



Application Note AN-RS-031

Creación de modelos RMID simplificados

Mira Cal P y ModelExpert

Los modelos de verificación de materiales con algoritmos complejos como el análisis de componentes principales (PCA), parámetros casi infinitos y opciones de preprocesamiento pueden ser increíblemente complejos. Cada modelo debe construirse, evaluarse y validarse de forma rigurosa antes de ponerlo en práctica de forma rutinaria. Por lo general, esto puede llevarle días incluso a un quimiometrero altamente capacitado.

Mira P simplifica la verificación de materiales para todos. Con un flujo de trabajo corto y definido por el usuario, resultados sencillos y un diseño basado en

procedimientos operativos infalibles, Mira P es ya una de las herramientas de RMID más sencillas que existen. ModelExpert, en Mira Cal P, hace el trabajo de un quimiometrero. ModelExpert determina automáticamente los mejores parámetros del modelo para un desarrollo robusto del método. Simplemente recopile los datos del conjunto de entrenamiento y del conjunto de validación y ModelExpert optimizará el análisis de muestras. Con Mira P y ModelExpert, incluso los usuarios no técnicos pueden conseguir mejores resultados en muchísimo menos tiempo.

ModelExpert es una función integrada en Mira Cal P que optimiza los parámetros del modelo utilizando muestras de conjuntos de entrenamiento y conjuntos de validación proporcionados por el usuario. Esta

rutina itera 192 combinaciones de parámetros estadísticos para garantizar que se aplique la configuración óptima del modelo al muestreo del cliente.

DESCRIPCIÓN

ModelExpert aprovecha el poder de las curvas de características operativas del receptor (ROC) en la determinación automatizada de parámetros del modelo. Las curvas ROC son una parte integral de la evaluación de los modelos de Machine Learning. El enfoque ROC clasifica las combinaciones según la

puntuación del Área bajo la curva (AUC). La clasificación de ModelExpert también incluye *posteriormente* conocimiento sobre qué combinaciones funcionan mejor que otras, además de penalizar las combinaciones que producen falsos positivos/negativos en el intervalo de confianza dado.

MÉTODO

Para usar la función ModelExpert, el usuario primero crea un nuevo conjunto de entrenamiento en Mira Cal P. ModelExpert se encuentra en Conjuntos de entrenamiento en el menú verticales. Una vez que se selecciona ModelExpert, el software ejecuta automáticamente todos los posibles combinaciones de configuraciones del modelo (p. ej., normalizaciones, eliminación de línea base, principio componentes) para los datos dados mientras 'Encontrar Configuración del modelo' se muestra (Figura 1).

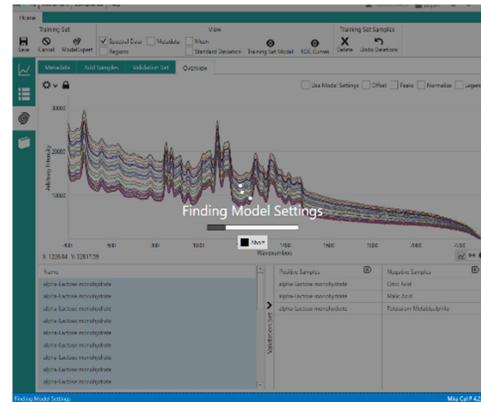


Figure 1. Captura de pantalla de Mira Cal P durante la rutina de ModelExpert.

RESULTADOS

Los resultados de ModelExpert aparecen en una ventana emergente, (**Figura 2**). Esta ventana resume la configuración resultante de ModelExpert. Se puede generar un informe en PDF que contenga más información sobre la configuración del modelo, las curvas ROC y las muestras de validación con los valores de p asociados. Una vez que se selecciona "Guardar conjunto de entrenamiento", todos los parámetros del modelo optimizado se aplican a los conjuntos de entrenamiento y validación asociados.

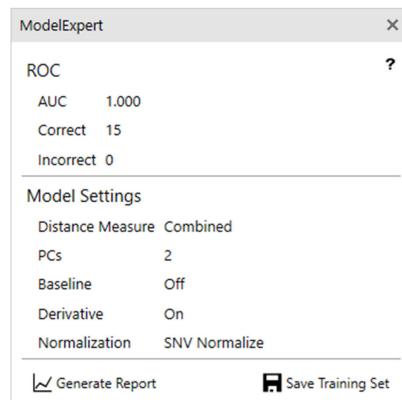


Figure 2. Ventana emergente con los resultados de ModelExpert.

CONCLUSIÓN

En general, la función ModelExpert es un método simple y transparente para generar parámetros óptimos y procesamiento de datos de muestra utilizando datos del cliente, todo con unos pocos clics

en Mira Cal P. Metrohm Raman se dedica a ofrecer el uso más simple, eficiente y preciso de Mira P para RMID.

CONTACT

Metrohm Hispania
Calle Aguacate 15
28044 Madrid

mh@metrohm.es

CONFIGURACIÓN



MIRA P Advanced

El Metrohm Instant Raman Analyzer (MIRA) P es un potente espectrómetro Raman portátil que se puede utilizar para determinar y verificar de forma rápida y no destructiva los más diversos materiales como, por ejemplo, principios activos y excipientes de uso farmacéutico. Pese a su pequeño tamaño, el MIRA P es muy robusto y cuenta con un espectrógrafo de diseño muy eficiente, que está equipado con nuestra extraordinaria tecnología Orbital Raster Scan (ORS). El MIRA P cumple la normativa FDA 21 CFR Parte 11.

El paquete Advanced incluye una lente adicional con la que los materiales se pueden analizar directamente o en sus recipientes (láser de clase 3b) y un accesorio de soporte de vial para analizar las muestras que se encuentran en viales de vidrio (láser de clase 1).