de confirmer par exemple que la procédure de fonctionnement a été rejetée ou que les données d'échantillon sont incorrectes.</p>
Reports	<p>Générer des rapports pour les procédures de fonctionnement sélectionnées.</p>

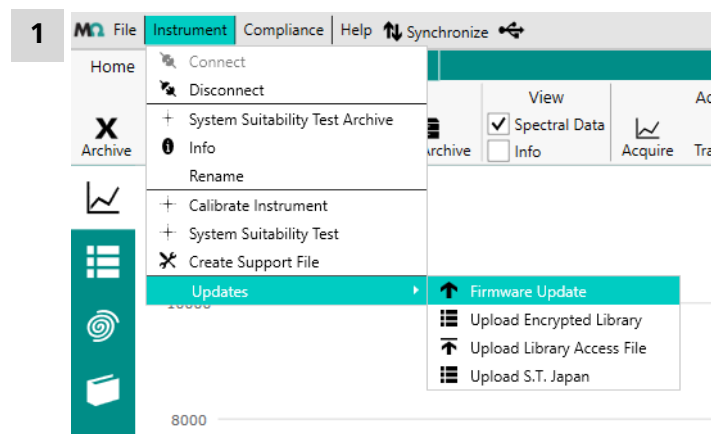
3.8 Browser échantillons

Le browser échantillons affiche les dossiers d'échantillons et leur contenu. La sélection et le double clic sur un dossier ou un échantillon dans le browser ouvrira cet objet dans la visionneuse d'échantillons.

4.2 Installation de Mira Cal P

- i** S'assurer d'avoir les droits administrateur avant d'installer le logiciel MIRA Cal P.
 - i** S'assurer que le système remplisse le prérequis système (*voir « Exigences relatives au système », page 20*).
- 1** Double-cliquer sur le fichier d'installation.
 - 2** Cliquer sur **[Install]** et suivre l'assistant sur l'écran.
 - i** Des logiciels d'autres fournisseurs seront également installés s'ils ne le sont pas déjà.


4.3 Mise à jour du firmware



Cliquer sur **Instrument** ► **Updates** ► **Firmware Update**.

- 2** Sélectionner le paquet du nouveau firmware (fichier .zip) dans le système de fichiers.
- 3** Cliquer sur **[OK]** pour mettre à jour le firmware.
Cliquer sur **[Cancel]** pour annuler la mise à jour du firmware.
- 4** Pendant la mise à jour du firmware, une fenêtre apparaît affichant l'ancienne version et la nouvelle version du firmware.
Cliquer sur **[Accept]** pour accepter les modifications et installer le nouveau firmware.



 Après une mise à jour du firmware, l'appareil doit être recalibré. Les informations relatives au calibrage sont disponibles ici [«Calibrage et aptitude du système», page 38](#).

5 Mise en service

5.1 Conversion de la base de données


Une conversion de la base de données est effectuée si l'ordinateur sur lequel MIRA Cal P est installé dispose déjà d'une version antérieure de Mira Cal (3.0 ou supérieure). MIRA Cal P utilise un nouveau format de base de données.

La première mise en service de MIRA Cal P convertit l'ancienne base de données au nouveau format.

MIRA Cal P demande d'abord à l'utilisateur de faire un backup de l'ancienne base de données. Ensuite MIRA Cal P procède à la conversion.

La conversion de la base de données prend moins d'une heure.


5.2 Démarrage de MIRA Cal P

 En l'absence de conversion de la base de données existante, le nom d'utilisateur et le mot de passe initiaux sont :

Nom d'utilisateur : admin

Mot de passe : Change!

1

Pour démarrer le programme, double-cliquer sur .

Après l'installation du logiciel, l'icône MIRA Cal P s'affiche sur le bureau de l'ordinateur.

2

Saisir votre nom d'utilisateur et votre mot de passe et cliquer sur **[Login]**.

- 3 Pour déconnecter MIRA P/MIRA M-3 de MIRA Cal P, cliquer sur **Instrument** ► **Disconnect**.

5.4 Configuration

5.4.1 Création et modification de bibliothèques

Les spectres des bibliothèques viennent d'échantillons ayant été précédemment acquis ou importés dans la base de données des échantillons.

Création d'une bibliothèque

- 1 Aller dans la vue **Library**.
- 2 Aller dans l'onglet **Home**.
- 3 Cliquer sur **[New]**.
- 4 Ajouter les métadonnées (informations relatives à la bibliothèque).
Une fois la bibliothèque créée, son nom ne peut plus être modifié.
- 5 Aller dans l'onglet **Add Samples**.
- 6 Sélectionner des échantillons. Il est possible de sélectionner plusieurs échantillons à l'aide des touches **[CTRL]** et **[SHIFT]**.
- 7 Cliquer sur **[Add]**.
- 8 Cliquer sur **[Confusion Matrix]** pour voir la corrélation croisée de tous les échantillons de la bibliothèque.
- 9 Cliquer sur **[Save]** pour créer une nouvelle bibliothèque.

Modification d'une bibliothèque

- 1 Aller dans la vue **Library**.
- 2 Sélectionner une bibliothèque et cliquer sur **[Edit]**.
- 3 Il est possible d'ajouter et de retirer des échantillons à/de la bibliothèque.

- Pour ajouter un échantillon, aller dans **Add Samples**. Cliquer sur **[Add]**.
- Sélectionner un échantillon pour le supprimer de la bibliothèque. Cliquer sur **[Delete]**.

4 Cliquer sur **[Save]**.

5 Seules les bibliothèques associées à une procédure de fonctionnement active seront synchronisées avec l'appareil.

Les bibliothèques modifiées sont synchronisées de la même manière que les bibliothèques nouvellement créées.

6 Les métadonnées des échantillons des bibliothèques peuvent être modifiées dans les bibliothèques utilisateur déjà existantes.

5.4.2 Création et modification d'ensembles d'apprentissages

Avant d'effectuer l'évaluation de l'échantillon, l'utilisateur doit créer un ensemble d'apprentissage dans MIRA Cal P. Cet ensemble d'apprentissage servira à la vérification des échantillons. Un ensemble d'apprentissage consiste en différents spectres de la substance à vérifier. Il doit refléter la variance du procédé de mesure.



 À partir de MIRA Cal P 4.1.0, l'algorithme ACP a été mis à jour afin de lui ajouter de nouvelles fonctionnalités. Cette mise à jour s'applique par défaut aux nouveaux ensembles d'apprentissage. Tout ensemble d'apprentissage existant utilise l'ancien algorithme tant que cet ensemble ne subit aucune modification.

Tableau 3 Paramètres par défaut et options de l'algorithme ACP

	Paramétrage par défaut	Options
PC	2	1 à 5
Prétraitement	Centre moyen	Centre moyen/Aucun
Mesure de la distance	Combiné	Combiné/Hotelling T ² /QResidual
Intervalle de confiance	0,95	0,90 / 0,95 / 0,975 / 0,99
Normalisation	Normalisation SNV	SNV/Vecteur/Min-Max
Lissage	Algorithme de Savitzky-Golay : 13 points (fenêtre de 27 points), polynôme de troisième degré	Continu
Ligne de base	OFF	ON/OFF
Dérivée	ON	ON/OFF
Compensation de la variance des appareils (IVC)	ON	ON/OFF

Création d'un ensemble de spectres d'apprentissage

- 1 Aller à la vue **Training Sets**.
- 2 Aller dans l'onglet **Home**.
- 3 Cliquer sur **[New]**.
- 4 Ajouter les métadonnées (informations relatives à l'ensemble d'apprentissage).
Une fois l'ensemble d'apprentissage créé, son nom ne peut plus être modifié.
- 5 Aller dans l'onglet **Add Samples**.
- 6 Sélectionner des échantillons. Il est possible de sélectionner plusieurs échantillons à l'aide des touches **[CTRL]** et **[SHIFT]**.
 Un ensemble d'apprentissage doit contenir au moins 20 échantillons.
- 7 Cliquer sur **[Add]**.
- 8 Aller à l'onglet **Validation Set**.
- 9 Cliquer sur **[New]** sous le ruban **Validation Set**.
- 10 Ajouter un nom à l'ensemble de données validées. Une fois l'ensemble de données validées créé, son nom ne peut plus être modifié.
- 11 Cliquer sur l'onglet **Sample Browser** ou sur l'onglet **Recent**.
- 12 Sélectionner les échantillons qui devraient être ACCEPTÉS pour le modèle. Sélectionner plusieurs échantillons avec **[CTRL]** ou **[SHIFT]**.
- 13 Cliquer sur **[Add To Positive]** sur le ruban **Validation Set**.
- 14 Sélectionner les échantillons qui devraient être REJETÉS pour le modèle. Sélectionner plusieurs échantillons avec **[CTRL]** ou **[SHIFT]**.
- 15 Cliquer sur **[Add To Negative]** sur le ruban **Validation Set**.
- 16 Cliquer sur **[Save]** sur le ruban **Validation Set**.

- 17 Aller à l'onglet **Overview**.
- 18 Cliquer **[ModelExpert]** sur le ruban **Training Set**.
La recherche des paramètres du modèle peut prendre plusieurs minutes.
- 19 Cliquer sur **[Save Training Set]** en bas de la boîte de dialogue **ModelExpert** pour créer l'ensemble d'apprentissage.


Modification d'un ensemble d'apprentissage

- 1 Aller à la vue **Training Sets**.
- 2 Sélectionner un ensemble d'apprentissage et cliquer sur **[Edit]**.
- 3 Il est possible d'ajouter et de retirer des échantillons à/de l'ensemble d'apprentissage.
 - Pour ajouter un échantillon à l'ensemble d'apprentissage, aller dans **Add Samples**. Cliquer sur **[Add]**.
 - Sélectionner un échantillon pour le supprimer de l'ensemble d'apprentissage. Cliquer sur **[Delete]**.
- 4 Cliquer sur **[Save]**.
- 5 Seules les ensembles d'apprentissage associés à une procédure de fonctionnement active seront synchronisés avec l'appareil.

Les ensembles d'apprentissage modifiés sont synchronisés de la même manière que ceux nouvellement créés.

Sélection de paramètres

- 1 Aller à l'onglet **Overview**.

- 2  **ModelExpert** est un outil permettant de déterminer les meilleures méthodes de traitement d'un ensemble de données sur la base d'un ensemble d'apprentissage et d'un ensemble de données validées. De nombreux types de traitement peuvent être appliqués à l'ensemble d'apprentissage pour que le modèle fonctionne pour l'application, tels que la normalisation, le centrage, la dérivation, etc. **ModelExpert** est la procédure recommandée, mais au besoin, les paramètres peuvent être sélectionnés manuellement.

Sur le ruban, sélectionner **Training Set Model**.

- 3 Sur le ruban, régler les paramètres souhaités ou lancer **ROC Curves** pour voir les meilleures combinaisons (nécessite un ensemble de données validées) (voir « *Outils de vérification et recommandations* », page 29).

5.4.3 Outils de vérification et recommandations

La vérification avec MIRA P/MIRA M-3 repose sur les modèles ACP (analyse en composantes principales). L'ACP fonctionne sur un ensemble d'apprentissage, c.-à-d. un ensemble de spectres multiples du même matériau, et réduit la dimensionnalité en trouvant des similitudes entre tous les spectres de cet ensemble.

Ensembles de spectres d'apprentissage

Un bon ensemble de spectres d'apprentissage est construit pour un seul matériau. Il s'agit d'une collection de spectres qui représentent les variations naturelles attendues pour ce matériau lors d'une analyse de routine. Les variations peuvent provenir des :

- Fournisseurs
- Contenants
- Appareils

Le nombre optimal de tests dépend des variations que le modèle doit comprendre. Pour le logiciel, le minimum est de 20, mais le nombre idéal se situe généralement entre 40 et 80 tests. Les ensembles d'apprentissage sont des objets entièrement conformes à MIRA Cal P. Pour prévenir toute modification indésirable, ils reçoivent un n° de version et peuvent être signés à plusieurs niveaux. Les échantillons de l'ensemble d'apprentissage sont ajoutés à l'onglet **Add Samples** de la fenêtre d'édition **Training Set**.

Ensembles de données validées

Un ensemble de données validées est une collection d'échantillons qui doivent être ACCEPTÉS pour un modèle (échantillons positifs) et d'échan-

5.4.4 Modèles de vérification (du début à la fin)

Un modèle de vérification doit être conçu correctement pour s'assurer que le test aboutisse à des résultats exploitables. À cet effet, il convient de répondre à certaines questions :

- L'objectif est-il de distinguer des produits très différents ou de détecter des contaminants dans un même produit ?
- Les produits seront-ils échantillonnés et testés dans des flacons ou testés in situ à travers un contenant ?

Les réponses à ces questions ont un impact considérable sur la manière dont le modèle est construit et sur les types d'échantillons nécessaires.

Conception d'un ensemble de spectres d'apprentissage et d'un ensemble des données validées

Réaliser 3 essais pour chaque variable (échantillon discret, épaisseur du contenant, fournisseur). Dans l'idéal, l'ensemble d'apprentissage ne comprend ni différents matériaux de contenants ni différentes optiques d'acquisition. Ces types de variations peuvent produire des grappes de données pouvant entraîner le comportement imprévisible d'un modèle ACP classique.

L'ensemble de données validées est composé d'échantillons positifs acceptés selon les critères du modèle et d'échantillons négatifs rejetés selon les critères du modèle.

- Pour les échantillons positifs de l'ensemble de données validées, incorporer des tests spécifiques provenant d'échantillons distincts qui ne figurent pas dans l'ensemble d'apprentissage. C'est le seul moyen de valider les performances du modèle avant sa mise en œuvre.
- Si le modèle est rejeté lors d'un test de matériaux différents de ceux inclus dans l'ensemble d'apprentissage, les échantillons de validation négatifs doivent comprendre autant d'échantillons « autres » qu'il est possible d'en collecter. Si le modèle est rejeté lors d'un test d'échantillons contaminés, l'ensemble de données validées ne doit comprendre que des échantillons contaminés. Il n'est pas réaliste d'espérer qu'un modèle ACP donne de bons résultats dans les deux cas.

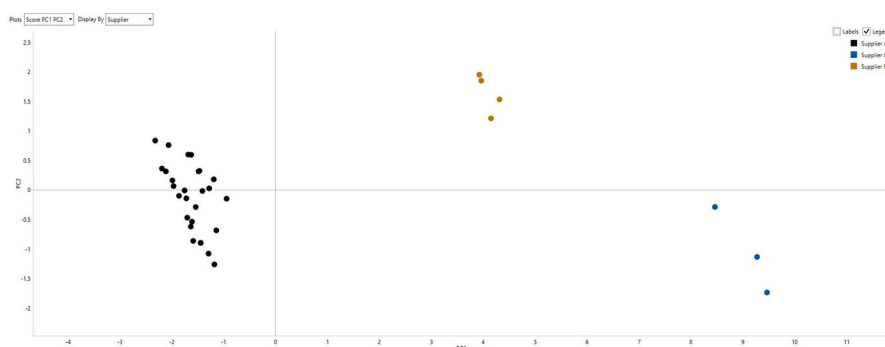
Collecte des échantillons de l'ensemble d'apprentissage et de l'ensemble de données validées

1. Élaborer une procédure de fonctionnement spécifique pour cet ensemble d'apprentissage et cet ensemble de données validées selon la procédure « *Création et édition des procédures de travail* », page 34. Les réglages par défaut de la procédure de fonctionnement (auto-intégration, puissance du laser 5, 1 moyenne) devraient suffire, à moins que les caractéristiques de l'échantillon ne soient connues.

Vérification du modèle

Si **ModelExpert** ne trouve pas de réglage idéal, essayer les étapes de diagnostic suivantes :

1. Vérifier que les échantillons de l'ensemble d'apprentissage sont corrects.
2. Vérifier que les échantillons de l'ensemble de données validées sont classés correctement.
3. Vérifier les paramètres du modèle en cours en examinant les scores et les poids factoriels propres du modèle de l'ensemble d'apprentissage depuis l'onglet **Overview**. On verra ici que les échantillons ayant de bonnes métadonnées sont précieux.
4. Dans le graphique des scores, utiliser le menu déroulant **Display By** pour colorer les points de ce graphique par :
 ID produit
 ID du sous-lot
 ID du lot
 Contenant
 Fournisseur



Cela peut aider à déterminer la source du problème.

5. Vérifier le modèle à l'aide des **ROC Curves** sur le ruban de l'onglet **Overview**.
6. Envisager de créer un gabarit de région pour isoler les zones du spectre qui vous intéressent. Elle se trouve dans le ruban de l'onglet **Overview**.
7. Considérer 1 composante principale. Dans la plupart des cas ce n'est pas recommandé, mais certains modèles peuvent l'exiger. **ModelExpert** n'évalue pas ce cas, mais il peut être défini manuellement dans les paramètres du modèle de l'ensemble d'apprentissage (*voir « Création et modification d'ensembles d'apprentissages », page 26*).

5.4.5 Création et édition des procédures de travail

Les procédures de travail pilotent l'acquisition et l'évaluation des spectres.

MIRA P/MIRA M-3 fonctionne uniquement sur la base de procédures de travail intégrées à MIRA Cal P. Avant d'utiliser l'appareil, les utilisateurs doivent élaborer des procédures de travail et se synchroniser avec MIRA P/ MIRA M-3. Les utilisateurs peuvent définir les réglages d'acquisition (*voir Tableau 4, page 34*) ainsi que la bibliothèque correspondante, l'ensemble d'apprentissage à tester et la façon d'analyser les codes-barres.

Tableau 4 Réglages d'acquisition

Réglage d'acquisition	Description
Puissance du laser (niveau)	<p>L'intensité du laser peut être réduite. Choisir une valeur allant de 1 à 5. 5 est la valeur maximale. La valeur recommandée est 5.</p> <p>Motifs possibles d'une diminution de la puissance du laser :</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ La mesure de matériaux difficiles comme les matériaux explosifs ou inflammables. ▪ La mesure de matériaux ayant un faible point de fusion. Les formes liquide et solide d'un composé ont des spectres différents.
Auto integration	L'appareil choisit automatiquement le meilleur temps d'intégration pour l'échantillon en cours.

Réglage d'acquisition	Description
Temps d'intégration (s)	<p>Le temps d'intégration indique la durée d'enregistrement d'un seul spectre.</p> <p>Le temps d'intégration est divisé en deux étapes.</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ Laser ON (allumé) pour acquérir le spectre de l'échantillon. ▪ Laser OFF (éteint) pour acquérir la référence. <p>La durée effective d'une mesure correspond à deux fois la valeur saisie.</p> <p>Le temps d'intégration maximal est de 30 secondes.</p>
Moyennes	<p>Si cette valeur est supérieure à 1, le spectre affiché correspondra à la valeur moyenne de plusieurs acquisitions. Avec une valeur supérieure dans ce champ, le temps de mesure sera plus long car les spectres devront être acquis en plus grand nombre.</p> <p>La moyenne s'effectue sur 10 spectres au maximum.</p> <p>Par exemple : saisir 5 pour obtenir la moyenne sur 5 spectres mesurés.</p>
Smart Tip	<p>Sélectionner l'embout à fixer requis pour mesurer les échantillons. Si aucun Smart Tip dédié n'est requis, sélectionner Allow all.</p>

Création d'une procédure de fonctionnement

- 1 Aller dans la vue **Operating Procedure**.
- 2 Aller dans l'onglet **Home**.
- 3 Cliquer sur **[New]**.

- 4 Ajouter des informations sur la procédure de fonctionnement dans l'onglet **Metadata**.

i Une fois qu'une procédure de fonctionnement est enregistrée, son nom ne peut plus être modifié.

- 5 Aller dans l'onglet **Acquisition**. Sélectionner les réglages d'acquisition souhaités.

- 6 Aller dans l'onglet **Identification**. Sélectionner la bibliothèque à utiliser pour la comparaison parmi les **Available Libraries**. Cliquer sur **[Add]** pour déplacer la bibliothèque vers les **Identification Libraries**.

Dans **Match Threshold**, l'utilisateur peut sélectionner l'indice de qualité de corrélation (HQI) minimal. La valeur par défaut est 0.85.

Sélectionner une bibliothèque pour la retirer de l'**Identification**. Cliquer sur **[Remove]**.

Si aucune bibliothèque n'est sélectionnée, l'identification ne peut pas être effectuée lors de la procédure d'évaluation.

- 7 Aller dans l'onglet **Mixture Identification**. Parmi les **Available Libraries**, sélectionner la bibliothèque à utiliser pour la concordance de mélange. Cliquer sur **[Add]** pour déplacer la bibliothèque vers les **Identification Libraries**.

Sélectionner une bibliothèque pour la retirer de la **Mixture Identification**. Cliquer sur **[Remove]**.

Si aucune bibliothèque n'est sélectionnée, l'identification de mélange ne peut pas être effectuée lors de la procédure d'évaluation.

- 8 Aller à l'onglet **Verification**. Sélectionner l'ensemble d'apprentissage à appliquer à la vérification parmi les **Available Training Sets**. Cliquer sur **[Add]** pour déplacer l'ensemble d'apprentissage vers **Verification Training Sets**.


L'utilisateur peut définir un intervalle de confiance situé entre 0,9 et 0,99.

Utiliser **Auto Increment** pour analyser un ensemble de contenants sans avoir à saisir manuellement le numéro de contenant suivant. L'utilisateur doit définir un contenant de départ et un contenant de fin. Le système incrémente automatiquement le numéro de contenant.

Lorsque l'utilisateur coche la case **Auto Increment**, le **Rescan Mode** est automatiquement activé.

Utiliser le **Rescan Mode** pour définir le nombre de fois où un contenant doit être scanné afin de garantir l'exactitude statistique. L'utilisateur peut définir les paramètres suivants pour définir les conditions d'acceptation et de rejet d'un contenant.

- Minimum pass (minimum d'acceptations)
- Maximum fail (maximum de rejets)
- Nouveaux scans requis

 Les modes d'auto-incrémentation et de renumérisation ne sont disponibles que sur l'appareil.

Sélectionner un ensemble d'apprentissage pour le retirer des **Verification Training Sets**. Cliquer sur **[Remove]**.

Si aucun ensemble d'apprentissage n'est sélectionné, la vérification ne peut pas être effectuée lors de la procédure d'évaluation.

- 9 Aller dans l'onglet **Barcodes**. Saisir ou scanner un exemple de contenu du code-barres utilisé. Définir comment les chaînes requises doivent être extraites à partir de votre code-barres.

Les informations suivantes peuvent être extraites.

- Sélection de la procédure de fonctionnement : une procédure de fonctionnement existante sera sélectionnée selon le code-barres de l'échantillon.
- ID du sous-lot
- ID du lot
- Contenant

- 10 Cliquer sur **[Save]** pour enregistrer la procédure de fonctionnement. Une fois enregistrée, la procédure de fonctionnement nouvellement créée apparaît sur la liste de la vue **Operating Procedure** sous l'onglet **Home**.

- 11 Cocher la case **Synchronize** pour permettre la synchronisation de la procédure de fonctionnement entre MIRA P/MIRA M-3 et MIRA Cal P.

Modification d'une procédure de fonctionnement

- 1 Aller dans la vue **Operating Procedures**.
- 2 Sélectionner une procédure de fonctionnement. Cliquer sur **Edit**.



- 3 Il est possible d'éditer les paramètres ci-dessous.
 - **Metadata** (hormis le nom qui ne peut plus être modifié une fois l'OP sauvegardée)
 - **Acquisition**
 - **Identification**
 - **Mixture Identification**
 - **Verification**
 - **Barcodes**
- 4 Cliquer sur **[Save]**.
- 5 Les procédures de fonctionnement éditées sont synchronisées de la même manière que les procédures de fonctionnement nouvellement créées.

5.5 Calibrage et aptitude du système

Calibrage du MIRA P/MIRA M-3

- 1 Raccorder un appareil.
- 2 Fixer un embout avec un standard de calibrage approprié sur l'appareil.
- 3 Mettre l'appareil debout.
- 4 Cliquer sur **Instrument** ► **Calibrate instrument**. Le calibrage peut prendre un certain temps.
Une boîte de dialogue confirme le succès ou l'échec du calibrage.
- 5 Après le calibrage, l'utilisateur est invité à effectuer un test d'aptitude du système. Sélectionner **[OK]** lance automatiquement le test. Sélectionner **[Cancel]** abandonne le test.

Réalisation d'un test d'aptitude du système

Le test d'aptitude du système est un autotest permettant de contrôler l'aptitude de l'appareil. Plusieurs procédures de test interne sont effectuées. Par ex. la vérification de l'intensité des pics et du calibrage du nombre d'ondes.

L'utilisateur peut exécuter ce test indépendamment du calibrage. Il faut effectuer le test quotidiennement pour s'assurer que l'appareil fonctionne

comme attendu. Après la réussite ou l'échec du test, un rapport peut être sauvegardé. Le rapport présente des informations détaillées des tests effectués.

- 1 Raccorder un appareil.
- 2 Fixer un embout avec un standard de calibrage sur l'appareil.
- 3 Cliquer sur **Instrument ► System Suitability Test**.
 Une boîte de dialogue confirme la réussite ou l'échec du test.
 Si le test d'aptitude du système échoue après le calibrage, se reporter à la section de dépannage pour plus d'informations « *Création d'un fichier journal d'assistance technique* », page 62.
- 4 Sélectionner une destination pour le fichier de rapport. Cliquer sur **[Save]**.

6 Fonctionnement et contrôle

6.1 Acquisition des données

Transfert de spectres acquis de MIRA P/MIRA M-3 à MIRA Cal P

- 1 Connecter l'appareil à MIRA Cal P.
- 2 Synchroniser MIRA P/MIRA M-3 à MIRA Cal P (*voir « Établir la liaison MIRA P/MIRA M-3 dans MIRA Cal P », page 24*).
Sélectionner **[Synchronize]** depuis la barre de menus.
Les échantillons synchronisés à MIRA Cal P apparaissent dans la vue **Sample**.

Acquisition de données avec MIRA P/MIRA M-3 connecté à MIRA Cal P

- 1 Connecter MIRA P/MIRA M-3 à MIRA Cal P.
- 2 Aller dans la vue **[Samples]**.
- 3 Cliquer sur **[Acquire]**.
- 4 Saisir les informations suivantes
 - Procédure de fonctionnement
L'utilisateur peut sélectionner des procédures de fonctionnement créées dans le logiciel et stockées sur MIRA P/MIRA M-3.
 - Nom
Saisir le nom de l'échantillon.
 - ID du lot, ID du sous-lot, contenant
 - Saisir manuellement l'ID du lot, l'ID du sous-lot et le contenant ou scanner un code-barres pour les entrer automatiquement.
Pour entrer automatiquement l'ID du sous-lot, l'ID du lot et le contenant, cocher la case **Barcode Populate**. Cliquer sur **[Scan Barcode]** pour démarrer le lecteur de code-barres de MIRA P/MIRA M-3.
- 5 Cliquer sur **[Acquire]**.

- 6 Les spectres sont affichés dans la vue **Sample**.

6.2 Affichage et gestion des données

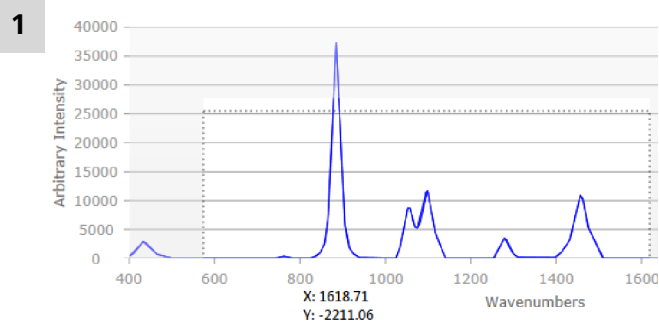
6.2.1 Affichage des échantillons

Il est possible d'utiliser la visionneuse de données spectrales pour un contrôle visuel des spectres acquis. Il est également possible d'utiliser la visualisation des données spectrales pour importer et afficher les spectres au format *.brms ou *.srmp.

Filtrer

- 1 Cliquer sur l'onglet **Filter**. En utilisant les critères de filtrage, l'utilisateur peut filtrer de grandes quantités de données.
- 2 Définir les critères de filtrage souhaités pour gérer les données de la fenêtre d'affichage.
- 3 Cliquer sur **[Clear Filters]** pour revenir au filtrage par défaut.

Zoomer



Cliquer et maintenir enfoncé le bouton gauche de la souris tout en étirant un rectangle, puis relâcher le bouton gauche de la souris.

- 2 Double-cliquer dans les données spectrales pour revenir à la taille d'origine.

6.2.2 Gestion des dossiers de tables d'échantillons

- 1 Sélectionner la vue **Sample**.
- 2 Il est possible de créer des dossiers sur le côté droit de la fenêtre de vue des échantillons.
- 3 Pour ajouter un échantillon, sélectionner l'échantillon dans la table d'échantillons. Faire un clic droit et le couper. Sélectionner le dossier souhaité et le coller dans le dossier.

6.3 Traitement d'un spectre

i Le traitement spectral ne modifie en rien les données et ne doit pas être utilisé pour déterminer la qualité d'un échantillon. Cette fonction est conçue comme un outil d'investigation permettant d'identifier les échantillons ou contenants qui ne satisfont pas aux analyses de routine. Un possible écart de la valeur p de $\pm 0,001$ est attendu entre l'appareil et le logiciel.

Les spectres peuvent être traités ou retraités en utilisant différentes méthodes.

Aller dans l'onglet **Process** dans la vue **Sample** pour visualiser les différentes options de traitement.

Identification

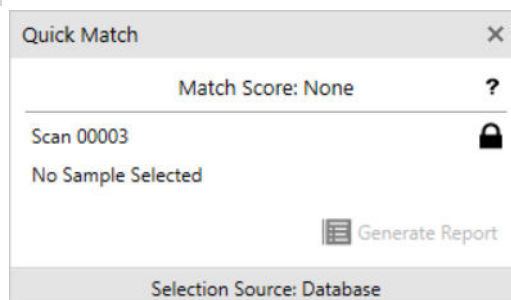
- 1 Aller dans la zone **Identification** de l'onglet **Process**.
- 2 Sélectionner la bibliothèque de comparaison dans la liste déroulante **Library**.
- 3 Augmenter ou diminuer le nombre de **Matches** pour définir le nombre de résultats à afficher.
- 4 Augmenter ou diminuer le chiffre du **Threshold** pour définir le seuil de correspondance. Si l'utilisateur réduit ce nombre, il augmente les chances d'avoir des faux positifs.
- 5 Cliquer sur **[Match]** pour effectuer la comparaison avec les paramètres sélectionnés.


Vérification

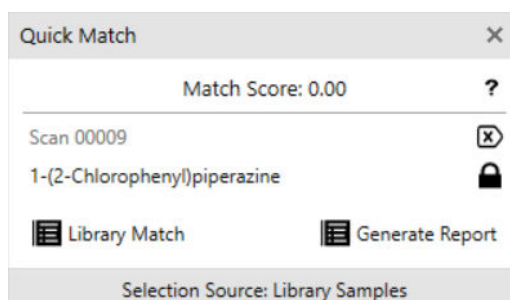
- 1 Aller dans la zone **Verification** de l'onglet **Process**.
- 2 Sélectionner l'ensemble d'apprentissage de comparaison dans la liste déroulante **Training Set**.
- 3 Augmenter ou diminuer le **Confidence Interval** pour définir la limite entre l'acceptation et le rejet.
- 4 Cliquer sur **[Match]** pour effectuer la comparaison avec les paramètres sélectionnés.

Concordance rapide (Quick match)

- 1 Cliquer sur **[Quick Match]** pour ouvrir la fenêtre de **Quick Match**.



- 2 Le spectre sélectionné s'affiche. Cliquer sur l'icône  pour verrouiller le spectre actif.
- 3 Sélectionner un spectre différent pour afficher le score de concordance entre ces 2 spectres.
- 4 Aller dans l'onglet **Bibliothèques**. La fenêtre **Quick Match** restera active.
- 5 Sélectionner une bibliothèque dans la liste. Faire un clic droit sur la bibliothèque et sélectionner **View**. Aller dans l'onglet **Library Samples**. Une icône de concordance de bibliothèques s'active alors.



- 6 Cliquer sur **[Library Match]** pour afficher le score de concordance sous la forme d'une colonne dans la liste des bibliothèques.
- 7 Cliquer sur **[Generate Report]** pour générer le rapport de concordance au format .pdf.

6.4 Audit Trail

L'Audit Trail est un journal de toutes les activités de l'utilisateur généré automatiquement. Il comprend des enregistrements précis des actions de l'utilisateur, tels que la date, l'heure et l'utilisateur.

6.5 Élaboration des rapports

Il y a 2 options pour produire un rapport d'échantillons. Les 2 procédures ci-dessous les décrivent. Les rapports sont similaires pour les deux procédures. Définir les paramètres pour les rapports dans la configuration de conformité (*voir « Onglet des rapports », page 54*).

Rapport d'échantillons, option 1

- 1 Sélectionner la vue **Sample**.
- 2 Cliquer sur l'onglet **Reports**.
- 3 Cliquer sur **[Save Summary]**, **[Batch Report]**, **[Save Full]** ou **[Save Audit]**.
- 4 Sélectionner une destination pour le fichier. Cliquer sur **[Save]**.

Rapport d'échantillons, option 2

- 1 Sélectionner un échantillon. Faire un clic droit sur l'échantillon sélectionné.

2 Aller dans **Reports**.

3 Sélectionner un format de rapport.

Il y a 2 options pour produire un rapport de bibliothèque. Les 2 procédures ci-dessous les décrivent. Les rapports sont similaires pour les deux procédures.

Rapport de bibliothèque, option 1

1 Sélectionner la vue **Libraries**.

2 Cliquer sur l'onglet **Reports**.

3 Cliquer sur **[Save Full]** ou **[Save Audit]**.

4 Sélectionner une destination pour le fichier. Cliquer sur **[Save]**.

Rapport de bibliothèque, option 2

1 Sélectionner une bibliothèque. Faire un clic droit sur la bibliothèque sélectionnée.

2 Aller dans **Reports**.

3 Sélectionner un format de rapport.

Il y a 2 options pour générer un rapport d'ensemble d'apprentissage. Les 2 procédures ci-dessous les décrivent. Les rapports sont similaires pour les deux procédures.

Rapport d'ensemble d'apprentissage, option 1

1 Sélectionner la vue **Training Sets**.

2 Cliquer sur l'onglet **Reports**.

3 Cliquer sur **[Save Full]** ou **[Save Audit]**.

4 Sélectionner une destination pour le fichier. Cliquer sur **[Save]**.

Rapport d'ensemble d'apprentissage, option 2

- 1 Sélectionner un ensemble d'apprentissage. Faire un clic droit sur l'ensemble d'apprentissage sélectionné.
- 2 Aller dans **Reports**.
- 3 Sélectionner un format de rapport.

Il y a 2 options pour produire un rapport de procédure de fonctionnement. Les 2 procédures ci-dessous les décrivent. Les rapports sont similaires pour les deux procédures.

Rapport de procédure de fonctionnement, option 1

- 1 Sélectionner la vue **Operating Procedure**.
- 2 Cliquer sur l'onglet **Reports**.
- 3 Cliquer sur **[Save Full]** ou **[Save Audit]**.
- 4 Sélectionner une destination pour le fichier. Cliquer sur **[Save]**.

Rapport de procédure de fonctionnement, option 2

- 1 Sélectionner une procédure de fonctionnement. Effectuer un clic droit sur une procédure de fonctionnement sélectionnée.
- 2 Aller dans **Reports**.
- 3 Sélectionner un format de rapport.

6.6 Revenir à une version antérieure des objets

MIRA Cal P offre la possibilité de restaurer une version antérieure d'un objet.

Les objets concernés sont :

- Samples
- Les bibliothèques
- Les ensembles d'apprentissage
- Procédures de fonctionnement

1 Cliquer sur **Compliance** ► **Revert Objects**

2 Sélectionner un objet devant être restauré. La version s'affiche dans la ligne à côté du nom.

Différents types d'objet peuvent s'afficher en basculant d'un onglet du menu à l'autre.

3 Cliquer sur **[Revert]**.

6.7 Exporter

Exportation de l'Audit Trail

1 Cliquer sur **Compliance** ► **Audit Trail**.

2 Cliquer sur **[Save As]**.

3 Sélectionner une destination pour le fichier et cliquer sur **[Save]**.

Exportation d'échantillons

i Seuls les échantillons exportés avec le type de fichier ***.brms** ou ***.srmp** peuvent être réimportés vers MIRA Cal P. Les fichiers sont cryptés afin de protéger l'intégrité des données. ***.brms** est le format par défaut sous MIRA Cal P. Les formats ***.brms** et ***.srmp** contiennent des spectres et des métadonnées telles que le temps d'intégration, les correspondances éventuelles avec les bibliothèques utilisées, les commentaires, les données de conformité ainsi que les versions de logiciel et firmware utilisées. ***.brms** est le type de fichier recommandé. ***.srmp** est supporté pour des raisons de compatibilité avec l'ancien logiciel.

- 1 Aller dans la vue **Samples**.
- 2 Sélectionner les fichiers à exporter. Il est possible de sélectionner plusieurs fichiers.
- 3 Faire un clic droit sur l'échantillon. Cliquer sur **[Save As]**.
- 4 Sélectionner un type de fichier :
 - **Format BRMS (.brms)/échantillon Raman**

Il s'agit du type de fichier par défaut et recommandé. Le **format BRMS (.brms)** contient des spectres et des métadonnées telles que le temps d'intégration, les correspondances éventuelles avec les bibliothèques utilisées, les commentaires, les données de conformité ainsi que les versions de logiciel et firmware utilisées.
 - **Format SRMP (.srmp)**

Le **format SRMP (.srmp)** contient des spectres et des métadonnées telles que le temps d'intégration, les correspondances éventuelles avec les bibliothèques utilisées, les commentaires, les données de conformité ainsi que les versions de logiciel et firmware utilisées.
 - **Format SPC (.spc)**

Le **format SPC (.spc)** est optimal pour assurer la compatibilité avec les logiciels de spectroscopie d'autres fournisseurs.
 - **Format XML (.xml)**

Le **format XML (.xml)** est un format texte.
 - **Format CSV (.csv)**

Le format **CSV (.csv)** est un format texte.
- 5 Cliquer sur **[Save]**.

Exporter des bibliothèques

- 1 Aller dans la vue **Libraries**.
- 2 Sélectionner les fichiers à exporter. Il est possible de sélectionner plusieurs fichiers.
- 3 Faire un clic droit sur la bibliothèque. Cliquer sur **[Save As]**. Les bibliothèques ne peuvent être sauvegardées que sous le type de fichier .lrmp.
- 4 Sélectionner une destination pour le fichier. Cliquer sur **[Save]**.

Exporter des ensembles d'apprentissage

- 1 Aller à la vue **Training Sets**.
- 2 Sélectionner les fichiers à exporter. Il est possible de sélectionner plusieurs fichiers.
- 3 Faire un clic droit sur l'ensemble d'apprentissage. Cliquer sur **[Save As]**. Les ensembles d'apprentissage peuvent être sauvegardés sous les types de fichier .trmp ou .json.
- 4 Sélectionner une destination pour le fichier. Cliquer sur **[Save]**.

Exporter des procédures de fonctionnement

- 1 Aller dans la vue **Operating Procedures**.
- 2 Sélectionner les fichiers à exporter. Il est possible de sélectionner plusieurs fichiers.
- 3 Effectuer un clic droit sur la procédure de fonctionnement. Cliquer sur **[Save As]**. Les procédures de fonctionnement ne peuvent être sauvegardées que sous les types de fichier .ormp ou .json.
- 4 Sélectionner une destination pour le fichier. Cliquer sur **[Save]**.

6.8 Sauvegarde de la base de données

Exportation d'une base de données

i Seuls les utilisateurs de rôles **Laboratory Manager** et **Administrator** ont accès à cette fonctionnalité.

- 1 Cliquer sur **File** ► **Advanced** ► **Database** ► **Backup**.
- 2 Sélectionner une destination pour le fichier. Cliquer sur **[Save]**.

Restauration de la base de données

i Noter que les données existantes du MIRA Cal P seront écrasées par les données du fichier de la base de données.

Un fichier de base de données MIRA Cal P existant doit être disponible en format **.litdb** ou **.db**.

- 1 Cliquer sur **File** ► **Advanced** ► **Database** ► **Restore**.
- 2 Sélectionner l'emplacement de la base de données ainsi que le fichier de bases de données à restaurer. Cliquer sur **[Open]**.
- 3 Confirmer la restauration. Sélectionner **[Yes]**.

6.9 Administration

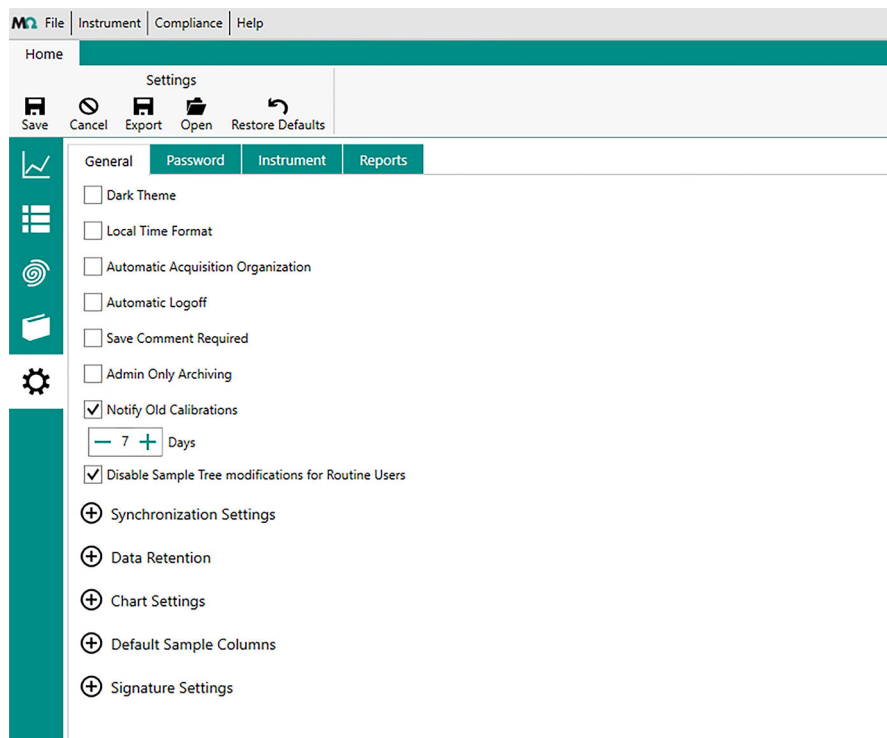
6.9.1 Configuration de conformité

i Seuls les administrateurs ont accès à ces fonctionnalités.

Cliquer sur **Compliance** ► **Compliance Configuration** pour ouvrir la configuration de conformité.

Onglet General

Pour déployer la même configuration sur plusieurs ordinateurs, exporter et importer le paramétrage de configuration. Pour exporter les paramètres de configuration, cliquer sur **[Export]** sous l'onglet **Home**. Cliquer sur **[Open]** pour importer le paramétrage de configuration.



General

Dark Theme

Couleur de l'interface utilisateur

Local Time Format

Dates et heures au même format que la date et l'heure de l'ordinateur (p. ex. DD/MM/YYYY ou MM/DD/YY)

Automatic Acquisition Organization

Les échantillons collectés par le logiciel sont placés dans un dossier spécifique, indépendamment du dossier en cours, avec cet ordre *Nom d'appareil > Mois Année > Date*. Si cette option est désactivée, les échantillons collectés par le logiciel sont placés dans le dossier ouvert. Si aucun dossier n'est ouvert, le logiciel adoptera par défaut le schéma **Automatic Acquisition Organization** décrit ici.

Déconnexion automatique

Déconnexion automatique au bout d'un certain temps

Save Comment Required

Oblige les utilisateurs à écrire un commentaire s'ils changent d'objet.

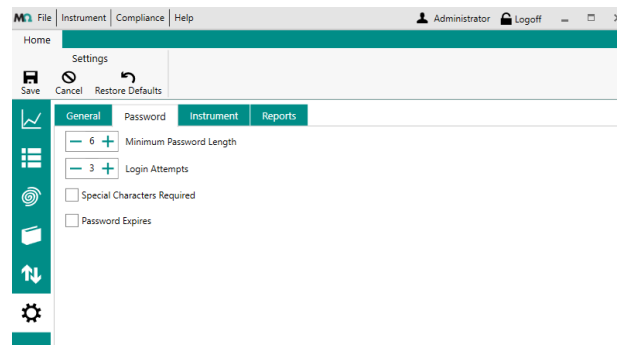
Admin Only Archiving

Seuls les utilisateurs admin peuvent archiver des objets.

Notify Old Calibrations

Notifie à l'utilisateur le dépassement du nombre de jours défini pour le calibrage d'un appareil.

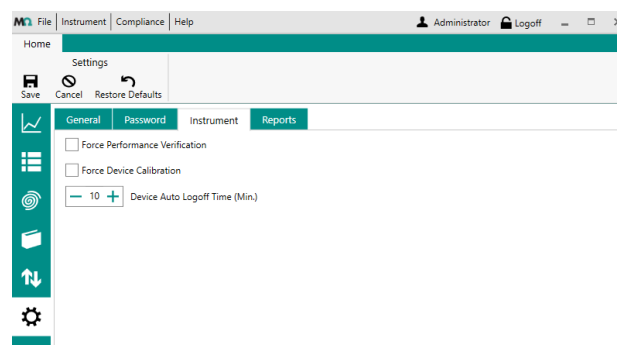
Onglet mot de passe



Password

Paramétrages tels que les longueurs minimum des mots de passe, le nombre possibles de tentatives d'identification, l'utilisation de caractères spéciaux et l'éventuelle expiration du mot de passe.

Onglet Instrument



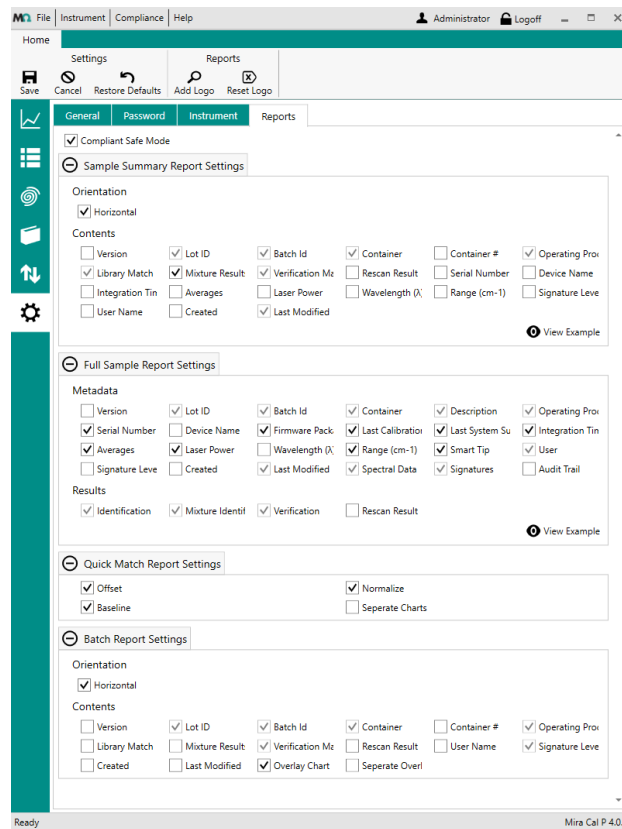
Instrument ►

Paramétrages concernant le contrôle de la performance, le calibrage et le délai avant déconnexion automatique.

Force Performance Verification

Si la case est cochée, MIRA P/MIRA M-3 doit utiliser la CVA pour les tests d'adéquation du système. Si elle n'est pas cochée, MIRA P/MIRA M-3 n'aura pas besoin de CVA.

Onglet des rapports



Sample Summary Report Settings

Paramètres à afficher dans le rapport condensé des échantillons.

Full Sample Report Settings

Paramètres à afficher dans le rapport complet des échantillons.

Quick Match Report Settings

Paramètres à afficher dans le rapport de concordance rapide.

Batch Report Settings

Paramètres à afficher dans le rapport de lot.

6.9.2 Signature d'objets

Avec MIRA Cal P, l'utilisateur peut signer des objets.

Les objets signés ne peuvent pas être modifiés. Si des modifications sont nécessaires, la signature de cet objet doit d'abord être supprimée.

Les objets concernés sont :

- Samples
- Les bibliothèques
- Les ensembles d'apprentissage
- Procédures de fonctionnement

L'opération est la même pour tous les objets et est décrite ici pour une procédure de fonctionnement.

1er niveau de signature

- 1 Aller dans la vue **Operating Procedure**.
- 2 Ouvrir l'onglet **Signatures** ou effectuer un clic droit sur la procédure de fonctionnement souhaitée. Cliquer sur **[Sign Level 1]**.
- 3 Saisir l'identifiant et le mot de passe et choisir un motif de signature. Cette connexion est indépendante de l'utilisateur actuellement connecté à MIRA Cal P.

The screenshot shows a dialog box titled 'Sign Level 1' with a close button (X) in the top right corner. Inside the dialog, there are four input fields: 'User Name' (a text box), 'Password' (a text box), 'Reason' (a dropdown menu currently showing 'Approved'), and 'Comment' (a larger text area). At the bottom right of the dialog, there is a button labeled 'Sign' with a small pen icon to its left.

- 4 Cliquer sur **[Sign]**. **Signature Level 1** s'affiche dorénavant dans la colonne **Signature** de l'objet.

2e niveau de signature

- i** Le groupe d'utilisateurs de type « routine user » n'est pas autorisé à effectuer une signature de niveau 2.
- i** Un utilisateur ayant signé un objet au 1er niveau n'est pas autorisé à signer ce même objet au 2e niveau. Cet objet doit être signé par un autre utilisateur.


- 1 Aller dans la vue **Operating Procedure**.
- 2 Ouvrir l'onglet **Signatures** ou effectuer un clic droit sur la procédure de fonctionnement souhaitée. Cliquer sur **[Sign Level 2]**.

6.9.3 Configuration de l'administration des utilisateurs

6.9.3.1 Gestion des utilisateurs

Informations générales

MIRA Cal P dispose d'une administration des utilisateurs intégrée déjà activée au démarrage initial. Un compte d'administrateur général est défini pour le premier démarrage.

 Nom d'utilisateur et mot de passe initiaux :

Nom d'utilisateur : admin

Mot de passe : Change!


L'administration des utilisateurs est nécessaire et ne peut être désactivée. Tous les utilisateurs doivent donc utiliser leurs propres informations d'identification pour s'identifier. Toutes les opérations seront enregistrées avec ce nom d'utilisateur.

Paramétrages de conformité FDA

Afin d'assurer la conformité aux réglementations FDA, il est impératif de configurer une administration des utilisateurs. Les paramètres de sécurité peuvent être activés selon la réglementation 21 CFR Partie 11 en cochant les cases correspondantes. Les conditions suivantes seront alors remplies :

- Il est nécessaire de **s'identifier avec son identifiant et son mot de passe** à chaque démarrage du logiciel.
- **Les noms d'utilisateur** doivent être **uniques**. Les utilisateurs ne peuvent pas être supprimés, une fois enregistrés.
- Les mots de passe doivent être modifiés à l'expiration d'une certaine **durée de validité** définie.
- Les **mots de passe** ne doivent pas être **réutilisés**. Les 5 derniers mots de passe périmés ne peuvent pas être réutilisés.
- Le **nombre de tentatives d'identification** avec un mot de passe incorrect est limité. Suite à des tentatives d'identification avec un mot de passe incorrect en nombre supérieur à celui prédéfini, l'utilisateur sera automatiquement affecté au statut **inactive** (la valeur par défaut est 3 tentatives).

Définir les paramétrages relatifs au mot de passe dans la configuration de conformité (*voir « Onglet mot de passe », page 53*).

 Seuls les administrateurs ont accès aux fonctionnalités d'administration des utilisateurs.

Création d'un utilisateur

- 1 Aller dans **Compliance** ► **User Management**

2 Cliquer sur **[New]** pour créer un utilisateur.

3 Saisir le nom. Choisir un groupe d'utilisateurs. Saisir et confirmer le mot de passe.

Les groupes d'utilisateurs suivants existent.

- Routine User
Se connecter à l'appareil. Acquérir et visualiser les échantillons, signer les échantillons au niveau 1.
- Laboratory manager
En plus des droits des utilisateurs de type « routine user » : créer et gérer les bibliothèques, les ensembles d'apprentissage et les procédures de fonctionnement. Signer tous les objets, visualiser et exporter les Audit Trails et les sauvegardes de la base de données.
- Administrateur
En plus des droits des utilisateurs des types « routine user » et « laboratory user » : accès aux fonctionnalités d'administration des utilisateurs. Effectuer des mises à jour (du firmware, du pilote de l'appareil).
- IT Admin
Un niveau d'utilisateur limité ayant l'autorisation de changer les réglages de type informatique mais ne pouvant ni modifier des données, ni en produire de nouvelles. Les autorisations comprennent :
 - Gérer la base de données (emplacement, backups, etc.)
 - Gérer les utilisateurs/mots de passe
 - Gérer la configuration du logiciel (délai de déconnexion, paramètres de synchronisation, rapports personnalisés, exportation de données...)


4 Le nouvel utilisateur doit se connecter à MIRA Cal P et changer son mot de passe de démarrage.

i Un utilisateur ne sera pas synchronisé avec l'appareil tant qu'il n'aura pas changé dans MIRA Cal P le mot de passe de démarrage pour un nouveau mot de passe.

Réinitialisation des mots de passe des autres utilisateurs (comme administrateur)

1 Aller dans **Compliance** ► **User Management**

2 Sélectionner un utilisateur dans la liste et cliquer sur **[Edit User]**.

- 3 Saisir le nouveau mot de passe initial deux fois dans les champs d'entrée.
- 4 L'utilisateur concerné devra s'identifier avec le nouveau mot de passe initial lors de sa prochaine tentative d'identification. Il devra ensuite définir un nouveau mot de passe.
 -  Un utilisateur ne sera pas synchronisé avec l'appareil tant qu'il n'aura pas changé le mot de passe de démarrage fourni pour un nouveau mot de passe dans MIRA Cal P.

Changer son propre mot de passe

- 1 Aller dans **Compliance** ► **Change Password**
- 2 Saisir l'ancien mot de passe.
Saisir le nouveau mot de passe initial deux fois dans les champs d'entrée.

Le nouveau mot de passe est actif à la prochaine connexion à MIRA Cal P.

Désactiver/activer des utilisateurs

- 1 Aller dans **Compliance** ► **User Management**
- 2 Sélectionner un utilisateur dans la liste.
- 3 Cocher ou décocher la case **Enabled**.
Les utilisateurs concernés n'auront plus accès à MIRA Cal P.
 -  L'utilisateur ne devra pas automatiquement entrer un nouveau mot de passe après que son statut aura été modifié de « désactivé » à « réactivé ». Si le mot de passe doit être modifié en raison de la politique de votre entreprise, dans un second temps, l'administrateur devra réinitialiser manuellement le mot de passe de l'utilisateur verrouillé.

Action	Utilisateur de routine	Responsable labo	IT	Administrateur
Configuration de conformité			X	X
Mise à jour logiciel et firmware			X	X
Backup base de données		X	X	X
Restaurer la base de données			X	X
Réinitialiser la base de données			X	X
Changer la langue du logiciel			X	X
Voir les informations de l'appareil	X	X	X	X
Attribuer les autorisations appareil			X	X
Exécuter un script			X	X
Créer un fichier d'assistance	X	X	X	X

La configuration de la conformité comprend (entre autres) :

- Le format de l'heure
- La politique de mots de passe
- L'obligation de sauvegarder des commentaires
- Le délai de déconnexion automatique
- Les réglages de synchronisation
- Les paramètres du rapport
- Signature Settings
- Default Sample Columns
- Période et paramètres de conservation des données
- Périodicité du calibrage
- Importation des rapports XSLT personnalisés

Autres fonctions :

- Exporter une configuration
- Importer une configuration
- Restaurer la configuration par défaut

7 Dysfonctionnements et traitement des problèmes

7.1 Création d'un fichier journal d'assistance technique

Cette fonction permet de créer un fichier journal. En cas d'assistance, le fichier journal créé peut être envoyé à votre représentant Metrohm local.

Un standard de calibrage doit être joint.

Création d'un journal d'assistance

Le fichier d'assistance est adaptatif :

- Si un appareil est connecté, il reprendra des données d'appareils.
- Si aucun appareil n'est connecté, il ne reprendra que les données du PC.

1 Cliquer sur **Help ► Create Support File**.

Un fichier journal est créé. Cela peut prendre un certain temps.

2 Sélectionner une destination pour le fichier. Cliquer sur **[Save]**.