



Application Note AN-RS-031

Costruzione del modello RMID semplificato

Mira Cal P e ModelExpert

I modelli per la verifica dei materiali mediante algoritmi complessi, come l'analisi delle componenti principali (PCA), i parametri quasi infiniti e le opzioni di pre-elaborazione, possono essere incredibilmente complicati. Ogni modello deve essere costruito in modo rigoroso, valutato e convalidato prima di poterlo utilizzare regolarmente. In genere, questo può richiedere giorni anche a un chemiometrico altamente qualificato.

Mira P semplifica la verifica dei materiali sotto ogni punto di vista. Con un flusso di lavoro breve e definito dall'utente, risultati diretti e un design basato su una

sequenza operativa estremamente semplice, Mira P è già uno degli strumenti per RMID più semplice disponibili. ModelExpert, all'interno di Mira Cal P, svolge il lavoro del chemiometrico. ModelExpert determina automaticamente i parametri modello migliori per lo sviluppo di un metodo robusto. Raccogli semplicemente i dati del Training Set e del Validation Set e ModelExpert ottimizzerà l'analisi del campione. Con Mira P e ModelExpert anche gli utenti non tecnici possono ottenere risultati migliori in tempi molto rapidi.

INTRODUZIONE

ModelExpert è una funzione integrata in Mira Cal P che ottimizza i parametri del modello utilizzando i campioni di Training Set e Validation Set forniti dall'utente. Questa routine itera 192 combinazioni di

parametri statistici per garantire che le impostazioni ottimali del modello vengano applicate al campionamento dei clienti.

DESCRIZIONE

ModelExpert sfrutta la potenza delle curve delle caratteristiche operative del ricevitore (ROC) nella determinazione automatizzata dei parametri del modello. Le curve ROC sono parte integrante della valutazione dei modelli di Machine Learning. L'approccio ROC classifica le combinazioni in base al

punteggio Area Under the Curve (AUC). La classifica ModelExpert include anche la conoscenza *a posteriori* quali combinazioni si comportano meglio di altre, oltre a penalizzare le combinazioni che producono falsi positivi/negativi al dato intervallo di confidenza.

METODO

Per utilizzare la funzione ModelExpert, prima l'utente crea un nuovo set di allenamento in Mira Cal P. ModelExpert si trova nel Training Set nel menu verticale. Una volta selezionato ModelExpert, il software esegue automaticamente tutte le possibili combinazioni di impostazioni del modello (ad es. normalizzazioni, rimozione della linea di base, principio componenti) per i dati forniti mentre 'Trova Impostazioni modello' viene visualizzato (Figura 1).

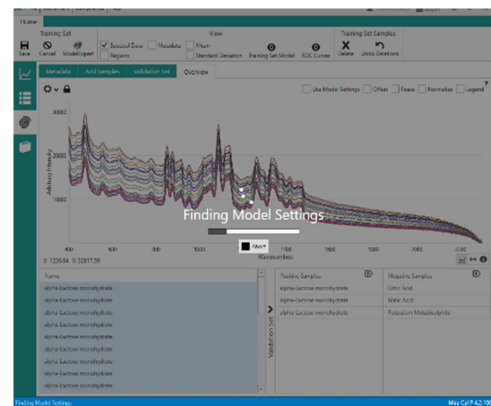
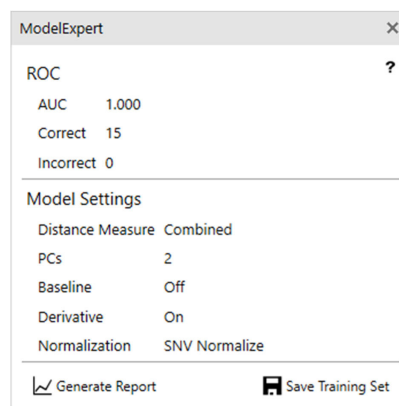


Figure 1. Schermata di Mira Cal P durante la routine ModelExpert.

RISULTATI

I risultati di ModelExpert vengono visualizzati in una finestra popup, (figura 2). Questa finestra riassume le impostazioni ModelExpert risultanti. È possibile generare un report PDF contenente ulteriori informazioni sulle impostazioni del modello, sulle curve ROC e sui campioni di convalida con i valori p associati. Dopo aver selezionato "Salva training set", tutti i parametri del modello ottimizzato vengono applicati ai training e validation set associati.



ModelExpert	
ROC	
AUC	1.000
Correct	15
Incorrect	0
Model Settings	
Distance Measure	Combined
PCs	2
Baseline	Off
Derivative	On
Normalization	SNV Normalize
Generate Report	
Save Training Set	

Figure 2. Finestra popup con risultati ModelExpert.

CONCLUSIONE

Nel complesso, la funzione ModelExpert è un metodo semplice e trasparente per generare parametri ottimali ed elaborare dati campione utilizzando i dati

dei clienti, il tutto con pochi semplici click in Mira Cal P. Metrohm Raman è dedicato a offrire l'uso più semplice, efficiente e preciso di Mira P per RMID.

CONTACT

Metrohm Italiana Srl
Via G. Di Vittorio, 5
21040 Origgio (VA)

info@metrohm.it

CONFIGURAZIONE



MIRA P Advanced

Metrohm Instant Raman Analyzer (MIRA) P è uno spettrometro raman palmare ad alte prestazioni utilizzabile per determinazione e verifica rapide e non distruttive di svariate tipologie di materiale tra cui principi attivi ed eccipienti farmaceutici. Nonostante le dimensioni ridotte, MIRA P è estremamente robusto e dispone di uno spettrografo ad alta efficienza dotato della tecnologia brevettata ORS (Orbital Raster Scan). MIRA P soddisfa la normativa FDA 21 CFR parte 11.

La configurazione Advanced Package comprende una lente accessoria che permette l'analisi dei materiali diretta o attraverso gli imballi originali (laser classe 3b) e un porta vial per analizzare i campioni contenuti in vial di vetro (laser classe 1).