



Application Note AN-RS-045

Transición de operaciones RMID entre dispositivos Raman portátiles

Transferencia de biblioteca y modelos de NanoRam 785 a MIRA P

Para obtener resultados con calidad de laboratorio en escenarios de pruebas no tradicionales, como la inspección de materiales en el punto de recepción, la espectroscopia Raman supera los métodos tradicionales de identificación y verificación de materias primas (RMID). Los dispositivos Raman portátiles agilizan los procesos RMID y verifican de manera eficiente la calidad y la consistencia de un material. Esta eficiencia ayuda a los fabricantes a ahorrar tiempo y recursos, garantizando operaciones más confiables y rentables.

Los modelos de verificación son clave para RMID con

espectroscopia Raman. Es posible transferir modelos de verificación establecidos y validados que ya se utilizan rutinariamente de un producto Raman de Metrohm a otro. Por ejemplo, aunque NanoRam 785 ya no se venda, los clientes existentes pueden trasladar fácilmente sus operaciones RMID a MIRA P. Esta nota de aplicación describe la transferencia de bibliotecas y modelos personalizados/de usuario de NanoRam 785 a MIRA P para la transición más fluida posible. La transferencia de modelos entre instrumentos MIRA P se analiza en una nota de aplicación independiente ([AN-RS-044](#)).

INTRODUCCIÓN

Los usuarios de NanoRam 785 (NR785) pueden encontrar los conceptos básicos de construcción de modelos para MIRA P en el sitio web de Metrohm [1]. Se supone que los lectores de esta solicitud son usuarios de NR785 que están familiarizados con los conceptos básicos de RMID y ya están trabajando con modelos establecidos.

Transferir modelos entre NR785 y MIRA P es simplemente una cuestión de cambiar los formatos de archivo y volver a ensamblar el modelo NR785 para MIRA P. Los nuevos usuarios descubrirán que las pruebas de calidad con MIRA P y su software, MIRA Cal P, son sencillas e intuitivas.

TERMINOLOGÍA

La terminología del software difiere entre NanoRam ID (NID) y MIRA Cal P. Los términos se definen en

Tabla 1.

Tabla 1. Términos relevantes utilizados en NID y MIRA Cal P.

Software	Identificación de NanoRam	MIRA Cal P
Recopilación de datos	Preajuste operativo	Procedimiento operativo (OP)
Parámetros de verificación	Método	Modelo de conjunto de entrenamiento
Formato de archivo de datos	CSV	Sistema de gestión de riesgos BRMS
Curva ROC	Un método analítico utilizado para evaluar el rendimiento de un modelo en varios umbrales.	

IDENTIFICACIÓN VS. VERIFICACIÓN

Los métodos de identificación miden la similitud espectral entre una muestra desconocida y una colección de espectros de biblioteca. La identificación se puede realizar con una biblioteca personalizada o una biblioteca de estándares como la [Biblioteca USP completa de Metrohm](#).

A diferencia de la identificación, **verificación** Detecta diferencias espectrales muy leves para una alta especificidad. Cada espectro de muestra se proyecta en un conjunto de entrenamiento (es decir, una colección de espectros que representan la sustancia objetivo) para ver qué tan bien coincide con los criterios del modelo. Este proceso puede discriminar entre muestras muy similares (por ejemplo, el mismo producto químico de dos productores diferentes) para cumplir estrictamente con los estándares de verificación.

El tipo de transferencia depende del tipo de transferencia de biblioteca de pruebas para identificación y de transferencia de método/modelo para verificación.



Paso 1. Exportación de datos

Identificación	Verificación
Los datos de la biblioteca se exportan desde el software B&W Tek NID como archivos CSV	Los datos del método se exportan desde el software B&W Tek NID como archivos CSV

Paso 2. Convertir formato de datos

Identificación	Verificación
Para ambos tipos de transferencia, los archivos CSV exportados se convierten al formato binario BRMS para su uso por MIRA P. Metrohm proporciona una herramienta de conversión de software para este proceso.	

Paso 3. Configurar el software MIRA Cal P

Identificación	Verificación
La herramienta de conversión crea una carpeta que contiene datos de la biblioteca convertidos que se importan a MIRA Cal P. Se crea una nueva biblioteca y se sincroniza con el dispositivo para su uso inmediato. Este es un proceso muy sencillo.	Metrohm ofrece un procedimiento operativo estándar de verificación simple. Se crea un nuevo OP para cada material en MIRA Cal P, se sincroniza con el dispositivo y se utiliza para recopilar escaneos de validación.

Paso 4. Nuevo modelo en MIRA Cal P

Identificación	Verificación
—	Importe los datos convertidos de NR785 a las carpetas correspondientes en MIRA Cal P. Cree un conjunto de entrenamiento con las muestras de transferencia. Crear un conjunto de validación. Genere todas las curvas ROC, luego seleccione la mejor curva y guárdela. Anade el modelo validado al OP. Sincronice MIRA P y el modelo estará listo para usar.

TRANSFERENCIA DE DATOS Y MÉTODOS

Después de la transferencia y la optimización ROC, las configuraciones del modelo para un ejemplo de

lactosa se enumeran en **Tabla 2** abajo.

Table 2. ROC-optimized model settings.

PCS	3
Pretreatment	Mean Center
Distance Measure	Combined
Confidence Interval	0.95
Normalization	Min/Max Normalize
Smooth	YES
Points	13
Poly Order	3
Baseline	NO
Derivative	YES
IVC	YES

VALIDACIÓN CON P-VALUES

Validación de un modelo demuestra que el modelo evalúa adecuadamente un material en un nuevo instrumento. En otras palabras, los datos de validación sirven como un «diagnóstico» de cómo funciona el modelo en la nueva unidad.

La validación es una evaluación de un método utilizando muestras de prueba:

- que se espera que PASEN (muestras positivas).
Se trata de muestras del material de destino que son diferentes a las muestras utilizadas para construir el conjunto de entrenamiento.
- que se espera que FALLEN (muestras negativas).
Estos pueden ser materiales diferentes o similares pero diferentes. Esto garantiza la especificidad de un modelo.

Tabla 3. Resultados de la prueba de validación con

Tabla 3 muestra los resultados de la prueba de validación para un modelo de lactosa, después de la transferencia. La lactosa es un excelente indicador del éxito de la transferencia porque es un material particularmente desafiante para Raman de 785 nm debido a la fluorescencia.

La robustez y especificidad del modelo son bastante altas después de la transferencia. Esto se probó incluyendo diferentes tipos de lactosa (con números CAS únicos) en el conjunto de validación negativa y confirmando que fallaron adecuadamente.

valores p aprobados (verde) y reprobados (rojo).

Positive Samples	p-values	Negative Samples	p-values
α -Lactose Monohydrate	0.194	Acetaminophen	0.001
α -Lactose Monohydrate	0.672	Calcium Stearate	0.001
α -Lactose Monohydrate	0.56	Citric Acid	0.001
α -Lactose Monohydrate	0.673	Dextrose	0.001
		α -D-Lactose Monohydrate	0.012
		Lactose Anhydrous	0.001
		Lactose/APAP	0.001
		L-Thyroxine	0.001
		Sucrose	0.001
		Theophylline	0.001

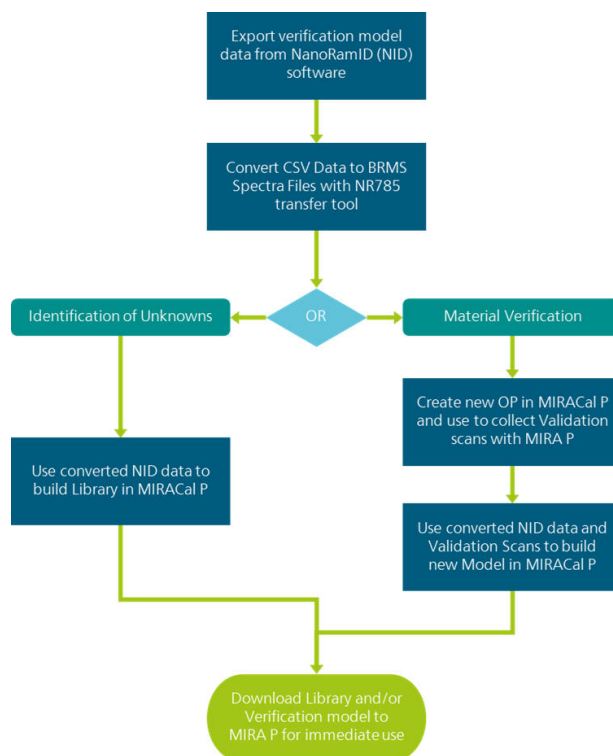
CONCLUSIÓN

La transferencia de la biblioteca y el modelo NanoRam 785 a MIRA P es un procedimiento simple que permite una transición rápida y eficiente. Aproveche

la cartera Raman de Metrohm para obtener la mejor experiencia RMID posible.

REFERENCIAS

1. Arce, M. Yo. Raman en el mundo real: simplificando la inspección de materia prima entrante. *Analizar esto – El blog de Metrohm*, 2021



CONTACT

Metrohm México
Calle. Xicoténcatl #181, Col
Del Carmen, Alcaldía
Coyoacán.
04100. Ciudad de México
México

info@metrohm.mx

CONFIGURACIÓN



MIRA P Basic

El Metrohm Instant Raman Analyzer (MIRA) P es un potente espectrómetro Raman portátil que se utiliza para la determinación y verificación rápida y no destructiva de diversos tipos de materiales como, por ejemplo, principios activos y excipientes de uso farmacéutico. A pesar del pequeño tamaño del aparato, el MIRA P tiene un diseño resistente y cuenta con un espectrógrafo altamente eficiente equipado con nuestra exclusiva tecnología Orbital Raster Scan (ORS, por sus siglas en inglés). El MIRA P cumple plenamente con las directivas de la FDA 21 CFR Part 11.

El paquete básico MIRA P permite al usuario adaptar el MIRA P a sus necesidades. El paquete básico Mira es un paquete inicial que incluye los componentes esenciales para operar el Mira P.

El paquete básico contiene los accesorios de calibración/verificación de MIRA, la librería de la USP y el adaptador LWD para los análisis en botellas o bolsas. Funciona con clase de protección láser 3B.



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).



MIRA P Flex

El MIRA P Flex Package permite al usuario adaptar el MIRA P a sus necesidades. El Flex Package incluye todos los componentes básicos para el funcionamiento del MIRA P sin adaptadores para la toma de muestras. Para su funcionamiento se requiere al menos un adaptador para la toma de muestras. El MIRA P Flex Package contiene la librería de la USP, accesorios para la calibración y la verificación, y un cable USB. Operación con clase 3B.