



Sistema Agilent Cerity di gestione dati in rete per QA/QC in campo farmaceutico



Guida ai concetti Quadro generale



Agilent Technologies

Avvisi

© Agilent Technologies, Inc. 2003

Nessuna parte di questo manuale può essere riprodotta in alcun formato o con alcun mezzo (inclusa l'archiviazione e la scansione elettroniche o la traduzione in una lingua straniera) senza previo consenso scritto di Agilent Technologies, Inc. secondo le disposizioni di legge sul diritto d'autore degli Stati Uniti, internazionali e locali applicabili.

Codice del manuale

G4000-94023

Edizione

5/2003

Stampato in Germania

Agilent Technologies Deutschland GmbH
Hewlett-Packard-Strasse 8
76337 Waldbronn, Germania

Microsoft[®] is a U.S. registered trademark of Microsoft Corporation.

Software Revision

Questa Guida si applica alle revisioni A.02.xx del software Sistema Agilent Cerity di gestione dati in rete per QA/QC in campo farmaceutico, dove xx è un numero compreso tra 00 e 99 e fa riferimento alle revisioni minori del software, che non hanno effetto sull'accuratezza tecnica della presente Guida.

Garanzia

Le informazioni contenute in questo documento sono fornite allo stato corrente e sono soggette a modifiche senza preavviso nelle edizioni future. Agilent non rilascia alcuna garanzia, esplicita o implicita, relativamente al presente manuale e alle informazioni in esso contenute. Salvo il caso di dolo o colpa grave Agilent non sarà responsabile di errori o danni diretti o indiretti relativi alla fornitura o all'uso di questo documento o delle informazioni in esso contenute. In caso di separato accordo scritto fra Agilent e l'utente con diverse condizioni di garanzia relativamente al contenuto di questo documento in conflitto con le condizioni qui riportate, prevarranno le condizioni dell'accordo separato.

Licenze sulla tecnologia

I componenti hardware e/o software descritti in questo documento vengono forniti con licenza e possono essere utilizzati o copiati solo in conformità ai termini di tale licenza.

Indicazioni di sicurezza

AVVERTENZA

L'indicazione **AVVERTENZA** segnala un rischio. Richiama l'attenzione su una procedura operativa o analoga operazione che, se non eseguita correttamente o non rispettata, può provocare danni al prodotto o la perdita di dati importanti. Non eseguite mai alcuna operazione ignorando l'**AVVERTENZA**, fatelo solo dopo aver compreso e applicato completamente le indicazioni di Agilent.

ATTENZIONE

L'indicazione **ATTENZIONE** segnala un rischio serio. Richiama l'attenzione su una procedura operativa o analoga operazione che, se non eseguita correttamente o non rispettata, può provocare lesioni personali o morte. Non eseguite mai alcuna operazione ignorando l'indicazione **ATTENZIONE**, fatelo solo dopo aver compreso e applicato completamente le indicazioni di Agilent.

Contenuto della Guida...

Questa Guida ai concetti presenta un quadro generale del sistema Cerity di gestione dati in rete (NDS) per applicazioni QA/QC in campo farmaceutico allo scopo di:

- comprendere l'uso dei componenti di Cerity for Pharmaceutical QA/QC
- risparmiare tempo chiedendo assistenza in linea

1 Panoramica del sistema NDS Cerity per QA/QC in campo farmaceutico

Informazioni su come i componenti Cerity for Pharmaceutical QA/QC si integrano rispettando gli standard di conformità.

2 Cerity for Pharmaceutical QA/QC - Elementi di base dell'applicazione

Informazioni sugli strumenti per l'analisi di campioni, l'impostazione di metodi e la stesura di rapporti.

3 Concetti di base per l'analisi dei campioni

Concetti che facilitano l'inserimento, l'analisi e la revisione dei risultati di campioni e sequenze.

4 Concetti per l'impostazione dei metodi

Concetti per facilitare l'impostazione dei metodi.

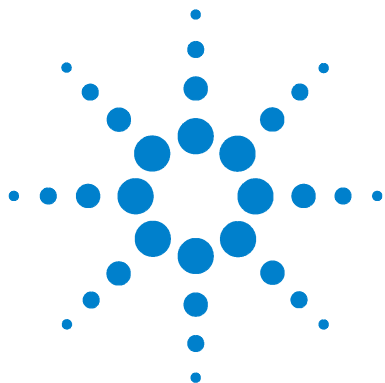
5 Applicazioni per l'amministrazione e la gestione

Informazioni sugli strumenti di gestione per impostare e mantenere Cerity for Pharmaceutical QA/QC.

Sommario

1	Panoramica del sistema NDS Cerity per QA/QC in campo farmaceutico	7
	Sistema in uso	8
	Interazione dei componenti NDS Cerity	11
	Come è possibile ottenere la conformità alle normative utilizzando il sistema NDS Cerity	17
2	Cerity per QA/QC in campo farmaceutico - Elementi di base dell'applicazione	21
	Le quattro finestre di lavoro principali	22
	Strumenti di lavoro principali	26
	Assistenza in linea	28
	Analisi dei campioni	30
	Ricerche nel database	36
	Modifica di metodi	38
	Salvataggi nel database	39
	Impostazione del metodo	43
3	Analisi dei campioni	47
	Inserimento di campioni o sequenze	49
	Preparazione dell'analisi	52
	Programmazione e tracciamento dell'analisi	53
	Revisione dei risultati	56
	Rifiuto o approvazione dei risultati	62

	Rielaborazione dei metodi calibrati	65
	Revisioni dei risultati e della tavola di calibrazione	70
	Revisione e rintracciabilità delle sequenze	75
4	Impostazione dei metodi	91
	Concetti del metodo Cerity per QA/QC in campo farmaceutico	93
	Sezioni del metodo Cerity per QA/QC in campo farmaceutico	98
	Calibrazione	104
	Calcoli personalizzati	110
	Layout di revisione dei dati	127
	Reporting	130
5	Applicazioni per l'amministrazione e la gestione	141
	Impostazione dopo l'installazione	142
	Amministrazione del sistema e manutenzione di NDS Cerity	148



1

Panoramica del sistema NDS Cerity per QA/QC in campo farmaceutico

Sistema in uso 8

Interazione dei componenti NDS Cerity 11

Come è possibile ottenere la conformità alle normative utilizzando il sistema NDS Cerity 17

Questo capitolo fornisce una panoramica su tutti i componenti del Sistema Agilent Cerity di gestione dati in rete per QA/QC in campo farmaceutico e sulla loro interazione che consente di effettuare il lavoro conformemente alle normative.

Verrà illustrato come i tre componenti principali, ossia server di database, controllore di acquisizione e client di revisione, interagiscono per soddisfare le esigenze del laboratorio.



Sistema in uso

Il sistema NDS Cerity può essere un sistema di tipo Professional o un sistema Client/Server.

Sistema Professional (Agilent G4000AA)

Il sistema NDS Cerity Professional funziona su Workstation in ambiente Windows.

Benché venga fornito con cinque licenze utente nominative per Oracle, il sistema può essere utilizzato da un solo utente NDS Cerity alla volta.

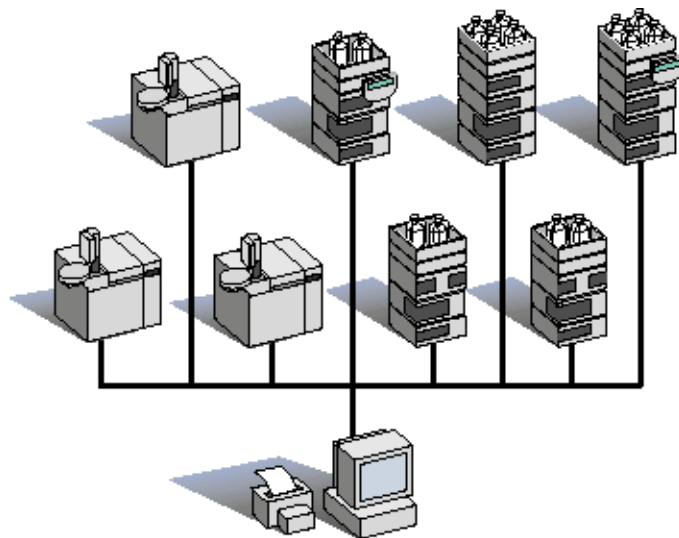


Figura 1 Sistema NDS Cerity Professional

Sistema Client/Server (Agilent G4001AA)

I componenti NDS Cerity per il sistema Client/Server vengono installati ed eseguiti su apposite Workstation Microsoft® Windows. Il cluster comprende tutte le periferiche di rete configurate per il sistema Client/Server NDS Cerity, quali strumenti, stampanti e client.

Si può configurare il numero di utenti desiderato su un unico cluster NDS Cerity. Gli utenti NDS Cerity ed il controllo dello strumento sono soggetti a licenze separate. Per ogni utente definito nel sistema è richiesta una licenza Oracle. Cinque licenze Oracle nominative specifiche per l'applicazione sono comprese con il sistema Client/Server.

1 **Panoramica del sistema NDS Cerity per QA/QC in campo farmaceutico**
Sistema in uso

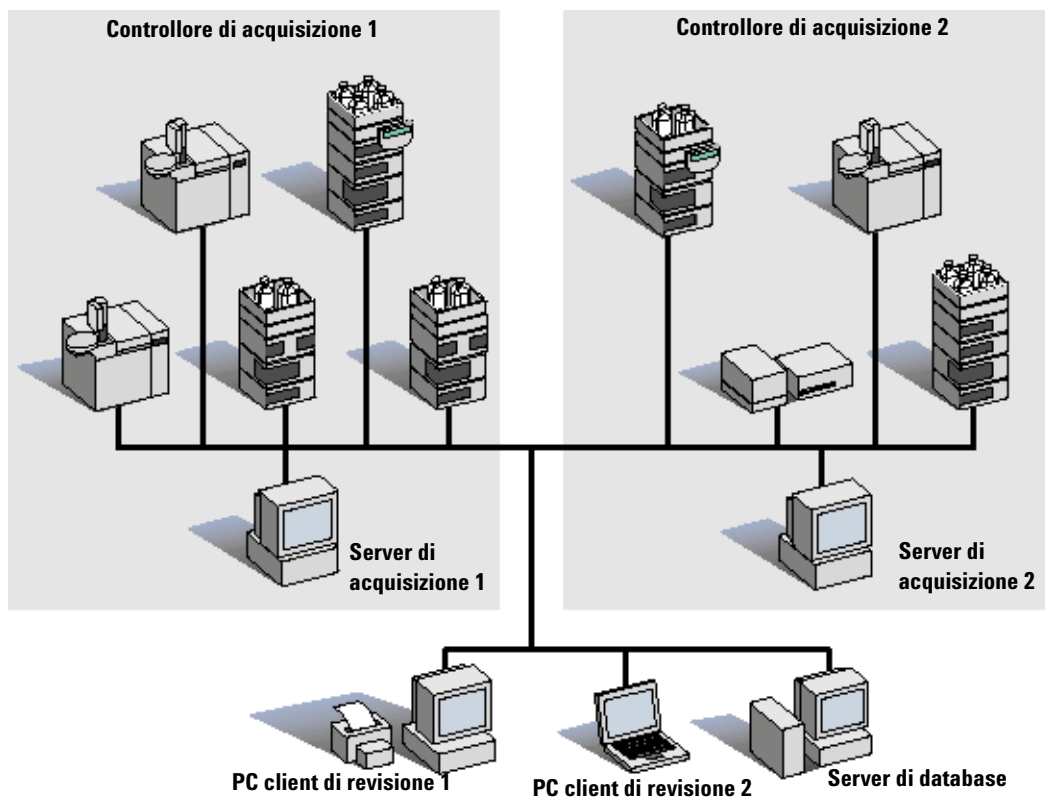


Figura 2 Sistema Client/Server NDS Cerity

Interazione dei componenti NDS Cerity

I componenti NDS Cerity costituiscono una struttura comune per l'acquisizione, la rielaborazione e la memorizzazione dei dati.

- Client di revisione per l'analisi dei campioni, l'impostazione di metodi e rapporti, l'amministrazione e la gestione.
- Controllore di acquisizione per l'acquisizione, l'analisi e la rielaborazione dei dati.
- Server di rielaborazione per la rielaborazione dei dati.
- Server di database per la memorizzazione dei dati.

Il sistema NDS Cerity Professional gestisce server di database, controllore di acquisizione e client di revisione NDS Cerity e database relazionale Oracle su una sola Workstation Microsoft Windows.

Il sistema Client/Server NDS Cerity distribuisce i componenti su determinati server o workstation. I componenti NDS Cerity eseguono le stesse operazioni su entrambi i sistemi.

Il sistema è completamente personalizzabile.

Analisi di campioni, impostazione di metodi e stesura di rapporti

Per ulteriori informazioni sui concetti fondamentali dell'applicazione Cerity per QA/QC in campo farmaceutico, vedere il Capitolo 2 "Cerity per QA/QC in campo farmaceutico - Elementi di base dell'applicazione".

Il *client di revisione* costituisce l'interfaccia utente per il sistema NDS Cerity.

Questa applicazione consente agli utenti di analizzare i campioni e impostare metodi e rapporti.

Il database NDS Cerity memorizza tutti i dati grezzi, i metadati e i dati di risultati dall'applicazione Cerity per QA/QC in campo farmaceutico.

1 Panoramica del sistema NDS Certity per QA/QC in campo farmaceutico
Interazione dei componenti NDS Certity

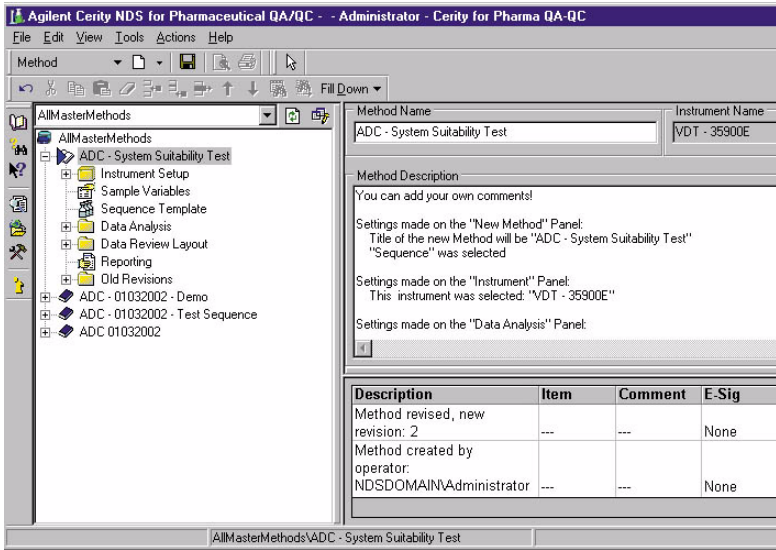


Figura 3 Applicazione Certity per QA/QC in campo farmaceutico

Per ulteriori informazioni sull'analisi dei campioni, vedere il Capitolo 3 "Analisi dei campioni".

Per ulteriori informazioni sull'impostazione di metodi e rapporti, vedere il Capitolo 4 "Impostazione dei metodi".

Analisi dei campioni Con l'applicazione Certity per QA/QC in campo farmaceutico, gli operatori possono inserire e analizzare campioni e sequenze con metodi precedentemente sviluppati e rivedere i risultati. Gli analisti possono effettuare revisioni Peer e rielaborare i risultati, mentre i responsabili possono firmare elettronicamente i risultati.

Impostazione del metodo Utilizzare l'applicazione Certity per QA/QC in campo farmaceutico per impostare i metodi che comprendono i parametri dello strumento, i parametri di elaborazione dei dati, le specifiche di layout dei risultati e la selezione del tipo di rapporto e possono includere le variabili personalizzate del campione, modelli di sequenza, formule di calcolo personalizzate e specifiche dei limiti.

I metodi di Certity per QA/QC in campo farmaceutico implementano parametri, layout e calcoli delle monografie o delle SOP dell'analisi. In genere vengono impostati una sola volta. Gli analisti, gli operatori e i tecnici utilizzano questi metodi predefiniti.

Reporting Quando si imposta un metodo o si inserisce un campione, si selezionano i tipi di rapporto che si desidera generare durante l'elaborazione. Quando si analizza un campione o una sequenza, il sistema genera rapporti basati sui modelli selezionati per ciascun tipo di rapporto.

Il *modello di rapporto* fornisce il formato per i campi e le tabelle del rapporto generato. I modelli di rapporto recuperano dal database i dati relativi a ogni campione, a più campioni o a sequenze.

È possibile utilizzare i modelli di rapporto predefiniti già assegnati ai tipi di rapporto oppure selezionarne altri forniti con il sistema. Gli utenti autorizzati possono inoltre creare e modificare modelli di rapporto con *Report Template Editor*.

Tramite *Report Viewer di Certity* è possibile visualizzare e stampare documenti di rapporto.

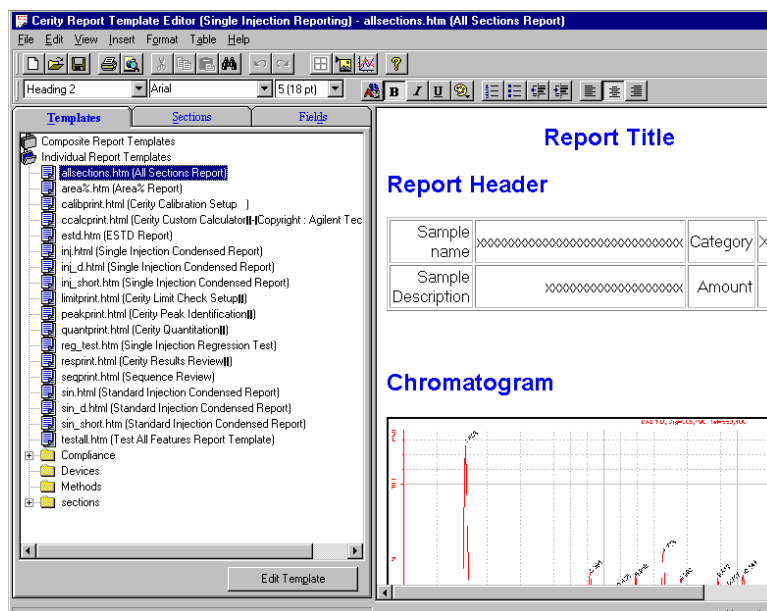


Figura 4 Report Template Editor

Amministrazione e gestione

Il *client di revisione Cerity* fornisce l'interfaccia che consente all'amministratore NDS Cerity di gestire il sistema.

NDS Cerity Software Administration Questa applicazione consente agli amministratori di impostare licenze, strumenti, autorizzazioni all'accesso, ruoli, capacità utente, audit e formati per tutto il sistema.

Compliance Questa applicazione consente agli amministratori o ai responsabili del laboratorio di installare il sistema NDS Cerity e di eseguire test di qualificazione sul sistema di dati e sugli strumenti collegati. L'applicazione Compliance viene fornita con licenza separata.

Archive and Restore Questa utilità consente agli amministratori autorizzati di archiviare, ripristinare o eliminare i dati dal database.

Password Change Questi due strumenti consentono agli amministratori di cambiare le password di sistema relative all'account di database e all'account di servizio.

Database Resolve Questa utilità verifica l'assenza di nomi duplicati nel database dopo il ripristino di dati da un altro database.

Per ulteriori informazioni sulle applicazioni di amministrazione e gestione NDS Certity, vedere il Capitolo 5 "Applicazioni per l'amministrazione e la gestione".

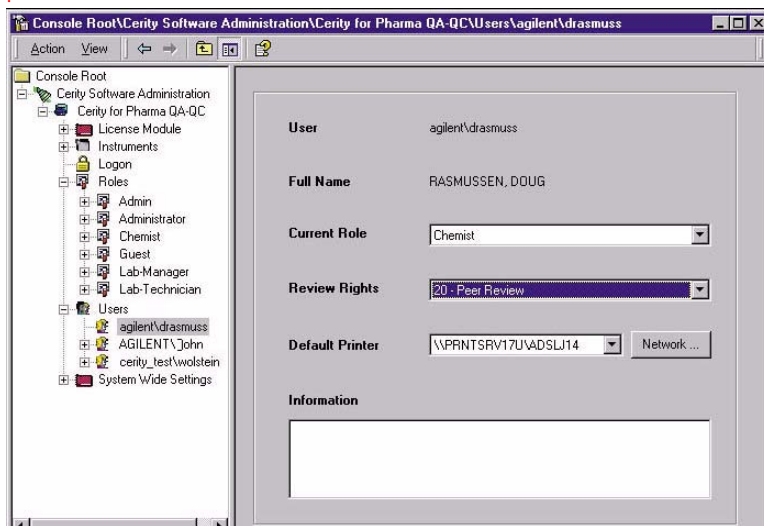


Figura 5 Applicazione NDS Certity Software Administration

Acquisizione ed elaborazione di dati

Il *controllore di acquisizione Certity* acquisisce dati e controlla strumenti da una Workstation Windows. L'acquisizione di dati ha inizio nel momento in cui il controllore di acquisizione recupera i parametri dello strumento dal *server di database*.

Il *client di revisione* fornisce l'interfaccia utente per immettere i parametri del metodo che il controllore di acquisizione utilizza per controllare lo strumento. Il controllore di acquisizione può inoltre analizzare e rielaborare i dati.

Rielaborazione

Il sistema NDS Cerity utilizza un algoritmo casuale per assegnare a un computer di rete la funzione di server di rielaborazione per un client. La selezione casuale assicura un'equa distribuzione del carico di lavoro nel sistema, presupponendo che tutti i client generino carichi di lavoro simili. Questa redistribuzione del carico di lavoro consente di evitare inutili rallentamenti quando molti utenti eseguono contemporaneamente la rielaborazione dei risultati.

*Vedere la "Guida all'installazione"
l'impostazione di un server di
rielaborazione*

Anche i controllori di acquisizione hanno la funzione di server di rielaborazione. È anche possibile assegnare un server di rielaborazione dedicato a un singolo client. Agilent consiglia di impostare un server di rielaborazione dedicato per 10 utenti di rielaborazione simultanei.

Memorizzazione di dati

Il *server di database* NDS Cerity memorizza metodi e dati acquisiti. Al termine dell'analisi i risultati vengono salvati nel database. È possibile recuperare dati per la revisione mediante gli strumenti di ricerca NDS Cerity.

La quantità di dati che si possono memorizzare dipende dai seguenti fattori:

- numero di utenti simultanei
- numero di strumenti simultanei
- quantità di dati accessibili in linea nel database
- numero di campioni elaborati
- numero di cicli di rielaborazione (le revisioni e le informazioni di audit generate con ogni ciclo aumentano il volume di dati)

Come è possibile ottenere la conformità alle normative utilizzando il sistema NDS Certy

Per ulteriori informazioni sulla conformità, vedere la Technical Reference Guide (Guida di riferimento tecnico).

Questa sezione fornisce una panoramica sul supporto delle norme di conformità per i laboratori fornito dal Sistema Agilent Certy di gestione dati in rete per QA/QC in campo farmaceutico.

Accesso autorizzato

Il sistema NDS Certy utilizza la protezione del sistema operativo Windows nonché i ruoli e le capacità di ruolo NDS Certy per limitare l'accesso degli utenti alle applicazioni e ai componenti del sistema NDS Certy elencati di seguito:

- Certy Software Administration
- Certy per QA/QC in campo farmaceutico
- Certy Compliance
- Certy Archive and Restore
- Certy Reports e Report Template Editor

Verifiche di autorizzazione

NDS Certy per QA/QC in campo farmaceutico rispetta i requisiti previsti dalla CFR 21 FDA parte 11 per l'accesso autorizzato alle attività dell'utente. Le verifiche di autorizzazione, basate sui ruoli e sulle capacità di ruolo assegnate, assicurano che solo gli utenti autorizzati possano utilizzare il sistema. L'amministratore NDS Certy seleziona le attività per gli utenti in base ai ruoli di laboratorio e alle capacità di ruolo assegnate.

Dati affidabili

Il sistema NDS Cerity assicura l'affidabilità dei dati nei seguenti modi:

- fornisce la qualificazione operativa e la verifica delle prestazioni dell'hardware e delle applicazioni specifiche del laboratorio Cerity per QA/QC in campo farmaceutico
- accerta che il sistema archivi e recuperi correttamente dati grezzi, metadati (campi e parametri) e dati di risultati
- impedisce che i dati vengano danneggiati tramite il controllo delle incoerenze dei dati
- salvaguarda l'integrità dei dati condivisi e l'inserimento manuale di dati tramite controlli dei dispositivi del sistema

Utilità di controllo della conformità

L'utilità di controllo della conformità comprende entrambe le utilità di qualificazione dell'installazione e di qualificazione operativa e verifica delle prestazioni per l'hardware e il software supportati.

Le utilità IQ (Install Qualification, qualificazione dell'installazione) e OQ/PV (Operation Qualification/Performance Verification, qualificazione operativa/verifica delle prestazioni) sono disponibili come prodotto concesso in licenza e come servizio di Agilent Technologies. La gamma di prodotti e servizi di validazione per il sistema NDS Cerity comprende l'LC Agilent 1100, il GC Agilent 6890, il convertitore A/D Agilent 35900E e la qualificazione del sistema software.

I test IQ e OQ/PV vengono eseguiti da tecnici ATCSP (Agilent Technologies Certified Service Professionals), da tecnici dell'assistenza e da partner di canale, nonché da consulenti indipendenti e gruppi di assistenza interni.

Autenticazione utente

Il sistema NDS Cerity per QA/QC in campo farmaceutico assicura che gli utenti siano responsabili delle modifiche apportate ai dati:

- le firme elettroniche sono associate ai rispettivi record in modo verificabile per assicurare che non possano essere eliminate, copiate o trasferite per falsificare un record
- le firme elettroniche NDS Cerity sono autenticate e riportano un contrassegno orario
- il sistema NDS Cerity richiede che gli utilizzatori immettano sempre il nome utente e la password per accedere all'applicazione Cerity per QA/QC in campo farmaceutico

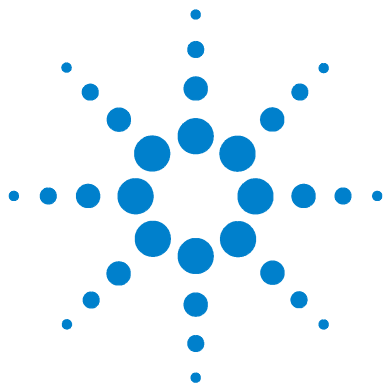
Tracciabilità dei dati

La CFR 21 FDA parte 11.10e richiede una traccia per l'audit nel caso di azioni che creano, modificano o eliminano un record elettronico. La traccia per l'audit di Cerity fornisce quanto segue:

- prova delle azioni effettuate sui record, dei loro autori e delle date
- registrazione di tutte le modifiche apportate ai dati senza oscurare i dati originali
- controllo di revisione rigido che consente il mantenimento automatico delle revisioni precedenti nell'archivio di dati

1 Panoramica del sistema NDS Cerity per QA/QC in campo farmaceutico

Come è possibile ottenere la conformità alle normative utilizzando il sistema NDS Cerity



2 Cerity per QA/QC in campo farmaceutico - Elementi di base dell'applicazione

Le quattro finestre di lavoro principali 22

Strumenti di lavoro principali 26

Assistenza in linea 28

Analisi dei campioni 30

Ricerche nel database 36

Modifica di metodi 38

Salvataggi nel database 39

Impostazione del metodo 43

Il capitolo presenta le caratteristiche fondamentali ed i concetti che stanno alla base dell'applicazione NDS Cerity per QA/QC in campo farmaceutico. Vengono inoltre fornite informazioni di base per seguire l'analisi di un campione in tutte le sue fasi, dall'inserimento al rapporto. Per ulteriori informazioni sull'impostazione di metodi e sull'analisi di campioni, leggere i capitoli 4 e 5. Questo capitolo costituisce un valido ausilio per completare gli esercizi nelle *schede introduttive*.



Le quattro finestre di lavoro principali

Il sistema NDS Cerity memorizza i “dati” in un database. I dati sono costituiti da dati grezzi e risultati calcolati con tutti i metadati richiesti, quali parametri, campi, formule e configurazioni, per quattro “oggetti” primari nel database: sequenze e campioni inseriti, strumenti, risultati relativi a campioni e sequenze, metodi.

Finestra Sample (Campione)

La finestra Sample (Campione) fornisce un'area di lavoro per immettere campioni e impostare sequenze. Per accedere alla finestra Sample, scegliere l'opzione **Sample** (Campione) nell'elenco Current View (Finestra corrente).

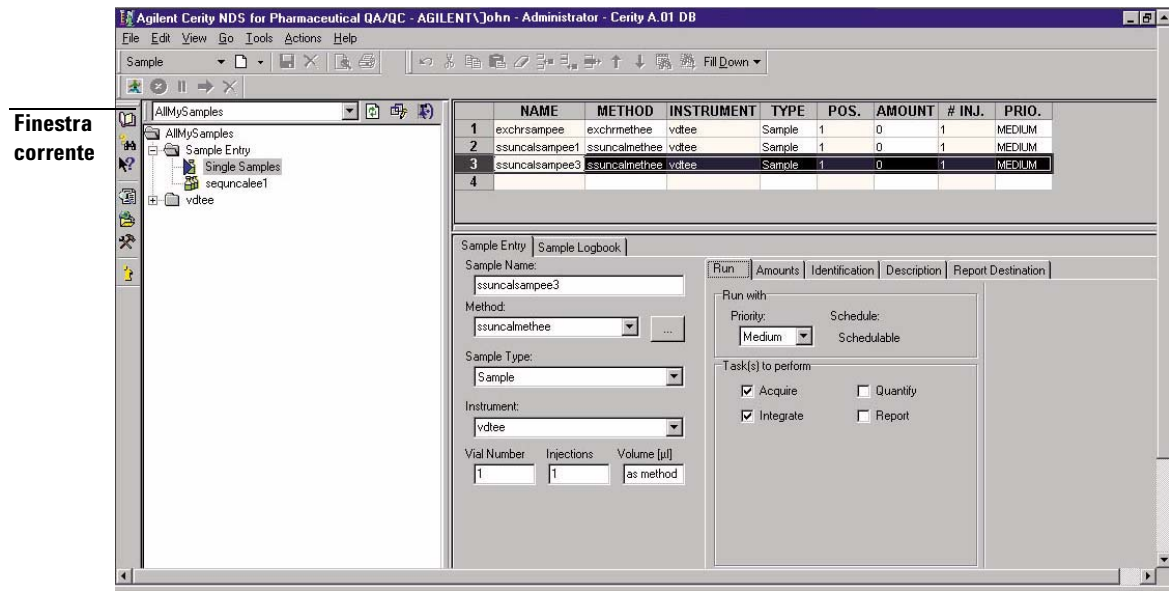


Figura 6 Finestra Sample (Campione)

Finestra Instrument (Strumento)

La finestra Instrument (Strumento) fornisce un'area di lavoro per visualizzare lo stato di uno strumento. È possibile analizzare campioni e sequenze e tenere traccia del relativo stato di analisi da questa finestra. Per accedere alla finestra Instrument, scegliere l'opzione **Instrument** (Strumento) nell'elenco Current View (Finestra corrente).

Finestra
corrente

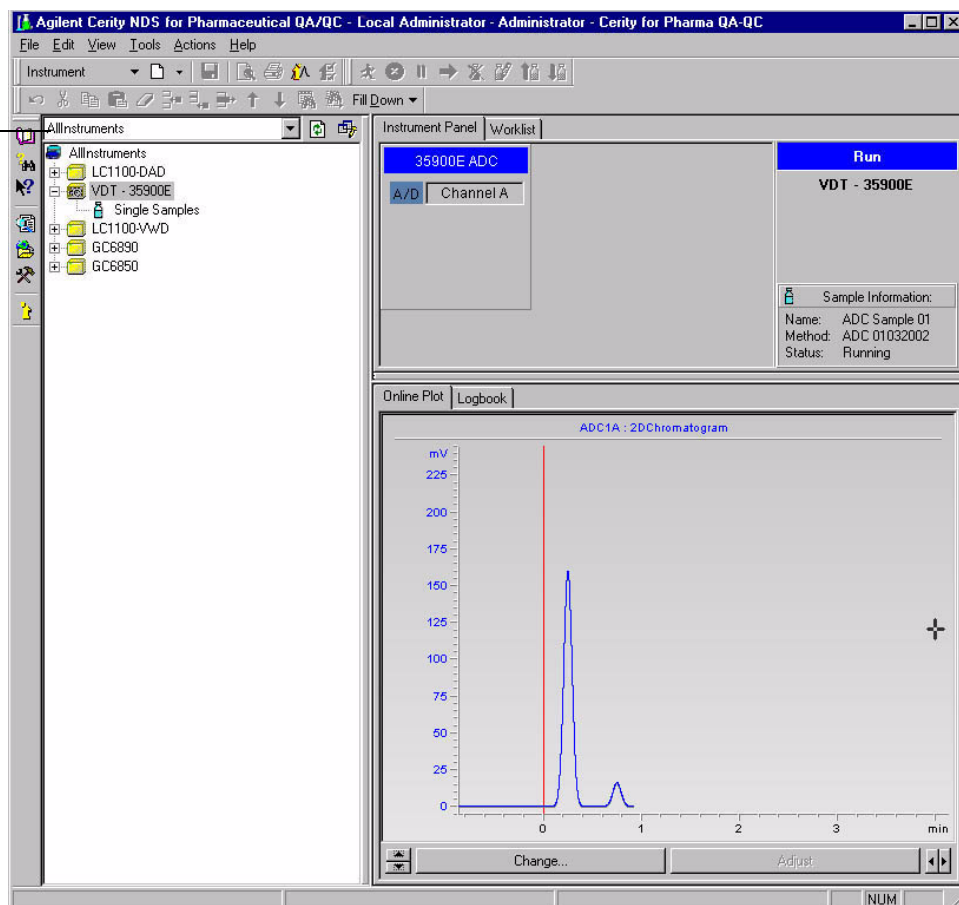


Figura 7 Finestra Sample (Campione)

2 **Cerity per QA/QC in campo farmaceutico - Elementi di base dell'applicazione**
Le quattro finestre di lavoro principali

Finestra Result (Risultato)

La finestra Result (Risultato) fornisce un'area di lavoro per rivedere e rielaborare campioni e sequenze. Per accedere alla finestra Result, scegliere l'opzione **Result** (Risultato) nell'elenco Current View (Finestra corrente).

Finestra
corrente

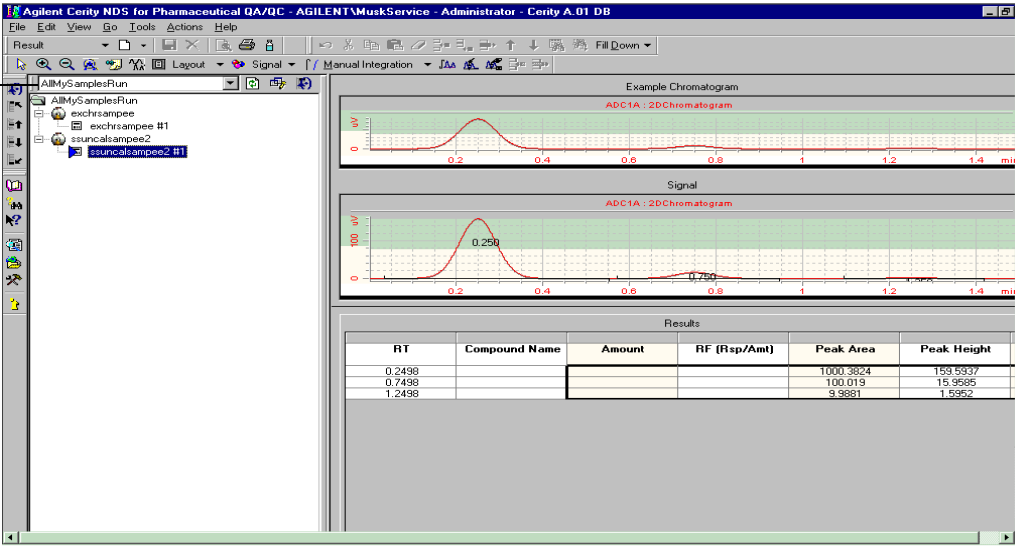


Figura 8 Finestra Result (Risultato)

Finestra Method (Metodo)

La finestra Method (Metodo) fornisce un'area di lavoro per impostare metodi e rapporti. Per accedere alla finestra Method, scegliere l'opzione **Method** (Metodo) nell'elenco Current View (Finestra corrente).

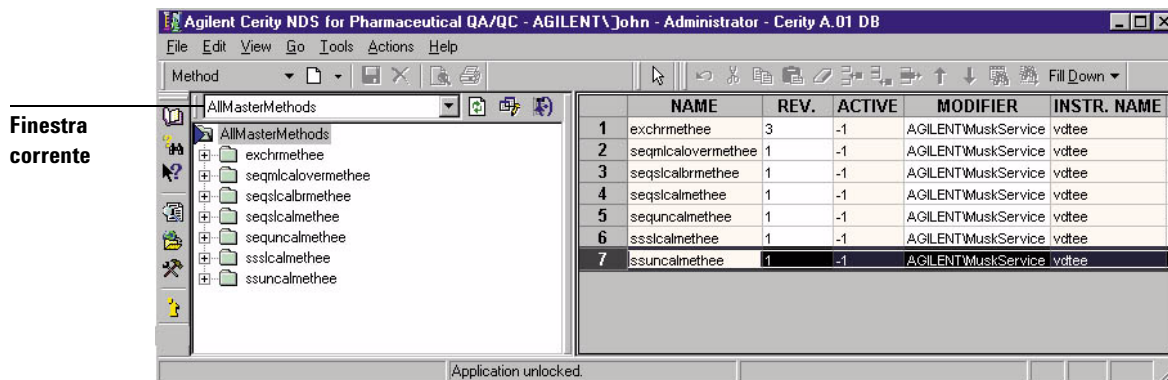


Figura 9 Finestra Instrument (Strumento)

Strumenti di lavoro principali

Gli strumenti di lavoro si trovano nella barra dei menu e nelle barre degli strumenti della finestra corrente. Fare clic con il pulsante destro del mouse su una tabella o un grafico per accedere a strumenti aggiuntivi.

Barra degli strumenti standard: strumenti per la finestra corrente e pulsante "New" (Nuovo).

Pulsante "New": consente di creare un modello di metodo, una sequenza o una ricerca.

Selezione della finestra corrente: selezionare una delle quattro finestre in questo punto.

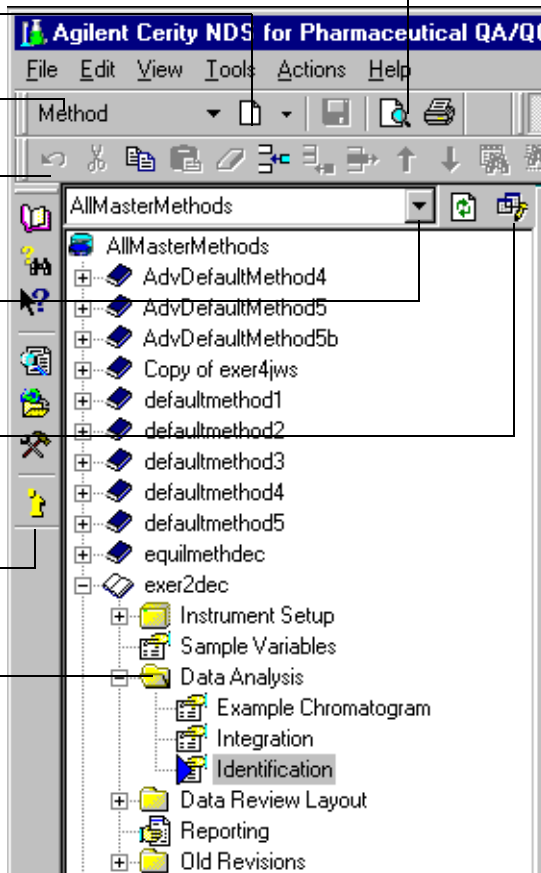
Barra degli strumenti di modifica: gli strumenti di questa barra sono disponibili per la selezione solo se si applicano all'area di lavoro.

Query list (Elenco di ricerca): selezionare un gruppo di campioni, strumenti, metodi o risultati dal database per visualizzarli nell'albero di selezione.

Pulsante per la Query wizard (Ricerca guidata): definire una nuova ricerca di campioni, strumenti, metodi o risultati da recuperare nel database.

Barra degli strumenti della Guida: consente di trovare l'assistenza necessaria.

Albero di selezione: espandere una cartella o selezionare un elemento nell'albero di selezione per impostare o modificare i dati nell'area di lavoro.

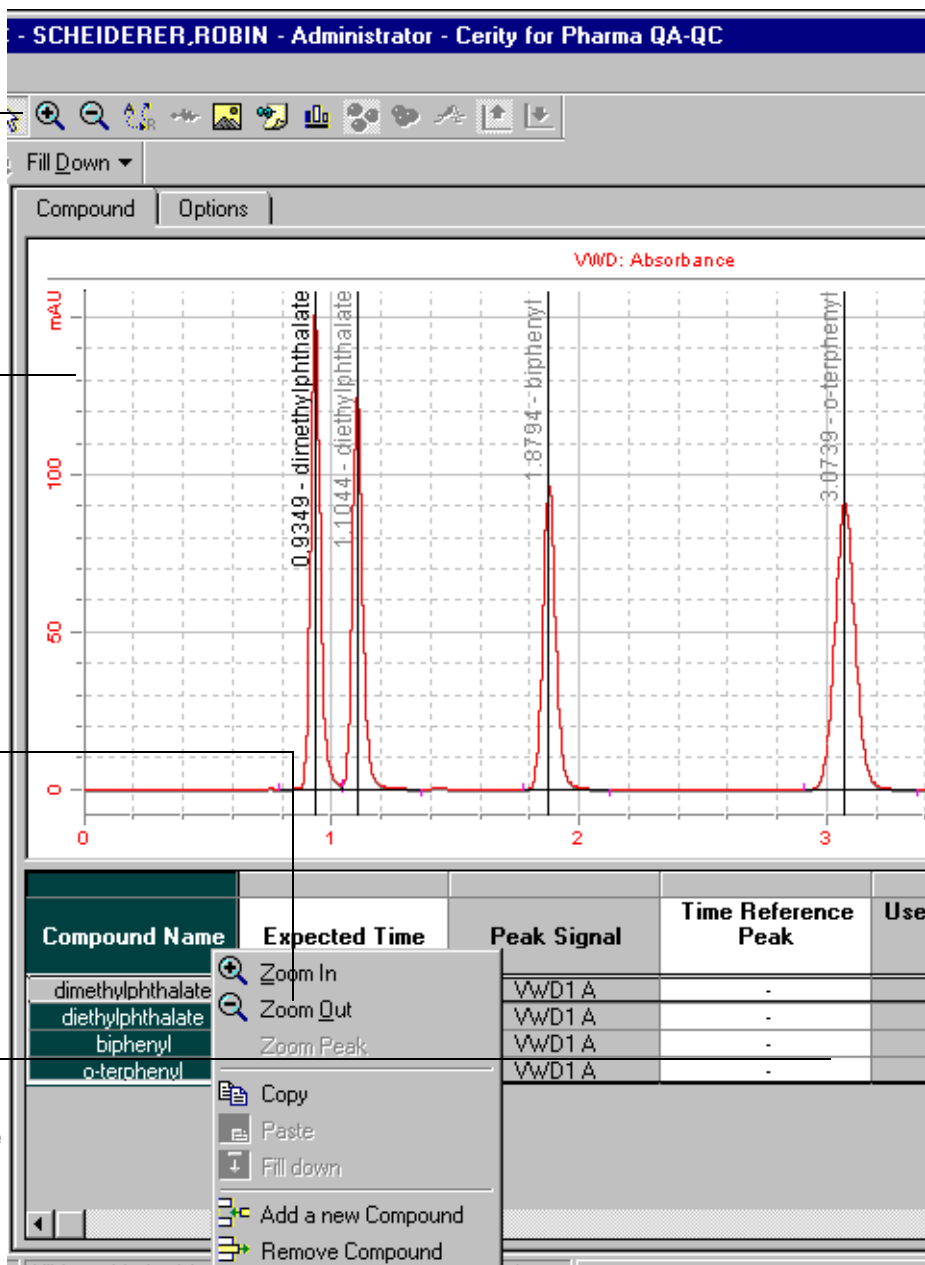


Strumenti o barra degli strumenti di azione: consentono di modificare una tabella o svolgere un'attività nell'area di lavoro.

Area di lavoro: utilizzare barre degli strumenti e comandi per visualizzare o modificare tabelle, grafici, finestre di dialogo o elenchi.

Menu contestuale: fare clic con il pulsante destro del mouse su una cella della tabella per visualizzare un menu di scelta rapida che consente di modificare la tabella.

Elenco a discesa: selezionare una cella nella tabella per accedere a un elenco.



Assistenza in linea

Nelle seguenti aree è disponibile assistenza per ogni finestra:

- barra degli strumenti della Guida
- menu Help
- suggerimenti

Barra degli strumenti della Guida

Vedere la descrizione delle icone sulla barra degli strumenti della Guida riportata di seguito:

Sommario: questo pulsante consente di accedere al sistema della Guida in linea. Utilizzare gli strumenti Indice, Indice analitico, Glossario e Cerca per accedere alle procedure e alle informazioni sulla finestra, la finestra di dialogo o la procedura guidata corrente.

Cerca: lo strumento di ricerca facilita il reperimento dell'argomento desiderato.

Guida rapida: quando il puntatore si trasforma in punto interrogativo, fare clic all'interno di una finestra, una finestra di dialogo o una procedura guidata per visualizzare informazioni della Guida su tale elemento dell'interfaccia utente. Questo tipo di guida è denominato User Interface Help nell'albero di selezione Sommario.

Documenti in linea: è possibile accedere alla documentazione Cerity come file Acrobat PDF (Portable Document Format).

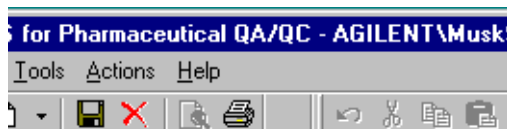
Altre risorse: questo pulsante consente di collegarsi al sito Web di Agilent per accedere a risorse quali materiali ed assistenza tecnica.

SOP: quando è impostato dall'amministratore di sistema, questo pulsante fornisce un collegamento alle SOP (Procedure operative standard) del laboratorio o ad un altro indirizzo nella rete Intranet.



Menu Help

È possibile accedere alla Guida dalla relativa barra degli strumenti o dal menu Help.



Suggerimenti delle barre degli strumenti

Posizionare il puntatore del mouse su un pulsante della barra degli strumenti per visualizzarne il nome.



Analisi dei campioni

*Per ulteriori informazioni
sull'analisi dei campioni, vedere il
Capitolo 3 "Analisi dei campioni".*

Dalle finestre Sample (Campione), Instrument (Strumento) e Result (Risultato) di Cerity per QA/QC in campo farmaceutico si inseriscono campioni e si impostano sequenze, si analizzano campioni singoli o sequenze e si rivedono e rielaborano i risultati.

Inserimento di campioni singoli

È possibile inserire i campioni uno alla volta nella finestra Sample (Campione). Utilizzare i campioni singoli se l'analisi non richiede ricalibrazioni specifiche per sequenza o calcoli di gruppo.

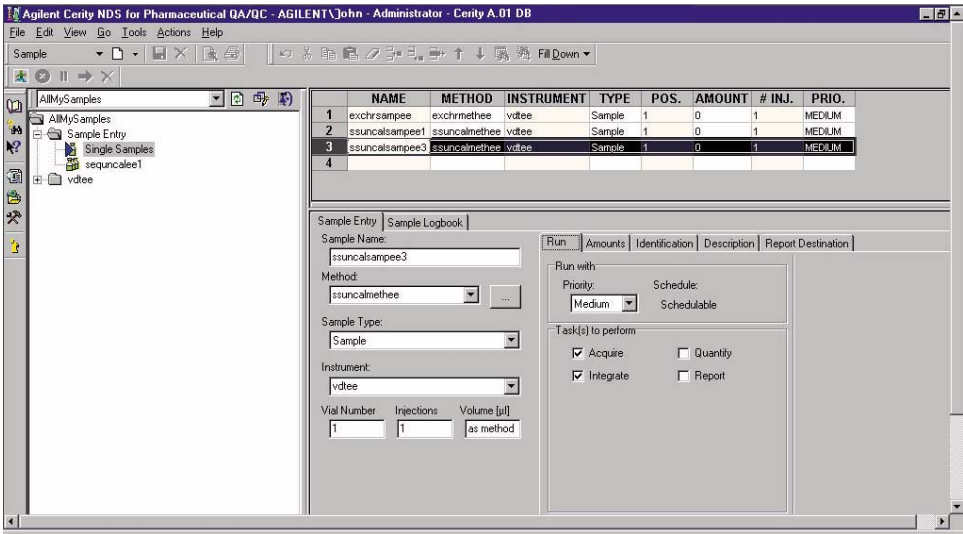


Figura 10 Inserimento di campioni singoli

Impostazione di sequenze

Creare una nuova sequenza, quindi assegnarla a uno strumento e a un metodo. Dopo la creazione, la nuova sequenza viene visualizzata nella finestra Sample (Campione).

Per ulteriori dettagli sui modelli di sequenza nel metodo, vedere il Capitolo 4 "Impostazione dei metodi".

Viene anche visualizzato il modello di sequenza impostato nel metodo utilizzato per la sequenza. Nel modello di sequenza è possibile modificare nomi dei campioni, ID LIMS, quantità, pesi o concentrazioni.

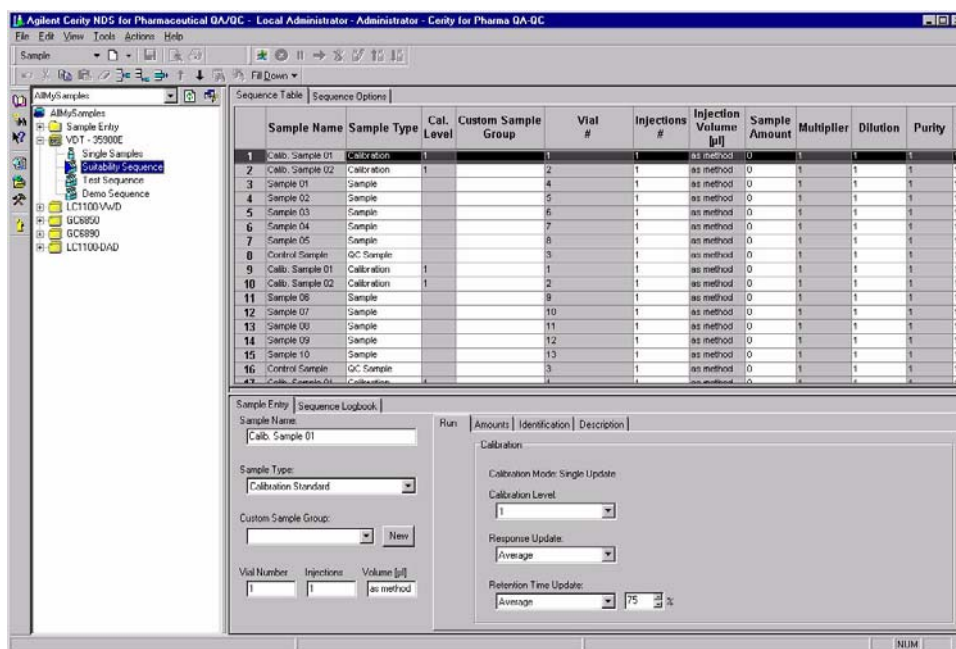


Figura 11 Sequence Table (Tabella delle sequenze) nella finestra Sample (Campione)

Preparazione dello strumento

La finestra Instrument (Strumento) consente di monitorare lo stato dello strumento unitamente alla pressione o alla temperatura, eseguire operazioni di diagnostica ed equilibrare il sistema, ossia spurgare la pompa o accendere la lampada UV-visibile nel rivelatore.

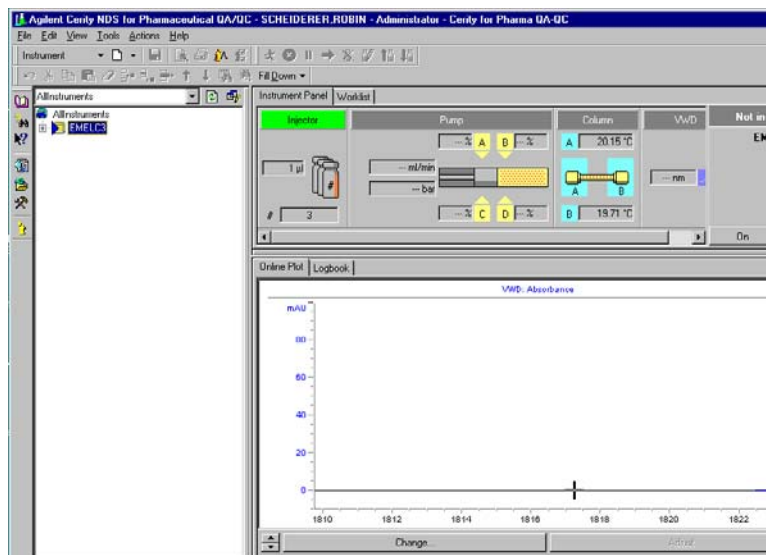


Figura 12 Finestra Instrument (Strumento)

Analisi di campioni o sequenze

È possibile analizzare campioni e sequenze nella finestra Sample (Campione) o Instrument (Strumento). Quando si fa clic sul pulsante **Run** (Esegui), il sistema invia il lavoro di analisi al programmatore Cerity per QA/QC in campo farmaceutico.

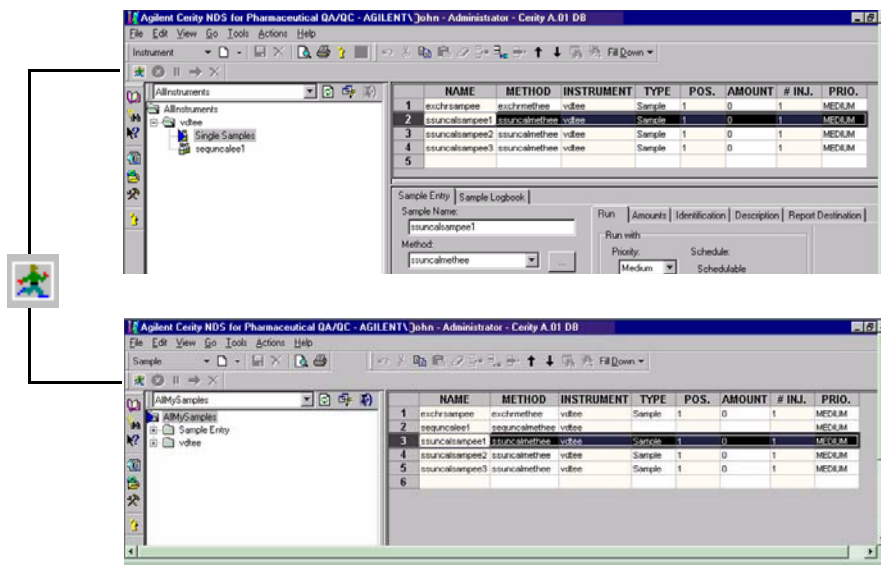


Figura 13 Pulsante Run della barra degli strumenti

Stato di campioni e sequenze

Dopo l'avvio dell'analisi, l'applicazione cancella le analisi dal campione singolo e dalle sequenze sia dalla finestra Instrument (Strumento) sia dalla finestra Sample (Campione). Le analisi vengono ora visualizzate nella Worklist (Elenco di lavoro) e le iniezioni completate sono presenti nella finestra Result.

Nella **Worklist** (Elenco di lavoro) per la finestra Instrument (Strumento), è possibile visualizzare lo stato di un campione singolo, un gruppo di campioni singoli, una sequenza e una serie di sequenze per un'analisi.

È anche possibile interrompere, sospendere e ripristinare una sequenza, una serie di sequenze e un gruppo di campioni nella **Worklist** (Elenco di lavoro).

Quando si sospende una sequenza, il sistema completa l'analisi del campione corrente prima che si inizi l'analisi del campione successivo nella sequenza.

Name	Status	Type	Method	Priority #	Vial #	Injections #	Description
1 Sample 04	Running(1)	Sample	ADC - Test Method	100	1	1	
2 Sample 02	Queued	Sample	ADC - Test Method	500	1	1	

Descrip	Hide Column	em	Comment	E-Sig	Timestamp
Data ac	Show All Columns	ADC	---	None	03/07/2002, 15:07:59
Run cor	Columns...	ADC	---	None	03/07/2002, 15:07:58
Collecti	Column Width...	ADC	---	None	03/07/2002, 15:06:28
Run sta		ADC	---	None	03/07/2002, 15:06:18
Data ac	Sort by Event	ADC	---	None	03/07/2002, 15:06:12
Run cor	Sort	ADC	---	None	03/07/2002, 15:06:12
Collecti	Filter...	ADC	---	None	03/07/2002, 15:04:58
Run sta	Event Information	ADC	---	None	03/07/2002, 15:04:40
Data ac		ADC	---	None	03/07/2002, 14:57:14
Run cor	Print Preview	ADC	---	None	03/07/2002, 14:57:14
Collecti	Print	ADC	---	None	03/07/2002, 14:55:44
Run started	Collecting data	ADC	---	None	03/07/2002, 14:55:33
Data acquisition completed		ADC	---	None	03/07/2002, 14:54:08
Run completed		ADC	---	None	03/07/2002, 14:54:08
Collecting data		ADC	---	None	03/07/2002, 14:52:38

Figura 14 Worklist (Elenco di lavoro) di campioni o sequenze

Revisione dei risultati

Selezionare i risultati da rivedere dall'albero di selezione nella finestra **Result** (Risultato). È necessario sapere in che modo sono organizzati i risultati nell'albero di selezione. Se il risultato non è visibile, può essere necessario selezionare un risultato di ricerca dall'elenco sopra l'albero di selezione o effettuare una ricerca nel database.

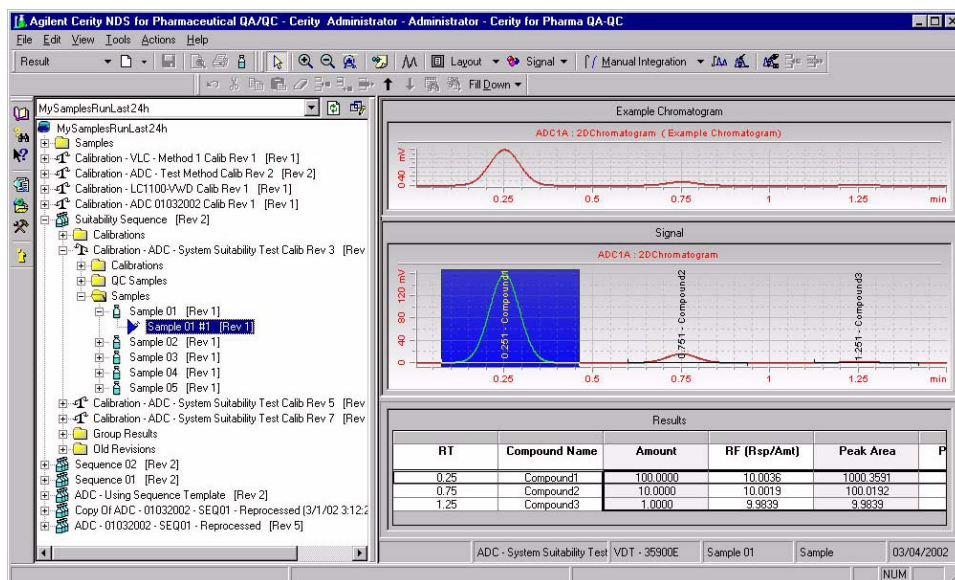


Figura 15 Finestra Result (Risultato)

Nella finestra **Result** (Risultato) è possibile anche apportare modifiche ai risultati e rielaborarli. In alternativa, dopo la modifica del metodo, è possibile procedere alla rielaborazione con la revisione più aggiornata del metodo. È anche possibile rielaborare i risultati con un altro metodo.

La finestra **Result** (Risultato) consente inoltre di accettare o rifiutare i risultati in base al livello di autorizzazione assegnato dall'amministratore.

Ricerche nel database

Per rivedere o rielaborare i risultati, è necessario innanzitutto trovare i risultati desiderati.

Ricerche di risultati

Per visualizzare i risultati dal database, effettuare una ricerca nel sistema. Il sistema NDS Cerity viene fornito con ricerche predefinite per agevolare gli utenti.

- Selezionare una ricerca dalla **Query List** (Elenco di ricerca) sopra l'albero di selezione e visualizzare i risultati già creati con **Query Wizard** (Ricerca guidata).
- Gli utenti avanzati possono anche definire ricerche personalizzate con **Query Wizard** (Ricerca guidata). Le ricerche vengono definite quando si impostano i criteri per cercare nel database i risultati desiderati.

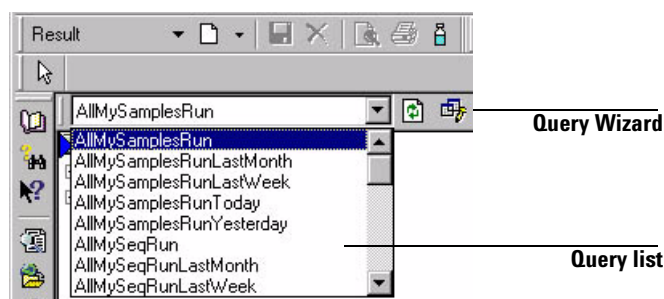


Figura 16 Query list (Elenco di ricerca) e Query wizard (Ricerca guidata)

Ricerche di metodi

Le ricerche possono essere selezionate anche per trovare i metodi da modificare.

Altre ricerche

È inoltre possibile cercare un insieme definito di campioni o sequenze non analizzate o di strumenti configurati, ma questa operazione viene in genere eseguita raramente.

Query Wizard (Ricerca guidata)

La **Query wizard** (Ricerca guidata) semplifica la ricerca delle informazioni necessarie. Il sistema NDS Cerity dispone di una **Query Wizard** (Ricerca guidata) per ogni finestra.

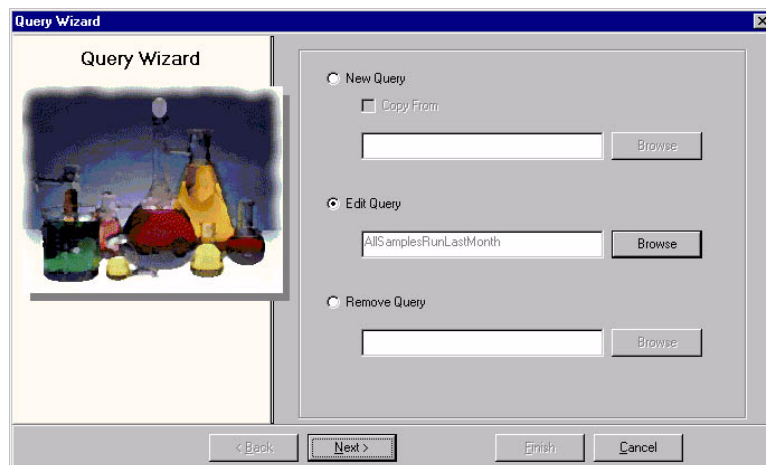


Figura 17 Query Wizard (Ricerca guidata)

Modifica di metodi

Una volta impostati i metodi dalla SOP o dalla monografia, è possibile modificarli con facilità nella finestra Method (Metodo).

Questa finestra consente di apportare le seguenti modifiche a un metodo:

- modifica dei parametri dello strumento
- modifica delle variabili del campione
- modifica di un modello di sequenza (funzionalità disponibile in genere solo per utenti avanzati)
- modifica dei parametri di analisi dei dati
- modifica del layout per visualizzare i risultati
- selezione di un diverso tipo di rapporto per creare un rapporto

È anche possibile modificare un metodo esistente nella finestra Method (Metodo).

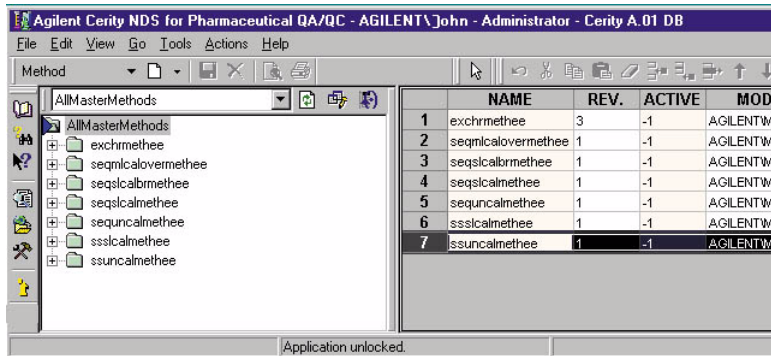


Figura 18 Finestra Method (Metodo)

Salvataggi nel database

Un amministratore di NDS Cerity può configurare comportamenti specifici per l'audit da effettuarsi in Cerity per QA/QC in campo farmaceutico. NDS Cerity contiene un modulo per impostare osservazioni sull'audit e memorizzare un registro apposito quando si effettuano salvataggi nel database.

Voci di audit

Quando si salvano le modifiche apportate a un metodo, a un campione o una sequenza inserita o a un risultato o quando si passa da un metodo o da un campione al successivo, viene visualizzata la finestra di dialogo **Save Changes to the Database** (Salva modifiche nel database). Questo è il modulo fornito da NDS Cerity per immettere osservazioni di audit.

Può essere necessario rivedere l'elenco delle modifiche e selezionare un motivo per le modifiche. Può essere richiesta una firma elettronica che comprende nome utente e password per registrare le modifiche.

NDS Cerity consente agli amministratori di sistema di configurare le operazioni che richiedono obbligatoriamente osservazioni e firma elettronica in uscita.

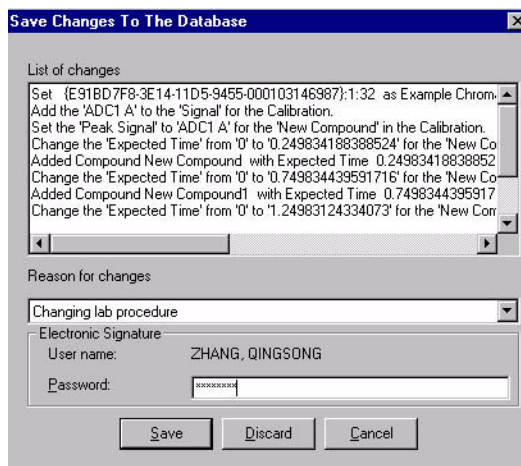


Figura 19 Finestra di dialogo **Save Changes To The Database** (Salva modifiche nel database)

Registri elettronici di audit

Il sistema NDS Cerity mantiene sempre un rigido controllo di revisione e tracce per l'audit indipendenti dall'utente sulle registrazioni elettroniche che gestisce. Tutte le tracce per l'audit sono riportate nei registri elettronici presenti nelle rispettive finestre.

Methods (Metodi)

Il **Method Logbook** (Registro elettronico del metodo) viene visualizzato nell'area di lavoro Description (Descrizione) per i metodi quando si seleziona un metodo nell'albero di selezione della finestra Method (Metodo).

Single Samples (Campioni singoli)

La traccia per l'audit per i campioni inseriti ma non analizzati si trova in **Sample Logbook** (Registro elettronico del campione) che viene visualizzato nell'area di lavoro Single Samples (Campioni singoli) della finestra Sample (Campione) o Instrument (Strumento).

Dopo l'analisi di singoli campioni, il registro elettronico relativo ad ogni campione può essere visualizzato nella Finestra Results (Risultati) facendo clic sul pulsante **Sample Details** (Particolari del campione) sulla barra degli strumenti.

Sequences (Sequenze) La traccia per l'audit per le sequenze inserite ma non eseguite è visualizzata in **Sequence Logbook** (Registro elettronico della sequenza) per le sequenze presenti nelle Finestre Sample (Campione) o Instrument (Strumento).

Dopo l'analisi di una sequenza, è possibile trovare il **Sequence Logbook** (Registro elettronico della sequenza) nella finestra Result (Risultato) quando si seleziona la sequenza nell'albero di selezione.

Sample or Sequence Runs (Analisi di campioni o sequenze) È possibile trovare la traccia per l'audit per un'analisi di campione o sequenza nel registro elettronico nell'area di lavoro dello strumento nella finestra Instrument (Strumento).

Le colonne dei registri elettronici che non risultano intuitive sono descritte nella [Tabella 1](#); la [Figura 20](#) illustra inoltre un esempio di registro elettronico.

Tabella 1 Descrizione del contenuto del registro elettronico

Nome colonna	Esempio di contenuto visualizzato	Scopo
E-Sig	Firmato Nessuno	Identifica azioni per le quali è stata configurata una firma elettronica (E-Sig) applicata in NDS Cerity Software Administration.
Source	cerity_test\sspencer Automazione Timbro Utente	Se viene configurata E-Sig , il nome utente della persona che firma viene registrato. Se E-Sig non è configurata, viene registrato il timbro utente associato all'azione oppure in caso di azioni effettuate in automatico, viene registrata l'automazione stessa (Automation).
Type	Audit Informazioni	Specifica se i dettagli sono per l'audit o a scopo di informazione generale.
Remarks	Modifica procedura laboratorio Metodo rilasciato	Quando i motivi dell'audit sono stati configurati nell'applicazione Software Administration di Cerity per QA/QC in campo farmaceutico, il sistema visualizza Method Logbook (Registro elettronico dei metodi) che riporta tutte le colonne (vedere la Figura 20).

2 Cerity per QA/QC in campo farmaceutico - Elementi di base dell'applicazione
Salvataggi nel database

Description	Item	Comment	E-Sig	Timestamp	Source	Type	Host
Change the 'To' from '1000' to '180' for the 35900SetPoints, Channel A.	35900SetPoints, Channel A	Updated	None	06/11/2002, 08:22:37	wadlc001\demo	Audit	WADLC001
Change the 'From' from '0' to '20' for the 35900SetPoints, Channel A.	35900SetPoints, Channel A	Updated	None	06/11/2002, 08:22:37	wadlc001\demo	Audit	WADLC001
Change the 'External State (Remote Bus Mode)' from 'ACTIVE' to 'OFF' for the 35900SetPoints, Channel A.	35900SetPoints, Channel A	Updated	None	06/11/2002, 08:22:37	wadlc001\demo	Audit	WADLC001
Change the 'Stop Time (min)' from '1' to '1.4' for the 35900SetPoints, Channel A.	35900SetPoints, Channel A	Updated	None	06/11/2002, 08:22:37	wadlc001\demo	Audit	WADLC001
Method revised, new revision: 2	---	---	None	06/11/2002, 08:22:18	wadlc001\demo	Information	WADLC001
Created.	Method	Initial configuration	Signed	06/11/2002, 08:22:05	wadlc001\demo	Audit	WADLC001
Method created by operator: Demo User							

Figura 20 Method Logbook (Registro elettronico del metodo) con tutte le colonne

Impostazione del metodo

Il metodo Cerity per QA/QC in campo farmaceutico è la versione elettronica della procedura di analisi, della monografia o della SOP. Per questo motivo, gli amministratori del sistema o gli analisti generalmente impostano un metodo una sola volta o raramente.

L'impostazione dei metodi si compone di due parti. Innanzitutto, si crea un modello di metodo con il **Method Wizard** (Impostazione guidata del metodo). Il *modello di metodo* fornisce un formato per consentire all'utente l'immissione dei soli parametri rilevanti per l'analisi. È quindi possibile procedere all'immissione dei parametri nel modello per creare un *metodo* nella finestra Method (Metodo).

Creazione di un modello di metodo

Per informazioni sull'impostazione di metodi, vedere "Concetti del metodo Cerity per QA/QC in campo farmaceutico" a pagina 93.

Prima di immettere i parametri dello strumento o impostare una tavola di calibrazione, è necessario creare la struttura per l'analisi. Con il **Method Wizard** (Impostazione guidata del metodo) è possibile scegliere le opzioni necessarie per creare un modello di metodo.

Alcune delle scelte disponibili scorrendo il **Method Wizard** (Impostazione guidata del metodo) sono le seguenti:

- selezione di un nome di metodo per campioni singoli o sequenze
- assegnazione del metodo a uno strumento
- selezione di opzioni per impostare l'analisi di dati
- selezione di opzioni per impostare l'identificazione dei composti
- selezione di opzioni per impostare la calibrazione
- selezione di opzioni per impostare la quantificazione

2 Cerity per QA/QC in campo farmaceutico - Elementi di base dell'applicazione

Impostazione del metodo

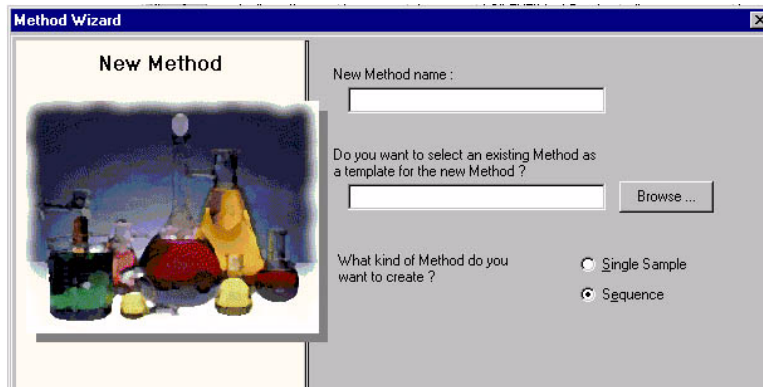


Figura 21 Method Wizard (Impostazione guidata del metodo)

Immissione di parametri

Dopo avere completato la creazione di un nuovo modello di metodo, nella finestra Method (Metodo) viene visualizzato il nuovo metodo nell'albero di selezione. Si prosegue con l'immissione dei parametri iniziali nella finestra Method (Metodo).

Reporting

Il sistema NDS di Cerity può creare rapporti al termine dell'elaborazione dei dati. È tuttavia necessario selezionare prima i tipi e i modelli di rapporto nel metodo. Il modello di rapporto specifica i dati per il rapporto e il layout dei campi per i valori da visualizzare. Il sistema NDS Cerity accede ai dati specificati nel modello di rapporto per creare il rapporto.

Selezione del tipo di rapporto Cerity per QA/QC in campo farmaceutico contiene diversi tipi di rapporti predefiniti. Se si seleziona **Reporting** nell'albero di selezione quando si imposta un metodo, i tipi di rapporto predefiniti vengono visualizzati nell'area di lavoro.

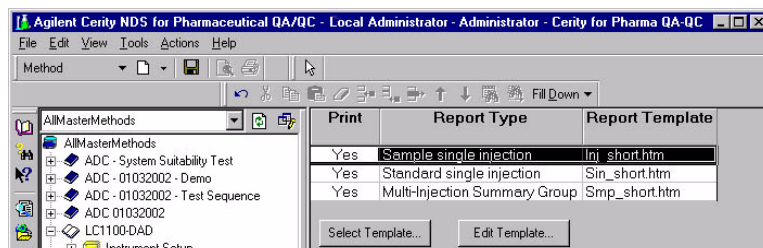


Figura 22 Tipi di rapporto nella finestra Method (Metodo) per campioni singoli

È anche possibile selezionare la stampa o la creazione di un tipo di rapporto nella finestra Sample (Campione) per il campione o la sequenza di campioni appena inserita.

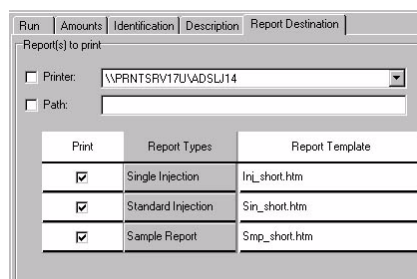


Figura 23 Tipi di rapporto per la finestra Sample (Campione)

Selezione del modello di rapporto Ciascun tipo di rapporto predefinito utilizza un modello predefinito. Un tipo di rapporto non può essere modificato, ma è possibile selezionare un modello diverso per il tipo di rapporto. Questa operazione viene eseguita nell'area di lavoro Reporting.

Modifica del modello di rapporto Gli amministratori di sistema o gli utenti con l'autorizzazione corretta possono anche modificare i modelli di rapporto esistenti o crearne di nuovi con Report Template Editor di Cerity, che consente di creare un nuovo modello di rapporto o modificarne uno esistente. È possibile selezionare sezioni preimpostate e oltre duemila campi per creare un modello di rapporto basato sulle proprie specifiche.

2 Certity per QA/QC in campo farmaceutico - Elementi di base dell'applicazione
Impostazione del metodo

È possibile accedere a *Report Template Editor di Certity* dall'area di lavoro Reporting quando si imposta un metodo.

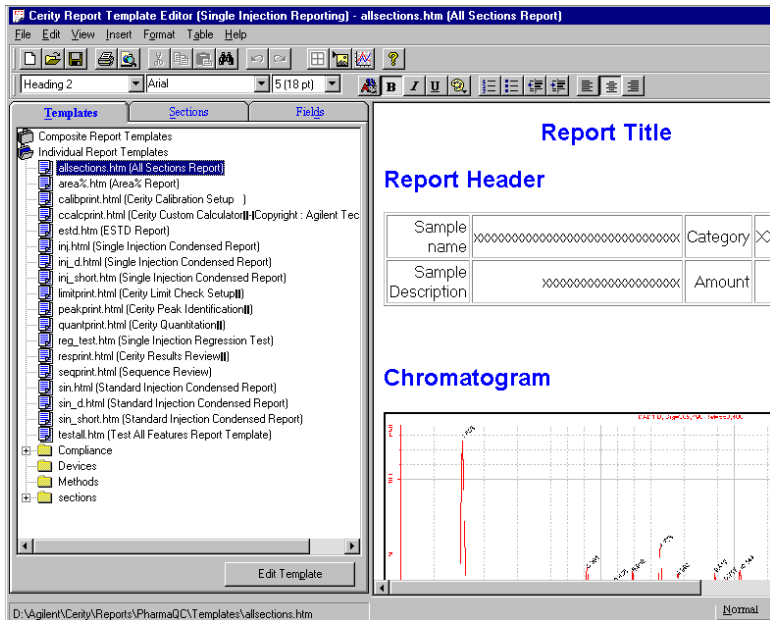
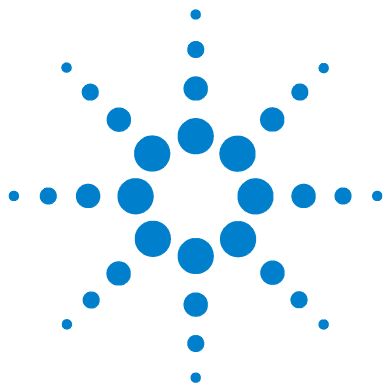


Figura 24 Report Template Editor



3

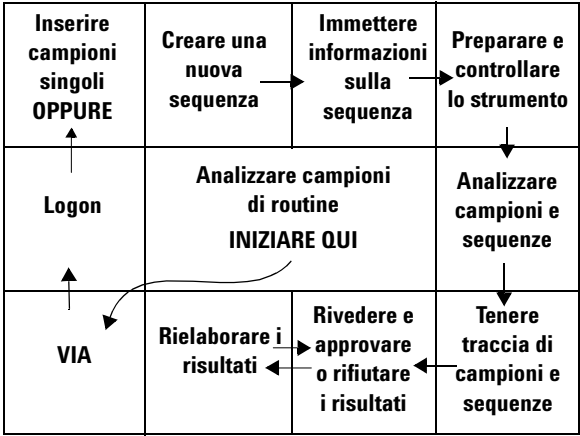
Analisi dei campioni

Inserimento di campioni o sequenze	49
Preparazione dell'analisi	52
Programmazione e tracciamento dell'analisi	53
Revisione dei risultati	56
Rifiuto o approvazione dei risultati	62
Rielaborazione dei metodi calibrati	65
Revisioni dei risultati e della tavola di calibrazione	70
Revisione e rintracciabilità delle sequenze	75

Questo capitolo fornisce una descrizione dei concetti che aiutano a comprendere appieno l'analisi dei campioni in NDS Cerity per QA/QC in campo farmaceutico ed è utile per completare gli esercizi del gruppo di analisi di campioni di routine delle *schede introduttive*.



La mappa seguente illustra il percorso per l'analisi di campioni di routine. Iniziare da **VIA**. Ogni sezione comprende una serie di attività da eseguire in laboratorio.



Ogni argomento di questo capitolo fornisce informazioni di base che consentono di seguire le fasi di questo percorso.

Inserimento di campioni o sequenze

Inserimento di campioni singoli

Un *campione singolo* o una *sequenza Cerity* per QA/QC in campo farmaceutico contiene tutte le informazioni su metodo, campione e sequenza necessarie per acquisire ed elaborare i dati. Queste informazioni vengono aggiunte a tutte le informazioni sull'analisi e ai dati grezzi ed elaborate per ottenere il risultato Cerity per QA/QC in campo farmaceutico per il singolo campione o la sequenza.

È possibile inserire i campioni singoli in una delle tre posizioni seguenti:

- finestra Sample (Campione): area di lavoro per campioni singoli nella cartella Sample Entry (Inserimento di campioni)
- finestra Sample (Campione): area di lavoro per campioni singoli nella cartella Instrument (Strumento)
- finestra Instrument (Strumento): area di lavoro per campioni singoli nella cartella Instrument (Strumento)

Il pannello **Sample Entry** (Inserimento di campioni) consente di immettere le stesse informazioni sul campione in ogni posizione. Fare clic sul pulsante **Apply** (Applica) per accertarsi che il sistema abbia inserito correttamente le informazioni.

Attività di elaborazione da eseguire:
è necessario selezionare Quantify
(Quantifica) per identificare i
composti.

Aggiornamenti della calibrazione:
è possibile selezionare il livello
e il tipo di aggiornamento per
gli standard di calibrazione.

The screenshot shows the 'Sample Entry' dialog box. The 'Sample Name' field contains 'ee1uorcat1'. The 'Method' dropdown is set to 'ee_121001_i20_25_tst_1'. The 'Sample Type' dropdown is set to 'Calibration Standard'. The 'Instrument' dropdown is set to 'EELC3'. The 'Vial Number' is '1', 'Injections' is '1', and 'Volume [µl]' is '1 as method'. The 'Run with' section shows 'Priority: Medium' and 'Schedule: Unknown'. The 'Task(s) to perform' section has checkboxes for 'Acquire', 'Integrate', and 'Report', all of which are checked. The 'Calibration' section has 'Calibration Level: 1', 'Response Update: Average', and 'Retention Time Update: Average'. The 'Analyst' field contains 'SCHEIDERER.ROBIN'. An 'Apply' button is located at the bottom center.

3 Analisi dei campioni

Inserimento di campioni o sequenze

Sample Variables (Variabili del campione): si immettono la quantità di campione e i valori per qualsiasi moltiplicatore o divisore impostato come variabile del campione nel metodo.

Compound Amounts (Quantità di composto): se si specificano quantità di composto variabili nel metodo calibrato, tali quantità possono essere modificate.

Report destination (Destinazione del rapporto): per informazioni sull'impostazione, la stesura e la stampa di rapporti, vedere il Capitolo 4 "Impostazione dei metodi".

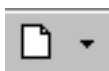
Use	Name	Amount
<input checked="" type="checkbox"/>	New Compound2	10
<input checked="" type="checkbox"/>	New Compound5	5
<input type="checkbox"/>	New Compound3	0
<input type="checkbox"/>	New Compound6	0

Salvataggi dell'inserimento di campioni Fare clic sul pulsante **Apply** (Applica) nell'area di lavoro di inserimento del campione per immettere le informazioni sul campione nella relativa tabella e selezionare il pulsante **Save** (Salva) per salvare le immissioni e le modifiche nel database.

Instrument Logbook (Registro elettronico dello strumento)

Quando si salva il campione nel database NDS Cerity, l'audit del NDS Cerity per QA/QC in campo farmaceutico può richiedere di immettere un motivo di audit e fornire la propria firma elettronica per poter analizzare il campione. In **Sample Logbook** (Registro elettronico del campione) viene visualizzata una descrizione delle modifiche.

Inserimento di sequenze



Nuove sequenze Utilizzare il pulsante **New** (Nuovo) per creare nuove sequenze.

Dopo aver creato una sequenza, è possibile immetterne le informazioni in tre finestre:

- finestra Sample (Campione) in Sample Entry (Inserimento di campioni)

- finestra Sample (Campione) nella cartella Instrument (Strumento)
- finestra Instrument (Strumento) nella cartella Instrument (Strumento)

Opzioni della sequenza È possibile immettere informazioni sui campioni nello stesso pannello **Sample Entry** (Inserimento di campioni) come per i campioni singoli, ma le opzioni **Tasks to perform** (Attività di analisi da eseguire) e **Report destination** (Destinazione del rapporto) sono elencate in Sequence Options (Opzioni della sequenza).

Tasks to perform (Attività di elaborazione da eseguire): corrispondono alle attività relative ai campioni singoli, ma l'opzione **Allow Online Editing (Consenti modifica in linea)** riguarda solo le sequenze.

Report destination (Destinazione del rapporto): immettere qui la destinazione del rapporto per l'intera sequenza, anziché in Sample Entry (Inserimento di campioni).

Salvataggi dell'inserimento di sequenze Fare clic sul pulsante **Apply** (Applica) nell'area di lavoro di inserimento del campione per immettere le informazioni sul campione nella relativa tabella e selezionare il pulsante **Save** (Salva) per salvare le immissioni e le modifiche nel database.

Quando si inserisce un campione singolo o una sequenza, il relativo numero di revisione viene impostato su 1 e viene incrementato quando si modifica il campione singolo o la sequenza.

Sequence Logbook (Registro elettronico della sequenza) Quando si salva la sequenza nel database NDS Certity, l'audit NDS Certity per QA/QC in campo farmaceutico può richiedere di immettere un motivo di audit e fornire la propria firma elettronica per poter analizzare una sequenza. Nel **Sequence Logbook** (Registro elettronico della sequenza) viene visualizzata una descrizione delle modiche.

Preparazione dell'analisi

Equilibratura di strumento e colonna

Quando si crea uno strumento, il relativo numero di revisione viene impostato su 1 e viene incrementato se la configurazione dello strumento viene modificata in modo interattivo.

È possibile equilibrare strumento e colonna dal pannello Instrument (Strumento) nella finestra Instrument (Strumento).

Nel pannello Instrument (Strumento) è riportata un'illustrazione dei moduli dello strumento che si possono configurare. Fare clic su un modulo per accedere alle voci di menu per l'immissione dei parametri dello strumento. Ad esempio, è possibile avviare o arrestare una pompa.

Immettere i parametri di equilibratura nella finestra di dialogo **Set Pump** (Imposta pompa). È possibile avviare la pompa e monitorare la linea di base visualizzata nel diagramma in tempo reale.

Valori effettivi

Selezionando **Device Actuals** (Valori effettivi del dispositivo) dal menu View (Visualizza), è possibile visualizzare e impostare i valori in tempo reale dei parametri per uno strumento selezionato.

Per immettere i valori effettivi nella finestra **Device Actuals** selezionare la voce **Setup Actuals Window** (Imposta finestra dei valori effettivi) nel menu View (Visualizza), quindi aggiungere o rimuovere le impostazioni.

Diagramma in tempo reale

Prima di analizzare un campione o una sequenza, impostare gli assi e l'aspetto del diagramma in tempo reale e fare clic sul pulsante **Change** (Modifica).

Programmazione e tracciamento dell'analisi

Programmazione di campioni o sequenze

È possibile analizzare i campioni singoli o le sequenze dalle seguenti finestre:

- nella cartella Sample Entry (Inserimento di campioni) per la finestra Sample
- nella cartella Sample Entry (Inserimento di campioni) per la finestra Sample
- nella cartella Instrument (Strumento) per la finestra Instrument



La selezione di un campione singolo o di un gruppo di campioni da analizzare viene effettuata nella tabella dei campioni. Dopo aver selezionato i campioni singoli o le sequenze da analizzare, avviare l'analisi tramite il pulsante Run (Esegui).

Utilizzare le regole riportate di seguito per pianificare le analisi:

- quando si avvia un'analisi per un gruppo di campioni singoli o sequenze, viene analizzato il primo campione o la prima sequenza selezionata. I campioni o le sequenze rimanenti vengono inseriti nella coda di analisi
- l'ordine in cui si avvia l'analisi di un campione o di una sequenza determina l'ordine di analisi nella coda
- se è necessario interrompere una sequenza con un campione ad alta priorità, occorre innanzitutto interrompere la sequenza, quindi inserire il campione nella prima riga della Worklist (Elenco di lavoro) e analizzarlo. Vedere ["Traccia dell'analisi"](#) a pagina 54 per ulteriori informazioni sulla Worklist (Elenco di lavoro).
- è possibile impostare l'ordine di analisi di campioni singoli per priorità. L'ordine di priorità è alta, media e bassa

Non è necessario impostare una programmazione per programmare un campione o una sequenza.

Traccia dell'analisi

Worklist (Elenco di lavoro)

La Worklist (Elenco di lavoro) relativa ad uno strumento consente di tenere traccia dello stato dei campioni e delle sequenze nella coda di analisi. Per eliminare un campione o una sequenza dalla **Worklist** (Elenco di lavoro), è necessario completare o interrompere l'analisi.

Per lo strumento selezionato la selezione di un campione o di una sequenza dalla Worklist (Elenco di lavoro) attiva i pulsanti **Abort** (Arresta), **Pause** (Sospendi), **Resume** (Riprendi) e **Remove** (Rimuovi).



Funzioni della Worklist (Elenco di lavoro)

Quando si tiene traccia di campioni e sequenze con la **Worklist** (Elenco di lavoro), è possibile eseguire le seguenti attività:

- visualizzare lo stato di campione e sequenza per tutti gli strumenti nel gruppo selezionato
- visualizzare lo stato di campione e sequenza per uno strumento
- interrompere l'analisi di un campione o di una sequenza
- sospendere l'analisi di un campione o di una sequenza
- ripristinare l'analisi di un campione o di una sequenza
- interrompere l'analisi di una sequenza con il pulsante **Edit Sequence** (Modifica sequenza) per passare alla modalità di modifica della sequenza

*Se facendo clic sul pulsante **Edit Sequence** (Modifica sequenza) nella Worklist (Elenco di lavoro) non accade nulla, la casella di controllo **Allow Online Editing** (Consenti modifica in linea) non è selezionata nel metodo.*

Modifica di una sequenza durante un'analisi

Se durante l'impostazione della sequenza è stata selezionata la casella di controllo **Allow Online Editing** (Consenti modifica in linea), fare clic sul pulsante **Edit Sequence** (Modifica sequenza) nella Worklist (Elenco di lavoro) per modificare la sequenza durante l'analisi. Il sistema completa l'elaborazione del campione che sta analizzando, quindi entra in pausa per consentire di modificare la sequenza o aggiungere nuovi campioni. Durante l'analisi di una sequenza, non è possibile programmare altre sequenze o campioni singoli sullo strumento.

Quando la sequenza viene ripresa, vengono eseguite l'iniezione successiva o la linea di sequenza. NDS Cerity per QA/QC in campo farmaceutico ricalcola automaticamente tutte le dipendenze in sospenso (ad esempio ricalibrazioni, tabelle riassuntive di gruppi di campioni) in modo da comprendere le iniezioni appena aggiunte.

Instrument Logbook (Registro elettronico dello strumento)

Tutti gli eventi che si verificano durante un'analisi vengono riportati nel **Instrument Logbook** (Registro elettronico dello strumento).

Cerity per QA/QC in campo farmaceutico registra i seguenti eventi nel **Instrument Logbook** (Registro elettronico dello strumento):

- eventi per un'analisi
- errori
- pausa o interruzione dello strumento

Revisione dei risultati

Risultato dell'analisi

Un *risultato Cerity per QA/QC in campo farmaceutico* contiene dati grezzi ed elaborati, calcoli, parametri del metodo e informazioni su campione e sequenza.

Quando si desidera rivedere un risultato, accertarsi di cercare il set di risultati corretto nella finestra Result (Risultato). Per visualizzare un risultato non visibile nell'albero di selezione, eseguire le operazioni seguenti:

- selezionare un'altra ricerca dalla Query list (Elenco di ricerca)
- modificare una ricerca esistente
- fare clic sul pulsante **Redo Query** (Esegui di nuovo la ricerca) per aggiornare le selezioni
- modificare la sezione Data Review Layout (Layout di revisione dei dati) del metodo per inserire il risultato che si sta cercando, quindi eseguire la rielaborazione

Per dettagli sul layout della revisione dei dati, vedere la sezione "Data Review Layout (Layout di revisione dei dati)" a pagina 103.

Organizzazione dei risultati nell'albero di selezione

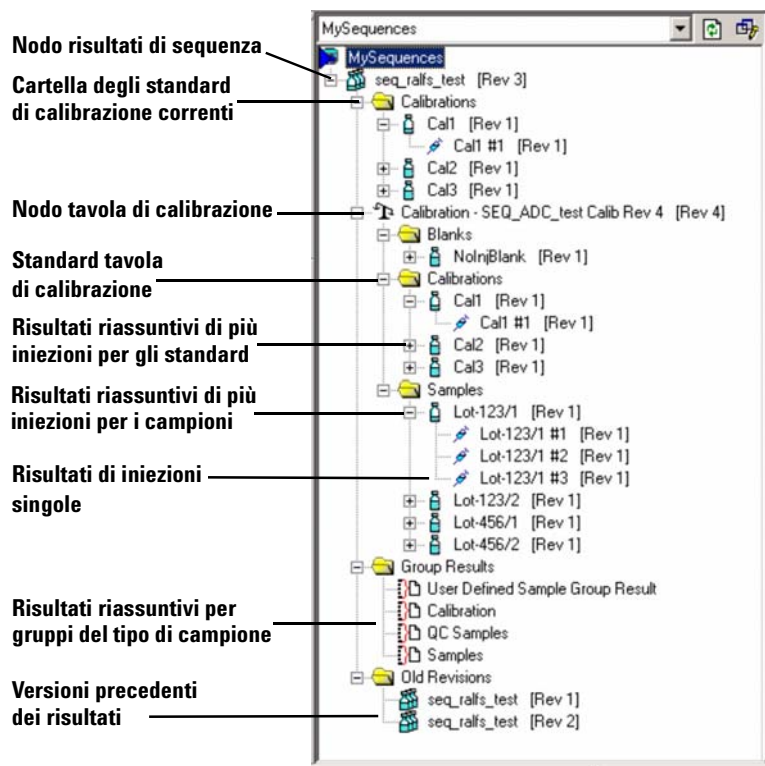


Figura 25 Tipi di rapporto per campioni singoli della Finestra Method (Metodo)

NOTA

Il nome del metodo utilizzato per i campioni singoli o per la sequenza viene visualizzato nella cartella dei risultati riassuntivi della calibrazione.

Visualizzazione delle cartelle di calibrazione nella finestra dei risultati

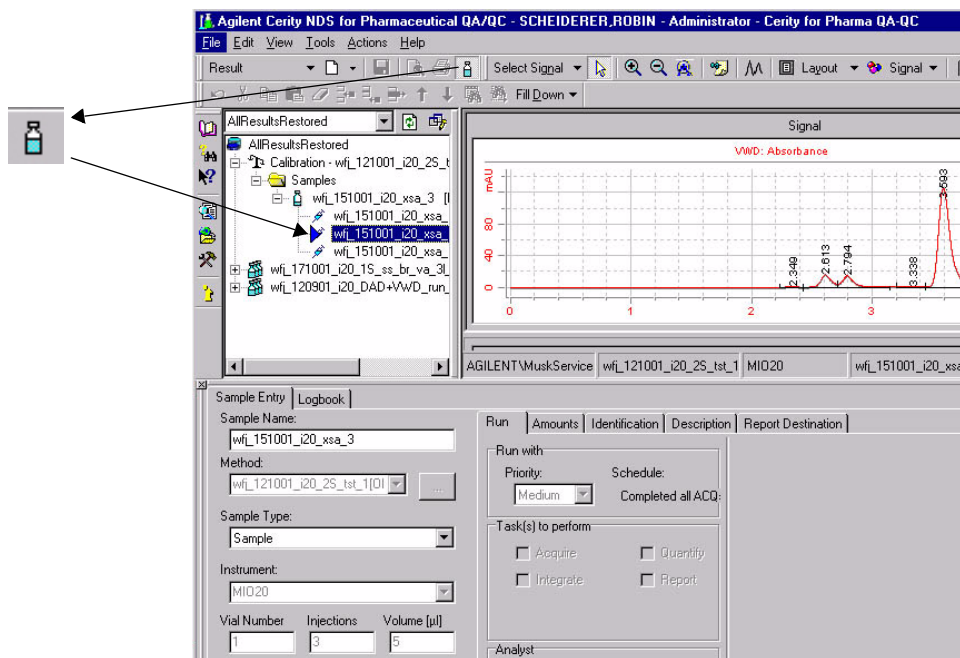
La Figura 25, mostra che la visualizzazione dell'albero nell'ambito del contesto dei risultati contiene più cartelle Calibration. Ogni cartella contiene informazioni diverse:

Nome	Percorso	Scopo
Cartella degli standard di calibrazione correnti	Immediatamente sotto il nodo dei risultati di sequenza	Consente di navigare nella versione più recente di standard acquisito ed utilizzato nella sequenza.
Nodo tavola di calibrazione	Identificato dall'icona della "bilancia"	Consente di navigare nelle tavole di calibrazione create ed utilizzate nella sequenza. Le tavole di calibrazione non utilizzate per nessun calcolo non sono accessibili.
Standard tavola di calibrazione	Sotto il nodo della tavola di calibrazione	Consente di navigare fra le varie versioni di standard usate per creare la tavola di calibrazione nel relativo nodo.

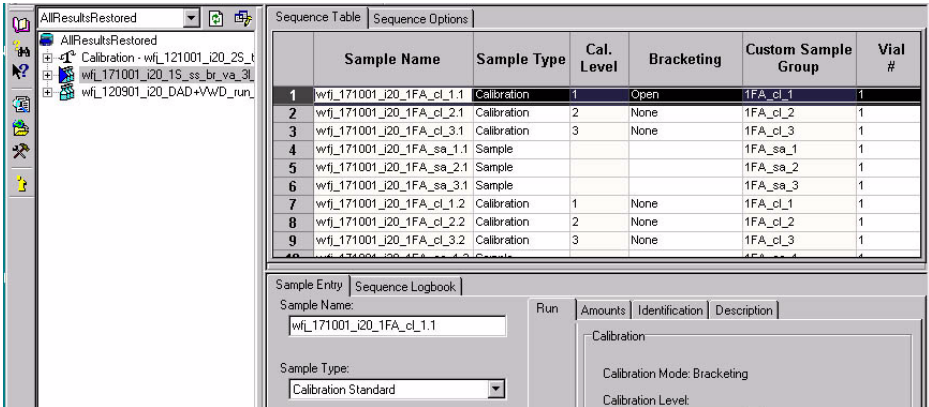
In seguito all'esecuzione (o alla ricalibrazione) di una sequenza, le versioni della cartella contenente gli standard di calibrazione correnti e gli standard della tavola di calibrazione sono identiche. Tuttavia, in seguito alle modifiche di un'analisi standard e prima della rielaborazione, le versioni di standard contenute nelle due cartelle di calibrazione sono diverse; ad esempio lo standard può essere Versione 4 nella cartella degli standard di calibrazione correnti (la versione più recente), ma Versione 3 negli standard della tavola di calibrazione (la versione di standard utilizzata nella tavola di calibrazione). Vedere anche ["Revisioni dei risultati e della tavola di calibrazione"](#) a pagina 70.

Revisione delle informazioni su campione e sequenza

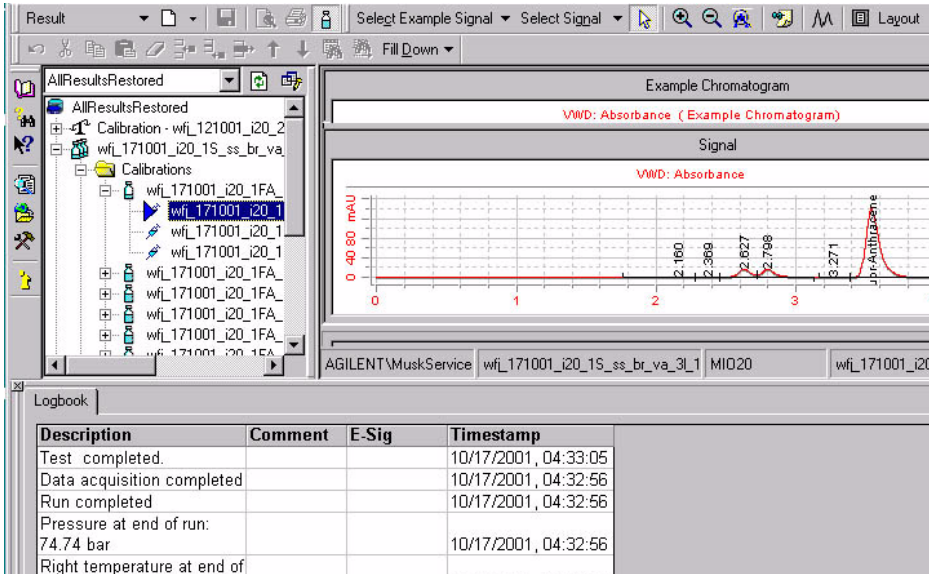
Campioni singoli Poiché i metodi e le informazioni sui campioni sono collegati ai risultati prodotti, è facile trovare le informazioni sul campione per un'analisi ad iniezione singola. Fare clic sull'icona **Sample Details** (Dettagli del campione) per visualizzare il pannello **Sample Entry** (Inserimento di campioni) per l'iniezione singola del campione singolo.



Sequenze È anche possibile trovare agevolmente le informazioni su campione e sequenza per le sequenze nella finestra Result (Risultato). Selezionando il risultato della sequenza vengono visualizzati la tabella di sequenza e il pannello di inserimento del campione.



Selezionare il risultato di un'iniezione singola per la sequenza e fare clic sull'icona **Sample Details** (Dettagli del campione) per visualizzare il **Sample Logbook** (Registro elettronico del campione).



Utilizzo dei risultati di Cerity per QA/QC in campo farmaceutico

Durante la revisione, la rielaborazione e l'approvazione dei risultati, è possibile effettuare le seguenti operazioni:

- rivedere i risultati per tutti i diversi insiemi di dati
- eseguire la reintegrazione
- modificare le informazioni su campione e sequenza
- rimuovere i punti di calibrazione
- eseguire di nuovo i calcoli con il metodo originariamente collegato al risultato
- rielaborare con la versione corrente del metodo
- immettere nel metodo i valori relativi alle aggiunte delle variabili di composto e campione
- rielaborare con un altro metodo
- importare e rielaborare un file ChemStation Agilent o un file ANDI
- accettare o rifiutare un risultato
- indicare che un risultato deve essere nuovamente analizzato

Rifiuto o approvazione dei risultati

Cerity per QA/QC in campo farmaceutico consente di approvare, respingere ed inviare in rete i risultati in base alle procedure in vigore in azienda. Confermare la revisione di ciascun risultato utilizzando la finestra di dialogo **Accept/Reject Results** (Approvazione/rifiuto di risultati).

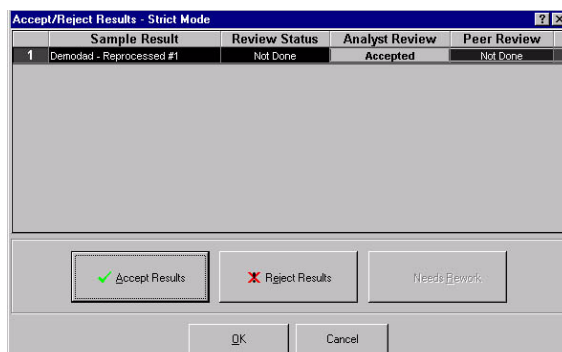


Figura 26 Finestra di dialogo **Accept/Reject Results**
(Approvazione/rifiuto di risultati)

La revisione si applica a tutti i risultati di un campione, ossia le iniezioni singole vengono riviste singolarmente e il risultato riassuntivo viene assegnato al campione o alla sequenza.

Livelli di accettazione dei campioni

Sono disponibili tre livelli di accettazione Cerity per QA/QC in campo farmaceutico definiti per tutti i risultati:

- 1 Richiesta revisione Analyst (livello 1), eseguita dagli utenti con capacità di accesso di livello 1, 2 o 3
- 2 Richiesta revisione Peer (livello 2), eseguita dagli utenti con capacità di accesso di livello 2 o 3
- 3 Richiesta revisione Managerial (livello 3), eseguita dagli utenti con capacità di accesso di livello 3

Diritti di revisione degli utenti

L'amministratore di sistema può assegnare agli utenti dell'applicazione NDS Cerity Software Administration una delle quattro capacità di revisione, che consentono di accettare o rifiutare i risultati a un determinato livello.

- 0 Non è consentito effettuare revisioni
- 10 È consentito effettuare revisioni di tipo Analyst (livello 1)
- 20 È consentito effettuare revisioni di tipo Peer o Analyst (livello 2)
- 30 È consentito effettuare revisioni di tipo Managerial, Analyst o Peer (livello 3)

Modalità di revisione

Al momento dell'installazione, l'amministratore del sistema definisce se la modalità di revisione è rigida o non rigida.

Revisione rigida

La revisione rigida è un criterio specificato dal sistema, secondo il quale il laboratorio può scegliere solo il numero dei livelli di approvazione. Nella revisione rigida si applicano le seguenti regole:

- tutti i livelli di accettazione di un risultato devono essere impostati su *Accepted* (Accettato) per consentire l'impostazione dell'accettazione globale del risultato
- ogni livello deve essere firmato per consentire la revisione del livello successivo, ossia il livello 1 di accettazione deve essere impostato prima del livello 2 e questo prima del livello 3
- il livello di approvazione più elevato assegnato a un risultato può modificarne lo stato da *Accepted* (Accettato) a *Needs Rework* (Nuova elaborazione richiesta) in qualsiasi momento

Revisione non rigida	<p>La revisione non rigida è un criterio definito dal laboratorio per il quale si applicano le seguenti regole:</p> <ul style="list-style-type: none">• non è necessario impostare tutti i livelli di accettazione, un livello più elevato può procedere all'accettazione per un livello inferiore o ignorare un rifiuto di livello inferiore• i livelli di accettazione possono essere eseguiti in qualsiasi ordine• tutti i revisori possono modificare lo stato della revisione da <i>Accepted</i> a <i>Needs Rework</i>, ma solo il livello più elevato può reimpostare lo stato di revisione globale su <i>Needs Rework</i>
-----------------------------	--

Rielaborazione dei metodi calibrati

La rielaborazione è l'azione con cui si ricalcolano i risultati di analisi in base a parametri di elaborazione modificati. È possibile rielaborare solo un campione singolo o una sequenza selezionata. Non è possibile rielaborare iniezioni singole o campioni singoli in una sequenza.

Se è necessario analizzare di nuovo un campione o una sequenza, è possibile apportare modifiche ai risultati o al metodo, quindi rielaborare il risultato.

Opzioni di rielaborazione disponibili

Tutti i parametri del metodo e le informazioni sul campione utilizzati per produrre un risultato vengono collegati a tale risultato. Questa struttura determina le opzioni per la rielaborazione.

The screenshot shows a 'Reprocess' dialog box. The 'Sample' field contains 'Demodad'. The 'Revision' field is set to '2'. Under 'Reprocess Options', the first radio button is selected: 'Use the method revision that is now attached to the result'. Other options include 'Use the most current revision of the method that is attached to the result', 'Use integration settings in the method', and 'Replace Response Factors in the Method'. There is also a 'Print Reports' checkbox at the bottom left and 'OK' and 'Cancel' buttons at the bottom right.

Selezione delle opzioni di rielaborazione

Le opzioni di rielaborazione selezionate dipendono dai motivi della rielaborazione. Quando si rielaborano i metodi calibrati, è necessario considerare con attenzione il risultato che si tenta di ottenere. Utilizzare le seguenti linee guida per effettuare la selezione.

Per standard di calibrazione che utilizzano metodi di calibrazione specifici per strumento:

Se si rielabora uno standard di calibrazione a campione singolo o una sequenza specifica per strumento che contiene standard di calibrazione e si desidera che le modifiche abbiano un impatto significativo sulle future analisi quantitative, selezionare l'opzione **Use the most current revision of the method that is attached to the result** (Utilizza la versione più recente del metodo allegata al risultato) e (importante!) selezionare la casella **Replace Response Factors in the Method** (Sostituisci i fattori di risposta nel metodo).

Se la calibrazione non deve aggiornare il metodo lasciare deselezionata la casella **Replace Response Factors in the Method** e selezionare l'opzione **Use the method revision that is now attached to the result** (Utilizza la versione di metodo attualmente allegata al risultato). Questa operazione disattiva gli effetti della ricalibrazione sul metodo. Selezionare **Use the most current revision of the method that is attached to the result** solo se si abbia bisogno di attivare le modifiche sul metodo durante l'analisi quantitativa di campioni/sequenze.

Per standard diversi dagli standard di calibrazione, campioni singoli e sequenze che utilizzano metodi di calibrazione specifici:

Quando si rielaborano bianchi di campioni singoli, campioni o controlli per QC, sequenze diverse dalle sequenze di calibrazione specifiche per strumento o sequenze calibrate specifiche per sequenza, selezionare l'opzione **Use the method revision that is now attached to the result**.

Solo in caso si desideri utilizzare le modifiche della calibrazione o altri parametri del metodo, selezionare l'opzione **Use the most current revision of the method that is attached to the result**.

Riutilizzo di dati vecchi:

L'opzione **Use the method revision that is now attached to the result** per effettuare una replica degli stessi identici calcoli effettuati in precedenza. Questa funzione è particolarmente utile per visualizzare risultati che risalgono a molti anni prima, in modo che possano essere di nuovo valutati. È inoltre utile per provare che da allora nessun risultato è stato modificato.

Utilizzare la [Tabella 2](#) per trovare l'opzione di rielaborazione più adatta ai casi specifici.

Tabella 2 Utilizzare la tabella seguente per selezionare le opzioni di rielaborazione in situazioni specifiche

Motivo della rielaborazione	Operazione da eseguire	Operazioni eseguite da Cerity per QA/QC in campo farmaceutico.
<ul style="list-style-type: none"> • Modifica di alcune impostazioni di integrazione per iniezioni singole • Immissione di nuovi valori per i campi di inserimento del campione • Rimozione degli standard di calibrazione dai dati di calibrazione • Rielaborazione di un campione o una sequenza acquisita senza elaborazione o con elaborazione parziale. 	<ul style="list-style-type: none"> • Dopo aver apportato le modifiche necessarie, selezionare l'opzione di rielaborazione Use the method revision that is now attached to the result (Utilizza la versione di metodo attualmente allegata al risultato). 	<ul style="list-style-type: none"> a Inizializza la tavola di calibrazione con la versione di più recente del metodo. b Per metodi specifici per strumento, se la tavola di calibrazione è corrente, il metodo viene aggiornato in base alle impostazioni ed agli standard di calibrazione. In tutti gli altri casi viene creata una nuova modalità di calibrazione, separata dal metodo.

Tabella 2 Utilizzare la tabella seguente per selezionare le opzioni di rielaborazione in situazioni specifiche

Motivo della rielaborazione	Operazione da eseguire	Operazioni eseguite da Cerity per QA/QC in campo farmaceutico.
<ul style="list-style-type: none"> • Uso di nuove impostazioni di integrazione nella revisione più aggiornata del metodo per tutte le iniezioni • Rielaborazione dei dati della vecchia sequenza utilizzando una nuova tavola di calibrazione nella versione più aggiornata del metodo. 	<ul style="list-style-type: none"> • Selezionare l'opzione di rielaborazione Use the most current revision of the method that is attached to the result (Utilizza la versione più recente del metodo allegata al risultato). 	<ul style="list-style-type: none"> a Inizializzazione della tavola di calibrazione con la versione più aggiornata della tavola di calibrazione del metodo della sequenza. b Se i dati da rielaborare sono di una revisione precedente della calibrazione o se il metodo è specifico per sequenza e si desidera aggiornare il metodo, barrare la casella Replace the response factors in the method (Sostituisci i fattori di risposta nel metodo). In tutti gli altri casi il metodo viene aggiornato automaticamente. Gli standard contrassegnati come non validi nello spazio di calibrazione NON vengono utilizzati. c Calcolo di quantificazione, calcoli personalizzati e limiti con le nuove impostazioni dal metodo.
<ul style="list-style-type: none"> • Rielaborazione dei dati con una revisione del metodo aggiornata che comprende nuove variabili di campione (non influenza la calibrazione). 	<ul style="list-style-type: none"> • Dopo aver apportato le modifiche necessarie, impostare la rielaborazione per i nuovi campi di inserimento del campione. • Immettere i valori per le nuove variabili del campione e selezionare l'opzione Use the most current revision of the method that is attached to the result. 	<ul style="list-style-type: none"> • Esecuzione delle operazioni precedenti. • Qualsiasi altra modifica è utilizzata sia per questa selezione sia per le sezioni precedenti. <p>Poiché il software Cerity per QA/QC in campo farmaceutico collega al risultato la versione più aggiornata del metodo, quando si imposta l'elaborazione per i nuovi campi di inserimento del campione, selezionare l'opzione Use the method revision that is now attached to the result.</p>
<ul style="list-style-type: none"> • Rielaborazione dei dati con una versione del metodo aggiornata che comprende nuovi composti (influenza la calibrazione). 	<ul style="list-style-type: none"> • Dopo aver apportato le modifiche necessarie, impostare la rielaborazione per i nuovi campi di inserimento del campione. • Immettere i valori per le nuove variabili del campione e selezionare l'opzione Use the most current revision of the method that is attached to the result. 	<ul style="list-style-type: none"> a Reintegrazione dei risultati dell'iniezione singola con le impostazioni del metodo. b Aggiornamento della tavola di calibrazione secondo le impostazioni del metodo e gli standard di calibrazione nella sequenza. Vengono utilizzati gli standard contrassegnati come non validi nell'area di lavoro di calibrazione. c Calcolo di quantificazione, calcoli personalizzati e limiti con le nuove impostazioni dal metodo. Viene inoltre utilizzata qualsiasi altra modifica.

Tabella 2 Utilizzare la tabella seguente per selezionare le opzioni di rielaborazione in situazioni specifiche

Motivo della rielaborazione	Operazione da eseguire	Operazioni eseguite da Cerity per QA/QC in campo farmaceutico.
<ul style="list-style-type: none"> Rielaborazione con un metodo diverso. 	<ul style="list-style-type: none"> Impostare la rielaborazione per un altro metodo. Immettere i valori per le variabili del campione o le quantità di composto nel nuovo metodo e selezionare l'opzione Use the method revision that is now attached to the result. 	<ul style="list-style-type: none"> a Reintegrazione dei risultati dell'iniezione singola con le impostazioni del metodo. b Aggiornamento della tavola di calibrazione secondo le impostazioni del metodo e gli standard di calibrazione nella sequenza. Vengono utilizzati gli standard contrassegnati come non validi nell'area di lavoro di calibrazione. c Calcolo di quantificazione, calcoli personalizzati e limiti con le nuove impostazioni dal metodo. Viene inoltre utilizzata qualsiasi altra modifica.

AVVERTENZA

Quando si esegue la rielaborazione con un metodo diverso, verrà inserito nell'albero di selezione un nodo di calibrazione aggiuntivo con lo stesso nome.

Reintegrazione

L'applicazione Cerity per QA/QC in campo farmaceutico fornisce strumenti per la reintegrazione. È possibile reintegrare gli eventi iniziali modificati e gli eventi sincronizzati per i risultati o utilizzare l'autointegrazione per consentire al sistema di impostare i parametri per l'integrazione. È anche possibile integrare manualmente i singoli picchi con le proprie linee di base. Salvare le nuove impostazioni e i risultati nel database. È necessario rielaborare il risultato per ricalibrarlo e riquantificarlo.

Revisioni dei risultati e della tavola di calibrazione

Per seguire la rielaborazione dei risultati, è necessario comprendere il sistema di numerazione delle revisioni dei risultati e della tavola di calibrazione.

Revisioni dei risultati

Quando viene creato un campione singolo o una sequenza, il relativo numero di revisione viene impostato su 1 e viene incrementato quando il campione singolo o la sequenza vengono salvati nel database. L'analisi del campione singolo o della sequenza incrementa di uno il numero di revisione.

Il risultato prodotto presenta lo stesso numero di revisione del campione singolo o della sequenza analizzata, in quanto contiene la revisione di tutte le informazioni relative a campione, sequenza e metodo nel campione singolo o nella sequenza analizzata. Il numero di revisione del risultato viene incrementato se si modificano uno o più parametri nel risultato.

Modifiche di versione nel contesto dei risultati

Sequenza ad aggiornamento singolo (assenza di bracketing)

Tabella 3 Modifiche di versione per una sequenza ad aggiornamento singolo

Fase	Azione (utilizzando sempre <i>Save to database</i> (Salva nel database))	Finestra	Numeri di revisione		
			Sequenza	Campione	Iniezione (cromatogramma)
1	Creazione di una sequenza	Sample	1	N/D	N/D
2	Aggiunta di un campione alla tabella Sequence (Sequenza)	Sample	2	N/D	N/D
3	Modifica quantità di composto per un campione nella tavola di sequenza	Sample	3	N/D	N/D
4	Esecuzione dell'acquisizione della sequenza sullo strumento		4	1	1
5	Modifica dell'inserimento di campione in quantità differenti	Result	5	1	1
6	Integrazione manuale del cromatogramma relativo ad una iniezione	Result	6	2	2
7	Rielaborazione della sequenza	Result	8*	3	3
8	Modifica dell'inserimento di campione in quantità differenti	Result	9	3	3
9	Integrazione manuale del cromatogramma relativo ad una iniezione	Result	10	4	4
10	Rielaborazione della sequenza	Result	12*	5	5

* L'azione di rielaborazione incrementa il numero di versione di due unità, a causa di processi interni.

Sequenza in bracketing

Per una sequenza in bracketing, le versioni differiscono come segue:

Revisione di standard di calibrazione:

- gli standard per un bracketing **aperto** aumentano di una unità la versione di campione e cromatogramma
- gli standard utilizzati in un bracketing **aperto e chiuso** aumentano di due unità la versione di campione e cromatogramma

Revisione di incogniti calcolati (compresi campioni QC e bianchi):

- la versione aumenta di una unità quando viene calcolato il risultato

Sequenza globale in bracketing

Revisione di standard di calibrazione:

- dopo l'acquisizione gli standard sono in versione 1

Revisione di incogniti calcolati (compresi campioni QC e bianchi):

- la versione viene incrementata di una unità quando viene calcolato il risultato, ad esempio diventa versione 2 dopo l'acquisizione iniziale

Revisioni della tavola di calibrazione

Quando si crea una tavola di calibrazione, il relativo numero di revisione viene impostato su 1 e viene incrementato quando la tavola di calibrazione viene aggiornata. I seguenti esempi illustrano il controllo della revisione della tavola di calibrazione. In tutti i casi, le tavole presuppongono una sola iniezione per standard. Il numero di revisione della tavola di calibrazione viene incrementato ogni volta che si analizza un campione di calibrazione. Per le calibrazioni specifiche per sequenza, n è sempre 1.

Tabella 4 Calibrazione di aggiornamento singolo

Ordine sequenza	Nome campione	Revisione della tavola di calibrazione	
		Utilizzato	Generato
1	Standard 1, analisi 1	n	n+1
2	Standard 1, analisi 2	n+1	n+2
3	Campione 1a	n+2	
4	Campione 1b	n+2	
5	Standard 1, analisi 2	n+2	n+3

Tabella 4 Calibrazione di aggiornamento singolo (continua)

Ordine sequenza	Nome campione	Revisione della tavola di calibrazione	
		Utilizzato	Generato
6	Standard 2, analisi 2	n+3	n+4
7	Campione 2a	n+4	
8	Campione 2b	n+4	
9	Standard 1, analisi 3	n+4	n+5
10	Standard 2, analisi 3	n+5	n+6

Tabella 5 Calibrazione in bracketing

Ordine sequenza	Nome campione	Revisione della tavola di calibrazione		Bracket
		Utilizzato	Generato	
1	Standard 1, analisi 1	n	n+1	1 Aperto
2	Campione 1a	n+2		1
3	Campione 1b	n+2		1
4	Standard 1, analisi 2	n+1	n+2/n+3 [*]	1 Chiuso, 2 Aperto
5	Campione 2a	n+4		2
6	Campione 2b	n+4		2
7	Standard 1, analisi 3	n+3	n+4	2 Chiuso

^{*} Revisione n+2 alla chiusura del bracket 1, revisione n+3 all'inizio del bracket 2.

Il numero di revisione della tavola di calibrazione viene cambiato a ogni modifica. Per la calibrazione in bracketing, vengono generate versioni intermedie dei dati di calibrazione, non direttamente utilizzate per la calibrazione dei campioni, ad esempio la revisione 3 nella [Tabella 5](#).

Tabella 6 Calibrazione in bracketing globale

Ordine sequenza	Nome campione	Revisione della tavola di calibrazione	
		Utilizzato	Generato
1	Standard 1, analisi 1	n	n+1
2	Campione 1a	n+3	
3	Campione 1b	n+3	
4	Standard 1, analisi 2	n+1	n+2
5	Campione 2a	n+3	
6	Campione 2b	n+3	
7	Standard 1, analisi 3	n+2	n+3

Nella revisione in bracketing globale, i campioni non vengono quantificati finché tutti gli standard non sono stati analizzati. Ciò significa che la tavola di calibrazione viene inizializzata all'inizio della sequenza, quindi aggiornata due volte (righe 4 e 7) per produrre i numeri di revisione 2 e 3. I campioni vengono quantificati utilizzando la revisione 3 che consiste nella media di tutti i punti di calibrazione.

Per tenere traccia delle prestazioni cromatografiche coerenti del sistema, gli standard di calibrazione devono essere equamente distribuiti per tutta la sequenza. I problemi relativi alla precisione della calibrazione possono essere rilevati utilizzando statistiche adatte o fattori di risposta.

Revisione e rintracciabilità delle sequenze

Nel sistema NDS Cerity tutti i dati vengono mantenuti ed organizzati come iniezioni singole o come sequenze. Ogni volta che il particolare di una sequenza viene modificato, la modifica viene documentata e considerata come una nuova versione di sequenza. Tuttavia, la versione di sequenza non documenta le modifiche alle singole analisi contenute nella sequenza stessa; tali modifiche sono riportate nei registri elettronici delle singole analisi modificate. Quindi non c'è un legame diretto fra la versione di sequenza e le modifiche apportate all'interno della sequenza stessa.

Le azioni relative alle sequenze sono documentate in un apposito registro elettronico. Ogni sequenza ha un solo registro elettronico nel quale vengono memorizzate e visualizzate tutte le modifiche e le revisioni della sequenza. Il registro elettronico riporta sempre tutti i dati. Ciò significa che le versioni più vecchie della sequenza mostrano tutti i dati, compresi quelli relativi alle versioni più recenti. In questo modo è difficile tenere traccia delle modifiche apportate alla sequenza.

Le versioni anteriori della sequenza sono documentate e visualizzate nella modalità corrente. Le precedenti versioni non riportano le analisi correlate e le relative modifiche; tali informazioni si trovano solo nei registri elettronici dei singoli campioni.

I procedimenti di revisione delle sequenze spesso creano un numero di versioni superiore al previsto.

Le versioni nuove vengono create per due categorie di modifiche:

- Modifiche esterne: modifiche del risultato effettuate dall'utente, come la reintegrazione di un cromatogramma.
- Modifiche interne: modifiche dello stato della sequenza, ad esempio la modifica del risultato della revisione di una sequenza in "ready for reprocessing" (pronta per la rielaborazione).

Entrambe le categorie di modifica creano versioni nuove della sequenza. Le versioni di sequenza basate su modifiche esterne sono in genere facili da rintracciare e comprendere. Tuttavia le revisioni interne della sequenza sono generalmente invisibili all'utente e producono versioni difficili da rintracciare e da capire.

Questa sezione descrive come rintracciare e capire tutte le versioni di una sequenza, utilizzando i dati dell'esempio. Vengono fornite istruzioni passo dopo passo che consentono di utilizzare gli strumenti del sistema NDS Cerity per localizzare e definire una cronologia completa della sequenza.

Istruzioni passo dopo passo per la rintracciabilità delle versioni di una sequenza

Punto 1 Identificazione di modifiche interne senza impatto sulla sequenza

La visualizzazione delle sequenze nel sistema NDS Cerity è organizzata come segue. Il nome della sequenza si trova al punto più alto della gerarchia nello storico della sequenza. Selezionandolo ed aprendo la sequenza vengono visualizzati tutti gli elementi secondari della stessa. Questi elementi secondari sono test/risultati eseguiti sulla versione corrente oltre che su versioni precedenti della sequenza. Per aprire tutte le sotto-cartelle di una sequenza in una sola volta, selezionare ed evidenziare la sequenza che interessa e premere il tasto asterisco (*) sulla tastiera. Compariranno tutti i risultati che si riferiscono alla versione attuale della sequenza (nel presente esempio rev 15 della sequenza Demosequence1ac-TestCase) sotto la versione di sequenza corrente, la rev.15 (vedere la [Figura 28](#) a pagina 78). Ciò comprende in particolare tutti i risultati relativi al campione con il numero di revisione corrente. Di conseguenza i risultati correnti possono essere rintracciati e spiegati con facilità. La [Figura 27](#) a pagina 77 riporta una panoramica della sequenza, con tutte le sotto-cartelle, nella versione più recente.

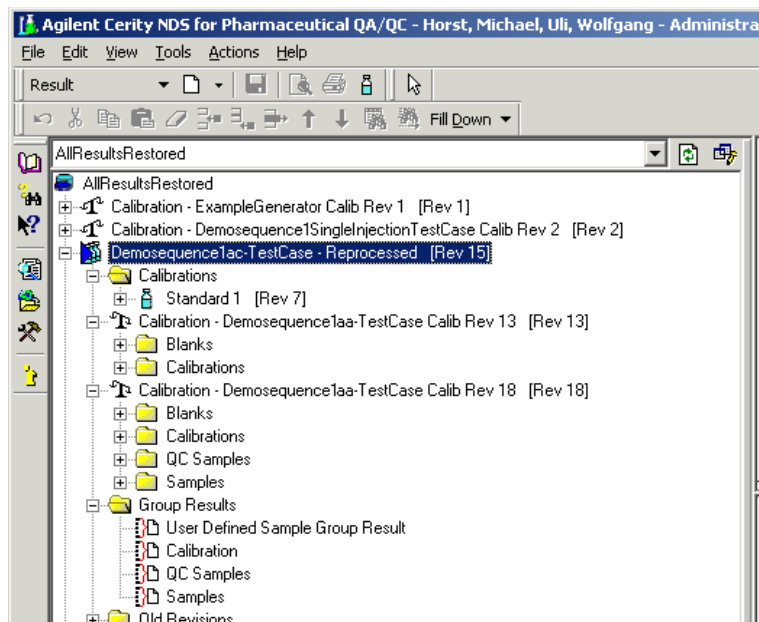


Figura 27 Revisione della sequenza iniziale con tutte le cartelle visualizzate

La [Figura 28](#) a pagina 78 visualizza le versioni precedenti della sequenza. Queste ultime sono memorizzate nella sotto-cartella “Old revisions” (Versioni precedenti). La sequenza di esempio contiene 14 versioni vecchie. Ora dobbiamo identificare le ragioni e le azioni che hanno portato a tali revisioni.

3 **Analisi dei campioni**
Revisione e rintracciabilità delle sequenze

The screenshot displays the Agilent Cerity NDS interface. On the left, a tree view under 'AllResultsRestored' shows a hierarchy of sequence revisions. A red box highlights the 'Old Revisions' section, listing 14 revisions of 'Demosequence1ac-TestCase - Reprocessed' from Rev 1 to Rev 14. Below this, other sequences like 'DataPakSeq11' through 'DataPakSeq5' are listed. On the right, the 'Sequence Table' tab is active, showing a table with columns: Sample Name, Sample Type, Cal. Level, Custom Sample Group, Vial #, and Injection #. The table contains 10 rows of data, including 'Blank-1', 'Standard 1', 'Standard 2', 'Blank-2', and 'Sample-V1' through 'Sample-V5'. Below the table, the 'Sample Entry' section is visible, with a 'Sequence Logbook' button highlighted by a red box. The 'Sample Name' field contains 'Blank-1' and the 'Sample Type' is set to 'Blank Run'.

	Sample Name	Sample Type	Cal. Level	Custom Sample Group	Vial #	Injection #
1	Blank-1	Blank Run			1	1
2	Standard 1	Calibration	1		2	5
3	Standard 2	QC Sample			3	1
4	Blank-2	Blank Run			4	1
5	Sample-V1	Sample			5	1
6	Sample-V2	Sample			6	1
7	Sample-V3	Sample			7	1
8	Sample-V4	Sample			8	1
9	Sample-V5	Sample			9	1
10	Sample-V6	Sample			10	1

Figura 28 Precedenti versioni della sequenza

Per identificare i motivi della revisione è necessario avere una combinazione di inserimenti nel registro elettronico della sequenza, registri elettronici del campione e numeri di versione. Il primo passo per rintracciare tali revisioni consiste nell'identificazione delle revisioni “interne”. Esse sono state create dal sistema NDS Cerity basandosi su modifiche organizzative (ad esempio la preparazione per l'esecuzione) che non modificano nessun dato all'interno della sequenza. Il

software Cerity, come parte della sua funzionalità generale, esegue queste modifiche di sequenza. Il software Cerity, come parte della sua funzionalità generale, esegue queste modifiche di sequenza.

Un esempio di creazione di una revisione “interna” è la programmazione e l'esecuzione di una sequenza per l'acquisizione di dati. Dopo il completamento dell'inserimento di dati per la sequenza e l'immissione della sequenza nel sistema di acquisizione, il sistema NDS Cerity applica una modifica interna di stato alla sequenza (da “data entry” (inserimento dati) a “ready for acquisition” (pronta per l'acquisizione). Il successivo cambiamento di stato sarà da “ready for acquisition” a “acquisition started” (acquisizione iniziata) su uno strumento selezionato. Per l'utente si tratta di un'unica azione, “sequence is started” (sequenza iniziata). Tuttavia il sistema NDS Cerity le considera come due azioni e documenta due revisioni di sequenza. Tale creazione di revisioni interne è vera per qualsiasi esecuzione di sequenza, indipendentemente dal fatto che si tratti di acquisizione di dati o rielaborazione (vedere anche “[Modifiche di versione nel contesto dei risultati](#)”* a pagina 71). Il modo più rapido per identificare una revisione interna della sequenza è la lettura del timbro orario che si trova nella parte superiore del registro elettronico della sequenza, come illustrato dalla [Figura 29](#) a pagina 80. L'esame del timbro orario relativo alla creazione della versione di sequenza è la prima attività di revisione della sequenza corrente. Le informazioni visualizzate comprendono lo stato corrente della sequenza, l'operatore che ha immesso la sequenza ed il timbro orario relativo alla modifica del database (vedere la [Figura 29](#) a pagina 80). Il timbro della versione iniziale contiene anch'esso l'utente ed il nome utente per una maggiore rintracciabilità.

Timbro orario iniziale relativo alla revisione della sequenza

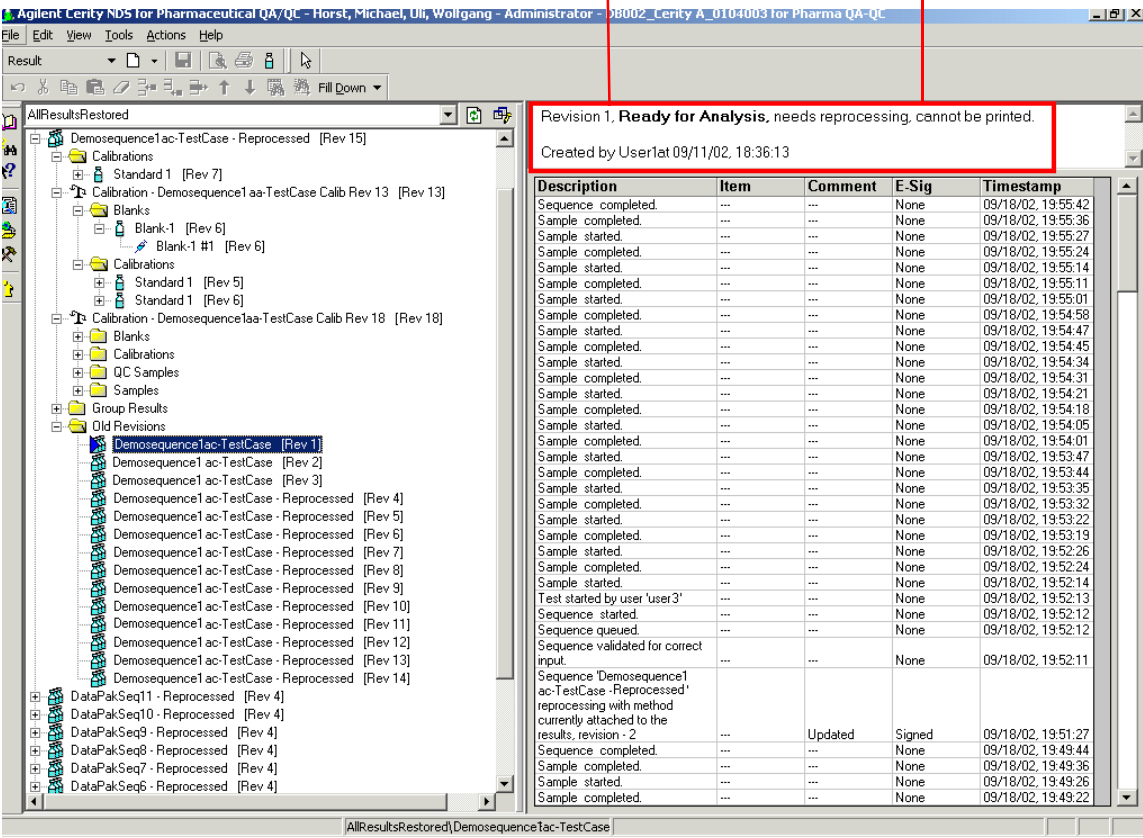


Figura 29 Timbro orario iniziale relativo alla revisione della sequenza

Tutte le revisioni interne della sequenza sono identificate da una combinazione di stato, che è sempre "needs reprocessing, cannot be printed" (deve essere rielaborata, impossibile stampare), e dal timbro orario. Il timbro orario di una revisione interna della sequenza è sempre identico al timbro della versione successiva della sequenza. La versione di sequenza successiva riporta sempre lo stato "reprocessing complete, use print report to see details" (rielaborazione completa, utilizza il rapporto stampato per visualizzare i particolari). La combinazione di questi elementi con timbri orari identici

identifica la prima versione di sequenza come revisione interna in combinazione con la revisione successiva, vedere la [Figura 30](#) a pagina 81.

La [Figura 30](#) documenta che la revisione 1 della sequenza è una revisione interna mentre la revisione 2 è la prima versione di risultato della sequenza che è possibile stampare.

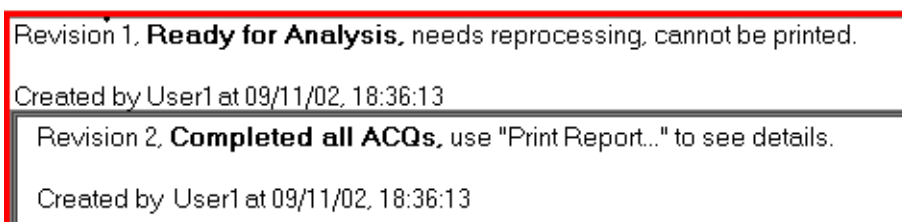


Figura 30 Sovrapposizione di due timbri orari di revisione della sequenza identici

In definitiva è possibile identificare facilmente tutte le versioni di sequenza create tramite esecuzione o rielaborazione della stessa. Selezionando le versioni della sequenza e paragonando la revisione ed il timbro orario unitamente alle osservazioni inserite, è possibile identificare ulteriori revisioni interne della sequenza. Le sequenze con lo stesso timbro orario e gli stessi dati identificativi dell'utente vanno insieme e sono il risultato di una rielaborazione della sequenza. Un semplice clic sulle versioni vecchie ne visualizza i dati e consente di rintracciare e documentare tutte le versioni della sequenza create attraverso procedimenti di esecuzione/rielaborazione.

NOTA

Le revisioni di sequenze create attraverso l'acquisizione dei dati e la rielaborazione, non hanno modifiche, tranne che un risultato nuovo per tutti i calcoli correlati alla sequenza, ad esempio i risultati di quantificazioni. Tali risultati possono essere facilmente stampati allo scopo di documentare completamente le modifiche. Le modifiche alle singole analisi o a parametri di analisi dei dati sono documentati nei relativi registri elettronici del campione; vengono inoltre create ulteriori revisioni di sequenze separate. Vedere anche il Punto 2.

Punto 2 Rintracciare tutte le modifiche alla sequenza create tramite modifiche delle singole esecuzioni, come reintegrazione manuale di standard o modifiche del metodo.

Basandosi sull'identificazione delle revisioni della sequenza di rielaborazione, le versioni 3 e 8-9 sono state create in seguito a modifiche dell'integrazione o della calibrazione dei campioni contenuti nella sequenza. L'identificazione delle modifiche dei risultati richiede in genere sia la revisione dei risultati dei singoli campioni sia il timbro orario della creazione della nuova versione di sequenza. È possibile identificare i campioni con un successivo passaggio di rianalisi perché tutte le revisioni dei risultati del campione subiscono un incremento di 1 unità non appena la modifica o la rielaborazione vengono effettuate. Nei dati di esempio della [Figura 31](#) a pagina 83, il numero di revisione standard per tutti i risultati di iniezione è sei (la versione 1 al momento dell'acquisizione dei dati più cinque eventi di rielaborazione). È importante capire che tutte le revisioni dei risultati devono avere lo stesso numero di versione finché le versioni della sequenza derivano dalla rielaborazione e non sono state applicate modifiche.

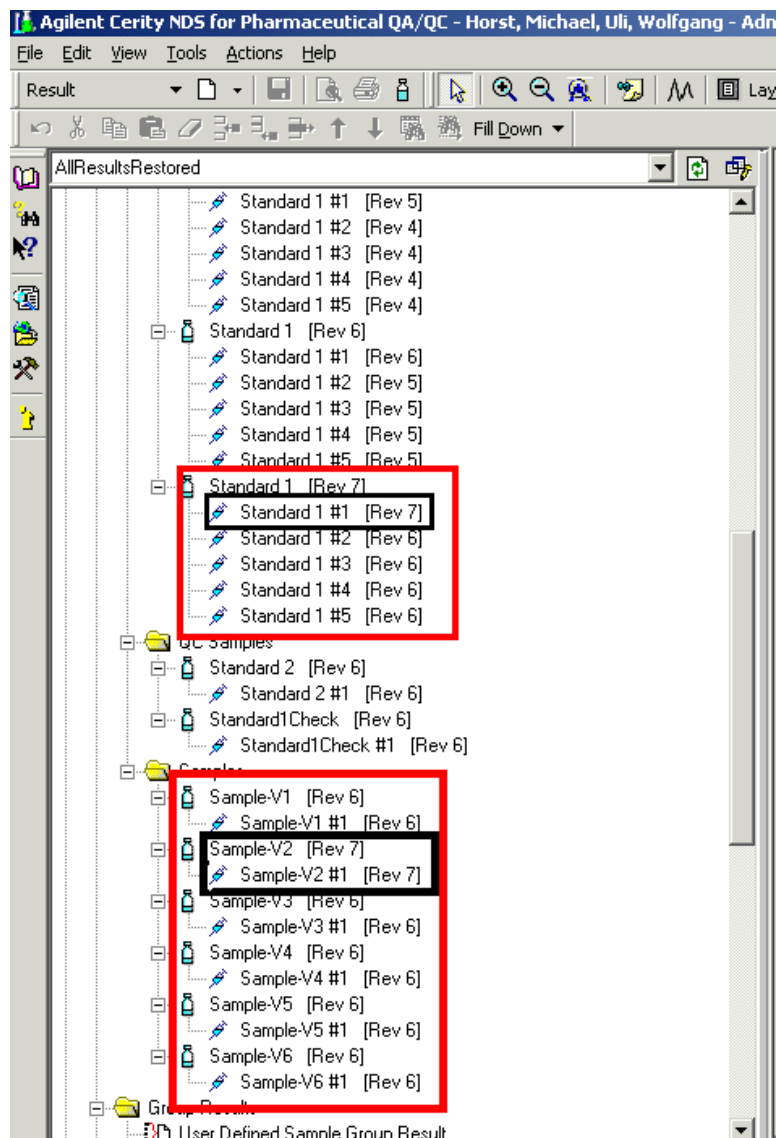


Figura 31 Identificazione di risultati del campione con singole modifiche per il campione V2 e lo Standard 1

3 **Analisi dei campioni**
Revisione e rintracciabilità delle sequenze

Non appena il singolo risultato viene modificato, il numero di versione del campione modificato risulta superiore a quello delle altre versioni. In questo esempio due revisioni di campione **V2** e **standard_1**, non rispettano la caratteristica “all identical” (tutti identici) dei risultati, come illustrato nella **Figura 31** a pagina 83. Entrambi hanno il numero di revisione 7, che mostra che questi campioni comprendono una singola fase di revisione. I registri elettronici di questi campioni ora visualizzano le modifiche correnti per i singoli campioni. La **Figura 32** mostra un sottoinsieme del registro elettronico del campione V2.

The screenshot shows the Agilent Cerity NDS for Pharmaceutical QA/QC interface. The 'Results Table' displays data for Hydrochlorothiazide and Lisinopril. The 'Logbook' section contains a detailed audit trail of sample processing steps, including manual integration events and baseline adjustments, which are highlighted by a red rectangle.

Compound Name	Injection#	RT	Peak Area	MeanArea
Hydrochlorothiazide	1	8.69	1711.85	1711.84603
Lisinopril				2328.21367

Description	Item	Comment	E-Sig	Timestamp	Source	Type	Host
DAS8: Failed to calculate the results for all peaks.	SIMethod	---	None	09/12/02, 11:37:57	DAS	Error	CERITYAQ-03
Sample started.	---	---	None	09/12/02, 11:37:54	Automation	Information	CERITYAQ-03
Added a manual integration event Split Peak at 3.83947802494605 on signal VwD1 A, injection #1	SIMethod	Updated	Signed	09/12/02, 16:37:39	lab1\User2	Audit	CHEM22
Added a manual integration event Split Peak at 4.10276142739179 on signal VwD1 A, injection #1	SIMethod	Updated	Signed	09/12/02, 16:37:39	lab1\User2	Audit	CHEM22
Added a manual integration event Draw Peak Baseline from 3.00904262908954 to 3.07694477141992 on signal VwD1 A, injection #1	SIMethod	Updated	Signed	09/12/02, 16:37:39	lab1\User2	Audit	CHEM22
Added a manual integration event Draw Peak Baseline from 13.3754363581931 to 16.9742499017028 on signal VwD1 A, injection #1	SIMethod	Updated	Signed	09/12/02, 16:37:39	lab1\User2	Audit	CHEM22
Added a manual integration event Draw Peak Baseline from 8.3054097308986 to 9.7932568621268 on signal VwD1 A, injection #1	SIMethod	Updated	Signed	09/12/02, 16:37:39	lab1\User2	Audit	CHEM22
Sample started.	---	---	None	09/12/02, 11:37:52	Automation	Information	CERITYAQ-03
Sample completed.	---	---	None	09/12/02, 11:08:15	Automation	Information	CERITYAQ-03
Sample completed.	---	---	None	09/12/02, 11:08:12	Automation	Information	CERITYAQ-03
DAU40: Not all results have been calculated correctly	SIMethod	---	None	09/12/02, 11:08:11	DAU	Error	CERITYAQ-03
Sample started.	---	---	None	09/12/02, 11:08:06	Automation	Information	CERITYAQ-03
Sample completed.	---	---	None	09/12/02, 14:30:09	Automation	Information	CERITYDB-01

Figura 32 Sottoinsieme del registro elettronico del campione per il campione V2

Gli eventi sono elencati con lo stesso timbro orario perché il registro elettronico riporta il tempo del “salvataggio effettivo nel database” piuttosto che i singoli inserimenti da tastiera.

Gli eventi sono elencati con lo stesso timbro orario perché il registro elettronico riporta il tempo del “salvataggio effettivo nel database” piuttosto che i singoli inserimenti da tastiera.

Il registro elettronico del campione chiamato “standard 1” visualizza le modifiche manuali del risultato per questo campione, come illustrato nella [Figura 33](#).

[illegible]

Figura 33 Sottoinsieme del registro elettronico del campione di Standard 1

Il registro elettronico riportato nella [Figura 33](#) a pagina 85 mostra solo un sottoinsieme delle modifiche al campione denominato Standard 1. Il registro elettronico visualizza un paio di modifiche legate principalmente alla modifica dei singoli eventi di integrazione e parametri di integrazione.

In definitiva il controllo dei numeri di revisione dell'esecuzione risultante (calibrazioni, campioni e campioni QC) nell'ultima versione di sequenza, documenta tutti i campioni che sono stati rianalizzati singolarmente (dove per “singolarmente” si intende “non come parte di una rielaborazione completa della sequenza”). Se il numero degli eventi di rielaborazione della sequenza è identificato, il numero predefinito della versione risultante sarà anch'esso noto (come il numero di eventi di rielaborazione più 1 per l'acquisizione iniziale). Ogni campione con numero di versione superiore al numero predefinito deve avere eventi di rianalisi individuali. Nella sequenza di esempio ci sono due campioni Standard 1 e V2. I registri elettronici visualizzano le modifiche correnti e consentono una rintracciabilità completa delle modifiche apportate dalla nuova analisi.

Punto 3 Mappatura delle modifiche del campione e delle revisioni della sequenza

La mappatura delle modifiche del risultato e delle revisioni della sequenza utilizza i timbri orari relativi alla creazione della sequenza ed alla sua modifica. Lo standard 1 è stato rianalizzato il 09/12/02 alle 14:08:35 (orario del salvataggio delle modifiche). La successiva azione di salvataggio della sequenza è documentata alle 14:53:15. Ciò significa che le modifiche del parametro di integrazione per lo standard 1 sono le modifiche dalla versione di sequenza 2 alla versione 3. La documentazione della modifica per la versione 3 consiste nelle seguenti azioni: parametro di integrazione modificato per lo standard 1 ed applicazione di un'autointegrazione per questo standard. L'applicazione di questi parametri ha creato una sequenza versione 4 (interna) ed una versione 5 (rielaborazione completata).

La reintegrazione manuale di V2 è stata salvata alle 16:37:39.

NOTA

La mappatura degli eventi effettivi per questo evento specifico è piuttosto difficile perché i computer di questo cluster non hanno timbri orari sincronizzati. Ciò è facilmente osservabile dal registro elettronico visualizzando le colonne "host" e controllando l'ora locale per i tre diversi computer CHEM 22, PCERITYAQ e CERITYDB.

Le due fasi di rianalisi spiegano ora due delle tre rimanenti versioni della sequenza. Le informazioni relative all'ultima versione devono quindi essere documentate nel registro elettronico della sequenza.

NOTA

Il salvataggio delle modifiche ai singoli campioni ed il salvataggio delle sequenze sono azioni indipendenti. Questo spiega il divario esistente fra l'orario delle modifiche apportate al risultato e la revisione della sequenza successiva.

Punto 4 Revisione del registro elettronico della sequenza per le modifiche della calibrazione

Il registro elettronico della sequenza memorizza tutti gli eventi relativi alla sequenza stessa. Tali eventi sono principalmente l'esecuzione, la creazione, la modifica e la rielaborazione della sequenza, ma possono comprendere cambiamenti di campioni da analizzare. Nell'esempio riportato, il registro elettronico della sequenza mostra modifiche della quantità di campione per le linee 2,3 e 11 del campione. Queste modifiche sono state salvate il 09/12/02 alle 16:29:48 come illustrato nella [Figura 34](#) a pagina 88.

3 Analisi dei campioni

Revisione e rintracciabilità delle sequenze

Revision 10, **Ready for Reprocessing**, needs reprocessing, cannot be printed.

Created by User2 at 09/12/02, 17:37:52

Description	Item	Comment	E-Sig	Timestamp	Source	Type	Host
Sample started.	---	---	None	09/12/02, 11:37:38	Automation	Information	CERITYAQ
Sample completed.	---	---	None	09/12/02, 11:37:36	Automation	Information	CERITYAQ
Sample started.	---	---	None	09/12/02, 11:37:26	Automation	Information	CERITYAQ
Sample completed.	---	---	None	09/12/02, 11:37:24	Automation	Information	CERITYAQ
Sample started.	---	---	None	09/12/02, 11:37:13	Automation	Information	CERITYAQ
Sample completed.	---	---	None	09/12/02, 11:37:10	Automation	Information	CERITYAQ
Sample started.	---	---	None	09/12/02, 11:36:24	Automation	Information	CERITYAQ
Sample completed.	---	---	None	09/12/02, 11:36:21	Automation	Information	CERITYAQ
Sample started.	---	---	None	09/12/02, 11:36:11	Automation	Information	CERITYAQ
Test started by user 'User2'	---	---	None	09/12/02, 11:36:10	UserStamp	Information	CERITYAQ
Sequence started.	---	---	None	09/12/02, 11:36:09	Automation	Information	CERITYAQ
Sequence queued.	---	---	None	09/12/02, 11:36:09	Automation	Information	CERITYAQ
Sequence validated for correct input.	---	---	None	09/12/02, 11:36:08	Automation	Information	CERITYAQ
Sequence 'Demosequence1 ac-Test Case - Reprocessed' reprocessing with method currently attached to the results, revision - 2	---	Updated	Signed	09/12/02, 16:38:43	lab1\User2	Audit	CHEM22
Change the 'Sample Amount' from '28.3' to '43.76000'.	Sample line 3	Updated	None	09/12/02, 16:29:48	lab1\User2	Audit	CHEM22
Change the 'Sample Amount' from '1' to '43.77000'.	Sample line 11	Updated	None	09/12/02, 16:29:48	lab1\User2	Audit	CHEM22
Change the 'Sample Amount' from '1' to '28.30000'.	Sample line 3	Updated	None	09/12/02, 16:29:48	lab1\User2	Audit	CHEM22
Change the 'Amount' from '0' to '0.01419'.	Sample line 2	Updated	None	09/12/02, 16:29:48	lab1\User2	Audit	CHEM22
Change the 'Amount' from '0' to '0.02189'.	Sample line 2	Updated	None	09/12/02, 16:29:48	lab1\User2	Audit	CHEM22
Change the 'Use' from '0' to '1'.	Sample line 2	Updated	None	09/12/02, 16:29:48	lab1\User2	Audit	CHEM22
Change the 'Use' from '0' to '1'.	Sample line 2	Updated	None	09/12/02, 16:29:48	lab1\User2	Audit	CHEM22
Sequence completed.	---	---	None	09/12/02, 11:09:50	Automation	Information	CERITYAQ
Sample completed.	---	---	None	09/12/02, 11:09:44	Automation	Information	CERITYAQ
Sample started.	---	---	None	09/12/02, 11:09:32	Automation	Information	CERITYAQ
Sample completed.	---	---	None	09/12/02, 14:31:29	Automation	Information	CERITYAQ
Sample started.	---	---	None	09/12/02, 14:31:20	Automation	Information	CERITYAQ

Figura 34 Sottinsieme del registro elettronico del campione riportante le modifiche di quantità

Con questi cambiamenti di quantità di campione, la documentazione di tutte le modifiche per tutte le versioni di sequenza può considerarsi completa. Rimangono da mappare gli stessi elementi nelle versioni 3, 8 e 9 della sequenza.

NOTA

Se tutti i PC fossero stati sincronizzati, sarebbe stato possibile effettuare una mappatura diretta basata sui timbri orari. In mancanza di sincronizzazione dei timbri orari, ci si affida al registro elettronico, organizzando i dati inseriti in ordine di arrivo. Ciò significa che le voci del registro elettronico non sono ordinate in base al timbro orario ma sono in ordine di arrivo.

La [Tabella 7](#) fornisce una panoramica di tutte le versioni delle sequenze e dello storico delle loro modifiche, oltre ai motivi del cambiamento.

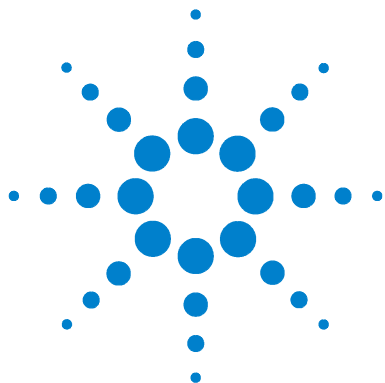
Tabella 7 Documentazione delle revisioni di sequenze, compresi gli elementi di modifica

N. Rev.	Data	Tibro orario (non sincronizzato)	Stato	Azione identificata	Motivo della revisione	Spiegazione
1	11-Sep	18:36:15	Pronto per l'analisi	Acq. completata	Interna	Revisione interna in seguito a analisi della sequenza
2		18:36:15	Acq. completata. Pronto per la stampa	Acq. completata, analisi dei dati effettuata	Primi risultati	Acquisizione dei dati completata
3	12-Sep	14:53:15	Pronto per l'analisi; rielaborazione necessaria	Campione modificato singolarmente	Modificato un risultato nella sequenza	Modifica del campione denominato Standard 1
4	12-Sep	15:25:36	Incompleto; rielaborazione necessaria	Sottoposizione a rielaborazione	Interna	Relativo alla rev.5 con rielaborazione
5	12-Sep	15:25:36	Pronto per la stampa	Rielaborazione eseguita	Rielaborazione	Prima rielaborazione eseguita
6	12-Sep	17:07:54	Incompleto; rielaborazione necessaria	Sottoposizione a rielaborazione	Interna	Interna a causa della rielaborazione
7	12-Sep	17:07:54	Pronto per la stampa	Rielaborazione completa	Risultato della sequenza aggiornato	Seconda rielaborazione eseguita

3 **Analisi dei campioni** Revisione e rintracciabilità delle sequenze

Tabella 7 Documentazione delle revisioni di sequenze, compresi gli elementi di modifica (continua)

N. Rev.	Data	Tibro orario (non sincronizzato)	Stato	Azione identificata	Motivo della revisione	Spiegazione
8	12-Sep	17:28:07	Incompleto; rielaborazione necessaria	Modifica dei dati di quantificazione	Modifiche dei risultati del campione	Quantità del campione modificate
9	12-Sep	17:33:01	Incompleto; rielaborazione necessaria	Reintegrazione del campione V2	Modifiche dei risultati del campione	Integrazione manuale applicata al campione V2
10	12-Sep	17:37:52	Incompleto; rielaborazione necessaria	Sottoposizione a rielaborazione	Interna	Interna a causa della rielaborazione
11	12-Sep	17:37:52	Pronto per la stampa	Rielaborazione completata	Rielaborazione	Eseguita terza rielaborazione
12	12-Sep	20:44:16	Incompleto; rielaborazione necessaria	Sottoposizione a rielaborazione	Interna	Eseguita quarta rielaborazione
13	12-Sep	20:44:16	Pronto per la stampa	Rielaborazione completata	Rielaborazione	
14	18-Sep		Incompleto; rielaborazione necessaria	Sottoposizione a rielaborazione	Interna	Eseguita prima rielaborazione
15	18-Sep		Revisione corrente, pronto per la stampa	Nessuna, revisione in corso	Nessuna	Nessuna



4 Impostazione dei metodi

Concetti del metodo Cerity per QA/QC in campo farmaceutico [93](#)

Sezioni del metodo Cerity per QA/QC in campo farmaceutico [98](#)

Calibrazione [104](#)

Calcoli personalizzati [110](#)

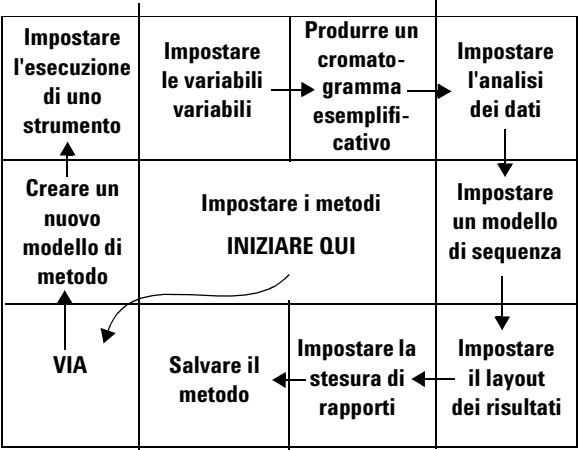
Layout di revisione dei dati [127](#)

Reporting [130](#)

In questo capitolo vengono fornite informazioni sui concetti per facilitare l'impostazione dei metodi. Il capitolo consente di completare gli esercizi presenti nella sezione Impostazione dei metodi della *Guida introduttiva*.



La mappa riportata di seguito illustra agli utenti avanzati o agli amministratori il percorso di impostazione di un metodo. Iniziare da **VIA**.



Ogni argomento di questo capitolo fornisce informazioni di base che consentono di seguire la mappa.

Concetti del metodo Cerity per QA/QC in campo farmaceutico

Per creare un metodo master, selezionare **Method** (Metodo) dall'elenco **New** (Nuovo) sulla barra degli strumenti standard.

Metodi master

Un *metodo master* è un metodo che può essere modificato solo dagli utenti assegnati, ma può essere utilizzato da tutti gli utenti.

Quando si desidera consentire ad altri utenti di modificare il *metodo master*, è possibile distribuire la versione corrente. Se l'amministratore abilita l'audit per l'attività di distribuzione di un metodo, può essere necessario immettere nome utente e password per eseguire tale attività.

Dopo aver distribuito il metodo master, chiunque disponga delle capacità di ruolo per modificare i metodi master può modificare questa versione. Se si modifica il metodo master, è necessario distribuire la nuova versione.

Metodi dello strumento

Un *metodo dello strumento* è un metodo master distribuito assegnato ad uno strumento nuovo. Tutti gli utenti possono modificare o utilizzare un metodo dello strumento.

Dopo aver distribuito un metodo master, è possibile assegnarlo a un altro strumento in **Method Wizard** (Impostazione guidata del metodo). Per assegnare il metodo, è necessario creare un *metodo dello strumento* con il metodo distribuito come modello. Successivamente gli utenti che dispongono della capacità adeguate, impostate dall'amministratore NDS Cerity, possono modificare qualsiasi impostazione originale nella finestra Method (Metodo).

Se lo strumento a cui si assegna il metodo è configurato in modo diverso rispetto al metodo originale, accertarsi di modificare i parametri dello strumento nella finestra Method.

È possibile iniziare a creare un metodo per lo strumento quando si seleziona **Instrument Method** (Metodo dello strumento) dall'elenco **New** (Nuovo) sulla barra degli strumenti standard.

Per ulteriori informazioni sul Method Wizard (Impostazione guidata del metodo) e sulla finestra Method, vedere “Finestra Method (Metodo)” a pagina 25 e “Impostazione del metodo” a pagina 43.

Metodi per campioni singoli o sequenze

Cerity per QA/QC in campo farmaceutico consente di creare metodi per campioni singoli e metodi per sequenze, pertanto viene utilizzato un solo metodo per tutti i campioni in una sequenza.

Esistono alcune differenze tra un metodo per campioni singoli e un metodo per sequenze:

- il metodo per sequenze contiene una tabella in cui è possibile impostare una sequenza di uso frequente
- il metodo per sequenze organizza i campioni e gli standard in gruppi per calcoli e rapporti personalizzati, come il gruppo di campioni QC, il gruppo standard di calibrazione, il gruppo di campioni e i gruppi di campioni personalizzati
- è possibile includere i calcoli di rumore per le sequenze, ma non per i singoli campioni
- per le sequenze è possibile selezionare l'ordine e la procedura di calibrazione

Metodi collegati a campioni e risultati

Quando si inserisce un campione singolo o si crea una nuova sequenza, selezionare il metodo da utilizzare con il campione o con la sequenza. Le informazioni e le istruzioni contenute in tale metodo restano collegate al campione o alla sequenza per tutta l'analisi e nei risultati.

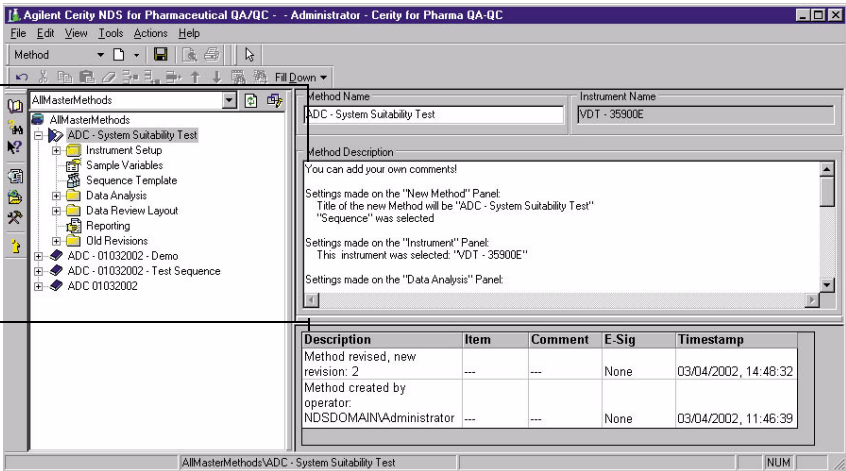
Pertanto, se si modifica il valore di una voce di campione o un'impostazione di integrazione e si esegue la rielaborazione, vengono ripetuti i calcoli con la versione del metodo originariamente collegata al risultato. Se si modifica il metodo o si desidera utilizzare un altro metodo per rielaborare i risultati, è necessario innanzitutto collegare al risultato la versione corrente o il nuovo metodo.

Voci e modifiche del metodo

La figura seguente illustra le voci e le modifiche del metodo.

Method Description
(Descrizione del metodo): le selezioni effettuate nel **Method Wizard** (Impostazione guidata del metodo) vengono visualizzate nell'area di lavoro **Method Description**.

Method Logbook (Registro elettronico del metodo): le voci e le modifiche apportate al metodo vengono visualizzate nel registro elettronico del metodo.



Versioni del metodo

Quando si crea e si salva un modello di metodo con il Method Wizard (Impostazione guidata del metodo), si crea la versione 1 del metodo. Ogni volta che si modifica e si salva il metodo successivo alla versione 1, si crea una nuova versione, così come quando si distribuisce un metodo master.

Se si seleziona una versione dalla cartella Old Revisions (Versioni precedenti) in una cartella di metodo selezionata, nell'area di lavoro vengono visualizzati **Method Description** (Descrizione del metodo) e **Method Logbook** (Registro elettronico del metodo).

Utilizzo dei metodi Cerity per QA/QC in campo farmaceutico

I metodi Cerity per QA/QC in campo farmaceutico consentono di effettuare le seguenti operazioni:

- assegnare un metodo a uno strumento per il controllo dello strumento
- utilizzare i propri moltiplicatori e divisori per calcolare una concentrazione per ogni campione
- utilizzare le variabili personalizzate del campione per calcoli e rapporti personalizzati
- utilizzare una tabella della sequenza come modello per tutte le sequenze simili o ripetute
- utilizzare un cromatogramma esemplificativo che consenta di integrare e identificare i picchi
- sommare intere aree del cromatogramma
- inserire quantità di composto variabili per ogni campione per calibrazioni a livello singolo o multi-livello
- quantificare i campioni in sequenze utilizzando lo standard prima dei campioni, gli standard prima e dopo i campioni oppure tutti gli standard nella sequenza

- analizzare i campioni con un metodo che contiene già i fattori di risposta esistenti o analizzare sequenze la cui quantificazione dei campioni è aggiornata con gli standard di calibrazione nella sequenza
- quantificare i composti non calibrati e i picchi non identificati utilizzando i fattori di risposta dei composti calibrati.
- utilizzare variabili e formule personalizzate per calcolare le statistiche del gruppo di risultati e altri calcoli richiesti in laboratorio.
- visualizzare le annotazioni e gli avvisi relativi a processi riusciti e non riusciti quando le variabili e i calcoli non sono compresi nei limiti predefiniti.
- visualizzare qualsiasi campo, variabile o calcolo disponibile nel layout dei risultati e nei rapporti.
- utilizzare le variabili di system suitability esistenti per verificare le prestazioni
- utilizzare i tipi di rapporto predefiniti associati ai modelli modificati o creati per generare i rapporti necessari

Sezioni del metodo Cerity per QA/QC in campo farmaceutico

Il metodo Cerity per QA/QC in campo farmaceutico contiene tutti i parametri richiesti per il controllo degli strumenti e l'acquisizione, l'analisi e la valutazione dei dati. Inoltre, il metodo contiene le variabili del campione e i modelli definiti dall'utente per sequenze (modello di sequenza), revisione dei risultati (layout revisione dati) e rapporti (modello di rapporto).

Utilizzare **Method Wizard** (Impostazione guidata del metodo) per selezionare le sezioni e le opzioni da visualizzare nel modello del metodo nella finestra Method (Metodo). Tutte le sezioni che possono essere visualizzate nella finestra Method sono descritte nei paragrafi seguenti.

Instrument Setup (Impostazione degli strumenti)

Questa sezione consente di inserire i parametri per gli strumenti configurati.

Un *metodo di equilibratura* è impostato con i parametri dello strumento solo al fine di equilibrare la colonna e stabilizzare la linea di base.

È possibile impostare un metodo di equilibratura per equilibrare lo strumento e la colonna prima di una analisi o alla fine di una sequenza per preparare la colonna alla sequenza successiva. Accertarsi di impostare su zero il volume di iniezione per il campionatore automatico.

Sample Variables (Variabili del campione)

Le variabili del campione sono fattori e definizioni di variabili utilizzati per quantificazione, calcoli personalizzati e rapporti.

Variabili del campione di sistema

L'applicazione Cerity per QA/QC in campo farmaceutico fornisce variabili moltiplicatore e divisore per la quantificazione. Assegnare un'intestazione per attivare le variabili.

Quando si assegna un metodo che utilizza queste variabili per un campione o una sequenza, le variabili con i valori predefiniti vengono visualizzate nella scheda **Amounts** (Quantità) del pannello **Sample Entry** (Inserimento di campioni). È possibile modificare il valore di queste variabili per ogni campione prima di un'analisi.

System Defined Sample Variables (Set by the user in Sample Entry and used in quantification)				
	Variable ID	Display Name	Default Value	
1	Multiplier_1	Multiplier	1	
2	Multiplier_2	Dilution	1	
3	Multiplier_3	Purity	1	
4	Multiplier_4		1	
5	Multiplier_5		1	
6	Divider_1	Divisor	1	
7	Divider_2		1	
8	Divider_3		1	
9	Divider_4		1	

Custom Sample Variables (Set by the user in Sample Entry and used in custom calculators and report generators)				
	Variable ID	Display Name	Default Value	Units
1				

Variabili personalizzate del campione

È possibile definire un gruppo personalizzato di variabili come moltiplicatori o divisori da utilizzare per calcoli e rapporti personalizzati. È possibile inserire intestazioni, valori predefiniti e commenti da visualizzare nelle tabelle dei rapporti sul campione.

Sequence Template (Modello di sequenza)

Un **modello di sequenza** consente di inserire l'ordine e il numero di standard di calibrazione e campioni incogniti in una tabella di sequenza.

4 **Impostazione dei metodi**
Sezioni del metodo Cerity per QA/QC in campo farmaceutico

Il modello di sequenza viene visualizzato come tabella di sequenza nella finestra Sample (Campione) dopo la creazione di una sequenza per il metodo che utilizza il campione. È possibile programmare la sequenza per l'analisi senza apportare modifiche alla tabella basata sul modello.

Per inserire gli standard di calibrazione nel modello di sequenza, è necessario innanzitutto completare l'impostazione della calibrazione in Data Analysis (Analisi dei dati).

	Sample Name	Sample Type	Cal. Level	Bracketing	Custom Sample Group	Vial #
1	wrtj_171001_j20_1FA_cl_1.1	Calibration	1	Open	1FA_cl_1	1
2	wrtj_171001_j20_1FA_cl_2.1	Calibration	2	None	1FA_cl_2	1
3	wrtj_171001_j20_1FA_cl_3.1	Calibration	3	None	1FA_cl_3	1
4	wrtj_171001_j20_1FA_sa_1.1	Sample			1FA_sa_1	1
5	wrtj_171001_j20_1FA_sa_2.1	Sample			1FA_sa_2	1
6	wrtj_171001_j20_1FA_sa_3.1	Sample			1FA_sa_3	1
7	wrtj_171001_j20_1FA_cl_1.2	Calibration	1	None	1FA_cl_1	1
8	wrtj_171001_j20_1FA_cl_2.2	Calibration	2	None	1FA_cl_2	1
9	wrtj_171001_j20_1FA_cl_3.2	Calibration	3	None	1FA_cl_3	1
10	wrtj_171001_j20_1FA_sa_1.2	Sample			1FA_sa_1	1
11	wrtj_171001_j20_1FA_sa_2.2	Sample			1FA_sa_2	1

Example Chromatogram (Cromatogramma esemplificativo)

Un *cromatogramma esemplificativo* è un cromatogramma acquisito da una singola iniezione che si sceglie di utilizzare per impostare l'integrazione e l'identificazione.

È possibile creare un *cromatogramma esemplificativo* prima di impostare i parametri di analisi dei dati per il metodo. Il cromatogramma esemplificativo consente di verificare i parametri di integrazione e gli eventi e di identificare i composti. È anche possibile utilizzare questo cromatogramma per confrontare i risultati per altri campioni.

Per produrre un cromatogramma esemplificativo iniziale per il metodo, vedere l'argomento relativo nella Guida in linea.

Selezionare un cromatogramma dal database o analizzare un campione per produrre un cromatogramma esemplificativo. Per questa operazione, è sufficiente la struttura di un metodo costituita esclusivamente dai parametri dello strumento. Non è necessario selezionare un cromatogramma esemplificativo per impostare l'analisi dei dati.

Integration (Integrazione)

Eventi iniziali e sincronizzati

È possibile impostare gli eventi di integrazione iniziali e sincronizzati per un segnale singolo o per tutti i segnali provenienti da un rivelatore.

Strumenti per l'integrazione di un cromatogramma

Se si desidera modificare l'integrazione predefinita del cromatogramma esemplificativo, in questa sezione del metodo è possibile modificare le impostazioni di integrazione:



- **integrate (integrazione):** questo pulsante consente di integrare il cromatogramma esemplificativo dopo la modifica degli eventi
- **autointegrate (integrazione automatica):** questa funzione calcola le impostazioni predefinite dal cromatogramma

Compound Identification (Identificazione del composto)

Opzioni disponibili per l'aggiunta o l'eliminazione dell'identificazione



È possibile utilizzare la barra degli strumenti o i menu di scelta rapida nel cromatogramma e nella tabella dei composti per aggiungere o eliminare l'identificazione. Se si desidera identificare tutti i picchi come composti, il modo più semplice consiste nell'utilizzo del pulsante Add Times of Signal (Aggiungi intervalli di segnale).

Per ulteriori dettagli sugli algoritmi di integrazione e sul processo di identificazione dei composti Cerity per QA/QC in campo farmaceutico, vedere la Technical Reference Guide (Guida di riferimento tecnico).

Peak Summing (Sommatoria picchi)

Per impostare la Peak Summing (Sommatoria picchi) selezionare l'opzione **Peak Summing** (Sommatoria picchi) in **Method Wizard** (Impostazione guidata del metodo). È possibile delimitare in modo interattivo un'area nel cromatogramma per la Peak Summing (Sommatoria picchi).

Calibration (Calibrazione)

Nell'applicazione Cerity per QA/QC in campo farmaceutico sono disponibili molte opzioni per l'impostazione della calibrazione, due delle quali consentono di distinguere la calibrazione Cerity per QA/QC in campo farmaceutico da altri programmi:

- è possibile immettere quantità di standard di calibrazione per ogni campione
- è possibile impostare la calibrazione in modo da salvare i fattori di risposta nel metodo e utilizzare solo occasionalmente gli standard di calibrazione per confermare la calibrazione. È anche possibile impostare la calibrazione in modo che sia spesso necessario eseguire la ricalibrazione con gli standard di calibrazione inseriti per tutta la sequenza

Per ulteriori informazioni, vedere
"Calibrazione" a pagina 104.

Quantitation (Quantificazione)

Un *gruppo di composti* è un gruppo di composti calibrati o non calibrati per il quale è possibile impostare calcoli e limiti personalizzati.

I composti identificati eliminati dalla tavola di calibrazione vengono visualizzati nell'area di lavoro Quantitation come composti non calibrati. Per i composti non calibrati e i picchi non identificati, è possibile specificare un fattore di risposta basato su quello di un composto calibrato. È anche possibile impostare *gruppi di composti* per composti calibrati e non calibrati.

Custom Calculations (Calcoli personalizzati)

Per ulteriori dettagli, vedere
"Calcoli personalizzati" a
pagina 110.

L'applicazione Cerity per QA/QC in campo farmaceutico consente di includere calcoli aggiuntivi e istruzioni condizionali operanti sui dati forniti dalla quantificazione. Questi calcoli personalizzati possono essere utilizzati in altri calcoli, visualizzati nella finestra dei risultati e stampati nei rapporti. Vengono memorizzati nel database insieme ai risultati generati automaticamente dal software.

Limits (Limiti)

È possibile impostare limiti per i seguenti tipi di risultati:

- iniezioni singole
- riepiloghi di più iniezioni
- gruppi per tipo di campione, solo per le sequenze

Le variabili e i calcoli disponibili sono quelli che erano disponibili o che sono stati impostati per diversi tipi di risultato diversi nell'area di lavoro Custom Calculations. Entro ogni tipo di risultato è possibile impostare limiti per i diversi gruppi di campioni e applicare questi limiti a tutti i composti o i gruppi di composti impostati nella quantificazione.

Tutti i risultati dei controlli di limite per la stessa voce univoca sono combinati in un solo risultato.

NOTA

È possibile impostare, ad esempio, i limiti per gli ftalati visualizzati nei risultati dell'iniezione singola per lo standard di calibrazione. In questo caso, si imposta un gruppo di composti denominato ftalati cui si assegnano gli ftalati calibrati e non calibrati.

Data Review Layout (Layout di revisione dei dati)

Per ulteriori informazioni, vedere "Layout di revisione dei dati" a pagina 127.

La tabella dei risultati e le voci riassuntive visualizzate nella finestra Result (Risultato) dipendono dalle selezioni effettuate in Data Review Layout.

Reporting

Per ulteriori dettagli, vedere "Reporting" a pagina 130.

Impostare la stesura di rapporti nel metodo. Successivamente è possibile modificare alcune delle impostazioni del metodo per ogni campione singolo o sequenza. I rapporti vengono generati automaticamente quando si analizza il campione o la sequenza e possono essere rigenerati durante la rielaborazione.

Calibrazione

Selezioni per la calibrazione di Cerity per QA/QC in campo farmaceutico

La *calibrazione* determina i fattori di risposta tramite l'utilizzo di standard di calibrazione per calcolare le concentrazioni di componente assolute all'interno dei campioni.

Uno *standard di calibrazione* è un campione contenente una quantità nota del composto da quantificare.

Un *fattore di risposta* è il valore della risposta diviso per la quantità di ciascun picco o della quantità divisa per la risposta. In alternativa, viene calcolato dall'adattamento di una curva.

Una *calibrazione a livello singolo* utilizza solo una concentrazione singola di standard per la curva di calibrazione, la quale visualizza una linea retta con due punti: la concentrazione standard singola contro il punto di risposta e il punto zero.

Una *calibrazione multi-livello* utilizza più concentrazioni dello standard di calibrazione consente di selezionare il tipo di curva più adatto ai dati.

La maggior parte delle selezioni relative alla calibrazione di Cerity per QA/QC in campo farmaceutico si effettua nel **Method Wizard** (Impostazione guidata del metodo). Una volta chiuso il **Method Wizard** (Impostazione guidata del metodo), non è più possibile modificare le selezioni salvate. È necessario creare un nuovo metodo con le nuove selezioni.

Tavola di calibrazione dei composti

È possibile impostare una nuova tavola di calibrazione, mantenere una tavola di calibrazione da un metodo copiato o impostare una calibrazione manuale.

Modalità di calibrazione

È possibile impostare la calibrazione di campioni singoli e sequenze nel Method Wizard (Impostazione guidata del metodo), con le seguenti opzioni:

- calibrazione a livello singolo con quantità fissa o variabile
- calibrazione multi-livello con quantità fissa o variabile
- calibrazione manuale

Se si seleziona l'opzione **Variable Amounts** (Quantità variabili) in **Method Wizard** (Impostazione guidata del metodo), è possibile immettere una nuova quantità quando si inserisce un campione o una sequenza nella finestra Sample (Campione). Se si seleziona l'opzione **Fixed Amounts** (Quantità fisse) in **Method Wizard** (Impostazione guidata del metodo), è necessario inserire le quantità per ciascun composto in Calibration (Calibrazione) nella finestra Method (Metodo). Non è possibile inserire una nuova quantità quando si inserisce un campione nella finestra Sample (Campione).

Ricalibrazione e ordine di quantificazione

Per le sequenze è possibile selezionare il tipo di ricalibrazione e l'ordine di quantificazione del campione con gli standard di calibrazione.

- **Calibrazione ad aggiornamento singolo**
Un insieme di campioni viene quantificato in base allo standard di calibrazione o alla media degli standard di calibrazione precedenti l'insieme di campioni.
- **Calibrazione globale**
Vengono analizzati gli standard di calibrazione e ne viene calcolata la media prima della quantificazione dei campioni. Questa operazione è anche detta bracketing media globale.
- **Bracketing**
Un insieme di campioni viene quantificato in base alla media degli standard di calibrazione analizzati prima e dopo l'insieme di campioni.

Calibrazione ad aggiornamento singolo

Nella calibrazione ad aggiornamento singolo, la tavola di calibrazione viene aggiornata dopo ogni standard di calibrazione. La tavola di calibrazione aggiornata viene utilizzata per quantificare i campioni che seguono fino al successivo standard di calibrazione. La sequenza di eventi è illustrata nella [Figura 35](#).

La tavola di calibrazione può essere inizializzata con i tempi di ritenzione e i fattori di risposta utilizzando l'opzione **Replace** (Sostituisci) per una calibrazione. Questa modalità si utilizza in genere all'inizio di una sequenza di analisi HPLC.

Per generare una media dei tempi di ritenzione e/o dei fattori di risposta degli standard di calibrazione, utilizzare l'opzione **Average** (Media) per la calibrazione. Questa modalità si utilizza in genere dopo la sostituzione dei dati di calibrazione.

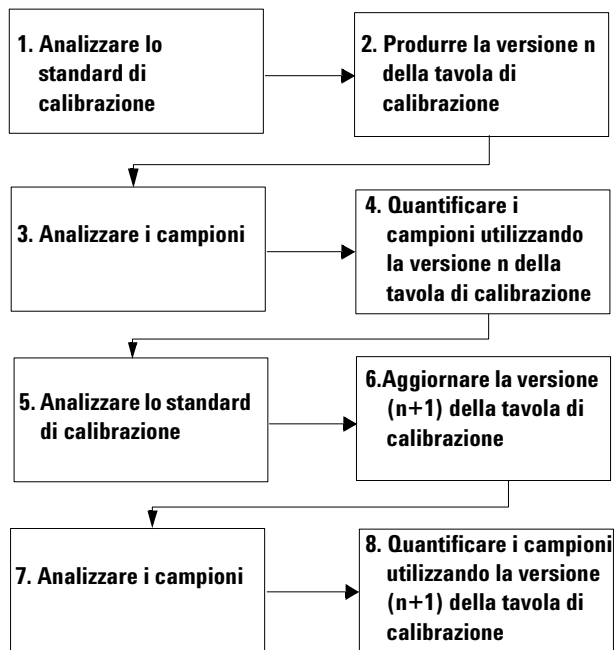


Figura 35 Schema per la ricalibrazione ad aggiornamento singolo

Bracketing

Nella calibrazione in bracketing, la tavola di calibrazione viene aggiornata utilizzando due gruppi di standard di calibrazione, analizzati prima e dopo i campioni. I campioni non vengono quantificati fino alla fine dell'analisi del secondo gruppo di standard di calibrazione. La sequenza di eventi è illustrata nella [Figura 36](#).

I fattori di risposta vengono sostituiti all'inizio del bracketing e ne viene calcolata la media con i valori di calibrazione ottenuti alla chiusura del bracketing. I tempi di ritenzione vengono trattati come nelle calibrazioni ad aggiornamento singolo.

Per la valutazione delle iniezioni di system suitability, il sistema consente di inserire una calibrazione ad aggiornamento singolo iniziale all'inizio della sequenza, prima delle calibrazioni in bracketing.

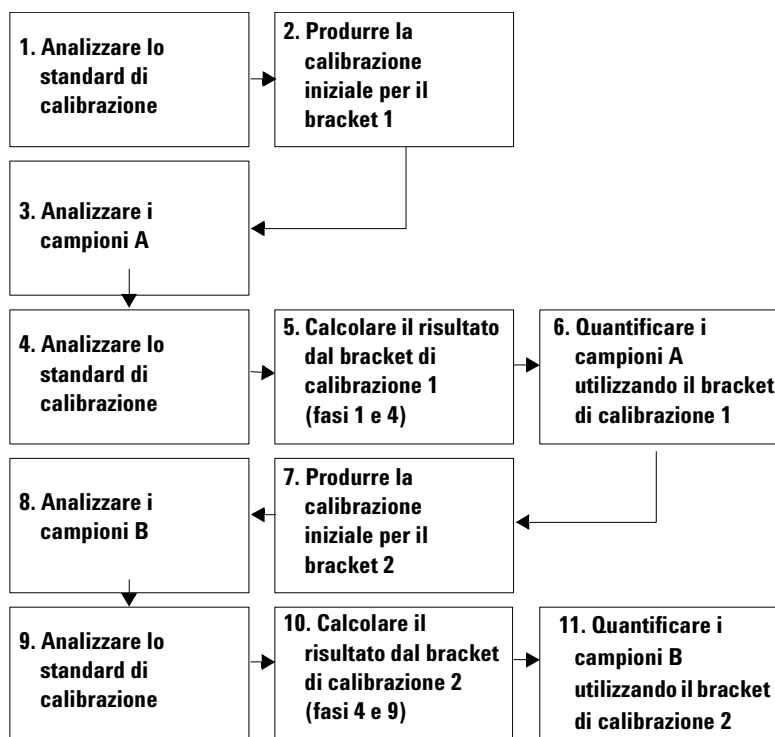


Figura 36 Schema per la ricalibrazione in bracketing

Bracketing globale

Nella calibrazione in bracketing globale, la tavola di calibrazione viene inizializzata all'inizio della sequenza. I risultati del primo gruppo di standard della sequenza sostituiscono i risultati di calibrazione esistenti. Tutti gli standard di calibrazione della sequenza vengono utilizzati per produrre una tavola di calibrazione alla fine della sequenza. Quest'ultima viene utilizzata per quantificare tutti i campioni. La sequenza di eventi è illustrata nella [Figura 37](#).

I fattori di risposta vengono sostituiti all'inizio della sequenza con i valori del primo standard di calibrazione e ne viene calcolata la media con i valori di calibrazione ottenuti durante la sequenza. I tempi di ritenzione vengono trattati come nelle calibrazioni ad aggiornamento singolo.

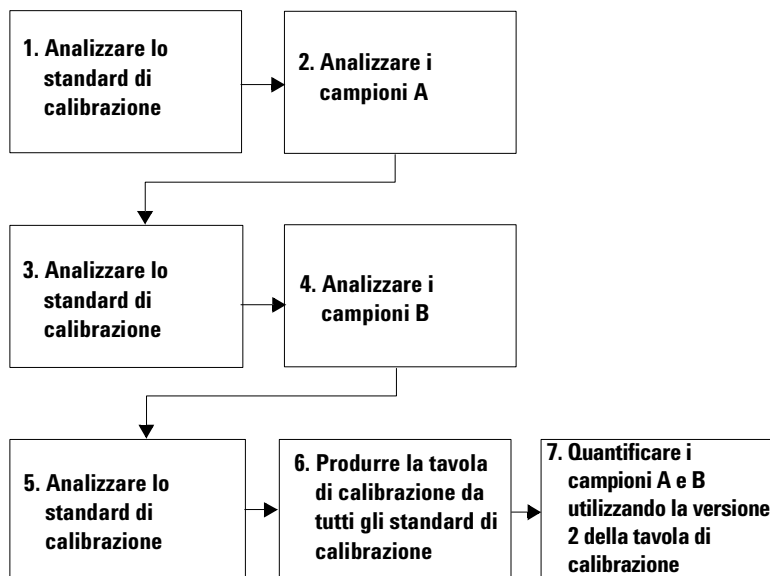


Figura 37 Schema per la ricalibrazione in bracketing globale

Procedure di calibrazione

Per le sequenze è possibile scegliere tra due procedure di calibrazione:

- calibrazione specifica per strumento
- calibrazione specifica per sequenza

Calibrazione specifica per strumento Tramite questo tipo di procedura di calibrazione si calibra lo strumento per un'analisi specifica. Utilizzare questa procedura quando la calibrazione è stabile per un lungo periodo di tempo. Quando si analizzano gli standard di calibrazione con questo metodo, i fattori di risposta e le curve di calibrazione vengono salvati nel metodo. Tutti i campioni che utilizzano questo metodo sono quantificati con i fattori di risposta nel metodo. È possibile scegliere di aggiornare la calibrazione con i nuovi standard di calibrazione. Utilizzare questa procedura principalmente con le analisi GC. Con questo tipo di procedura si analizzano campioni singoli.

Calibrazione specifica per sequenza Tramite questa procedura di calibrazione si calibra lo strumento solo per la sequenza corrente. Questa procedura viene utilizzata quando la calibrazione è stabile solo per un breve periodo di tempo. I fattori di risposta non vengono salvati nel metodo, ma vengono aggiornati ogni volta che si analizza una sequenza con standard di calibrazione per un metodo. Utilizzare questa procedura principalmente con le analisi LC.

Calcoli personalizzati

È possibile accedere ai calcoli personalizzati di Cerity per QA/QC in campo farmaceutico tramite una comune interfaccia di foglio di calcolo simile a Microsoft® Excel. Il numero e il tipo di fogli di lavoro su cui è possibile impostare i calcoli dipendono dal tipo di metodo, campione singolo o sequenza, e dal tipo di risultato. Anche le variabili disponibili dal database dipendono dal tipo di risultato.

Tipi di risultato disponibili per i calcoli personalizzati

Un *tipo di risultato* è una categoria di risultato basata su un'iniezione, un gruppo di campioni o standard oppure una sequenza.

Per i campioni singoli, i calcoli personalizzati possono essere impostati per risultati di iniezione singola e per risultati di riepilogo di più iniezioni. Per impostare i calcoli si utilizzano le variabili del metodo, incluse le variabili personalizzate del campione impostate nel metodo e i risultati di quantificazione di composti e picchi.

Un *gruppo per tipo di campione* è un insieme di risultati di sequenza raggruppati secondo il tipo di campione, quali lo standard di calibrazione, il campione QC o i gruppi di campioni. È anche possibile definire gruppi di campioni personalizzati.

Per le sequenze, i calcoli personalizzati possono essere impostati per risultati di iniezione singola, per riepiloghi di più iniezioni e per *gruppi per tipo di campione*.

Processo di impostazione di calcoli personalizzati

Durante l'impostazione di calcoli personalizzati è possibile aggiungere al foglio di lavoro colonne che contengono campi, variabili e risultati già presenti nel database, quindi aggiungere nuove colonne che contengono le formule per calcolare le nuove variabili definite.

Per operare sulle variabili sono disponibili diversi operatori matematici e istruzioni condizionali. La sintassi per combinare la variabili con queste funzioni è essenzialmente la stessa di Excel. Per le descrizioni di tutte le funzioni disponibili, vedere la guida di riferimento in linea.

Ricordare che se si aggiungono composti al metodo in un secondo momento, è necessario rielaborare i fogli di lavoro relativi al calcolo personalizzato in modo che i risultati aggiuntivi relativi al composto vengano calcolati.

Generazione di calcoli personalizzati

Per comprendere il processo di impostazione, osservare come vengono generati i calcoli personalizzati. Come illustrato nella figura seguente, il sistema utilizza i risultati di calcolo personalizzati di un'iniezione singola per calcolare i risultati riassuntivi di più iniezioni, i quali possono essere utilizzati per calcolare i risultati di gruppi per tipo di campione. Tutti i risultati vengono memorizzati nel database da cui è possibile recuperarli.

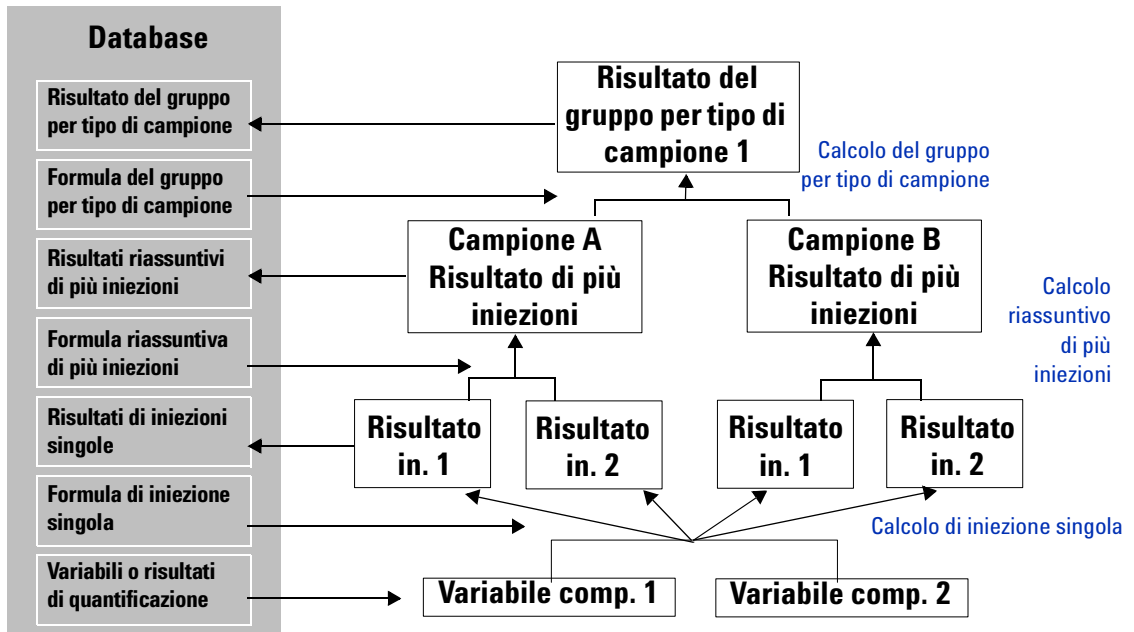


Figura 38 Gerarchia di calcoli generati

Esempio di generazione di calcoli

Calcoli per gruppo di campioni (RSD di Quantità = DEVST (Quantità di campione A, Quantità di campione B)) Calcoli per campione (Quantità media = Media (Quantità Iniez. 1 + Quantità Iniez. 2)) Calcoli per iniezione (Quantità% = Quantità impurezze/Quantità composto principale*100)	Gruppo di campioni 1				Gruppo di campioni 2			
	Campione A		Campione B		Campione C		Campione D	
	In. 1	In. 2	In. 1	In. 2	In. 1	In. 2	In. 1	In. 2
Deviazione standard delle quantità	0.14				0.08			
Quantità media	1.86		2.06		3.56		3.44	
Quantità (risultato esistente)	1.8	1.92	2.01	2.11	3.51	3.60	3.49	3.40
Quantità % (calcolo per iniezione)	0.15	0.16	0.17	0.18	0.29	0.30	0.29	0.28

Impostazione del foglio di lavoro per i calcoli

I calcoli personalizzati si impostano tramite una comune interfaccia di foglio di calcolo simile a Microsoft Excel. Questi fogli di lavoro consentono di impostare ed eseguire calcoli sui tipi di risultato per ogni fase del processo di calcolo:

- il foglio di lavoro per iniezione singola, attivo dopo la quantificazione, consente di impostare il calcolo di un'iniezione singola per tutti i tipi di campione (Figura 40)
- il foglio di lavoro riassuntivo per più iniezioni consente di impostare i calcoli per più iniezioni dello stesso campione, eseguendo un calcolo per tutti i tipi di campioni (Figura 41)
- il foglio di lavoro per il gruppo per tipo di campione consente di impostare i calcoli per un gruppo dello stesso tipo di campione e per gruppi di campioni personalizzati (Figura 42)

Aggiunta di variabili o risultati esistenti

Nei fogli di lavoro per i calcoli, aggiungere innanzitutto un colonna che contenga la variabile o il risultato esistente, quindi impostare una nuova formula o un nuovo calcolo che utilizzi tale variabile o risultato. Le variabili o i risultati esistenti dipendono dal tipo di risultato.

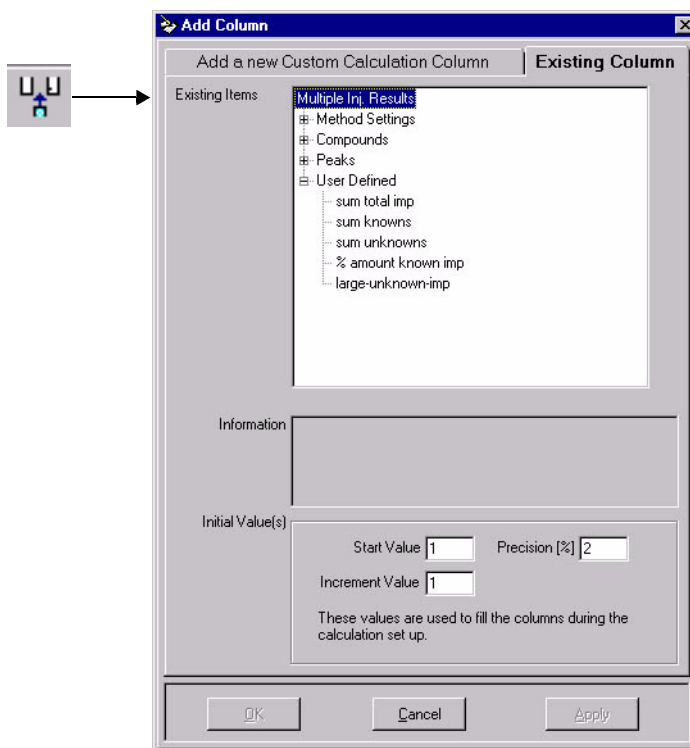


Figura 39 Elenco delle variabili e dei risultati esistenti per calcoli riassuntivi di più iniezioni

Variabili o risultati di iniezioni singole

- variabili di metodo e campione
- risultati di quantificazione e integrazione del composto
- risultati di quantificazione e integrazione del picco
- variabili personalizzate del campione (impostate nella sezione Sample Variables del metodo)

**Variabili o risultati riassuntivi
di più iniezioni**

- variabili di metodo
- risultati di quantificazione e integrazione del composto
- risultati di quantificazione e integrazione del picco
- variabili o risultati definiti dall'utente: risultati del calcolo personalizzato dalla formula impostata nel foglio di lavoro per iniezione singola

**Variabili o risultati del gruppo
per tipo di campione**

Solo i risultati definiti dall'utente dei calcoli personalizzati impostati nel foglio di lavoro riassuntivo per più iniezioni sono disponibili come variabili per impostare un calcolo per il gruppo per tipo di campione.

L'interfaccia utente di Report Template Editor di Cerity e il glossario della Guida in linea contengono le descrizioni di tutte le variabili e i risultati disponibili per i calcoli personalizzati.

Impostazione di un nuovo calcolo personalizzato È anche possibile aggiungere una colonna al foglio di lavoro per impostare una formula per un calcolo personalizzato il cui risultato può essere utilizzato come variabile per altri calcoli. Immettere il nome di visualizzazione e l'ID di sistema per il calcolo che si desidera impostare.

4 Impostazione dei metodi
Calcoli personalizzati

Un *livello* è una riga sul foglio di lavoro che contiene la formula o il risultato del nuovo calcolo.

Selezionare inoltre un *livello* per il calcolo. I livelli di calcolo per il foglio di lavoro dipendono dal tipo di risultato. Per conoscere il livello scelto per il calcolo, vedere gli esempi di foglio di lavoro riportati di seguito.

Livelli del foglio di lavoro per iniezione singola

La figura seguente illustra i livelli per l'iniezione singola.

Single inj. Variables (Livello variabile iniezione singola): questa riga contiene la formula per produrre un risultato riassuntivo per l'iniezione singola.	A	B	C	D	E	F	G	H
	1					New	New	New
	2			Amount	Peak Area	Perc. of Nicotin	Sum Metabolites	AreaSum not ident. Peaks
	3	-				%	mg/kg	
Identified Compounds o Not Identified Peaks (Livelli riassuntivi di composto identificato o picco non identificato): queste righe contengono le formule per produrre risultati riassuntivi per tutti i composti identificati o i picchi non identificati.	4	Single Inj. Results						
	5	Single Inj. Variables					2.996	
	6	Identified Compounds						
	7	Nicot. Metabolit I		0.9993	1.0097	24.885		
	8	Nicot. Metabolit II		1.9968	1.9896	49.724		
	9	PCH		3.0126	2.9811			
	10	Nicotin		4.0158	3.9833			
Livelli 1...n di composto identificato o picco non identificato: queste righe contengono formule per calcoli di composto o picco singolo.	11	Not Identified Peaks						18.005
	12	Unknown 1			5.0455			
	13	..			6.0103			
	14	Unknown n			6.9492			

Figura 40 Foglio di lavoro per iniezione singola

Livelli del foglio di lavoro riassuntivo per più iniezioni

La figura seguente illustra i livelli per risultati riassuntivi di più iniezioni.

Multiple inj. Variables (Livello variabile per più iniezioni): questa riga contiene la formula per produrre un risultato riassuntivo per tutte le iniezioni singole.	A	B	C	D	E	F	G	H	I
	1					New	New		New
	2			Amount	Sum Metabolites	Mean Amount	RSD of Sum Amount Metabolites	AreaSum not ident. Peaks	Mean of AreaSum not ident. Peaks
	3				mg/kg	mg/kg	%		
Livello 1..n variabile iniezione singola: queste righe contengono le formule per i calcoli sul risultato dell'iniezione singola ricavati dal calcolo della variabile di iniezione singola impostato nel foglio di lavoro per iniezione singola.	4	Multiple Inj. Results					12.58		
	5	- Multiple Inj. Variable							
	6	Single Inj. #1			2.996				
	7	..			3.182				
Livelli riassuntivi di composto identificato o picco non identificato: queste righe contengono le formule per produrre risultati riassuntivi per tutte le iniezioni singole per un composto o un picco.	8	Single Inj. #n			3.978				
	9	- Nicot. Metabolit I				1.777			
	10	Single Inj. #1		0.9993					
	11	..		1.9496					
Livelli 1...n di composto identificato o picco non identificato: queste righe contengono formule per calcoli di iniezioni singole per ogni composto o picco.	12	Single Inj. #n		2.3811					
	13	- Nicot. Metabolit II				3.018			
	14	Single Inj. #1		1.9968					
	15	..		3.0455					
	16	Single Inj. #n		4.0103					
	17	+ PCH				7.975			
	21	- Nicotin				5.347			
	22	Single Inj. #1		4.0158					
	23	..		5.9183					
	24	Single Inj. #n		6.1065					
	25	- Not Identified							18.78
	26	Single Inj. #1						18.005	
	27	..						17.345	
	28	Single Inj. #n						20.999	

Figura 41 Foglio di lavoro riassuntivo per più iniezioni

Livelli del foglio di lavoro per il
gruppo per tipo di campione

Livello variabile gruppo per tipo di campione: questa riga contiene la formula per produrre un risultato riassuntivo per ogni gruppo di campioni nella scheda.

Livello 1..n variabile risultati riassuntivi (campione) di più iniezioni: queste righe contengono le formule per i calcoli ricavate dal calcolo della variabile di più iniezioni impostato nel foglio di lavoro riassuntivo per più iniezioni.

Livelli riassuntivi di composto identificato o picco non identificato: queste righe contengono le formule per produrre risultati riassuntivi per tutti i gruppi di campioni per un composto o un picco.

Livelli #1...#n di composto identificato o picco non identificato: queste righe contengono formule per calcoli per campioni di gruppo singolo per ogni composto o picco.

La Figura 42 illustra i livelli per i gruppi per tipo di campione.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I
1				New	New	New	New	New	New
				Mean Amount	Mean Amount per Lot	RSD of Sum Amount Metabolites	Mean of RSD Metabolites	Mean of AreaSum not ident. Peaks	Mean AreaSum per Lot
2									
3	-			mg/kg	mg/kg	%	%		
4			User Sample Groups						
5	-		Sample Group Variable				12.59		
6			Sample Inj. #1			12.58			
7			..			12.02			
8			Sample Inj. #n			12.97			
9	-		Nicot. Metabolit I		2.002				
10			Sample Inj. #1	1.777					
11				1.996					
12			Sample Inj. #n	3.002					
13	-		Nicot. Metabolit II		4.995				
14			Sample Inj. #1	3.018					
15			..	4.988					
16			Sample Inj. #n	5.982					
17	+		PCH		8.003				
21	-		Nicotin		10.933				
22			Sample Inj. #1	5.347					
23			..	10.980					
24			Sample Inj. #n	11.883					
25	-		Not Identified						22.295
26			Sample Inj. #1					18.78	
27			..					22.02	
28			Sample Inj. #n					22.97	

Figura 42 Foglio di lavoro per il gruppo per tipo di campione

Per le definizioni di tutte le funzioni e le istruzioni condizionali disponibili, vedere la sezione di riferimento nella Guida in linea.



Funzioni e istruzioni condizionali

Per impostare una formula, immettere in un'unica cella una funzione matematica o un'istruzione condizionale e le righe cui si riferisce. Un calcolo deve iniziare con un segno uguale (=). Ad esempio, la voce della cella per calcolare la quantità media per partita di metabolita nicotina I nella figura precedente sarà =AVERAGE(D10:D12)

Facendo clic sul pulsante **Function** (Funzione) nella barra degli strumenti Tools, è possibile accedere a un elenco completo di funzioni matematiche nell'area di lavoro Custom Calculations (Calcoli personalizzati).

Valori visualizzati durante l'impostazione

Durante l'impostazione del calcolo, il sistema NDS Cerity per QA/QC in campo farmaceutico produce numeri casuali da inserire nelle celle, poiché è possibile che i risultati non siano sempre disponibili.

Esempio **Somma dell'area media delle impurezze non identificate per partita**

In questa sezione viene fornito un esempio da utilizzare in laboratorio che illustra l'utilizzo di questi concetti per impostare un calcolo personalizzato.

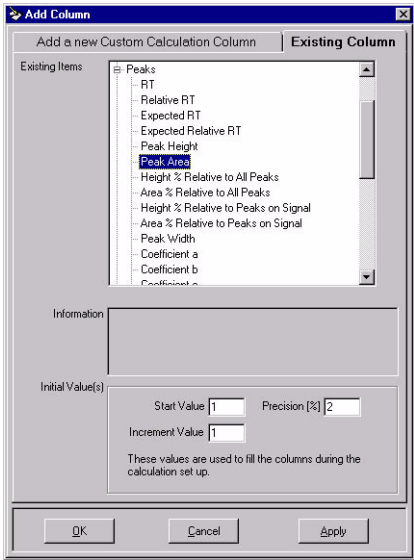
È possibile impostare un calcolo personalizzato per calcolare la media della somma delle aree di impurezze non identificate per lotto di campioni. Non è necessario identificare i composti per impostare questo calcolo, pertanto è possibile applicare le istruzioni riportate di seguito a un metodo vuoto.

Attività 1 Impostare la somma delle aree dei picchi non identificati in un'iniezione singola

Fasi

Risultato

- 1 Sul foglio di lavoro per iniezione singola, aggiungere una colonna per contenere il risultato di integrazione esistente, l'area del picco

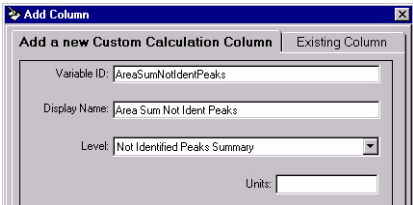


Ora l'area di lavoro contiene una colonna con le aree dei picchi non identificati.

Attività 1 Impostare la somma delle aree dei picchi non identificati in un'iniezione singola (continua)

Fasi	Risultato
------	-----------

- 2 Aggiungere una colonna per contenere il nuovo calcolo per la somma delle aree dei picchi non identificati. Suggerimento: livello riassuntivo dei picchi non identificati



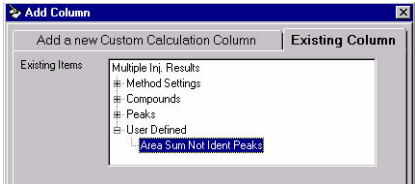
Ora l'area di lavoro contiene una colonna per la nuova variabile Area Sum Not Ident Peaks.

- 3 Immettere la formula per la somma dell'area dei picchi non identificati. Suggerimento: utilizzare la sintassi =SUM(D8:D10)

	A	B	C	D	E
1					New
2				Peak Area	Area Sum Not Ident. Peaks
3		-			
4		Single Injection			
5		Single Inj. Variables			
6		- Identified Compounds			
7		- Not Identified Peaks			6.01
8		Unknown 1		0.9993	
9		..		1.9968	
10		Unknown n		3.0126	

4 Impostazione dei metodi
Calcoli personalizzati

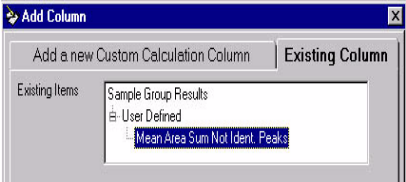
Attività 2 Impostare il calcolo della media delle aree dei picchi non identificati per tutte le iniezioni di un campione

Fasi	Risultato
1 Sul foglio di lavoro di riepilogo per più iniezioni, aggiungere una colonna per contenere la variabile impostata nel foglio di lavoro iniezione singola, la somma delle aree dei picchi non identificati.	<div></div> <p>Ora l'area di lavoro contiene una colonna con la somma delle aree dei picchi non identificati.</p>

Attività 3 Impostare il calcolo della media delle aree per i campioni nel gruppo di campioni

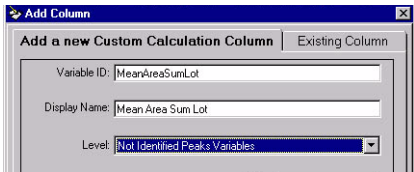
Fasi	Result
------	--------

- 1 Sul foglio di lavoro del gruppo di campioni, aggiungere una colonna per contenere la variabile impostata nel foglio di lavoro per più iniezioni, la media delle somme delle aree per tutte le iniezioni.



Ora l'area di lavoro contiene una colonna con la somma dell'area per i picchi non identificati.

- 2 Aggiungere una colonna per contenere il nuovo calcolo per la media delle somme delle aree dei picchi non identificati per un lotto di campioni. Suggerimento: livello delle variabili dei picchi non identificati



Ora l'area di lavoro contiene una colonna per la nuova variabile Mean Area Sum Per Lot.

- 3 Immettere la formula per la media delle somme dell'area per il lotto. Suggerimento: utilizzare la sintassi =AVERAGE(D10:D12)

	A	B	C	D	E
1					New
2				Mean Area Sum Not Ident. Peaks	Mean Area Sum per Lot
3	-				
4		Samples			
5	-	Sample Group Variable			
6		Sample #1			
7		..			
8		Sample #n			
9	-	Not Identified Peaks			2.01
10		Sample #1		1.00	
11		..		2.02	
12		Sample #n		3.01	

Altri esempi di calcoli personalizzati

Per esercitarsi sull'impostazione di un calcolo personalizzato, vedere l'esercizio "Set up a method to identify impurities" della Guida Getting Started.

Per istruzioni relative all'impostazione dei seguenti calcoli personalizzati, vedere la Guida in linea (HowTos/Setting Up Methods/Set up custom calculations):

- statistiche sulle aree di picco per più iniezioni
- % di impurezze note
- % di impurezze note totali
- % di impurezze sconosciute
- % di impurezze sconosciute totali
- fattori di risposta medi per più iniezioni
- fattore di risposta medio per ogni composto nel gruppo standard di calibrazione
- deviazione standard per il fattore di risposta medio per ogni composto negli standard
- deviazione standard relativa (RSD, Relative Standard Deviation) per il fattore di risposta medio per ogni composto negli standard
- fattore di risposta relativo (RRF, Relative Response Factor) tra i picchi
- precisione degli standard di controllo rispetto agli standard di calibrazione
- concentrazione e quantità effettiva di un campione
- quantità regolate per singoli composti

Relazione tra fogli di lavoro

I fogli di lavoro per i calcoli sono correlati, come illustrato nell'esempio precedente, nella [Figura 43](#) e nella [Figura 44](#). I risultati ricavati dal foglio di lavoro per l'iniezione singola sono utilizzati nel foglio di lavoro riassuntivo per più iniezioni i cui risultati sono a loro volta utilizzati nel foglio di lavoro del gruppo per tipo di campione.

FOGLIO DI LAVORO PER INIEZIONE
SINGOLA

Valore calcolato
personalizzato

Risultati di quantificazione

Risultati di integrazione

	A	B	C	D	E	F	G	H
1						New	New	New
2				Amount	Peak Area	Perc. of Nicotin	Sum Metabolites	AreaSum not ident. Peaks
3	-					%	mg/kg	
4	Single Inj. Results							
5	Single Inj. Variables							
6	- Identified Compounds							
7	Nicot. Metabolit I			0.9993	1.0097	24.885		
8	Nicot. Metabolit II			1.9968	1.9896	49.724		
9	PCH			3.0126	2.9811			
10	Nicotin			4.0158	3.9833			
11	- Not Identified Peaks							
12	Unknown 1				5.0455			
13	..				6.0103			
14	Unknown n				6.9492			

FOGLIO DI LAVORO RIASSUNTIVO

Iniezioni multiple
segnaposto

È possibile nascondere i
campi per maggiore
chiarezza

	A	B	C	D	E	F	G	H	I
1				Amount	Sum Metabolites	New Mean Amount	New RSD of Sum Amount Metabolites	AreaSum not ident. Peaks	New Mean of AreaSum not ident. Peaks
2									
3	-			mg/kg	mg/kg	mg/kg	%		
4	Multiple Inj. Results								
5	- Multiple Inj. Variable								
6	Single Inj. #1				2.996				
7	..				3.182				
8	Single Inj. #n				3.978				
9	- Nicot. Metabolit I					1.777			
10	Single Inj. #1			0.9993					
11	..			1.9496					
12	Single Inj. #n			2.3811					
13	- Nicot. Metabolit II								
14	Single Inj. #1			1.9968					
15	..			3.0455					
16	Single Inj. #n			4.0103					
17	+ PCH					7.975			
21	- Nicotin					5.347			
22	Single Inj. #1			4.0158					
23	..			5.9183					
24	Single Inj. #n			6.1065					
25	- Not Identified								
26	Single Inj. #1							18.005	
27	..							17.345	
28	Single Inj. #n							20.999	

Figura 43 Relazione tra il foglio di lavoro per iniezione singola e il foglio di lavoro riassuntivo per più iniezioni

4 Impostazione dei metodi
Calcoli personalizzati

FOGLIO DI LAVORO RIASSUNTIVO
PER PIÙ INIEZIONI

	A	B	C	D	E	F	G	H	I
1				Amount	Sum Metabolites	New Mean Amount	New RSD of Sum Amount Metabolites	AreaSum not ident. Peaks	New Mean of AreaSum not ident. Peaks
2									
3	-			mg/kg	mg/kg	%			
4	Multiple Inj. Results								
5	-	Multiple Inj. Variable					12.58		
6		Single Inj. #1			2.996				
7		..			3.182				
8		Single Inj. #n			3.978				
9	-	Nicot. Metabolit I				1.777			
10		Single Inj. #1		0.9993					
11		..		1.9496					
12		Single Inj. #n		2.3811					
13	-	Nicot. Metabolit II				3.018			
14		Single Inj. #1		1.9968					
15		..		3.0455					
16		Single Inj. #n		4.0103					
17	+	PCH				7.975			
21	-	Nicotin				5.347			
22		Single Inj. #1		4.0158					
23		..		5.9183					
24		Single Inj. #n		6.1065					
25	-	Not Identified						18.005	18.78
26		Single Inj. #1						17.345	
27		..						20.999	
28		Single Inj. #n							

FOGLIO DI LAVORO PER IL GRUPPO
PER TIPO DI CAMPIONE

	A	B	C	D	E	F	G	H	I
1				Mean Amount	New Mean Amount per Lot	RSD of Sum Amount Metabolites	New Mean of RSD Metabolites	Mean of AreaSum not ident. Peaks	New Mean AreaSum per Lot
2									
3	-			mg/kg	mg/kg	%	%		
4	User Sample Groups								
5	-	Sample Group Variable					12.59		
6		Sample Inj. #1				12.58	Media		
7		..				12.02			
8		Sample Inj. #n				12.97			
9	-	Nicot. Metabolit I			2.002				
10		Sample Inj. #1		1.777					
11		..		1.996					
12		Sample Inj. #n		3.002					
13	-	Nicot. Metabolit II			4.995				
14		Sample Inj. #1		3.018	Media				
15		..		4.988					
16		Sample Inj. #n		5.982					
17	+	PCH			8.003				
21	-	Nicotin			10.933				
22		Sample Inj. #1		5.347					
23		..		10.980					
24		Sample Inj. #n		11.883					
25	-	Not Identified							22.295
26		Sample Inj. #1						18.78	Media
27		..						22.02	
28		Sample Inj. #n						22.97	

Campioni segnaposto nel
gruppo per tipo di campione

Figura 44 Relazione tra il foglio di lavoro di riepilogo per più iniezioni e il foglio di lavoro del gruppo per tipo di campione

Layout di revisione dei dati

Tipi di layout

Cerity per QA/QC in campo farmaceutico visualizza i risultati nella finestra Result (Risultato) per i seguenti gruppi di risultati:

- iniezione singola, risultati riassuntivi di più iniezioni e calibrazione

Per le sequenze, vengono visualizzati i risultati per i seguenti gruppi per tipo di campione:

- gruppo di campioni QC
- gruppo di campioni
- gruppo di standard di calibrazione
- gruppo di campioni personalizzati

Selezioni di visualizzazione

Nella sezione Data Review Layout (Layout di revisione dei dati) del metodo è possibile scegliere di visualizzare nella finestra Result i risultati e le tabelle riassuntive, i titoli delle informazioni e le righe di stato per ogni insieme di risultati con le seguenti differenze:

- solo per la visualizzazione di risultati di iniezioni singole, è possibile scegliere di visualizzare il segnale
- solo per la visualizzazione di risultati di calibrazione, è possibile scegliere di visualizzare la tavola e la curva di calibrazione e il diagramma residuo

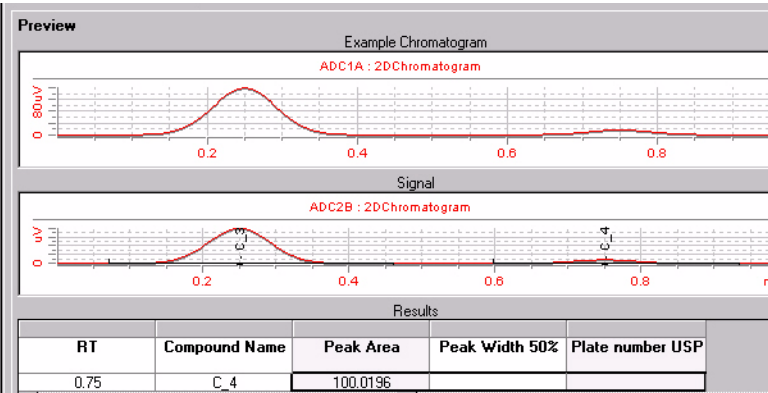
Selezioni dei risultati per la tabella dei risultati

Per ogni tabella che si sceglie di visualizzare, è possibile selezionare i campi e le variabili che verranno visualizzati come intestazioni di colonne o voci nelle tabelle.

I campi e le variabili visualizzati per ogni insieme di risultati sono quelli forniti dal sistema o impostati come variabili o variabili di calcolo personalizzate. Solo le variabili impostate per ciascun gruppo per tipo di campione nei calcoli personalizzati vengono visualizzate per il rispettivo gruppo per tipo di campione in questo punto.

Anteprima delle selezioni

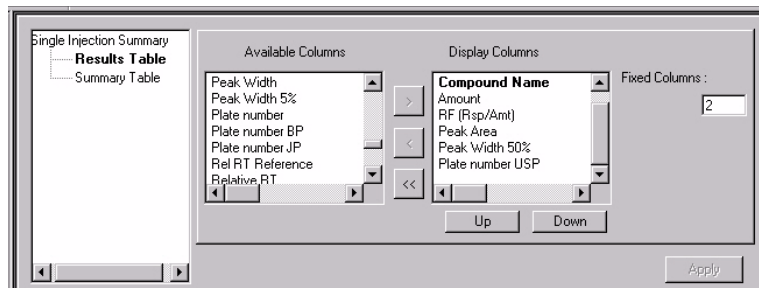
Quando si effettua o si modifica una selezione, la modifica viene visualizzata nella sezione Preview (Anteprima) dell'area di lavoro Data Review Layout. La modifica non viene visualizzata finché non si fa clic sul pulsante **Apply** (Applica).



System suitability

È possibile generare valori di system suitability nella finestra Result (Risultato), effettuando le seguenti due azioni con l'applicazione Cerity per QA/QC in campo farmaceutico:

- selezionare la casella di controllo di system suitability **Method Wizard** (Impostazione guidata del metodo)
- selezionare i calcoli di system suitability i cui valori si desidera che vengano calcolati nell'elemento Data Review Layout per iniezioni singole



I risultati di system suitability vengono visualizzati nella tabella Results (Risultati) per iniezioni singole.

Reporting

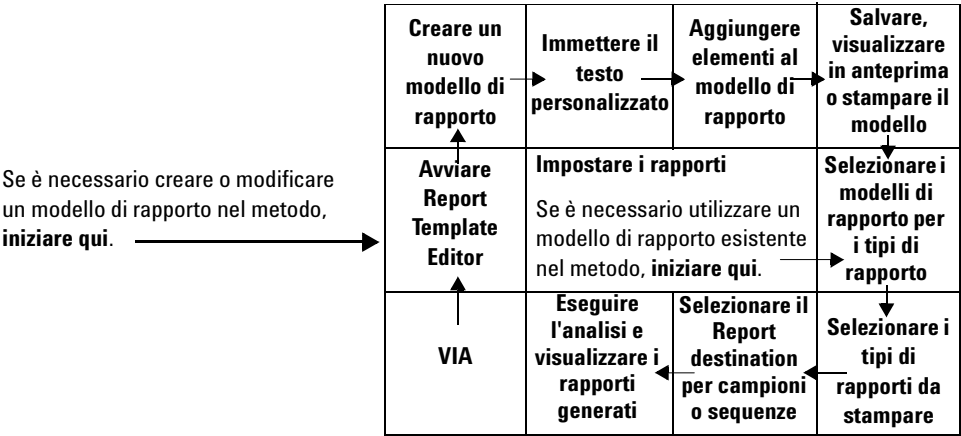
NDS Cerity per QA/QC in campo farmaceutico consente di creare rapporti con facilità. Sono compresi i seguenti tipi di dati:

- cromatogrammi e immagini
- risultati e tabelle riassuntive
- calcoli standard e personalizzati
- intestazioni e piè di pagina

Vedere la Technical Reference Guide (Guida di riferimento tecnico) per ulteriori informazioni sulla creazione di rapporti Cerity per QA/QC in campo farmaceutico.

I rapporti vengono generati una volta completata la quantificazione per un campione. Durante la stesura di rapporti, vengono organizzati e presentati i campi e i valori di risultato per i tipi di rapporto mediante modelli predefiniti. Non viene eseguito alcun calcolo. Tipi di rapporto e modelli vengono selezionati nel metodo. I rapporti vengono visualizzati o stampati in Report Viewer di Cerity.

La mappa seguente mostra il percorso riservato ad analisti e utenti avanzati per impostare, generare e visualizzare rapporti. Iniziare da **VIA**.



Ogni argomento secondario di questa sezione fornisce informazioni di base utili per seguire le fasi di questo percorso.

Tipi di rapporto

Per *tipo di rapporto* si intende la categoria di rapporto generato per un tipo di risultato.

Quando si imposta un metodo per la prima volta, si selezionano i tipi di rapporto che si desidera stampare quando si analizza un campione o una sequenza con tale metodo. I tipi di rapporto disponibili per il metodo vengono visualizzati nell'area di lavoro Reporting. Non è possibile aggiungere nuovi tipi di rapporto all'elenco relativo.

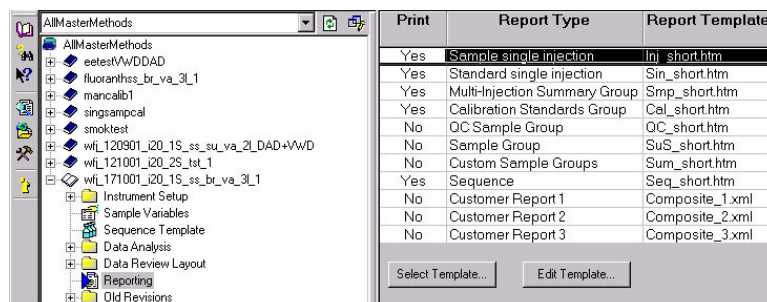


Figura 45 Area di lavoro Reporting della finestra Method (Metodo)

Tipi di rapporto per campioni singoli

I metodo impostati per campioni singoli forniscono tipi di rapporto per tre tipi di risultato:

- singola iniezione di campione
- singola iniezione di standard
- sommario iniezioni multiple

Tipi di rapporto per sequenze

I metodi impostati per le sequenze includono undici tipi di rapporto:

- singola iniezione di campione
- singola iniezione di standard
- sommario iniezioni multiple
- gruppo di standard di calibrazione
- gruppo di campioni QC
- gruppo di campioni
- gruppo di campioni personalizzati
- sequenza
- rapporti cliente 1, 2 o 3

Report destination (Destinazione del rapporto)

Quando si inserisce un campione singolo o si imposta una sequenza, è possibile modificare i tipi di rapporto da stampare, già definiti nella finestra Method. Questa operazione si esegue dalla scheda **Report Destination** (Destinazione del rapporto) del pannello **Sample Entry** (Inserimento di campioni) nella finestra Sample (Campione).

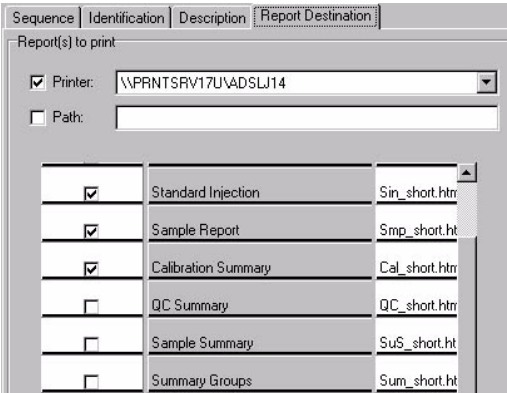


Figura 46 Scheda Report destination (Destinazione del rapporto) del pannello Sequence Options (Opzioni di sequenza)

È necessario aggiungere il nome del campione o della sequenza al percorso per consentire la rapida individuazione dei rapporti per il campione o la sequenza.

L'amministratore NDS Cerity imposta il percorso e la stampante per il salvataggio e la stampa dei rapporti. Dalla scheda **Report Destination** (Destinazione del rapporto) in Sample Entry (Inserimento di campioni), è possibile cambiare la stampante per la stampa dei rapporti e/o modificare il percorso per il salvataggio.

Modelli di rapporto

Un *modello di rapporto* è una struttura contenente il layout di campi, diagrammi, immagini e tabelle i cui valori si desidera inserire nel rapporto.

Ogni tipo di rapporto è collegato a un modello predefinito che genera un rapporto del tipo selezionato. Quando si analizza un campione o una sequenza, il modello di rapporto fornisce istruzioni al database per completare il rapporto con i valori dei campi e delle variabili impostati nel layout e nel contenuto del modello.

Sono disponibili tre opzioni per selezionare un modello di rapporto:

- utilizzare il modello predefinito già collegato al tipo di rapporto
- selezionare un altro modello di rapporto predefinito per il tipo di rapporto
- creare un nuovo modello di rapporto o modificarne uno esistente, quindi selezionarlo come modello per il tipo di rapporto

Quando si sceglie di modificare un modello per un tipo di rapporto, in Report Template Editor di Cerity vengono visualizzati solo i modelli per quel tipo di rapporto.

Report Template Editor di Cerity

Report Template Editor di Cerity consente di creare e modificare i modelli di rapporto. Utilizzare Report Template Editor di Cerity per personalizzare e formattare i rapporti NDS Cerity per QA/QC in campo farmaceutico secondo le esigenze del laboratorio.

4 Impostazione dei metodi Reporting

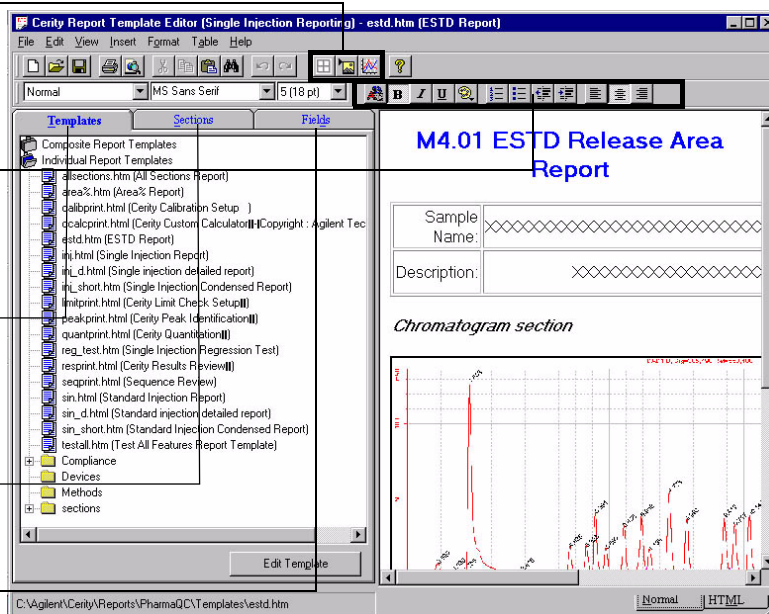
Barra degli strumenti di inserimento: utilizzare questi strumenti per inserire una tabella, un'immagine o un cromatogramma nel modello.

Barra degli strumenti di formattazione: utilizzare questi strumenti per la formattazione del testo del modello e/o del rapporto.

Scheda Templates (Modelli): selezionare da questa scheda un modello da modificare. I modelli vengono visualizzati nell'area di lavoro.

Scheda Sections (Sezioni): selezionare da questa scheda una sezione da inserire nel modello.

Scheda Fields (Campi): selezionare da questa scheda un campo o una variabile da inserire nel modello.



Albero di selezione

Area di lavoro

Nuovi modelli di rapporto

Per creare un nuovo modello di rapporto, fare clic sul pulsante **New** (Nuovo) in Report Template Editor di Cerity.

Report Template Editor di Cerity fornisce due tipi di modelli: Individual report templates (Modelli di rapporto singoli) e Composite report templates (Modelli di rapporto compositi).

Individual report templates (Modelli di rapporto singoli)

Utilizzare i modelli di rapporto singoli per inserire elementi semplici, quali tabelle, cromatogrammi, immagini o campi.

Tra i modelli di rapporto singoli sono inclusi:

- rapporti per iniezione singola
- rapporti di metodo
- rapporti di conformità
- rapporti di dispositivi

Dopo aver selezionato “new.htm” per creare un nuovo rapporto singolo, nell'area di lavoro viene visualizzato un modello di rapporto con l'intestazione Report Title. È necessario assegnare un nome al nuovo modello di rapporto e salvarlo affinché venga visualizzato un titolo nella cartella Individual Report Templates.

Composite report templates (Modelli di rapporto compositi)

I modelli di rapporto compositi consentono di inserire più modelli singoli esistenti nel modello di rapporto finale.

Tra i Composite report templates (Modelli di rapporto compositi) sono inclusi:

- rapporti di più iniezioni
- rapporti di sequenze

È possibile creare *modelli per più iniezioni* da modelli singoli utilizzando i seguenti componenti di rapporto:

- copertina
- strumento
- sommario iniezioni multiple
- iniezioni singole
- iniezioni standard

Il modello di rapporto salvato viene visualizzato come file XML nella cartella Composite Report Template (Modelli di rapporto compositi).

È possibile creare *modelli di sequenze* da modelli singoli utilizzando i seguenti componenti di rapporto:

- copertina
- sequenza
- strumento
- gruppo di campioni personalizzati
- gruppo di campioni
- gruppo di campioni QC
- gruppo standard di calibrazione
- sommario iniezioni multiple
- iniezioni singole
- iniezioni standard

Il modello di rapporto salvato viene visualizzato come file XML nella cartella Composite Report Template (Modelli di rapporto compositi).

Titoli dei modelli

Quando si salva il file, il titolo del modello viene visualizzato nelle seguenti posizioni:

- nella descrizione del nome di file del modello o della sezione
- sulla barra del titolo di Microsoft Internet Explorer quando si visualizza un modello in anteprima
- nel nome del file al primo salvataggio del modello

Il titolo del modello e l'intestazione del rapporto visualizzati nel nuovo modello non coincidono. È possibile modificare l'intestazione del rapporto, secondo le proprie esigenze.

Nuovi modelli da modelli esistenti

È possibile creare nuovi modelli di rapporto dai modelli predefiniti NDS Cerity oppure dai modelli personalizzati. Tutti i modelli vengono visualizzati nella scheda **Templates** (Modelli). Dopo aver selezionato e modificato un modello di rapporto esistente, è sufficiente salvarlo con un nuovo nome di file. Il nuovo modello di rapporto viene visualizzato nelle cartelle Individual Report Templates (Modelli di rapporto singoli) o Composite report templates (Modelli di rapporto compositi).

Editor di testo

L'editor di testo per l'applicazione Report Template Editor di Cerity utilizza gli strumenti comuni alla maggior parte dei programmi di elaborazione di testi. Quando si inizia a modificare il nuovo modello di rapporto il cursore è posizionato sull'intestazione. Se si desidera inserire un elemento nel rapporto, è necessario posizionare il cursore sotto l'intestazione.

Per immettere il testo desiderato nel rapporto, è possibile effettuare le operazioni seguenti:

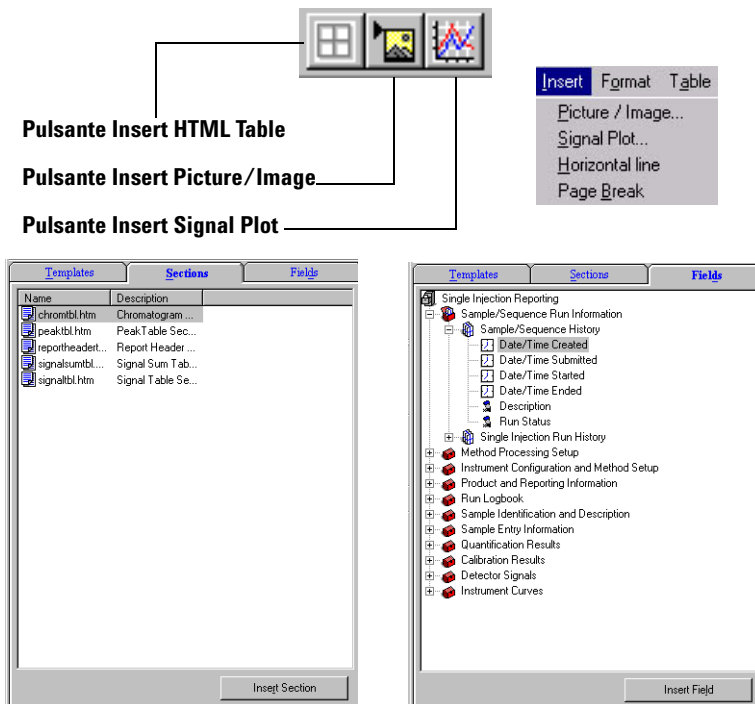
- immettere i nomi di campi e descrizioni
- modificare il carattere e le dimensioni del testo
- modificare la posizione del testo
- modificare l'enfasi del testo
- creare un elenco numerato o puntato
- impostare le proprietà dello sfondo
- modificare l'allineamento del testo
- modificare lo stile dei paragrafi
- modificare il colore del testo
- ripristinare la formattazione normale
- creare o modificare un'intestazione o un piè di pagina

Elementi del modello di rapporto

Report Template Editor di Cerity fornisce sezioni e campi da inserire in un modello di rapporto. È possibile inserire come sezioni i singoli modelli di rapporto salvati. Queste sezioni vengono visualizzate nella scheda **Sections** (Sezioni) di Report Template Editor di Cerity.

La scheda **Fields** (Campi) fornisce tutti i campi disponibili nelle finestre Sample (Campione), Method (Metodo), Instrument (Strumento) e Result (Risultato).

È possibile inserire in un modello di rapporto singoli campi, tabelle, immagini, diagrammi di segnale e altri elementi di rapporto.



Formati degli elementi del rapporto

È possibile impostare i formati nelle finestre di dialogo **Picture/Image** (Immagine), **Signal Plot** (Diagramma dei segnali) e **Table** (Tabella). Utilizzare ogni finestra di dialogo per selezionare le opzioni di formato. Non impostare formati per sezioni o campi singoli.

Anteprima o stampa di modelli di rapporto

Nell'area di lavoro Report Template Editor, è solo possibile stampare il modello di rapporto visualizzato. Selezionare la voce Preview template (Anteprima modello) nel menu **File** per accertarsi che il modello di rapporto sia completo e pronto per la stampa. È possibile stampare il modello dal programma Microsoft Internet Explorer.

Salvataggio di un modello di stampa

Sono disponibili diverse opzioni per salvare un modello di rapporto:

- salvare il modello di rapporto con lo stesso nome dopo la modifica di un rapporto.

Il sistema NDS Cerity per QA/QC in campo farmaceutico fornisce modelli predefiniti di sola lettura. Non è possibile modificare questi modelli a meno che l'amministratore NDS Cerity non modifichi l'autorizzazione di directory del modello di rapporto per consentirne lettura e scrittura.

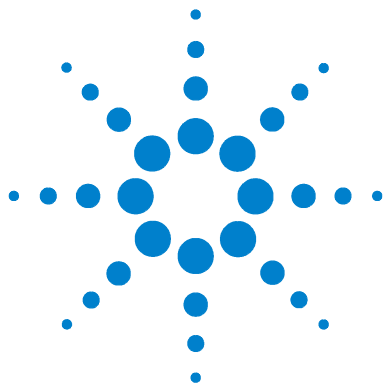
- salvare un modello di rapporto come nuovo file dopo la modifica. Utilizzare il comando **Save As** (Salva con nome) dal menu **File**.
- salvare il modello di rapporto come una sezione.

È necessario modificare il titolo del modello di rapporto prima di rinominare il relativo file. Il nuovo modello viene visualizzato nella scheda **Sections** (Sezioni) e nella cartella Sections all'interno della scheda **Templates** (Modelli). A questo punto è possibile aggiungere la sezione a un altro modello.

Report Viewer di Cerity

L'amministratore NDS Cerity imposta il percorso alla directory in cui sono memorizzati i rapporti. Da Report Viewer di Cerity si accede alla directory contenente i rapporti per campioni e sequenze. Il rapporto può essere stampato solo da questa applicazione.

È possibile stampare i rapporti sui metodi dal menu **File** nella finestra Method (Metodo). Il database completa i campi all'interno del modello del metodo e inserisce il rapporto in Report Viewer di Cerity, da cui è possibile stamparlo.



5 Applicazioni per l'amministrazione e la gestione

Impostazione dopo l'installazione [142](#)

Amministrazione del sistema e manutenzione di NDS Cerity [148](#)

Le applicazioni per l'amministrazione e la gestione di NDS Cerity per QA/QC in campo farmaceutico consentono agli amministratori di sistema di impostare e gestire il sistema NDS Cerity del laboratorio. In questo capitolo sono presentati i concetti che consentono agli amministratori di svolgere il proprio ruolo nel laboratorio.



Impostazione dopo l'installazione

Dopo aver installato il software NDS Cerity per QA/QC in campo farmaceutico, l'amministratore deve impostare gli utenti NDS Cerity per l'utilizzo dell'applicazione Cerity per QA/QC in campo farmaceutico.

L'amministratore NDS Cerity deve effettuare le seguenti attività:

Per informazioni su queste attività, vedere la Guida in linea per l'amministrazione del sistema.

- avviare l'applicazione di amministrazione NDS Cerity
- stabilire una connessione al database
- impostare la configurazione bootp solo se il laboratorio non utilizza il protocollo DHCP per gli strumenti
- aggiungere licenze
- verificare che l'installazione sia riuscita
- impostare una stampante predefinita per l'utente dell'assistenza NDS Cerity
- sincronizzare i timbri orari fra le macchine NDS Cerity
- aggiungere utenti
- aggiungere controllori di acquisizione
- aggiungere strumenti
- aggiungere un dispositivo
- salvare le modifiche apportate al database

I concetti illustrati in questa sezione consentono all'amministratore di eseguire queste attività.

Applicazione Administration di NDS Cerity

Utilizzare gli strumenti di configurazione Administration (Amministrazione) di NDS Cerity per gestire il sistema. Selezionare la voce di menu **Cerity Software Administration** da **Start** per accedere alla finestra di configurazione.

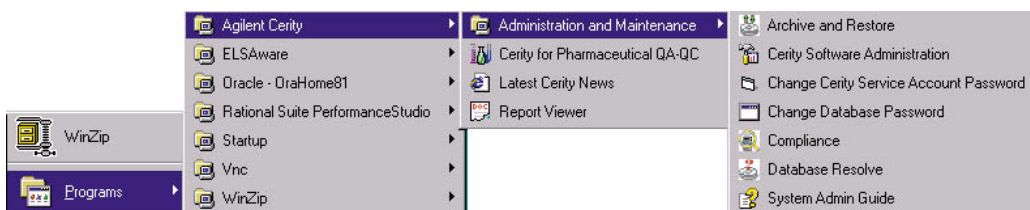


Figura 47 Voce del menu Administration di NDS Cerity

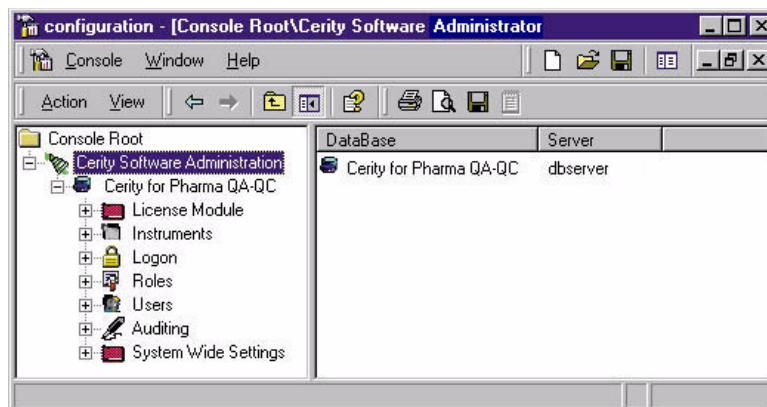


Figura 48 Finestra di configurazione Cerity Software Administration

Collegamento al database

È necessario aggiungere il database gestito dagli strumenti di configurazione Software Administration di Cerity. Fare clic con il pulsante destro del mouse sulla cartella Cerity Software Administration nella finestra principale per aggiungere un database. Dopo l'aggiunta, espandere la cartella del database per accedere a proprietà e impostazioni relative.

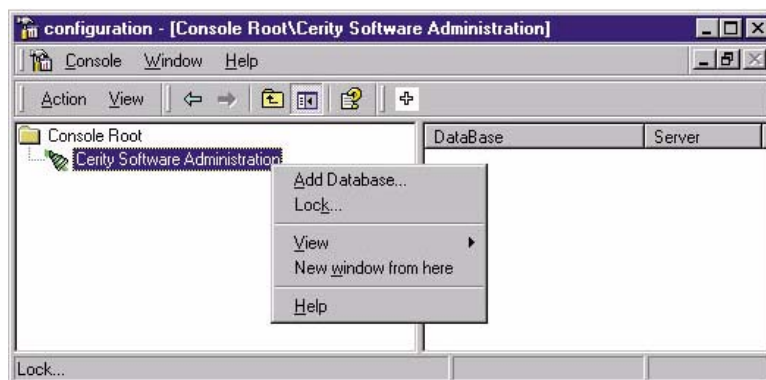


Figura 49 Menu di scelta rapida per l'aggiunta di database

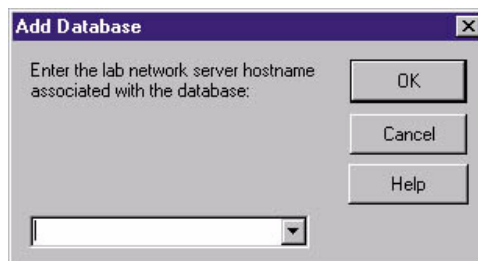


Figura 50 Finestra di dialogo Add Database (Aggiunta database)

Nel caso di installazione singola (NDS Cerity Professional), utilizzare il nome del PC singolo.

Licenze NDS Cerity

Il sistema autorizza un insieme di licenze dimostrative per gli strumenti e i moduli NDS Cerity durante l'installazione. Questo tipo di licenza è temporaneo e non può essere utilizzato per un periodo superiore ai 30 giorni. Prima della scadenza della licenza dimostrativa, è necessario acquistare una nuova licenza da Agilent Technologies. Dopo l'acquisto di una licenza, è necessario ottenerne l'autorizzazione all'utilizzo in base al contratto di licenza.

La cartella **License Module** (Modulo di licenza) consente di:

- visualizzare l'utilizzo della licenza su tutti i moduli installati
- autorizzare l'utilizzo di una licenza
- aggiornare o aggiungere una licenza NDS Cerity

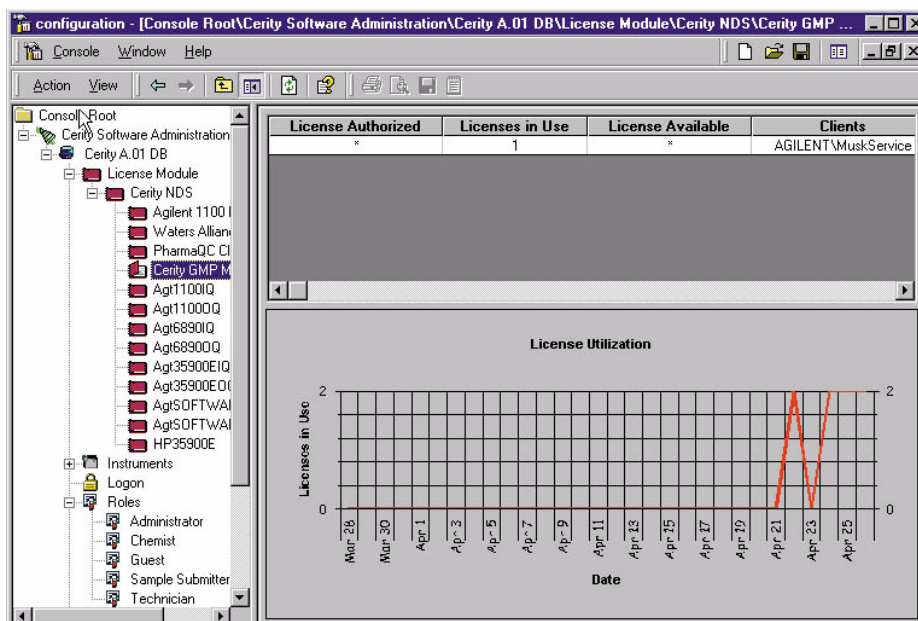


Figura 51 Voce License

Aggiunta di utenti

La cartella Users (Utenti) consente di impostare gli utenti nel sistema NDS Cerity.

È possibile:

- aggiungere utenti
- abilitare e disabilitare gli utenti
- assegnare agli utenti il proprio ruolo corrente
- assegnare agli utenti i relativi diritti di revisione
- assegnare una stampante predefinita ad ogni utente
- copiare gli utenti da un database a un altro

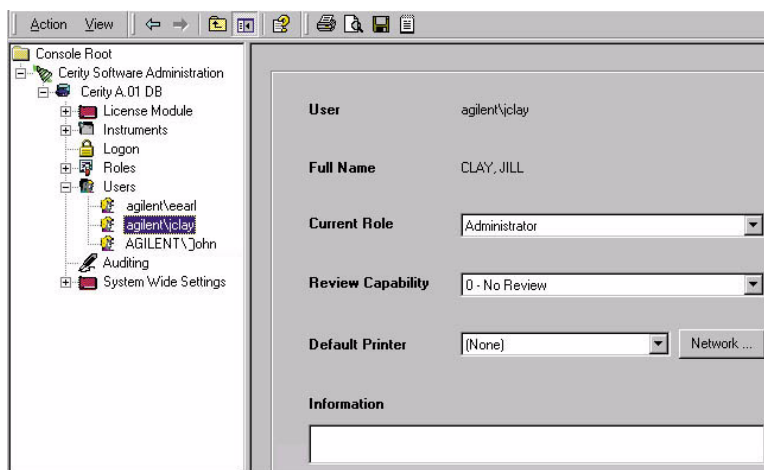


Figura 52 Cartella Users (Utenti)

Aggiunta di strumenti

Utilizzare la cartella Instruments (Strumenti) per aggiungere controllori di acquisizione, strumenti logici e dispositivi. È necessario immettere i parametri per gli strumenti e i dispositivi nell'applicazione Cerity per QA/QC in campo farmaceutico.

È possibile:

- aggiungere ed eliminare controllori di acquisizione
- aggiungere ed eliminare strumenti logici
- aggiungere ed eliminare dispositivi
- modificare le proprietà di collegamento di dispositivi, strumenti e server di acquisizione
- spostare uno strumento logico e i dispositivi collegati su un altro controllore di acquisizione
- arrestare uno strumento

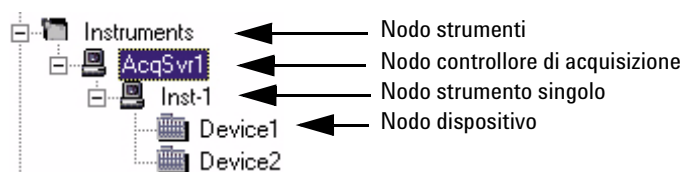


Figura 53 Cartella Instruments (Strumenti)

Amministrazione del sistema e manutenzione di NDS Cerity

Gli amministratori, dopo aver eseguito le attività successive all'installazione, devono gestire il sistema NDS Cerity e possono personalizzarlo secondo le esigenze del loro laboratorio. A tal fine è opportuno che comprendano come gestire le seguenti funzioni di NDS Cerity:

Protezione e audit

Gli amministratori possono effettuare le seguenti operazioni per accertarsi che il sistema sia protetto:

- impostare o modificare la protezione dell'accesso
- modificare la password dell'account NDS Cerity Network Server e per CAGDbAdmin
- limitare l'accesso a Registry Editor
- impostare le autorizzazioni sulle directory NDS Cerity e Oracle
- assegnare ruoli agli utenti per limitarne l'accesso alle funzioni Cerity per QA/QC in campo farmaceutico
- impostare l'audit in modo che il sistema tenga traccia della modifica, dell'utente che l'ha effettuata, della data e del motivo secondo le procedure aziendali.

Formati per tutto il sistema

Gli amministratori possono impostare o modificare i formati numerici o di data e ora per l'intero sistema.

Gestione del database

Gli amministratori possono effettuare le operazioni seguenti per la gestione del database:

- archiviare, ripristinare o eliminare dati
- eseguire il backup del database (possibile impostazione di backup automatico)
- eliminare incoerenze del database dopo il ripristino di dati

Gestione del sistema

Gli amministratori possono effettuare le operazioni seguenti per la gestione del sistema:

- stampare i parametri di impostazione di Software Administration di NDS Cerity
- visualizzare informazioni sull'host NDS Cerity
- verificare lo stato, avviare o interrompere i servizi NDS Cerity

Per informazioni su queste attività, vedere la Guida in linea per l'amministrazione del sistema.

I concetti illustrati in questa sezione consentono all'amministratore di eseguire queste attività.

Protezione e audit

Accesso

La voce Logon (Accesso) nella finestra Cerity Software Administration Configuration (Configurazione amministrazione software) controlla l'accesso al server e ai sistemi client Cerity. Ad esempio, è possibile controllare il numero di utenti che possono accedere al sistema dalla stessa Workstation Windows.

È possibile:

- abilitare e disabilitare la protezione dell'accesso
- consentire la presenza di un solo utente per computer
- consentire la presenza di più utenti per computer client
- impostare il tempo di inattività per bloccare automaticamente l'applicazione per le sessioni utente che condividono lo stesso computer client
- specificare le applicazioni NDS Cerity che possono accedere al database

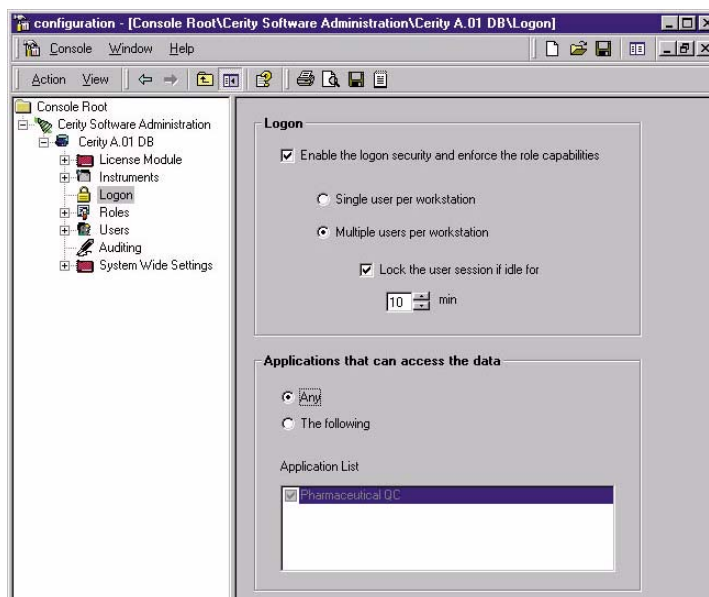


Figura 54 Voce Logon

Cambio delle password

È possibile modificare le password per l'account del server e per il database nell'elenco di strumenti Administration and Maintenance (Amministrazione e manutenzione). A questi due strumenti si accede da **Start**. Selezionare le voci di menu **Change Password** (Cambia password) per visualizzare le rispettive finestre di dialogo.

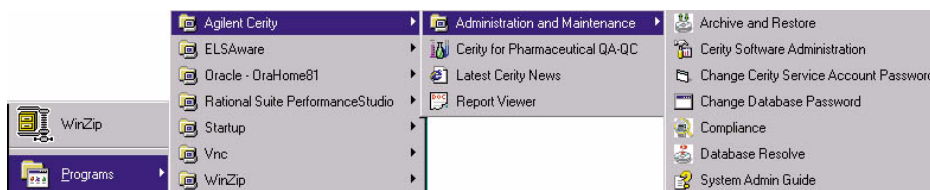


Figura 55 Voci di menu per il cambio della password

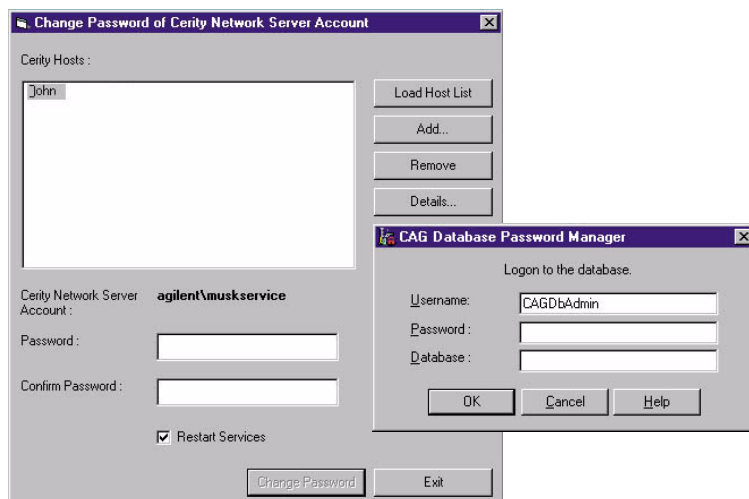


Figura 56 Finestre di dialogo Change Password (Cambio delle password)

Autorizzazioni per le directory NDS Certity e Oracle

La tabella seguente fornisce un breve riepilogo delle importanti directory NDS Certity e Oracle e delle autorizzazioni Windows consigliate per accedervi.

5 Applicazioni per l'amministrazione e la gestione

Amministrazione del sistema e manutenzione di NDS Cerity

Tabella 8 Autorizzazioni per le directory Windows

Nome directory	Utente o gruppo	Autorizzazioni consigliate
Database (ad esempio C:\Database)	EVERYONE	Autorizzazioni condivisione: sola lettura
	Amministratore NDS Cerity	Autorizzazioni condivisione e file system: controllo completo
	Utente di serviziNDS Cerity	Autorizzazioni condivisione e file system: controllo completo
Voce NDS Cerity nel Registro di sistema (HKeyLocalMachine\Agilent\Cerity)	Gruppo di amministratori; EVERYONE	Autorizzazioni condivisione e file system: controllo completo Autorizzazioni condivisione: sola lettura
Oracle\Ora81\Bin	SYSTEM	Autorizzazioni sistema di directory: controllo completo
	Gruppo di amministratori	Autorizzazioni sistema di directory: sola lettura
Oracle\...\Oradata	SYSTEM	Autorizzazioni sistema di directory: controllo completo
	Tutti gli altri utenti	Autorizzazioni sistema di directory: nessuna
Voce Oracle del Registro di sistema (HKeyLocalMachine\Agilent\Cerity)	SYSTEM	Autorizzazioni sistema di directory: controllo completo
	Tutti gli altri utenti	Autorizzazioni sistema di directory: nessuna
Directory Temp del sistema (ad esempio C:\Temp), se determinati servizi non si avviano.	Tutti gli utenti	Autorizzazioni sistema di directory: controllo completo
Cerity\Reports	EVERYONE	Autorizzazioni condivisione: sola lettura
	<ul style="list-style-type: none"> Tutti gli utenti Windows che usano NDS Cerity Tutti i clientNDS Cerity Amministratore NDS Cerity 	Autorizzazioni condivisione: controllo completo
Cerity\Reports\PharmaQC\Templates	EVERYONE	Autorizzazioni file system: sola lettura
	Qualsiasi utente NDS Cerity che debba modificare modelli di rapporto	Autorizzazioni file system: controllo completo
Cerity\Reports\PharmaQC\pharmaqc.dd Dizionario dati: contiene tutti i campi, le variabili e i risultati disponibili per l'utente.	Tutti gli utenti e i gruppi	Autorizzazioni file system: sola lettura
Cerity\Reports\PharmaQC\Reports	EVERYONE	Autorizzazioni file system: sola lettura
	Utente di serviziNDS Cerity	Autorizzazioni file system: controllo completo

Assegnazione dei ruoli

La cartella Roles (Ruoli) consente di impostare capacità di attività per i ruoli predefiniti: Administrator (Amministratore), Chemist (Chimico), Guest (Ospite), Sample Submitter (Operatore) e Technician (Tecnico).

È possibile:

- aggiungere ed eliminare ruoli
- copiare un ruolo e le relative capacità di attività da un database a un altro
- modificare le capacità di attività per un ruolo

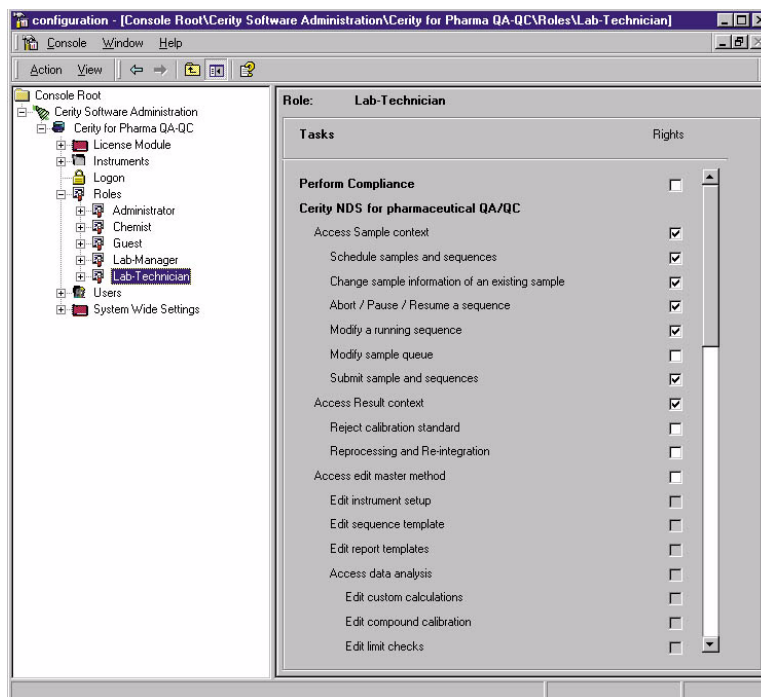


Figura 57 Cartella Roles (Ruoli)

Auditing

NDS Cerity per QA/QC in campo farmaceutico fornisce un insieme di attività che supporta linee guida normative per l'audit di record elettronici. La voce Auditing consente di impostare i requisiti di audit per ogni attività.

È possibile:

- richiedere agli utenti di immettere un motivo per l'audit di un'attività
- limitare i motivi di audit disponibili per gli utenti a quelli impostati dall'amministratore NDS Cerity
- richiedere una firma elettronica per un'attività
- creare un elenco di motivi di audit
- cancellare motivi di audit dall'elenco
- selezionare o deselezionare requisiti di audit per un'attività

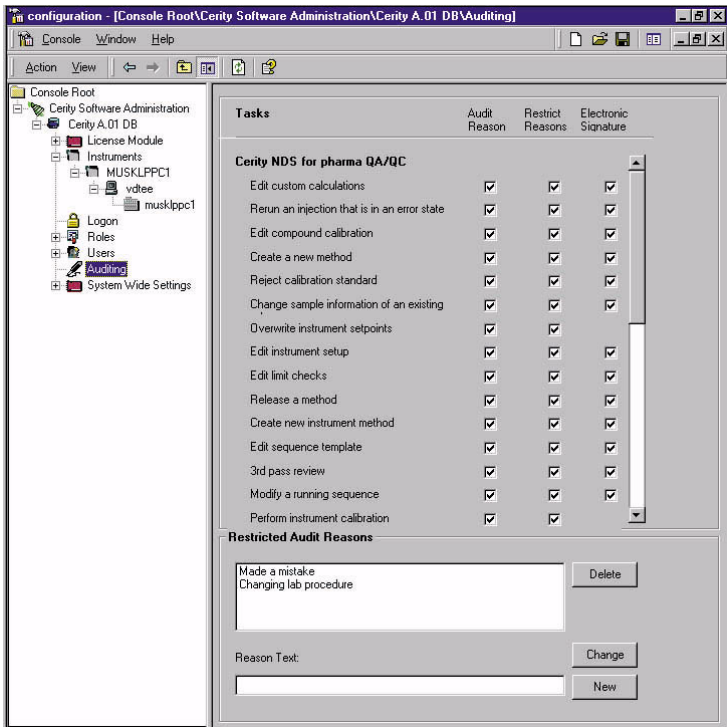


Figura 58 Voce Auditing

Formati numerici e di data per tutto il sistema

Utilizzare la cartella System Wide Settings (Impostazioni globali di sistema) per definire le impostazioni numeriche e di data e ora. Le impostazioni definite nella cartella System Wide Settings si applicano alle voci di campo o ai valori di risultato selezionati, ad esempio l'ampiezza del picco per l'intero database NDS Certity.

Selezionare la cartella System Wide Settings per:

- immettere la precisione decimale delle voci di campo e dei valori di risultato visualizzati nelle tabelle e nei rapporti
- selezionare il formato per sostituire i numeri più grandi della larghezza della cella o del campo
- impostare il formato di data e ora per i dati

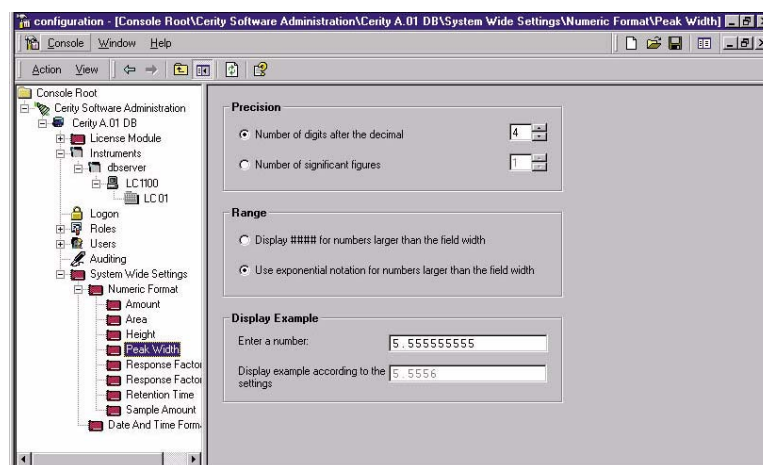


Figura 59 Cartella System Wide Settings (Impostazioni globali di sistema)

Gestione del database

Archive and Restore (Archivio e ripristino)

Utilizzare l'applicazione Archive and Restore per archiviare, ripristinare o eliminare dati presenti nel database. Selezionare la voce **Archive and Restore** (Archivio e ripristino) da **Start** per accedere al primo pannello dell'applicazione.

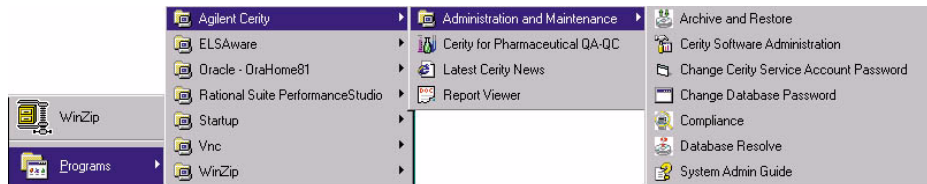


Figura 60 Voce di menu Archive and Restore

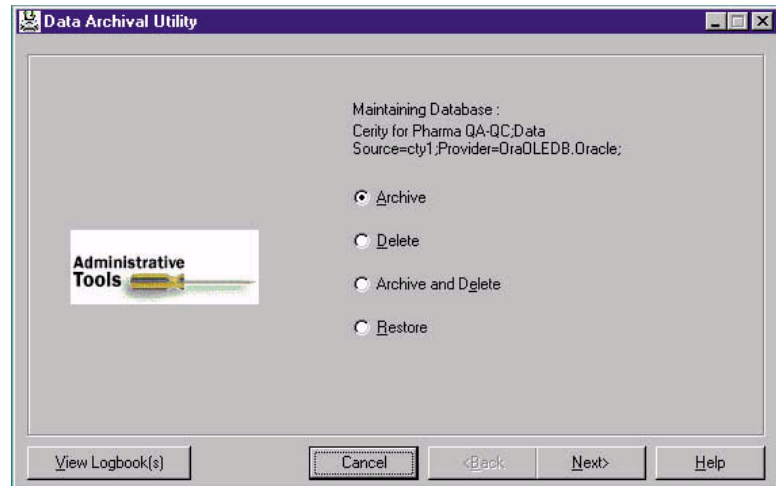


Figura 61 Primo pannello dell'utilità Data Archival (Archiviazione dati)

Ricerca nel database per archiviare o eliminare oggetti L'utilità Data Archival (Archiviazione dati) NDS Cerity consente di salvare su un supporto di archiviazione (disco o altro) oggetti di database, quali campioni e sequenze inseriti, risultati di campioni e sequenze, informazioni su strumenti e metodi. L'utilità di archiviazione può essere utilizzata per la memorizzazione a lungo termine e per spostare i dati da un database a un altro. Dopo aver archiviato i dati, è possibile cancellare dal database i dati vecchi. Questa operazione deve essere eseguita regolarmente per garantire prestazioni ottimali del sistema. Il sistema NDS Cerity memorizza gli oggetti archiviati in directory del file system di Windows.

Per ulteriori informazioni sulla Query wizard (Ricerca guidata), vedere "Ricerche nel database" a pagina 36.

Per trovare gli oggetti da archiviare, l'utilità Data Archival esegue la stessa **Query wizard** (Ricerca guidata) utilizzata dall'applicazione Cerity per QA/QC in campo farmaceutico per trovare gli oggetti da impostare o modificare.

Ripristino di oggetti nel database L'utilità Data Archival ripristina gli oggetti presenti su qualsiasi unità della rete nel file system di Windows nello stesso database o in un altro database della rete.

Quando l'utilità Data Archival ripristina gli oggetti archiviati da un database a un altro, si avvia l'utilità Database Resolve per risolvere le incoerenze tra i database. L'utente deve decidere quali versioni utilizzare se sono presenti duplicati.

Backup NDS Cerity

Il software NDS Cerity comprende anche le utilità Cerity Database Backup e Import (Backup e importazione database), che consentono di creare backup coerenti dei dati. Queste utilità mantengono sincronizzati gli oggetti di database e i file Oracle. In caso di perdita grave di dati, è possibile ripristinare tutti i dati NDS Cerity contenuti nel database prima dell'ultimo backup. L'utilità di backup di Cerity può essere eseguita mentre il database è attivo; il suo utilizzo sospende temporaneamente l'attività senza causare alcun impatto su eventuali sequenze in analisi. Il backup può essere ripristinato con l'utilità di importazione di Cerity.

Agilent consiglia di utilizzare altri programmi di backup e ripristino, quali Veritas Software, per creare processi di backup e di ripristino per i file di oggetti, quindi utilizzare le utilità di backup e di importazione di Cerity per eseguire tali processi. Le utilità di Cerity forniscono un'interfaccia della riga di comando per questo scopo e gestiscono il backup e il ripristino dei file Oracle, mantenendoli sincronizzati con i file di oggetto di Cerity. In questo modo è possibile utilizzare gli strumenti di backup e le SOP secondo i criteri dell'organizzazione.

Stabilire con il rappresentante Agilent NDS Cerity programmi di backup, archiviazione ed eliminazione appropriati per il sistema.

Risoluzione di conflitti di nomi nel database

Tramite l'utilità Database Resolve (Risoluzione database) è possibile risolvere i conflitti di nomi presenti nel database. Selezionare la voce di menu **Database Resolve** da **Start** per avviare l'utilità.

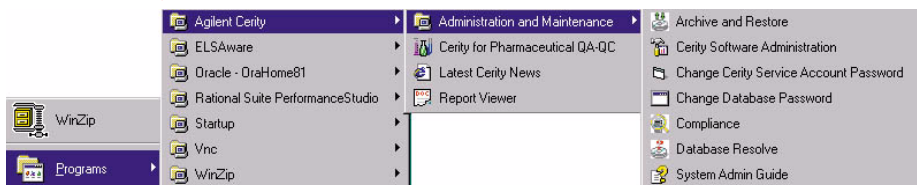


Figura 62 Voce di menu Database Resolve

Dopo l'accesso di un utente, viene eseguita l'utilità e viene visualizzato un messaggio che indica l'assenza di conflitti di nomi o un pannello che riporta i conflitti di nomi da risolvere. Se sono presenti nomi duplicati, è possibile risolvere i conflitti di nomi di ruolo o utente e scegliere di abilitare uno strumento.

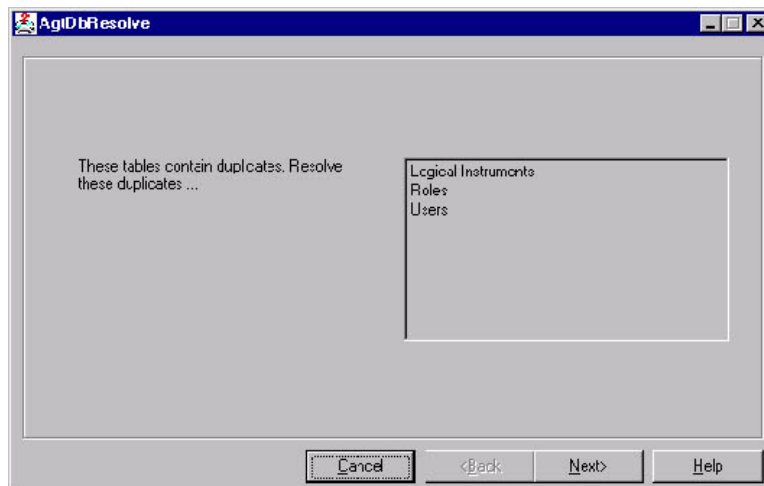


Figura 63 Pannello Database Resolve (Risoluzione database)

L'utilità Archive and Restore avvia automaticamente l'utilità Database Resolve nel tentativo di ripristinare dati da un database a un altro.

Blocco di oggetti

Quando un'applicazione accede ad un oggetto nel database, ad esempio un campione o un metodo, l'oggetto viene automaticamente bloccato. Se il sistema dovesse subire un guasto, il blocco non può essere aperto e l'oggetto rimane indisponibile agli altri computer sulla rete. Nella maggior parte dei casi il riavvio del computer dove si è verificato il guasto consente di recuperare gli oggetti bloccati. Tuttavia, nei casi in cui l'oggetto non venga recuperato riavviando l'applicazione, l'esecuzione di uno dei comandi della funzione di ricerca `lockedobjects.sql` consentirà di recuperarlo.

5 Applicazioni per l'amministrazione e la gestione

Amministrazione del sistema e manutenzione di NDS Cerity

Indice

A

Abort, pulsante, 54
accesso
 database, 150
 protezione, 150
 Sessione, tempo di inattività, 150
 Utente, impostazione, 150
accesso autorizzato, 17
Add Times of Signal, 101
Administrator, 153
Aggiornamento licenza, 145
Agilent ChemStation, file, 61
Amministratore, 14, 17
Analisi
 campioni singoli, 53
 Coda, 54
 interruzione, 53, 54
 interruzione di analisi di sequenza, 54
 modifica sequenza, 55
 ordine, 53
 pausa, 54
 programmazione regole, 53
 registrazione eventi, 55
 ripristino, 54
 sequenza, 53
Analisi di campione, 33
analisi di dati
 calcoli personalizzati, 102
 Calibrazione, 102
 Cromatogramma esemplificativo, 100
 identificazione, 101
 Integrazione, 101
 Limiti, 103
 Quantificazione, 102
Analisi di sequenza, 33
ANDI, file, 61
archiviazione, 14, 149, 156

Assistenza, tecnici, 18
ATCSP, 18
Attività, diritti, 153
Audit
 Firma elettronica, 154
 motivi, 148, 154
 per attività, 154
 per modifica, 148
 requisiti, 154
 Sample Logbook, 40
 selezione di attività, 39
 Sequence Logbook, 40
Audit, traccia
 controllo revisione, 19
 normativa, 19
Autenticazione, 19
Autorizzazione, verifiche, 17
Autorizzazioni, 151
autotest
 finestra, 24, 35
 individuazione, 56
 revisione, 35
 revisioni avanzate, 12
 ricerca, 56

B

Barra degli strumenti
 azione, 26
 guida, 26, 28
 modifica, 27
 standard, 26
Bracketing, calibrazione, 73, 107

C

Calcolatrice personalizzata
 gruppo di campioni, 118

calcoli personalizzati
 aggiunta di colonne, 114
 altri esempi, 124
 analisi di dati, 102
 esempio, 119 to 123
 Foglio di lavoro, 113
 generazione, 111
 impostazione, 110, 119
 nuova formula, 114
 nuova impostazione, 115
 tipi di risultato, 110
 tipo di risultato, 114
 Variabili esistenti, 114
Calcolo, foglio di lavoro, 113, 124
Calcolo, livelli
 gruppo per tipo di campione, 118
 informazioni su, 116
 risultati riassuntivi di più iniezioni, 117
 single injection, 116
Calibrazione
 aggiornamento singolo, 72, 106
 analisi di dati, 102
 bracketing, 73, 107
 bracketing globale, 74, 75, 108
 impostazione, 102
 livello, 104
 quantità fissa, 105
 quantità variabile, 105
 Risposta, fattori, 102, 106, 107
 Ritenzione, tempi, 106
 Sample, 104
 Standard, 102
 tavola, 106
calibrazione specifica per sequenza, 109
Calibrazione, aggiornamento, 49
Calibrazione, modalità
 livello singolo, 104
 multi-livello, 104

Calibrazione, procedure
 calibrazione specifica per
 sequenza, 109
 Strumento, calibrazione specifica, 109
Calibrazione, revisioni della tavola, 72 to
 74
Calibrazione, standard
 media, 106
 Risposta, fattori, 104
Cambio delle password, 151
Campi, 45
campione
 Analisi, 34
 inserimento, 25
 stato, 34
Campione singolo, inserimento
 Instrument, finestra, 49
 Sample, finestra, 49
Campione, analisi, 12
Campione, inserimento, 31
 immissione informazioni nella
 tabella, 50
 Rapporto, destinazione, 132
 salvataggio informazioni, 50
Campione, operatori, 12
Campione, quantità
 modifica, 50
Campione, quantità variabile
 divisori, 50
 moltiplicatori, 50
Campione, registro elettronico, 60
Campione, variabili di, 38, 114
 modifica, 99
 personalizzate, 99
 system, 98
Canale, partner, 18

Cerity
 Amministratore, 14, 17
 Audit, traccia, 19
 componenti, 11
 controller di acquisizione, 11
 Database, server, 11
 modelli, 152
 protezione, 17
 Rapporti, 152
 Revisione, client, 11, 14
Cerity NDS
 utenti, 142
Cerity Report Template Editor
 accesso, 46
 creazione di modelli, 133
 creazione di modelli di rapporto, 13
 editor di testo, 136
 modifica di modelli, 133
 Scheda Fields, 134
 Scheda Sections, 134
 Scheda Templates, 134
 strumenti, 133
Cerity Software Administration
 aggiunta di database, 144
 strumenti di configurazione, 143
Cerity, Database Resolve, 14
Cerity, Report Viewer
 finestra, 13
 rapporti memorizzati, 139
 stampa, 13
Cerity, sistema Client/Server, 8
Cerity, sistema Professional, 8
Cerity, utilità Archive and Restore, 156
Chemist, 153
Cluster, 9
Coda, 54
Collegamento, proprietà, 147
Composite Report Template
 più iniezioni, 135
 sequenza, 135
Composti, tavola di calibrazione, 104
Composto, identificazione
 aggiunta o eliminazione, 101
Condizionali, istruzioni, 118

Conformità, 14, 17
controllore di acquisizione, 15
Corrente, finestra, 22
Cromatogramma esemplificativo
 analisi di dati, 100
 creazione, 100
 utilizzo, 100
Current View (Finestra corrente), 26

D

Data e ora, formati, 148
database
 aggiunta, 144
 incoerenze, 158
 strumenti di configurazione, 144
Database Resolve, utilità, 157
Database, gestione, 149
Database, server, 11
Dati
 archiviazione, 18
 danni, 18
 eliminazione, 149, 156
 incoerenze, 18
 Oggetti, 18
 Tracciabilità, 19
Dati, acquisizione, 11
Dati, dizionario, 152
Dati, layout di revisione
 Anteprima, 128
 tabella dei risultati, 103
Definiti dall'utente
 Risultati, 115
 variabili, 115
Diagramma in tempo reale, 52
Directory, autorizzazioni, 151
dispositivi, 147
Dispositivo, controlli, 18
Dispositivo, valori effettivi, 52
Distribuzione metodo, 93

E

Eliminazione di dati, [14](#)
 Equilibratura
 colonna, [52](#)
 strumento, [52](#)
 Equilibratura, parametri, [52](#)
 eventi iniziali, [101](#)

F

fare, [27](#)
 finestra
 autotest, [24](#)
 corrente, [22](#)
 Method, [25](#)
 Sample, [22](#)
 Firma elettronica
 Audit, [154](#)
 Autenticazione, [19](#)
 contrassegno orario, [19](#)
 credenziali, [19](#)
 motivi per le modifiche, [39](#)
 requisiti, [39](#)
 Fogli di lavoro, relazioni, [124](#) to [126](#)
 Foglio di lavoro, [113](#), [124](#)
 Formati per sistema
 data e ora, [148](#), [155](#)
 numerici, [148](#), [155](#)
 Funzioni, [118](#)

G

Globale, calibrazione in bracketing, [74](#), [75](#),
[108](#)
 Grezzi, dati, [11](#)
 Gruppo per tipo di campione,
 calcolatrice, [118](#)
 Gruppo per tipo di campione, variabili, [115](#)
 Guest, [153](#)

H

Help, menu, [28](#)

I

Impostazione del metodo
 analisi di dati, [12](#)
 calcoli personalizzati, [12](#)
 layout dei risultati, [12](#)
 limite, [12](#)
 mappa, [92](#)
 opzioni, [43](#)
 Rapporto, destinazione, [132](#)
 Rapporto, tipo di, [12](#)
 Stesura di rapporti, [13](#)
 strumento, [12](#)
 Installazione, qualificazione, [18](#)
 Instrument, pannello
 immissione di parametri, [52](#)
 moduli, [52](#)
 Integrazione
 analisi di dati, [101](#)
 eventi iniziali, [101](#)
 modifica cromatogramma, [101](#)
 Sincronizzati, eventi, [101](#)
 Integrazione, strumenti, [69](#)
 Interruzione analisi, [53](#)
 IQ, [18](#)

L

Licenza
 aggiornamento, [145](#)
 aggiunta, [145](#)
 autorizzazione, [145](#)
 utilizzo, [145](#)
 Limiti
 analisi di dati, [103](#)
 impostazione, [103](#)
 tipi di risultato, [103](#)
 Livello singolo, calibrazione, [104](#)
 locked objects, [159](#)

M

mappa
 analisi di campioni di routine, [48](#)
 impostazione di rapporti, [130](#)
 impostazione parametri metodo, [92](#)
 Master, metodo, [93](#)
 Matematiche, funzioni, [118](#)
 Metadati, [11](#)
 Method
 creazione, [43](#)
 distribuzione, [93](#)
 finestra, [25](#)
 master, [93](#)
 Modello, [43](#)
 Parametri, [43](#)
 Registro elettronico, [40](#)
 risultati collegati, [95](#)
 Stesura di rapporti, [103](#)
 voci collegate, [95](#)
 Method Wizard, [43](#)
 metodo
 Dati, layout di revisione, [127](#)
 descrizione, [95](#)
 informazioni su, [96](#)
 Registro elettronico, [96](#)
 Versioni, [96](#)
 versioni precedenti, [96](#)
 Metodo, variabili, [115](#)
 modelli di sequenze, [135](#)
 Modello
 Metodo, [43](#)
 rapporto, [38](#)
 sequenza, [38](#)
 Multi-livello, calibrazione, [104](#)

N

Numerici, formati, [148](#)

O

oggetti, 22, 159
oggetti bloccati, 159
Operativa, qualificazione, 18
OQ/PV, 18

P

Parametri
 analisi di dati, 38
 Method, 43
 Stesura di rapporti, 44
 strumento, 38
password, 14, 148, 151
Pause, pulsante, 54
Personalizzate, variabili del campione, 99, 114
Picchi, sommatoria, 101
Picco, integrazione, 114
Più iniezioni, modelli, 135
Precisione decimale, 155
Predefinito, modello di rapporto, 13
Prestazioni, verifica, 18
Programmazione analisi, 53
protezione
 accesso, 148, 150
 accesso autorizzato, 17
 Cambiamento password, 148
 Directory, autorizzazioni, 148
 Ruoli, 148
Pulsante New (Nuovo), 26

Q

Quantificazione
 analisi di dati, 102
 composti non calibrati, 102
 picchi non identificati, 102
 Risultati, 114
Query Wizard (Ricerca guidata), 26

R

Rapporti
 formato, 137
 generazione, 130
 impostazione, 130
 mappa, 130
 visualizzazione o stampa, 130
Rapporto, componenti
 modelli di sequenze, 135
 Più iniezioni, modelli, 135
Rapporto, destinazione, 50, 51, 132
Rapporto, modello di
 Campi, 13
 creazione, 45, 134
 creazione da modello esistente, 136
 inserimento di elementi, 137
 modifica, 45
 nuovo, 45
 opzioni di formato, 138
 opzioni di salvataggio, 138, 139
 opzioni di stampa, 138
 predefinito, 45
 Recupero di dati, 13
 tabelle, 13
Rapporto, tipi
 impostazione del metodo, 131
 per campione singolo, 131
 per sequenza, 131
Rapporto, tipi predefiniti, 44
Rapporto, tipo di
 generazione, 44
 predefinito, 44
 selezione, 44
 stampa, 44
Record elettronici, 154
Registro, 148
Registro elettronico
 Method, 40
 Sample, 60
 sequenza, 51
Reintegrazione
 eventi iniziali, 69
 eventi sincronizzati, 69
Relazionale, database, 11
Remove, pulsante, 54
Resume, pulsante, 54
Revisione, capacità di, 63
Revisione, client, 14, 15
Revisione, controllo, 19
Revisione, modalità
 revisione non rigida, 63
 revisione rigida, 63
Revisione, numero
 incrementi, 70
 revisione dei risultati, 70
Revisione, stato
 Accepted, 63
 Needs Rework, 63
Ricalibrazione, 104
ricerca, 26
 predefinito, 36
 Risultati, 36
Rielaborazione
 azione, 65
 motivi, ?? to 69
 opzioni, 65
Rielaborazione risultati, 65
Ripristino, 14, 149, 156
Risposta, fattori, 102, 104, 106, 107
Risultati
 approvazione, 62
 approvazione/rifiuto, 61
 autointegrazione, 69
 Campi, 128
 integrazione del composto, 114
 Picco, integrazione, 114
 Quantificazione, 114
 revisione, 61
 rielaborazione, 61
 rifiuto, 62
 variabili, 128
 visualizzazione, 127
Risultati, dati, 11
Risultati, revisione
 campioni singoli, 59
 sequenza, 60
Risultati, revisioni, 70
Ritenzione, tempi, 106

Routine, campioni

Analisi, 48

mappa, 48

Ruoli

Administrator, 153

Chemist, 153

Guest, 153

Sample Submitter, 153

Technician, 153

Ruolo, assegnazione, 153

S

Salvataggio di modifiche nel database, 39

Sample

Analisi, 33

finestra, 22

Sample Submitter, 153

Scelta rapida, menu di, 27

Scheda Fields, 137

Scheda Sections, 137

Scheda Templates, 134

sequenza

Analisi, 33, 34, 53

assegnazione, 31

creazione, 31

impostazione, 25

interruzione, 34

modifica durante un'analisi, 55

pausa, 34

ripristino, 34

stato, 34

Sequenza, inserimento

Instrument, finestra, 50

Sample, finestra, 50

Sequenza, modello, 38, 100

Sample, finestra, 31

Sequenza, opzioni

Rapporto, destinazione, 51

Tasks to perform, 51

Sequenza, registro elettronico, 41, 51

server di acquisizione, 147

Servizi NDS Cerity, 149

Sessione, tempo di inattività, 150

Sincronizzati, eventi, 101

Singola, calibrazione di aggiornamento, 72

Singolo campione, informazioni

immissione nella tabella, 51

Singolo, calibrazione ad

aggiornamento, 106

Singolo, modello di rapporto

Conformità, 134

dispositivo, 134

Method, 134

salvataggio di nuovo rapporto, 135

single injection, 134

Sistema, variabili del campione, 98

Standard, 102

Stesura di rapporti, 44

Strumenti logici, 147

strumento

colonna, 52

finestra, 33

impostazione, 98, 147

Method, 93

Strumento logico, 147

Strumento, calibrazione specifica, 109

Strumento, parametri

impostazione valori, 52

valori in tempo reale, 52

Strumento, registro elettronico, 55

struttura di selezione, 26

Suggerimenti, 28, 29

System suitability

impostazione, 129

iniezioni, 107

Risultati, 129

sono, 129

T

Tasks to perform, 49

Technician, 153

Tracciabilità, 19

traceability, 75

U

Utente, impostazione, 150

Utente, licenza, 8

Utility di controllo della conformità, 18

V

Validazione, servizi, 18

Valori effettivi

dispositivo, 52

variabili

campione personalizzato, 114

gruppo per tipo di campione, 115

Method, 114

Sample, 114

Variabili esistenti, 114

versioni

metodo, 96

precedenti, 96

W

Worklist

attività, 54

stato di analisi, 34

traccia campioni e sequenze, 54

Workstation Windows, 8, 11

X

XML, file, 135

In questo volume

Questa Guida ai concetti presenta un quadro generale del sistema di gestione dati in rete Agilent Cerity per QA/QC in campo farmaceutico allo scopo di:

- Comprendere l'uso dei componenti di NDS Cerity
- Risparmiare tempo chiedendo assistenza in linea

La presente guida contiene le seguenti informazioni:

- Panoramica sul sistema NDS Cerity
- Concetti fondamentali dell'applicazione Cerity per QA/QC in campo farmaceutico
- Concetti di base per l'analisi dei campioni
- Concetti per l'impostazione dei metodi
- Applicazioni per l'amministrazione e la gestione

© Agilent Technologies Deutschland GmbH 2003

Stampato in Germania
5/2003



G4000-94023



Agilent Technologies