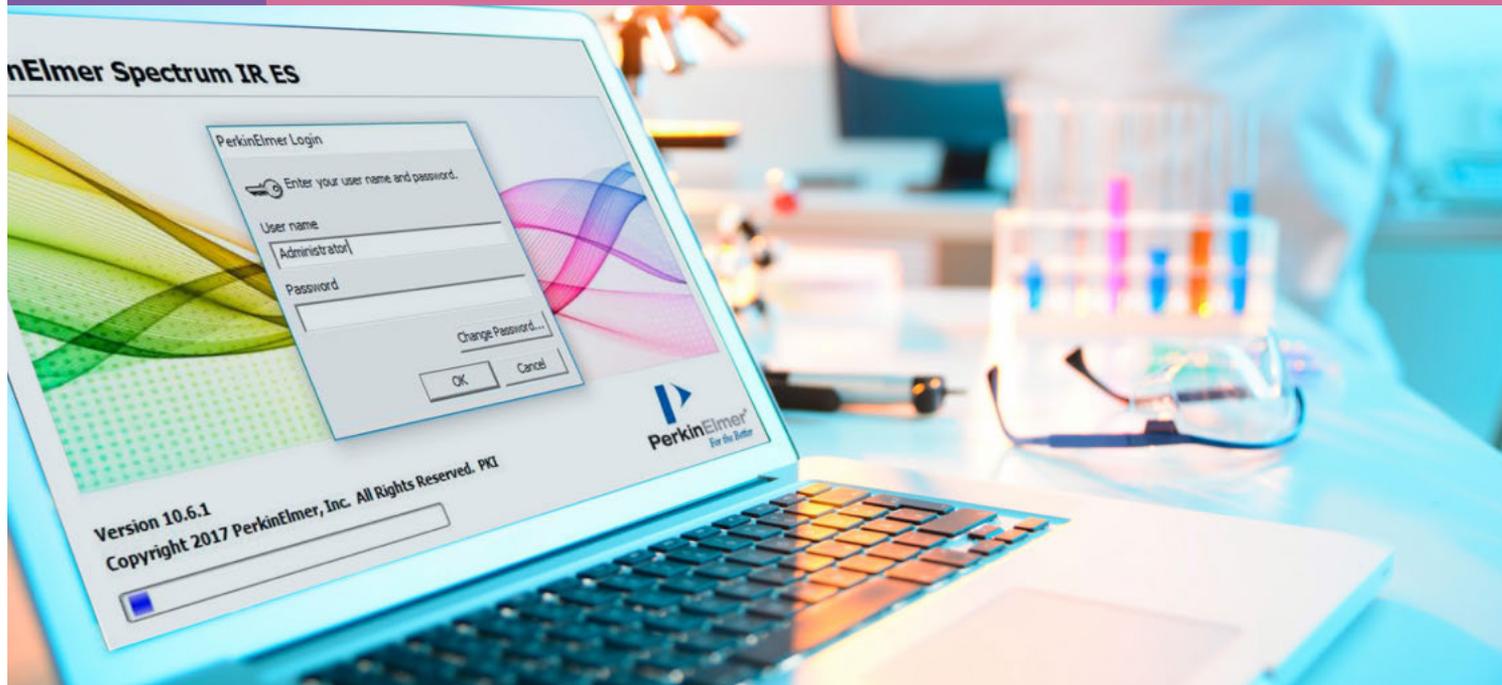


# 数据完整性——Spectrum 10 Enhanced Security (ES) 红外光谱仪软件



## 简介

按照美国食品药品监督管理局的规定，数据完整性指“数据的完整性、一致性和准确性。完整、一致和准确的数据应该是具有归属性、清晰易读性、同步产生性、原始记录或真实副本，以及准确性 (ALCOA)”。<sup>1</sup>ALCOA 本身已经演变为 ALCOA Plus 版，纳入了 FDA 规定的两个基本定义，即：数据完整性指数据的完整性、一致性、持久性和可用性。<sup>2</sup> 在美国出售药品的制药公司及其供应商必须遵守 21 CFR Part 11 法规，此法规也适用于其它相关行业。

PerkinElmer 的 Spectrum™ 10 Enhanced Security (ES) 软件平台适用于红外光谱仪，可提供有助于确保数据完整性和合规性的结构和功能。它使系统所有者能够在符合相关法规的前提下，将系统功能纳入验证计划中，体现其合规性。本文旨在展示 Spectrum 10 ES 软件如何满足 21 CFR Part 11 款法规的技术要求。

## Spectrum 10 ES

Spectrum 10 ES 能够严格控制红外数据的设置、收集和报告，符合 21 CFR Part 11 法规的技术要求 (图 1 和图 2)。此外，本软件的界面易于使用，可降低对非专业操作员的培训要求。Spectrum 10 ES 的大多数功能都与标准版软件的功能一致。两种版本的主要不同之处在于下列几个方面：

- 登录
- 权限
- 电子签名
- 记录保护
- 审计跟踪的使用

Spectrum 10 ES 软件能兼容 Frontier™、Spectrum Two™、Spectrum Two N™、Spectrum 400、Spectrum 100/100N、Spectrum One/NTS PerkinElmer FT-IR 和 FT-NIR 等光谱仪。本软件仅读取可识别、已加密的 PerkinElmer 格式的文件。

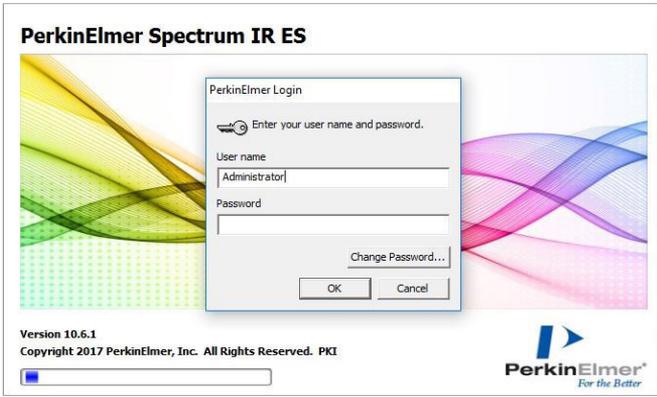


图 1. Spectrum 10 ES 软件的登录窗口。

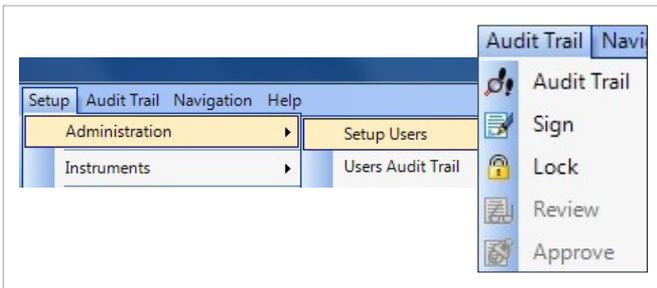


图 2. Spectrum 10 ES 软件工具栏上显示的增强安全功能。  
备注：只有管理员才能使用“设置用户”和“用户审计跟踪”这两项功能。

PerkinElmer 的 Enhanced Security AssureID ES 软件和 Spectrum Touch™ Es 软件也适用于红外光谱仪，并可提供优化的、以工作流程为导向的各类分析方法。Spectrum Touch Es 的界面操作简单、易于使用，可通过运行预先设置好的应用程序 (App) 来执行具体的分析，同时有助于用户遵守 21 CFR Part 11 法规 (图 3)。Spectrum Touch ES 中高度可定制的 Touch 应用程序采用 Spectrum 10 ES 和 Spectrum Touch Developer 创建而成。ES 功能也通过 Spectrum 10 ES 进行配置。Spectrum Touch ES 的触摸屏经过优化，使仪器能够在制造环境中移动。不过，本软件也可以安装在普通计算机中。

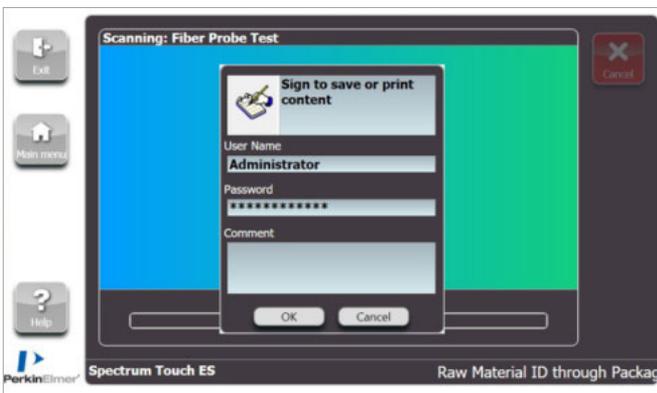


图 3. 要求用户为生成数据登录签名的 Spectrum Touch ES 界面。

## 软件登录

所有具有访问权限的用户只能通过唯一的用户名和密码登录 Spectrum 10 ES 软件，不得重新注册新账户。仪器的“服务模式 (Service Mode)”也受密码控制，只有当用户以“服务用户”的身份登录系统时，才能使用“服务模式”功能。Spectrum FL Es 管理员可在软件中进行用户设置 (图 4)。用户可通过下列任何一种密码登录模式登录本软件：

- PerkinElmer 账户登录→每一位 Spectrum 用户在本系统中都有一个唯一的登录信息 (用户名和密码)，即便用户从公司离职也是如此。
- Windows 账户登录→即通过 Windows® 操作系统的账户登录本系统，这意味着用户只需记住一个密码。

为了确保完全遵守 21 CFR Part 11 法规的技术要求，登录安全性包括管理员可限定的功能，例如密码过期、登录失败检测和锁定。系统会将用户所有访问记录或访问尝试记录记录到审计跟踪当中。用户失败登录次数不得超过某个具体数值。如果使用 PerkinElmer 账户登录的用户的账户因为其失败登录次数达到了管理员预先设定好的限值而被锁定一段时间 (由管理员设定)，或管理员刚刚解锁账户，那么 Spectrum 10 ES 管理员可以先向该用户分配一个临时密码，而该用户在此之后首次使用 Spectrum 10 ES 时 (即下一次登录时)，必须更改密码。由于 Spectrum 10 ES 的安全系数很高，我们强烈建议用户设置一名以上的管理员，以免出现其中一名管理员不在线或管理员忘记密码的情况。本软件不为安全系统设“后门”。如果用户通过 Windows 登录时账户被锁，公司的 IT 管理员将需要解锁其账户和 / 或为其提供临时密码。

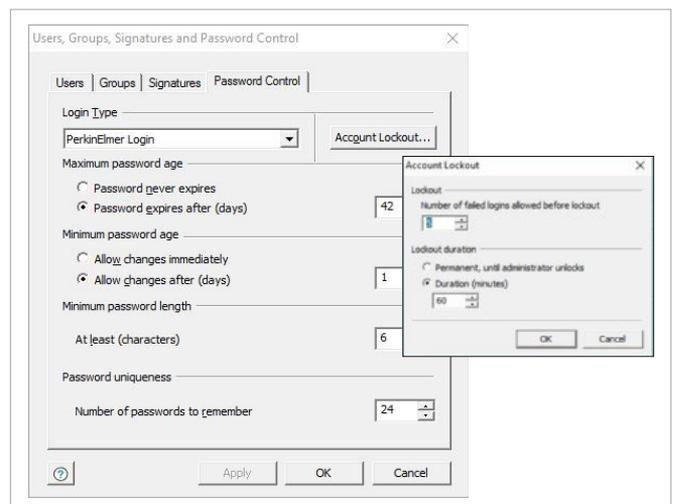


图 4. 登录信息和密码控制设置 (左图) 和账户锁定设置 (右图)。

## 用户和用户组的权限

Spectrum 10 ES 通过各种权限组来强制实施权限检查。每个权限组都有各自的软件访问权限，具体取决于管理员为其勾选的权限。一个用户可以被分配到一个或多个预先设定好的权限组。安装时，本软件默认设有下列权限组。

默认权限组包括：

- **管理员**——主要的安全管理功能由系统默认（例如：设置用户 / 权限组的登录和权限）。管理员可以是其他组的成员（例如“用户组”）。
- **系统主管**——除了基本管理权限外，还拥有一系列默认扩展权限（例如：保存权限组工作区、添加 / 删除仪器等）。系统主管还可以设置和检查用户的工作区。
- **用户**——除了与“管理员”、“返回工作区”、“审查”和“批准”相关的功能外，“用户”组的成员可以执行软件中的所有功能。“用户”组的默认权限少于“系统主管”组的默认权限。
- **审核人**——“审核人”组的成员负责审查其他用户做出的需要电子签名的任何变更。审核人还可以检查其他人的工作区。
- **审批人**——“审批人”组的成员负责批准其他用户作出的需要电子签名的任何变更。审核人还可以检查其他人的工作区。

只有 Spectrum 10 ES 管理员才有权更改权限组访问相关功能的权限、添加新组、维护系统，以及为各个用户分配可访问区域。管理员可以更换用户所属的组，并确定相关组有权访问的软件区域（图 5）。这使得实验室可以根据具体的分析要求，定制能使其工作流程最有效的应用。

此外，系统主管可以设置默认的权限组工作区（图 6）。这意味着系统主管可以将当前设置应用到所有选定的组。

## 电子签名

Spectrum 10 ES 中的管理员可以为某些操作配置签名点，例如 数据收集和结果输出（图 7），管理员可以分别配置签名点，也可以将相同的设置应用于所有签名点。相关人员可以在退出时或执行操作前（若适用）输入签名，也可以选择“审计跟踪”，然后选择“签名”。报告文件也会显示相关签名。

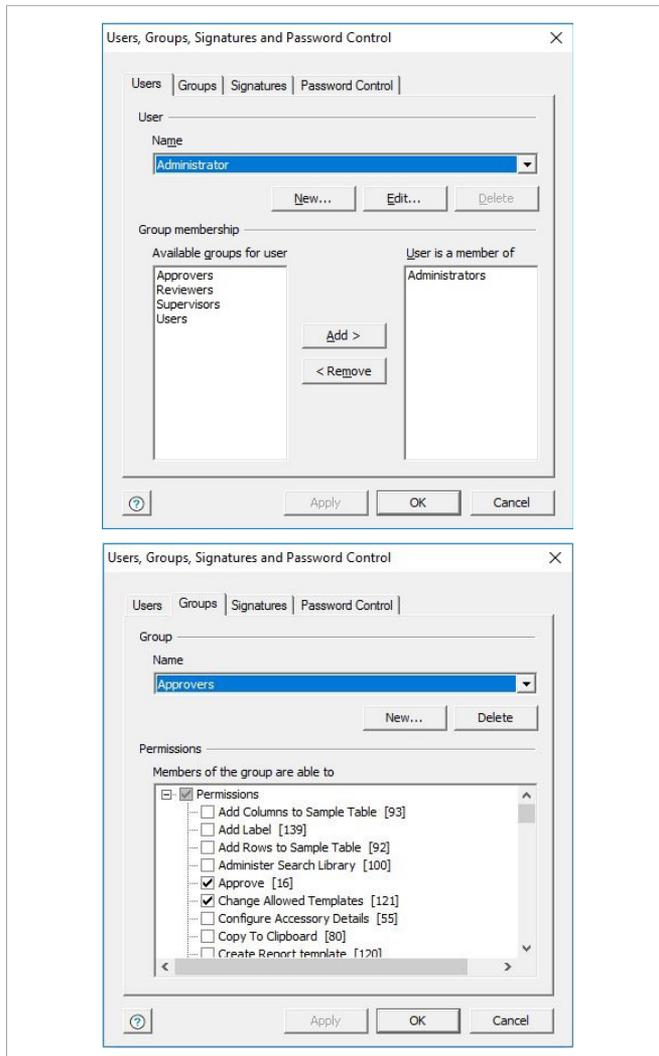


图 5. 组成员（上）和组权限（下）的设置。

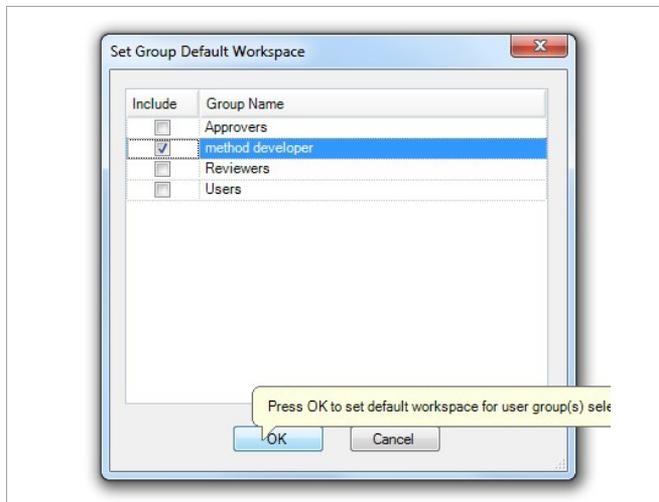


图 6. 系统主管设置工作区的界面。

软件中的签名点列表需预先定义，包括（但不限于）：

- 加载和保存仪器设置文件；
- 报告已完成的检查和仪器验证；
- 生成报告；
- 导出数据；
- 删除图表；
- 创建或更改公式和宏；
- 批准和审核已由其他用户签名的项目。

如果某个签名点没有勾选“需要签名”，那么系统将不会提示用户签名。如果某个项目需要签名，那么系统进行审计跟踪时将记录执行签名的用户名、签名日期和时间、备注和 / 或预先设定的原因。当签名事件触发时，系统会自动跳出一个对话框，此时用户必须输入用户名和对应的密码。管理员可以决定签名点是否需要备注和 / 或预先设定原因。相关人员签名时可以从下拉列表中选择预先设定好的原因。图 8 显示了可用签名对话框设置的示例。

## 记录保护

Spectrum 10 ES 将数据都存储在加密的 SQL 数据库中 (AssureID ES 使用的是加密的 Access 数据库)，可以保障文

件和数据的完整性。许多系统都使用“平面文件”方法，即将光谱保存为单个文件（与 Spectrum STD 一样）。为了确保结果安全，平面文件的使用要求手动对 Windows® 文件系统进行更加详细的配置。平面文件能够保存的审计跟踪信息也有限。通过 Spectrum 10 ES，操作员可以灵活地使用平面文件或数据库这两种方式中的任意一种，这有助于操作员从使用平面文件过渡到使用首选的加密数据库。此外，Spectrum 10 ES 还有一个安全数据库负责处理系统安全，例如：登录、密码、用户、用户组和电子签名政策。

PerkinElmer 的加密数据库可用于管理数据、设置和报告。如果出现电源故障，但还有数据尚未来得及签名，那么相关人员可以从软件中恢复相关数据，签上自己的用户名，然后保存。用户还可以从数据库中检索工作区，然后在保存工作区时复制该工作区的工作环境——包括数据和设置。

FDA 正在促进制药公司和相关行业以电子方式审查和批准数据。如果使用 Spectrum 10 ES 和 AssureID ES 软件，用户既可以在单机配置的设备进行电子审查和批准，也可以在网络数据库中进行电子审查和批准。将数据保存在网络上可以简化 IT 组的数据备份流程。

## 审计跟踪

Spectrum 10 ES 用户和结果 / 工作区的审计跟踪完整、一致且全面，用户可以查看、打印和导出这些审计跟踪以便检查。

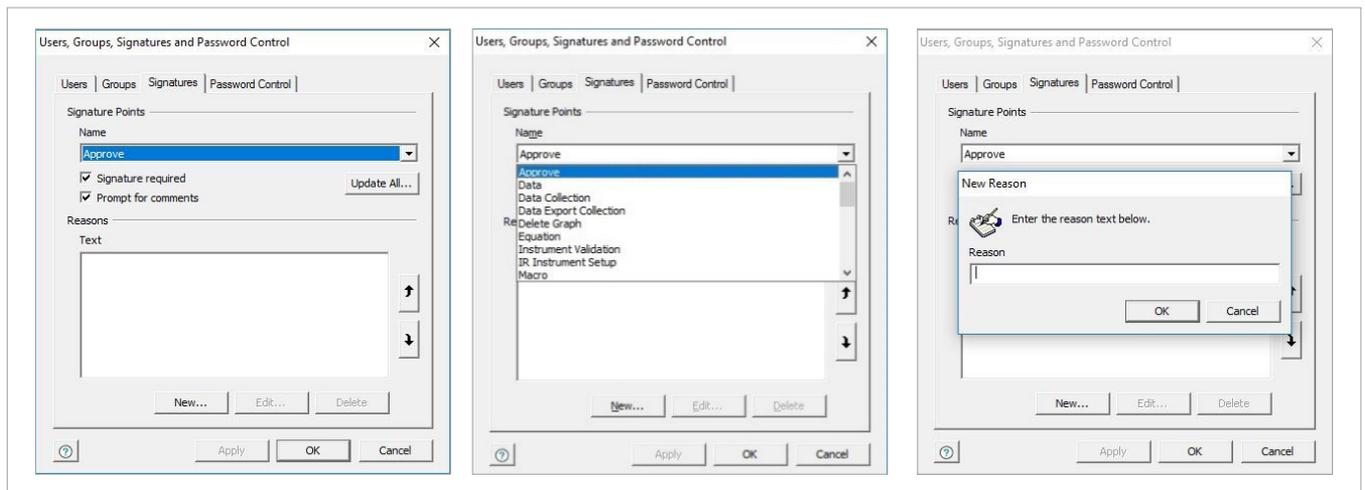


图 7. 单个签名点设置的配置。

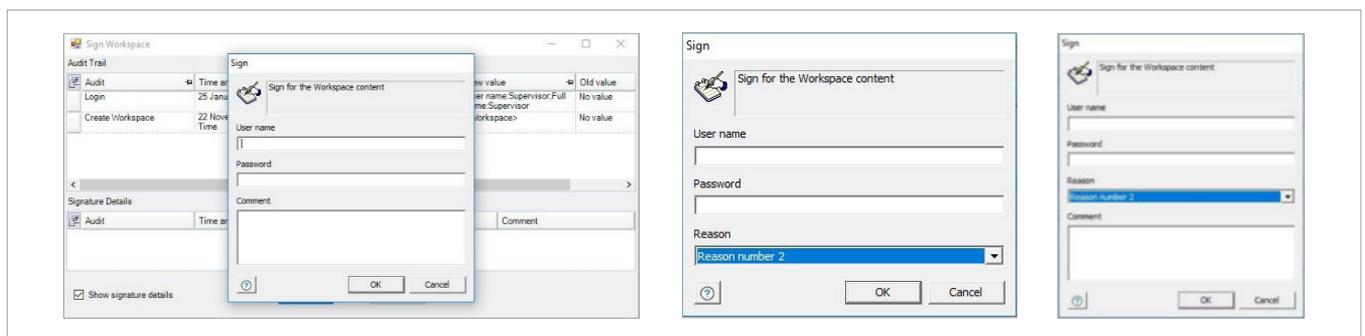


图 8. 签名对话框设置。

## 结果 / 工作区的审计跟踪

工作区审计跟踪 (图 9) 记录了用户在 Spectrum 10 ES 创建的所有设置、流程和结果,例如:光谱获取、峰标记和库搜索。本审计跟踪还包含用户的详细信息、记录创建、修改或删除时的日期戳和时间戳、新值、旧值和修改类型。当更改生效时,审计跟踪文件也会随之更新。例如,若用户更改了仪器设置,则只有当用户按下了扫描按钮,审计跟踪功能才会记录此信息。因此,如果用户先对仪器设置进行了一次更改,然后在扫描前对仪器设置再作了一次更改,那么仪器扫描时会将最新的扫描设置更新到审计跟踪当中。用户更改了某些设置,但随后又在应用所述更改之前取消了所述更改的,系统不会记录所述更改。

修改后的记录不会覆盖之前的记录,若记录修改会影响到已签字的数据,则系统将为新记录新建一份文件(光谱文件、公式、宏等),同时保留原始文件。软件中生成的结果或数据将无法删除或覆盖。

用户可以使用同一台计算机或通过网络在 Spectrum 10 ES 中查看本审计跟踪显示的活动。通过审计跟踪菜单中的“返回(分析员)”、“审查”或“批准”选项,用户可以加载工作区和添加电子签名,具体取决于相关权限。审计跟踪的默认空间容量为 6 GB,但可以增加到 10 GB。用户可以检索工作区(图 9),然后在保存工作区时复制该供工作区的工作环境——包括数据和设置。

此外,光谱文件中包含光谱历史记录(图 10)。这些历史记录包含所有样品详情、对仪器进行的设置、扫描期间进行的任何校准(例如 AVI 技术),以及数据收集后对数据执行的所有操作。样品历史记录将包括执行所述操作(这些操作通常具有处理性质)的用户账户。

## 用户审计跟踪和登录历史记录

用户审计跟踪和登录历史记录都保存在安全数据库中,只有“管理员”组的成员才能查看(图 11)。用户审计跟踪会记录符合《联邦法规 21 章》第 11 款法规的对安全设置(用户设置、组设置和密码设置)的所有更改。登录历史记录详细记录了用户账户、用户登录时间、登出时间和登录状态(例如:登录失败)。本记录还记录异常情况,例如:软件崩溃导致的强制注销。“汇总”选项卡包含了应用到工作区和用户的设置列表和权限列表。



图 9. 结果 / 工作区的审计跟踪。

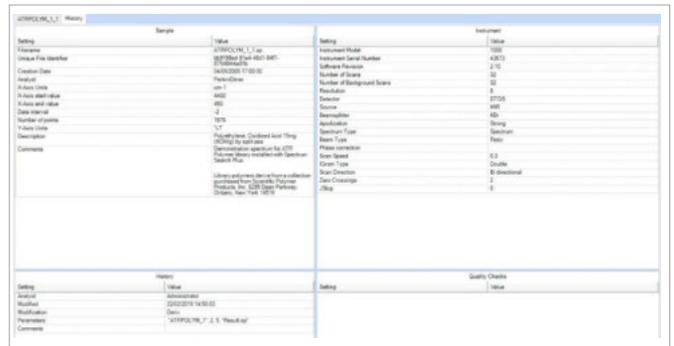


图 10. 光谱历史记录。

Spectrum 10 ES 管理员可以查看、打印和导出登录历史记录和用户审计跟踪,以便检查。本对话框中只能清除之前已经导出过的登录历史记录和审计跟踪记录。如果某条审计跟踪记录包含上次导出的记录以外的记录,那么只有已归档的记录才可以被删除(如需)。如果用户尝试删除的审计跟踪记录或登录历史记录全部未归档,那么系统将显示警告信息(图 12)。本对话框将始终记录用户于何时导出或清除登录历史记录或审计跟踪记录。

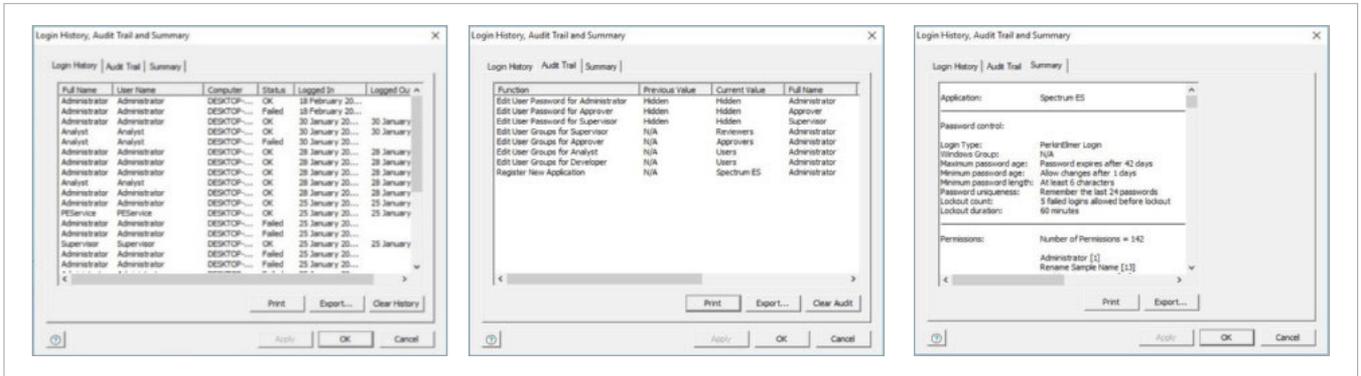


图 11. 登录历史记录或审计跟踪记录。

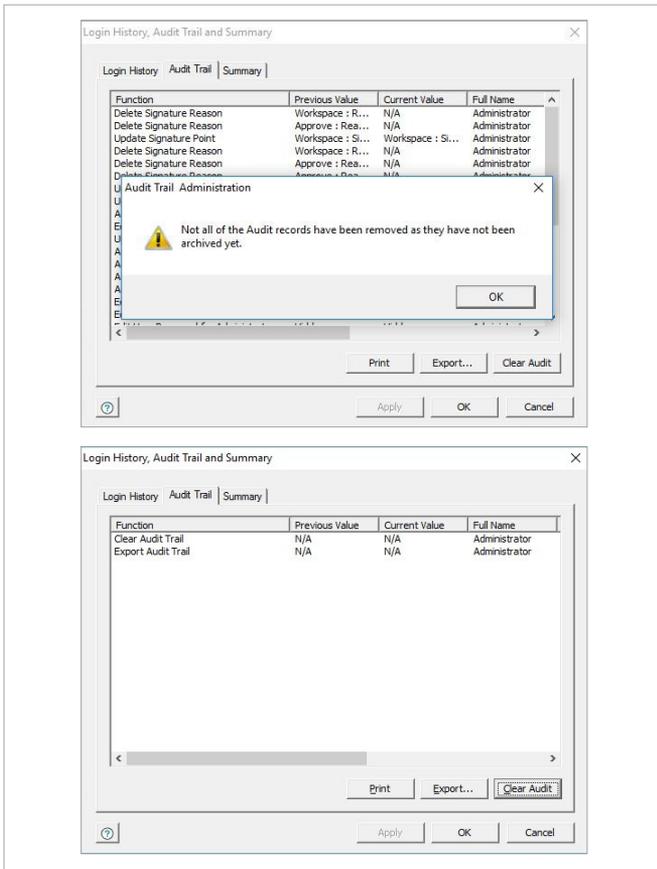


图 12. 用户未先导出审计跟踪就尝试清除用户审计跟踪时系统提示的警告 (上), 以及用户导出和清除审计跟踪后的界面 (下)。

## Spectrum 10 ES Report Designer

Spectrum 10 ES Report Designer 是确保用户满足数据完整性要求的另一附加功能。用户可使用这一灵活度极高的功能来生成报告, 并将报告保存为加密的 PDF 格式。这些文件都采用独一无二的格式 (来自 PerkinElmer) 加密, 一旦对其作任何的修改, 其都将变得无效, 且无法加载。只有具备相应权限的用户才能在 Spectrum 10 ES 软件中生成报告。同样, 只有具备相应权限的用户才能打开 Report Designer 来创建或编辑模板。

## 仪器性能测试

与标准版软件一样, Spectrum 10 ES 配备了一个内置的仪器性能验证解决方案, 用户可轻松运用此解决方案来确保符合各种药典的规定 (图 13)。



图 13. Spectrum 10 中的“仪器验证设置”选项卡。

Spectrum 10 ES 还会执行检查, 确保收集到的数据有效。例如, 若用户更改了仪器配件或选择了更高的光谱分辨率, 则 Spectrum 10 ES 将强制执行新的背景校正。

此外, PerkinElmer OneSource® UOQ 计划使实验室能够持续遵守不断变化的监管条件。

UOQ 计划包括:

- 用户定制的协议, 包括根据药典要求进行测试的方案。本协议最终确定且被批准后将锁定, 这样用户在测试期间就无法更改本协议。
- 服务工程师按照用户规定的规格对仪器进行的测试。为了缩短停机时间, 服务工程师可同时测试多台仪器。
- UOQ 报告, 本报告是一份超级安全的文档, 里面内容包括通过 / 未通过记录和内置计算结果。本报告符合《联邦法规 21 章》第 11 款法规的要求。
- 数字电子档案, 其可轻松提供审计所需的信息。

我们的通用操作验证 (UOQ) 计划支持 FT-IR、UV/Vis、HPLC、UPLC 和 GC 系统, 且可以在不考虑设备制造商的情况下, 促进年度操作验证的测试、报告和审查等的效率。

## 结论

PerkinElmer 的 Spectrum 10 Enhanced Security 软件平台适用于红外光谱仪, 可使数据更安全、更完整, 且符合 21 CFR Part 11 法规的要求。除了加强的访问控制功能外, ES 软件还可以将数据、实验参数和审计跟踪信息自动存储在加密数据库中。凭借着 ES 软件中的“审计跟踪”功能, 用户检查时可以快速、简单地恢复数据操作参数和事件, 以便检查。系统管理员可以为某些操作添加电子签名点, 并将其纳入审计跟踪。用户还可以运用我们全面的仪器验证模块来评估仪器性能。

## 参考文献

1. Data Integrity and Compliance with Drug CGMP: Questions and Answers; Guidance for Industry, Food and Drug Administration, 2018.
2. The 5P Model for Data Integrity, Institute of Validation Technology, 2018. Available from: <http://www.ivtnetwork.com/article/5p-model-data-integrity>.

珀金埃尔默企业管理(上海)有限公司  
地址: 上海 张江高科技园区 张衡路 1670 号  
邮编: 201203  
电话: 021-60645888  
传真: 021-60645999  
[www.perkinelmer.com.cn](http://www.perkinelmer.com.cn)



有关我公司完整的全球办事处设立情况, 请访问 [www.perkinelmer.com/ContactUs](http://www.perkinelmer.com/ContactUs)

版权 ©2019, 珀金埃尔默公司。版权所有。PerkinElmer® 是 PerkinElmer, Inc. 的注册商标。其他所有商标均为其各自所有者的财产。