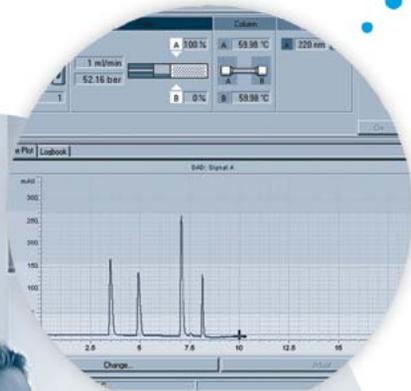
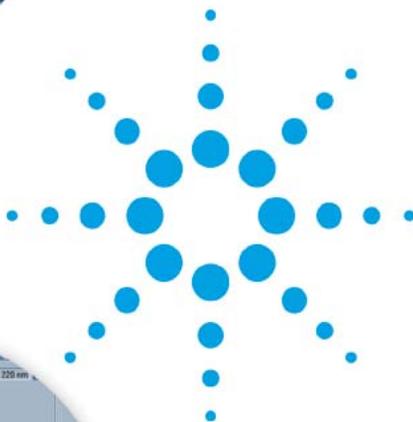
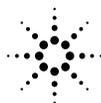




# Sistema de datos en red Cerity de Agilent para control de calidad farmacéutico



**Guía de conceptos**  
**La imagen completa**



**Agilent Technologies**

# Avisos

© Agilent Technologies, Inc. 2003

No se permite la reproducción de parte alguna de este manual bajo cualquier forma y por cualquier medio (incluyendo su almacenamiento y recuperación electrónicos y la traducción a idiomas extranjeros) sin el consentimiento previo por escrito de Agilent Technologies, Inc. según lo estipulado por las leyes de derechos de autor estadounidenses e internacionales.

## Número de referencia del manual

G4000-95023

## Edición

5/2003

Impreso en Alemania

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

Microsoft<sup>®</sup> is a U.S. registered trademark of Microsoft Corporation.

## Revisión de software

Esta guía es válida para las revisiones A.02.xx del software Sistema de datos en red Cerity de Agilent para control de calidad farmacéutico, donde xx hace referencia a revisiones menores del software que no afectan a l.

## Garantía

**El material contenido en este documento se proporciona "tal como es" y está sujeto a modificaciones, sin previo aviso, en ediciones futuras. Además, hasta el máximo permitido por la ley aplicable, Agilent rechaza cualquier garantía, expresa o implícita, en relación con este manual y con cualquier información contenida en el mismo, incluyendo, pero no limitado a, las garantías implícitas de comercialización y adecuación a un fin determinado. En ningún caso Agilent será responsable de los errores o de los daños incidentales o consecuentes relacionados con el suministro, utilización o uso de este documento o de cualquier información contenida en el mismo. En el caso que Agilent y el usuario tengan un acuerdo escrito separado con condiciones de garantía que cubran el material de este documento y que estén en conflicto con estas condiciones, prevalecerán las condiciones de garantía del acuerdo separado.**

## Licencias sobre la tecnología

El hardware y/o software descritos en este documento se suministran bajo una licencia y pueden utilizarse o copiarse únicamente de acuerdo con las condiciones de tal licencia.

## Avisos de seguridad

### PRECAUCIÓN

Un aviso de **PRECAUCIÓN** indica un peligro. Llama la atención sobre un procedimiento de operación, una práctica o similar que, si no se realizan correctamente o no se ponen en práctica, pueden provocar daños en el producto o pérdida de datos importantes. No avance más allá de un aviso de **PRECAUCIÓN** hasta que se entiendan y se cumplan completamente las condiciones indicadas.

### ADVERTENCIA

Un aviso de **ADVERTENCIA** indica un peligro. Llama la atención sobre un procedimiento de operación, una práctica o similar que, si no se realizan correctamente o no se ponen en práctica, pueden provocar daños personales o la muerte. No avance más allá de un aviso de **ADVERTENCIA** hasta que se entiendan y se cumplan completamente las condiciones indicadas.

## En esta Guía...

La Guía de conceptos presenta la “imagen completa” que hay detrás del Sistema de datos en red Cerity para control de calidad farmacéutico que le ayudará a:

- Entender cómo utilizar los componentes de Cerity para control de calidad farmacéutico
- Ahorrar tiempo en preguntas a la ayuda en línea

### **1 Visión general de Cerity NDS para control de calidad farmacéutico**

Descubra cómo trabajan conjuntamente los componentes de Cerity para control de calidad farmacéutico y cómo cumplen las normas.

### **2 Fundamentos de la aplicación Cerity para control de calidad farmacéutico**

Aprenda a utilizar herramientas para analizar muestras, configurar métodos y generar informes.

### **3 Conceptos del análisis de muestras**

Aprenda conceptos que le ayuden a introducir, analizar y revisar resultados de muestras y secuencias.

### **4 Conceptos para la configuración de métodos**

Aprenda conceptos que le ayuden a configurar métodos.

### **5 Aplicaciones de administración y mantenimiento**

Aprenda a utilizar herramientas de gestión para configurar y mantener el sistema Cerity para control de calidad farmacéutico.



# Contenido

<b>1</b>	<b>Visión general de Cerity NDS para control de calidad farmacéutico</b>	<b>7</b>
	¿Qué sistema tiene?	8
	¿Cómo trabajan conjuntamente los componentes de Cerity NDS?	11
	¿Cómo facilita el sistema Cerity NDS el cumplimiento de las normas?	17
<b>2</b>	<b>Fundamentos de Cerity para control de calidad farmacéutico</b>	<b>21</b>
	Las cuatro pantallas: donde realiza la mayor parte de su trabajo	22
	Herramientas básicas para realizar su trabajo	26
	Asistencia en línea	28
	Análisis de muestras	30
	Búsquedas en la base de datos	36
	Edición de métodos	38
	Guardar datos en la base de datos	39
	Configuración de métodos	43
<b>3</b>	<b>Análisis de muestras</b>	<b>47</b>
	Entrada de muestras y secuencias	49
	Preparación del análisis	52
	Programación y auditoría de análisis	53
	Revisión del resultado	56
	Aprobación/rechazo del resultado	62
	Reprocesamiento de métodos calibrados	65

## Contenido

	Revisión de resultados y de tablas de calibración	70
	Revisión y trazabilidad en secuencias	75
<b>4</b>	<b>Configuración de métodos</b>	<b>91</b>
	Conceptos de los métodos Cerity para control de calidad farmacéutico	93
	Secciones de los métodos Cerity para control de calidad farmacéutico	98
	Calibración	104
	Cálculos personalizados	110
	Formato para la revisión de datos	127
	Generación de informes	130
<b>5</b>	<b>Aplicaciones Administration y Maintenance</b>	<b>141</b>
	Configuración posterior a la instalación	142
	Administración y mantenimiento del sistema Cerity NDS	148



# 1

## Visión general de Cerity NDS para control de calidad farmacéutico

¿Qué sistema tiene? 8

¿Cómo trabajan conjuntamente los componentes de Cerity NDS? 11

¿Cómo facilita el sistema Cerity NDS el cumplimiento de las normas? 17

Este capítulo da una visión general de todos los componentes del sistema de datos en red Cerity para control de calidad farmacéutico y de cómo trabajan conjuntamente para ayudarle a realizar sus tareas y cumplir con los requisitos de las normas.

Aprenderá cómo trabajan conjuntamente los tres componentes principales: el servidor de la base de datos, el controlador de adquisición y el cliente de revisión, para satisfacer las necesidades de su laboratorio.



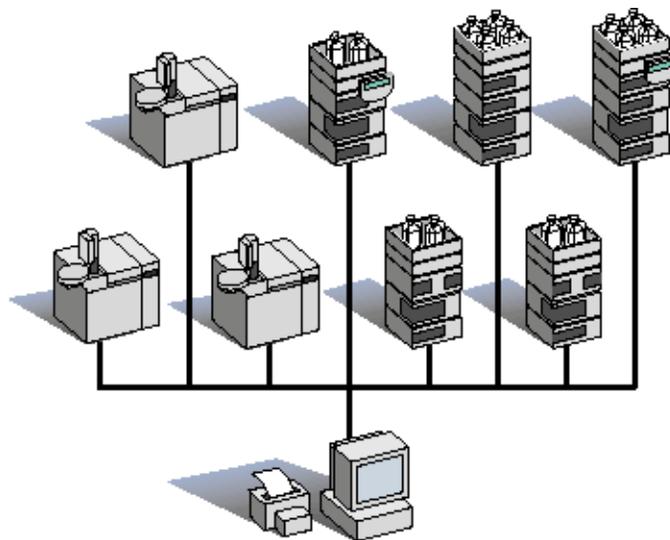
## ¿Qué sistema tiene?

Su sistema Cerity NDS puede ser un sistema profesional o un sistema cliente/servidor.

### Sistema profesional (Agilent G4000AA)

El sistema Cerity NDS profesional se ejecuta en una estación de trabajo Windows.

Aunque el sistema se suministra con cinco licencias de usuario nominado para Oracle, únicamente un usuario de Cerity NDS puede utilizar el sistema cada vez.



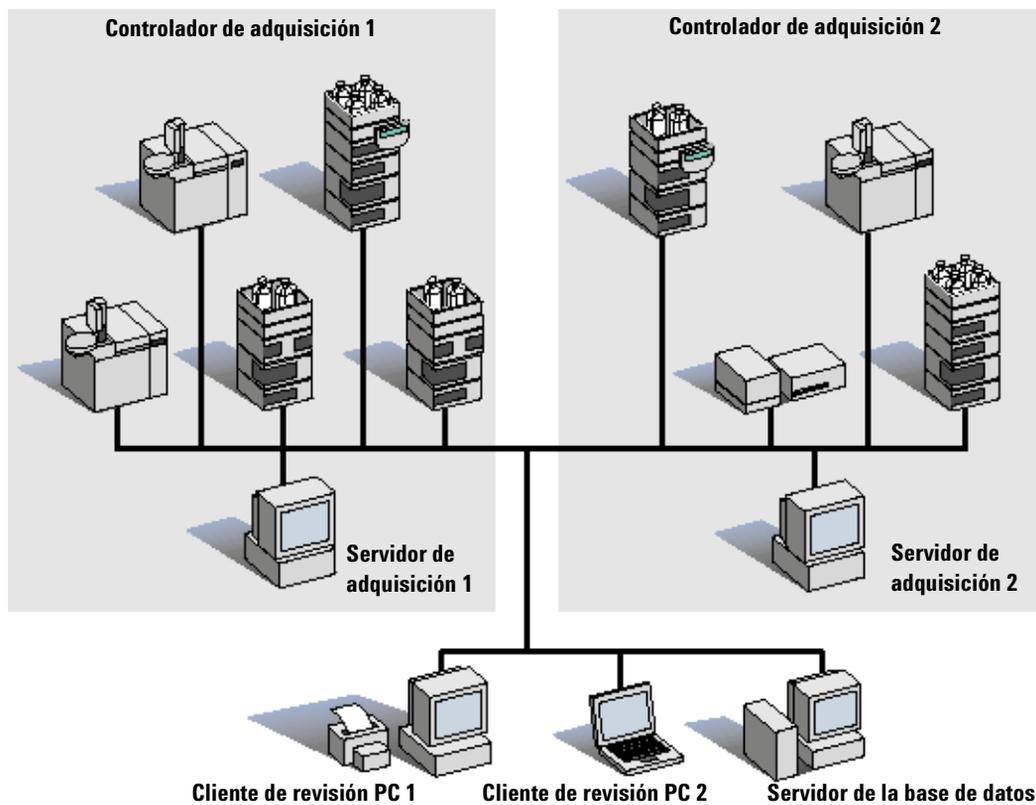
**Figura 1** Sistema profesional Cerity NDS

## **Sistema cliente/servidor (Agilent G4000AA)**

Los componentes del sistema Cerity NDS cliente/servidor se instalan y ejecutan en estaciones de trabajo Microsoft® Windows designadas. El clúster incluye todos los dispositivos de red configurados para el sistema Cerity NDS cliente/servidor como los instrumentos, impresoras y clientes.

Puede configurar tantos usuarios con licencia como necesite en un clúster Cerity NDS. Se asignan licencias separadas a los usuarios de Cerity NDS y al control de los instrumentos. Por cada usuario nominado en el sistema se requiere una licencia de Oracle. Se incluyen cinco licencias de Oracle de usuario con nombre específicas para la aplicación con el sistema cliente/servidor.

**1 Visión general de Cerity NDS para control de calidad farmacéutico**  
¿Qué sistema tiene?



**Figura 2** Sistema Cerity NDS cliente/servidor

## ¿Cómo trabajan conjuntamente los componentes de Cerity NDS?

Los componentes de Cerity NDS proporcionan un marco común para la adquisición, análisis, reprocesamiento y almacenamiento de datos:

- Cliente de revisión para el análisis de muestras, configuración de métodos e informes y administración y mantenimiento.
- Controlador de adquisición para la adquisición de datos, el análisis y el reprocesamiento
- Reprocesamiento de servidores para el reprocesamiento de datos
- Servidor de base de datos para el almacenamiento de datos

El sistema Cerity NDS profesional administra el servidor de base de datos, el controlador de adquisición y el cliente de revisión de Cerity NDS así como la base de datos relacional de Oracle en una única estación de trabajo Microsoft Windows.

El sistema Cerity NDS cliente/servidor distribuye los componentes de Cerity NDS en los servidores o estaciones de trabajo designadas. Los componentes de Cerity NDS ejecutan las mismas operaciones en ambos sistemas.

El sistema puede escalarse completamente.

### **Análisis de muestras, configuración de métodos y generación de informes**

*Véase el Capítulo 2, "Fundamentos de Cerity para control de calidad farmacéutico" para obtener más información sobre los fundamentos de esta.*

El *cliente de revisión* proporciona la interfase de usuario para Cerity NDS.

Esta aplicación permite que los usuarios analicen muestras y configuren métodos e informes.

La base de datos de Cerity NDS almacena todos los datos primarios, metadatos y datos de resultados procedentes de la aplicación Cerity para control de calidad farmacéutico.

## 1 Visión general de Cerity NDS para control de calidad farmacéutico ¿Cómo trabajan conjuntamente los componentes de Cerity NDS?

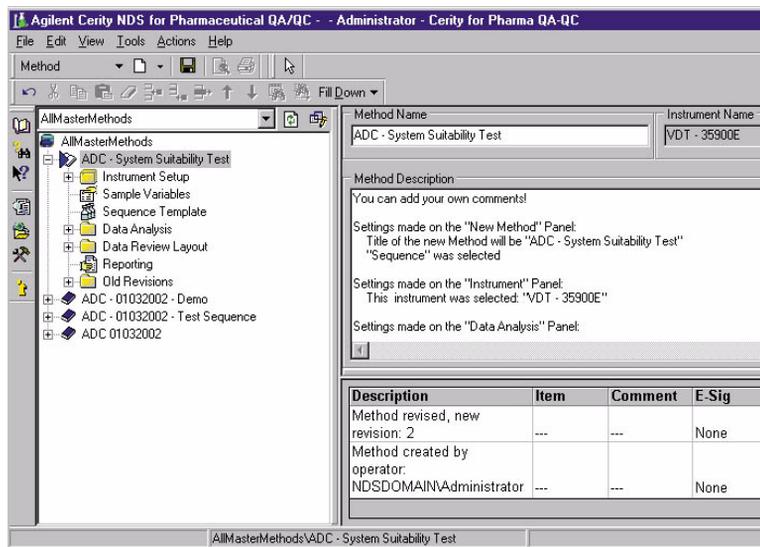


Figura 3 Aplicación Cerity para control de calidad farmacéutico

Consulte el Capítulo 3, "Análisis de muestras" para obtener más información.

Consulte el Capítulo 4, "Configuración de métodos" para obtener más fundamentos sobre la configuración de métodos y la generación de informes.

**Análisis de muestras** Mediante Cerity para control de calidad farmacéutico, los usuarios que envían muestras pueden introducir y analizar muestras y secuencias con métodos desarrollados previamente y revisar los resultados. Los analistas pueden realizar revisiones en detalle y reprocesar los resultados, los administradores pueden firmarlos electrónicamente.

**Configuración de métodos** Utilice la aplicación Cerity para control de calidad farmacéutico para configurar métodos que incluyan parámetros de instrumento, parámetros de análisis de datos, especificaciones de disposición de resultados y selección de tipo de informe. También pueden incluir variables de muestra personalizadas, plantillas de secuencias, fórmulas de cálculo personalizadas y especificaciones de límites.

Los métodos Cerity para control de calidad farmacéutico implementan los parámetros, disposición y cálculos de los monográficos de análisis o SOP. Normalmente se configuran una vez. Los analistas, los usuarios que envían muestras y los técnicos trabajan con estos métodos predefinidos.

**Generación de informes** Cuando configura un método o introduce una muestra, selecciona los tipos de informes que quiere generar durante el proceso. Cuando analiza una muestra o secuencia, el sistema genera informes basados en las plantillas seleccionadas para cada tipo de informe.

La *plantilla de informe* proporciona el formato de los campos y tablas de los informes. Las plantillas obtienen los datos para cada muestra, muestras múltiples o secuencias desde la base de datos.

Puede utilizar las plantillas de informe predeterminadas ya asignadas a los tipos de informe o puede seleccionar otras plantillas de informe que vienen con el sistema. Los usuarios autorizados también pueden crear y editar plantillas con el *Report Template Editor*.

Los usuarios pueden ver e imprimir documentos de informe con el *Cerity Report Viewer*.

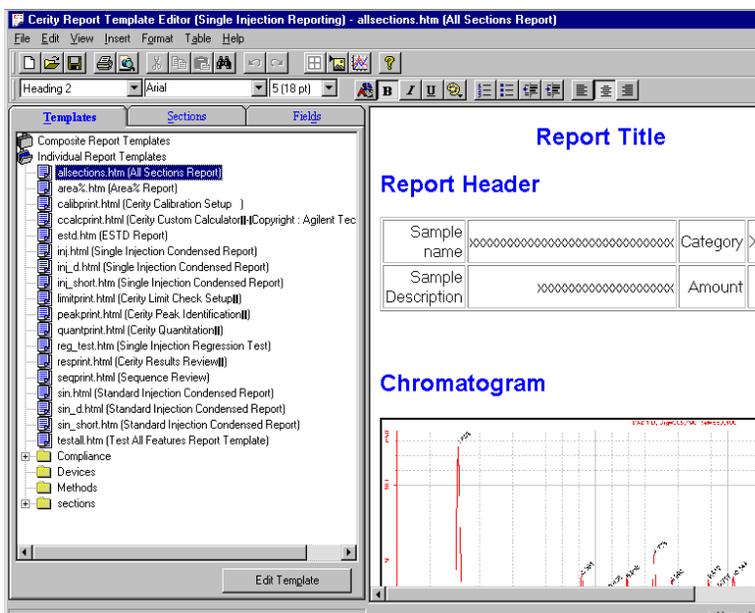


Figura 4 Editor de plantillas de informe

## Administración y mantenimiento

El *cliente de revisión* de Certy proporciona la interfase para que el administrador de Certy NDS gestione el sistema.

**Certy NDS Software Administration** Esta aplicación permite que los administradores configuren licencias, instrumentos, permisos de conexión al sistema, perfiles de funciones, derechos de usuario, auditorías y formatos amplios de sistema.

**Compliance** Esta aplicación posibilita que los administradores o directores de laboratorio verifiquen la instalación de Certy NDS y realicen tests de cualificación en el sistema de datos y en los instrumentos conectados. La licencia para la aplicación Compliance se concede por separado.

**Archive and Restore** Esta utilidad posibilita que los administradores autorizados archiven, restauren o supriman datos de la base de datos.

**Password changes** Estas dos herramientas posibilitan que los administradores cambien las contraseñas (cuenta de base de datos y de servicio) del sistema.

**Database Resolve** Esta utilidad comprueba la existencia de nombres duplicados en las bases de datos tras restaurar datos de otra base de datos.

Consulte el Capítulo 1, “Aplicaciones Administration y Maintenance” para obtener más información sobre estas aplicaciones de Cerity NDS.

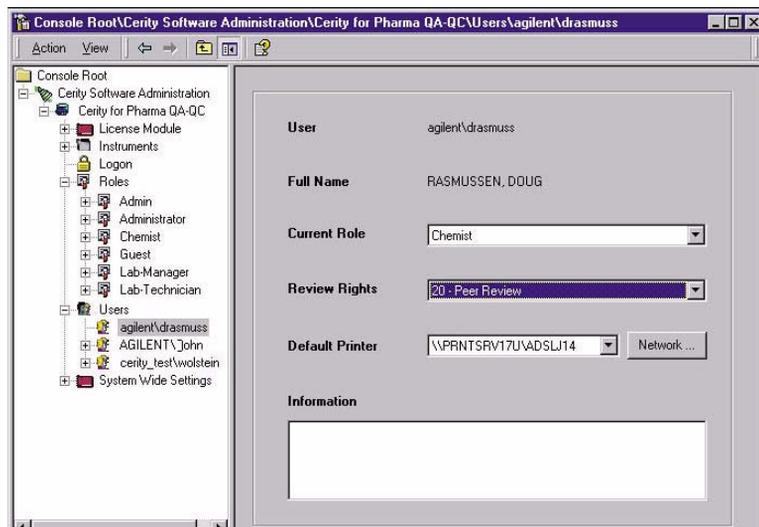


Figura 5 Aplicación Cerity NDS Software Administration

## Adquisición de datos y análisis

El *controlador de adquisición* de Cerity adquiere datos y controla instrumentos en una estación de trabajo Windows. La adquisición de los datos comienza cuando el controlador de adquisición recupera los parámetros de instrumento desde el *servidor de base de datos*.

El *cliente de revisión* proporciona la interfase de usuario para introducir los parámetros de método que el controlador de adquisición utiliza para controlar el instrumento. El controlador de adquisición también puede realizar el análisis de datos y el reprocesamiento.

## 1 Visión general de Cerity NDS para control de calidad farmacéutico ¿Cómo trabajan conjuntamente los componentes de Cerity NDS?

### Reprocesamiento

Cerity NDS utiliza un algoritmo aleatorio para asignar a una máquina de la red para que actúe como un “servidor de reprocesamiento” para un cliente. La selección aleatoria asegura la distribución uniforme de la carga de trabajo en todo el sistema, suponiendo que todos los clientes creen cargas similares. Esta redistribución de la carga ayuda a evitar bajadas de velocidad innecesarias cuando hay muchos usuarios reprocesando resultados al mismo tiempo.

*Consulte la Guía de Instalación para configurar un servidor de reprocesamiento.*

Los controladores de adquisición también actúan como servidores de reprocesamiento. También puede asignar un servidor de reprocesamiento específico para un cliente individual. Agilent recomienda que configure un servidor de reprocesamiento específico por cada 10 usuarios de reprocesamiento simultáneos.

### Almacenamiento de datos

El *servidor de base de datos* Cerity NDS guarda métodos y datos adquiridos. Una vez que se ha completado el análisis, los resultados se guardan en la base de datos. Puede recuperar datos para revisarlos mediante las herramientas de consulta de Cerity NDS.

La cantidad de datos almacenados depende de:

- Cantidad de usuarios simultáneos
- Cantidad de instrumentos simultáneos
- Cantidad de datos accesibles en línea en la base de datos
- Cantidad de muestras procesadas
- Número de ciclos de reprocesamiento (las revisiones y la información del registro de auditoría generadas con cada ciclo aumentan el volumen de datos).

## ¿Cómo facilita el sistema Cerity NDS el cumplimiento de las normas?

*Consulte la Guía de Referencia Técnica para obtener más información sobre el cumplimiento de las normas.*

Esta sección da una visión general de cómo el sistema de datos en red Cerity para control de calidad farmacéutico facilita el cumplimiento de las normas para laboratorios de control de calidad farmacéuticos.

### Acceso autorizado

Cerity NDS utiliza la seguridad del sistema operativo Windows y los perfiles y derechos de perfiles de Cerity NDS para limitar el acceso de usuarios a estas aplicaciones Cerity NDS y a componentes del sistema:

- Cerity Software Administration
- Cerity para control de calidad farmacéutico
- Cerity Compliance
- Cerity Archive and Restore
- Cerity Reports y Report Template Editor

### Comprobaciones de autorización

Cerity NDS para control de calidad farmacéutico cumple los requisitos de la FDA 21 CFR, Parte 11 para el acceso autorizado a tareas de usuario. Las comprobaciones de autorización, basadas en perfiles y en derechos de perfiles asignados, garantizan que únicamente los usuarios autorizados puedan utilizar el sistema. El administrador de Cerity NDS selecciona las tareas de los usuarios basándose en sus perfiles de funciones en el laboratorio y en los derechos asignados de perfil de funciones.

## Datos fiables

Cerity NDS asegura la fiabilidad de los datos de las formas siguientes:

- Proporciona la cualificación operativa y la validación del rendimiento del hardware y aplicaciones específicas del laboratorio de Cerity para control de calidad farmacéutico
- Garantiza que el sistema archiva y recupera adecuadamente datos primarios, metadatos (campos y parámetros) y datos de resultados
- Evita la corrupción de los datos de los objetos de datos al comprobar la falta de coherencia en los mismos
- Preserva la integridad de los datos compartidos y la introducción manual de datos mediante comprobaciones de dispositivos del sistema.

## Utilidad Compliance Check

La utilidad Compliance Check incluye las utilidades de Cualificación de la Instalación y Cualificación Operacional/Verificación del Rendimiento para el hardware y software admitidos.

Las utilidades IQ y OQ/PV están disponibles ambas como producto bajo licencia y como un servicio de Agilent Technologies. La gama de servicios de validación y productos para Cerity NDS incluye los LC 1100, GC 6890, ADC 35900E y la cualificación del sistema de software de Agilent.

Los Profesionales de Servicio certificados por Agilent (Agilent Technologies Certified Service Professionals) (ATCSP), los ingenieros de soporte y los Channel Partners, así como los consultores independientes y los grupos de servicio propios realizan tests de IQ y OQ/PV.

## Comprobación de la identidad de los usuarios

Cerity NDS para control de calidad farmacéutico se asegura de que los usuarios estén autorizados para realizar cambios en los datos:

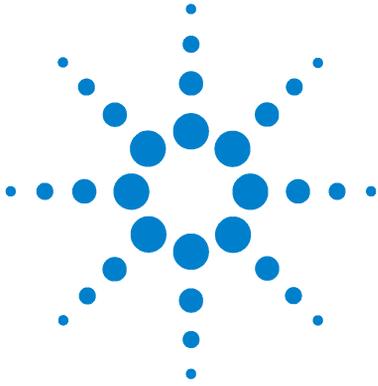
- Las firmas electrónicas se enlazan de forma verificable con sus registros correspondientes para asegurar que no puedan ser suprimidas, copiadas o transferidas para falsificar un registro.
- Se comprueban y estampan con el tiempo las firmas electrónicas de Cerity NDS.
- Cerity NDS requiere siempre que los usuarios introduzcan su nombre de usuario y su contraseña para acceder a la aplicación para el control de calidad farmacéutico.

## Trazabilidad de los datos

La FDA 21 CFR parte 11.10e requiere un registro de auditoría para “las acciones que creen, modifiquen o supriman un registro electrónico”. El registro de auditoría del sistema de datos en red Cerity proporciona:

- Evidencia de quién ha hecho qué a un registro y cuándo
- Un registro de todos los cambios en los datos sin interferir con los datos originales
- Un control de revisión estricto que proporciona una retención automática de las revisiones previas de los datos almacenados

**1 Visión general de Cerity NDS para control de calidad farmacéutico**  
¿Cómo facilita el sistema Cerity NDS el cumplimiento de las normas?



## 2 Fundamentos de Cerity para control de calidad farmacéutico

Las cuatro pantallas: donde realiza la mayor parte de su trabajo	22
Herramientas básicas para realizar su trabajo	26
Asistencia en línea	28
Análisis de muestras	30
Búsquedas en la base de datos	36
Edición de métodos	38
Guardar datos en la base de datos	39
Configuración de métodos	43

Este capítulo presenta las características y conceptos principales de la aplicación Cerity NDS para control de calidad farmacéutico. Consulte la información básica para ayudarle en la toma de una muestra desde su introducción hasta la generación de informes. Consulte los capítulos 4 y 5 para conocer más conceptos sobre la configuración de métodos y el análisis de muestras. Este capítulo le ayudará a completar los ejercicios de las *Getting Started Cards*.



## 2 Fundamentos de Cerity para control de calidad farmacéutico

Las cuatro pantallas: donde realiza la mayor parte de su trabajo

# Las cuatro pantallas: donde realiza la mayor parte de su trabajo

Cerity NDS guarda “datos” en una base de datos. Estos “datos” se componen de datos primarios y resultados calculados con todos los metadatos necesarios como: parámetros, campos, fórmulas y configuraciones, para cuatro “objetos” primarios en la base de datos: muestras y secuencias introducidas, instrumentos, resultados de muestras y de secuencias y métodos.

## Pantalla Sample

La pantalla Sample proporciona un espacio de trabajo para introducir muestras y configurar secuencias. Puede acceder a la pantalla Sample desde la opción **Sample** en la lista Current View.

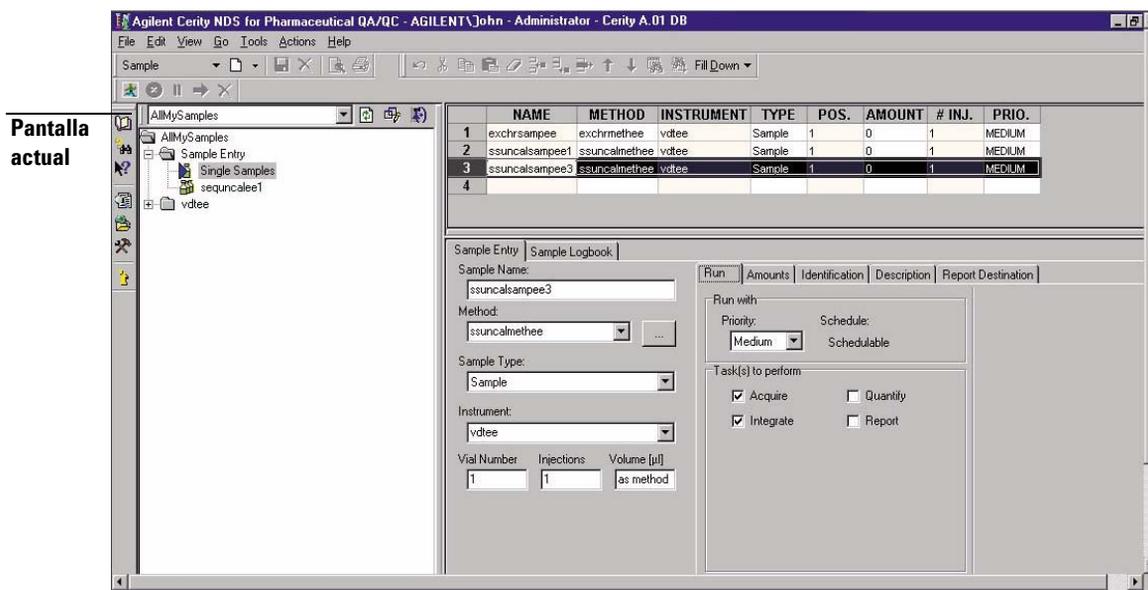


Figura 6 Pantalla Sample

## Pantalla Instrument

La pantalla Instrument proporciona un espacio de trabajo para ver el estado de un instrumento. Puede analizar muestras y secuencias y seguir su estado de análisis desde la pantalla Instrument. Puede acceder a la pantalla Instrument desde la opción **Instrument** de la lista Current View.

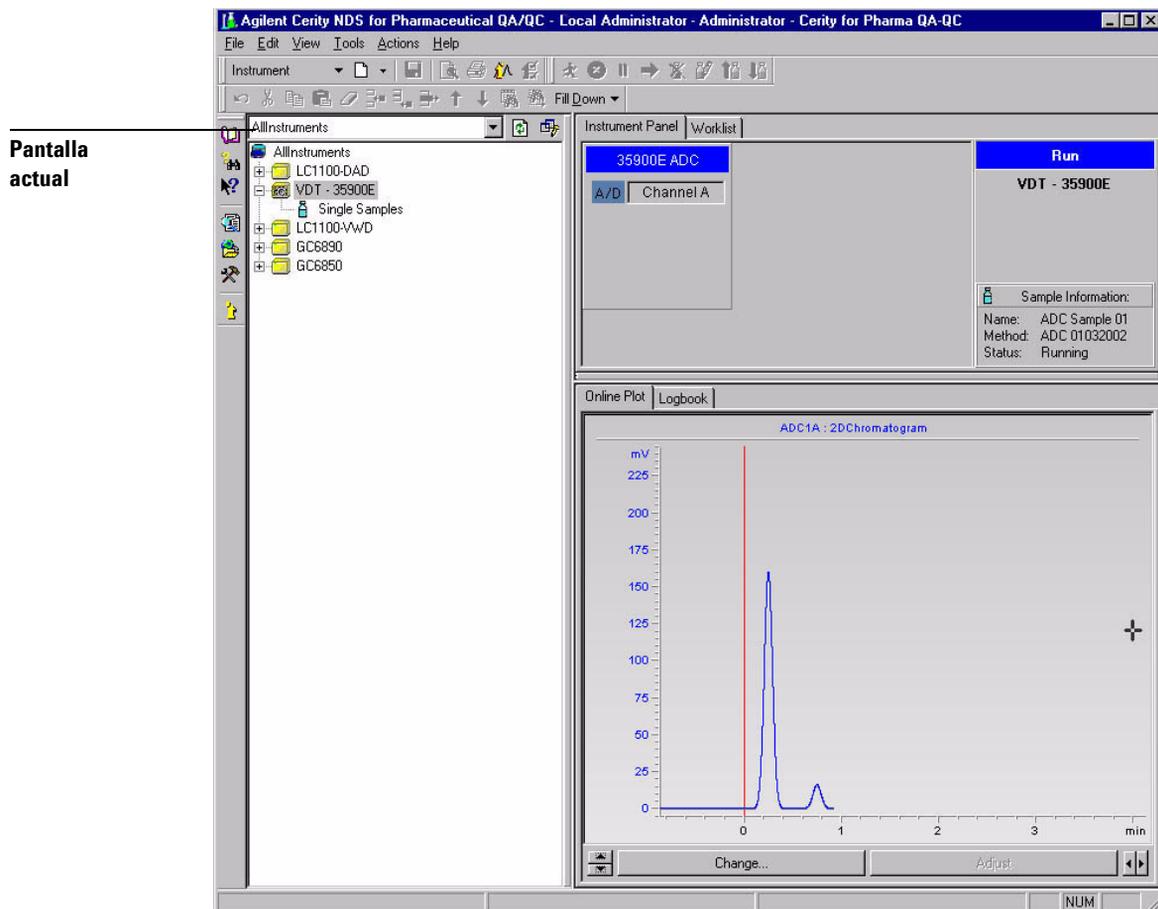


Figura 7 Pantalla Instrument

## 2 Fundamentos de Cerity para control de calidad farmacéutico

Las cuatro pantallas: donde realiza la mayor parte de su trabajo

### Pantalla Result

La pantalla Result proporciona un espacio de trabajo para revisar y reprocesar muestras y secuencias. Puede acceder a la pantalla Result desde la opción **Result** en la lista Current View.

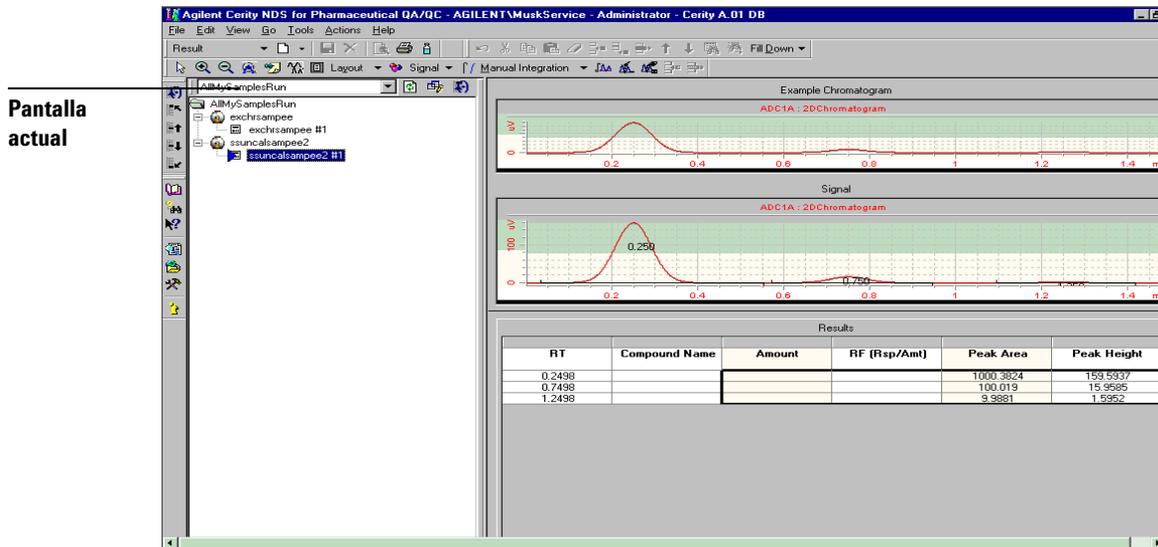


Figura 8 Pantalla Result

## Pantalla Method

La pantalla Method proporciona un espacio de trabajo para configurar métodos e informes. Puede acceder a la pantalla Method desde la opción **Method** en la lista Current View.

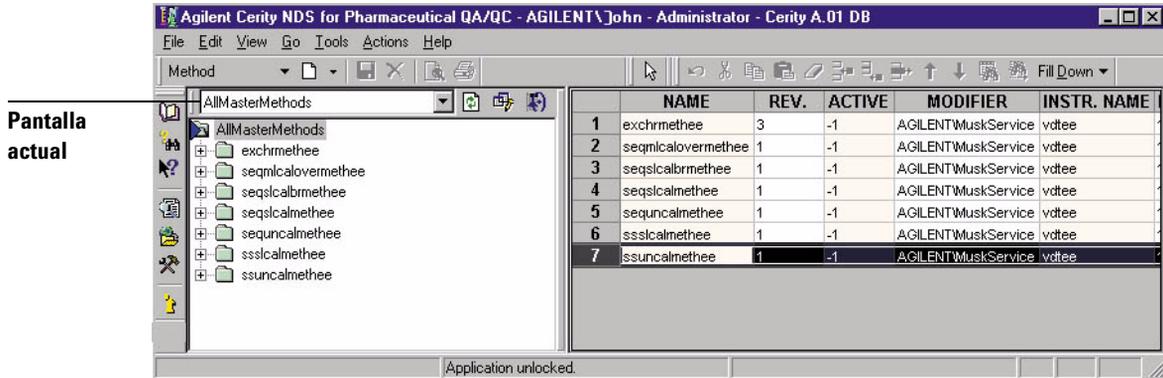


Figura 9 Pantalla Method

## Herramientas básicas para realizar su trabajo

Puede encontrar las herramientas para realizar su trabajo en la barra de menús y en la barra de herramientas de la Pantalla Current. Haga clic con el botón derecho del ratón sobre una tabla o gráfico para acceder a herramientas adicionales.

**Barra de herramientas estándar:** herramientas para la pantalla Current y el botón "New".

**Botón "New":** puede crear una plantilla de método, una secuencia o una consulta.

**Selección de pantalla Current:** seleccione aquí una de las cuatro pantallas.

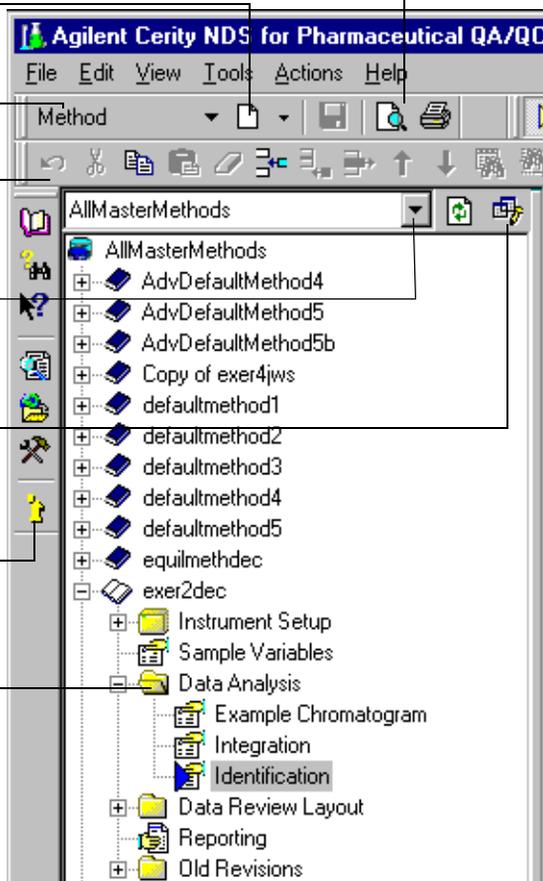
**Barra de herramientas Edit:** las herramientas de la barra de herramientas Edit aparecen siempre atenuadas a menos que puedan aplicarse al espacio de trabajo.

**Lista de consultas:** seleccione un grupo de muestras, instrumentos, métodos o resultados de la base de datos para mostrarlos en el árbol de selección.

**Botón Asistente de consulta:** defina una nueva consulta de muestras, instrumentos, métodos o resultados para recuperarlos desde la base de datos.

**Barra de herramientas Help:** aquí encontrará la ayuda que necesite.

**Árbol de selección:** expanda una carpeta o seleccione un elemento del árbol de selección para configurar o editar datos en el espacio de trabajo.

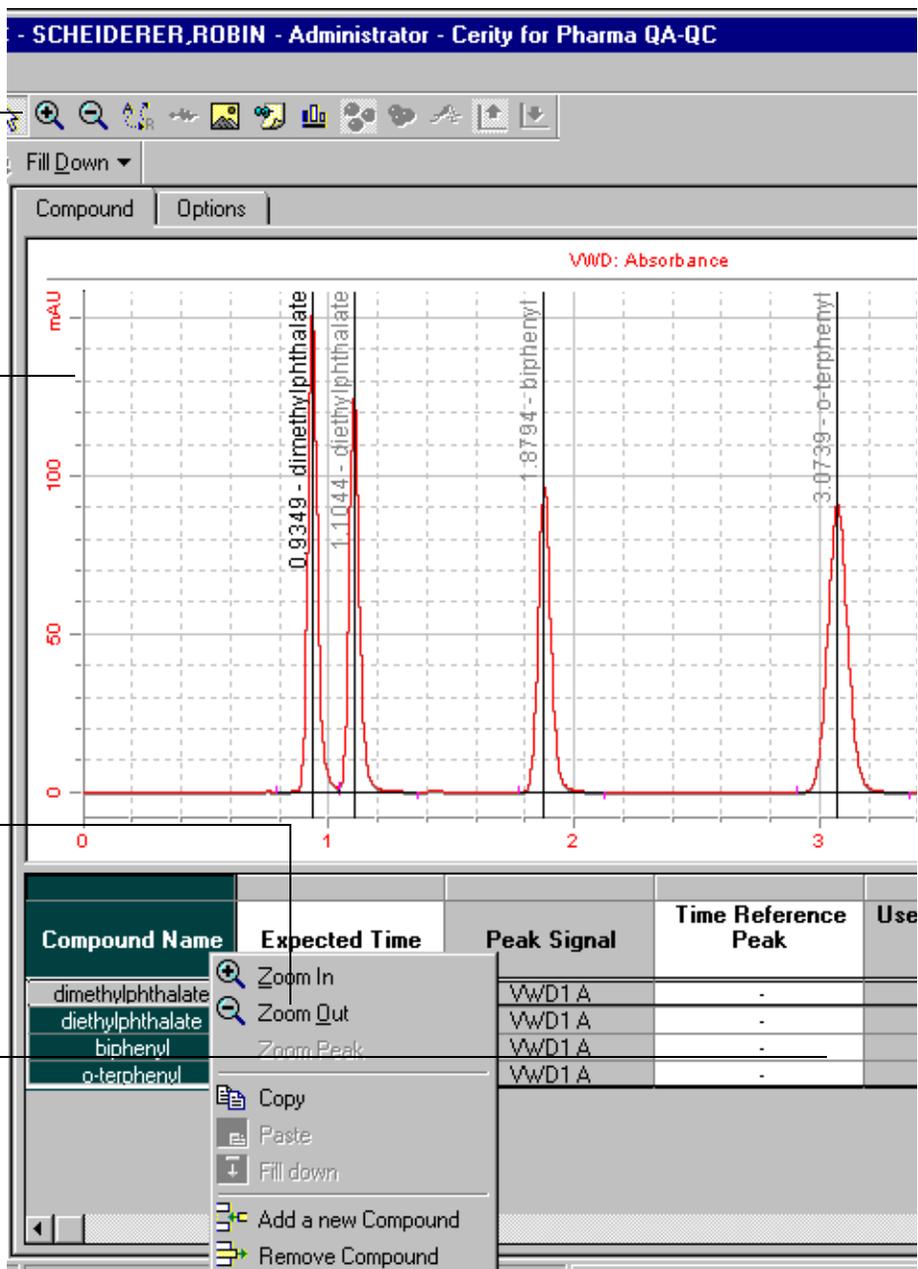


Herramientas o barra de herramientas Action: para modificar una tabla o realizar una tarea en el espacio de trabajo.

Espacio de trabajo: utilice barras de herramientas y comandos para mostrar o modificar tablas, gráficos, cuadros de diálogo o listas

Menú de contexto: haga clic con el botón derecho sobre una celda de la tabla para mostrar un menú de acceso directo para modificar la tabla.

Lista desplegable: seleccione una celda de la tabla para acceder a una lista.



## Asistencia en línea

Puede encontrar asistencia para cada pantalla en las áreas siguientes:

- Barra de herramientas Help
- Menú Help
- ToolTips

### Barra de herramientas Help

Puede ver la descripción de los iconos en la barra de herramientas Help que se muestra a continuación:

**Contents:** este botón le lleva al sistema de Ayuda en línea. Utilice las herramientas Table of Contents, Index, Glossary y Search para encontrar las tareas How To y obtener ayuda en la pantalla, cuadro de diálogo o asistente en el que se encuentre

**Search:** la herramienta Search le ayuda a encontrar el tema que le interese

**What's This?:** - Cuando el puntero se convierte en un signo de interrogación, haga clic dentro de la pantalla, cuadro de diálogo o asistente para obtener ayuda para esa interfase de usuario. Esta ayuda se denomina User Interface Help en el árbol de selección Contents

**Online Books:** puede acceder a la documentación de Cerity en forma de archivo Acrobat Portable Document Format (PDF)

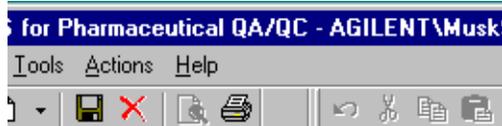
**Other Resources:** este botón enlaza con la página web de Agilent para encontrar recursos como consumibles y asistencia técnica

**SOPs:** cuando ha sido configurado por el administrador del sistema, este botón lleva a los SOP del laboratorio o a otra dirección de su intranet



## Menú Help

Puede acceder a la ayuda desde la barra de herramientas Help del menú Help.



## Barra de herramientas ToolTips

Desplace el puntero del ratón por encima del botón de la barra de herramientas para mostrar su nombre.



## Análisis de muestras

Consulte el Capítulo 3, "Análisis de muestras" para obtener más información.

Con las pantallas Sample, Instrument y Result de Cerity para control de calidad farmacéutico, puede introducir muestras, configurar secuencias, analizar muestras individuales o secuencias y revisar y reprocesar resultados.

### Entrada de muestras únicas

Puede introducir muestras una por una en la pantalla Sample. Utilice muestras únicas si el análisis no requiere recalibraciones específicas según la secuencia o cálculos de grupos.

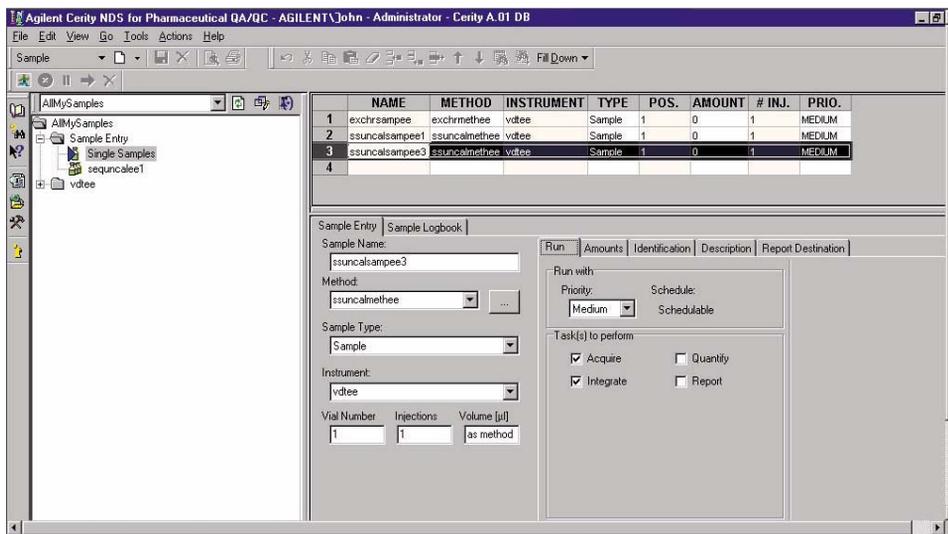


Figura 10 Entrada de muestras para muestras únicas

## Configuración de secuencias

Cree primero una secuencia nueva y, a continuación, asígnela a un instrumento y a un método. Una vez que haya creado una secuencia nueva, aparecerá en la pantalla Sample.

Consulte el Capítulo 4, "Configuración de métodos" para obtener más detalles sobre plantillas de secuencias en el método.

También aparecerá la plantilla de secuencia que se configuró en el método utilizado para su secuencia. Puede cambiar nombres de muestras, identificaciones de LIMS, cantidades, pesos o concentraciones en la plantilla de secuencias.

The screenshot displays the Agilent Cerity NDS software interface. The main window is titled "Agilent Cerity NDS for Pharmaceutical QA/QC - Local Administrator - Administrator - Cerity for Pharma QA-QC". The interface is divided into several sections:

- Sequence Table:** A table listing various samples and their configurations. The columns include Sample Name, Sample Type, Cal. Level, Custom Sample Group, Vial #, Injections #, Injection Volume [µl], Sample Amount, Multiplier, Dilution, and Purity.
- Sample Entry:** A form for configuring a specific sample. It includes fields for Sample Name (e.g., "Calib. Sample 01"), Sample Type (e.g., "Calibration Standard"), Custom Sample Group, Vial Number, Injections, and Volume [µl].
- Run Parameters:** A section for configuring the run parameters, including Calibration Mode (e.g., "Single Update"), Calibration Level, Response Update (e.g., "Average"), and Retention Time Update (e.g., "Average").

Sample Name	Sample Type	Cal. Level	Custom Sample Group	Vial #	Injections #	Injection Volume [µl]	Sample Amount	Multiplier	Dilution	Purity
1	Calib. Sample 01	Calibration		1	1	as method	0	1	1	1
2	Calib. Sample 02	Calibration		2	1	as method	0	1	1	1
3	Sample 01	Sample		4	1	as method	0	1	1	1
4	Sample 02	Sample		5	1	as method	0	1	1	1
5	Sample 03	Sample		6	1	as method	0	1	1	1
6	Sample 04	Sample		7	1	as method	0	1	1	1
7	Sample 05	Sample		8	1	as method	0	1	1	1
8	Control Sample	QC Sample		3	1	as method	0	1	1	1
9	Calib. Sample 01	Calibration		1	1	as method	0	1	1	1
10	Calib. Sample 02	Calibration		2	1	as method	0	1	1	1
11	Sample 06	Sample		9	1	as method	0	1	1	1
12	Sample 07	Sample		10	1	as method	0	1	1	1
13	Sample 08	Sample		11	1	as method	0	1	1	1
14	Sample 09	Sample		12	1	as method	0	1	1	1
15	Sample 10	Sample		13	1	as method	0	1	1	1
16	Control Sample	QC Sample		3	1	as method	0	1	1	1
17	Calib. Sample 01	Calibration		1	1	as method	0	1	1	1

Figura 11 Tabla de secuencias en la pantalla Sample

## Preparación del instrumento

La pantalla Instrument le permite supervisar la situación general del instrumento: estado, presión o temperatura; ejecutar informes de diagnóstico y equilibrar el sistema, por ejemplo, purgar la bomba o conectar la lámpara UV-visible del detector.

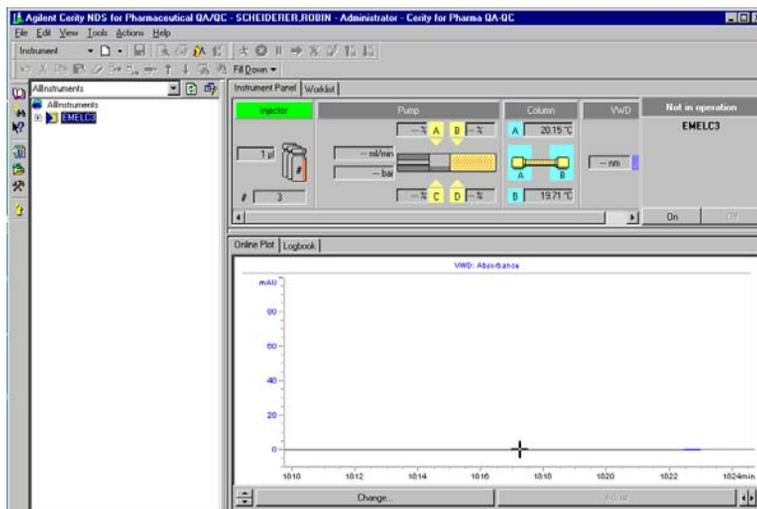


Figura 12 Pantalla Instrument

## Análisis de muestras o secuencias

Puede analizar muestras y secuencias tanto en la pantalla Sample como en la Instrument. Cuando hace clic sobre el botón **Run**, el sistema envía la tarea de análisis al programador de Cerity para control de calidad farmacéutico.

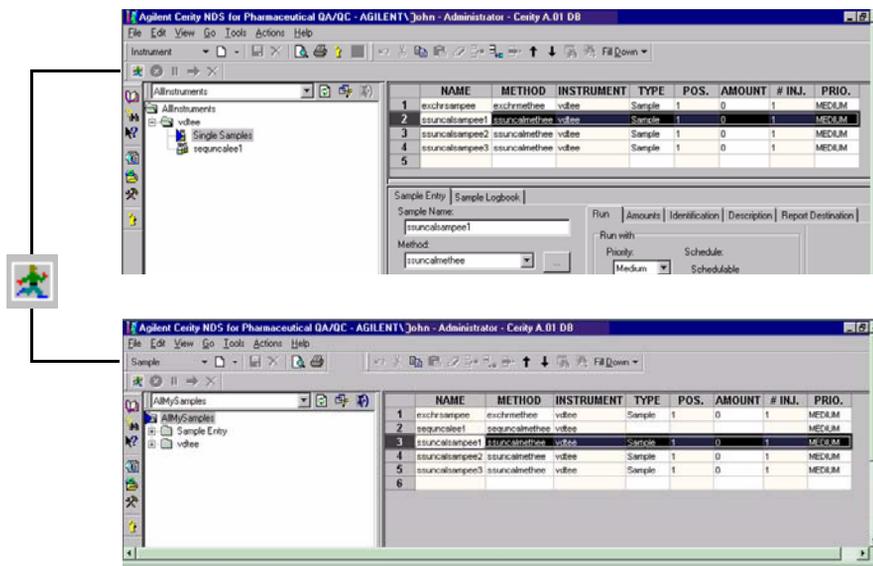


Figura 13 Barra de herramientas Run

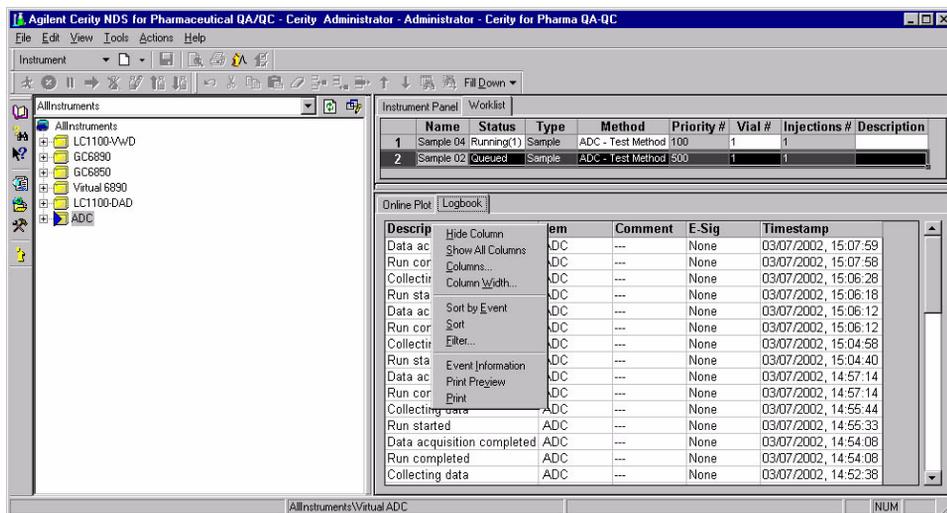
## Estado de las muestras y de las secuencias

Una vez haya comenzado el análisis, la aplicación elimina los análisis de la muestra única y de las secuencias de las pantallas Instrument y Sample. Ahora, los análisis aparecen en la lista de trabajo y las inyecciones completadas aparecen en la pantalla Result.

En la lista de trabajo **Worklist** de la pantalla Instrument, puede ver el estado de una muestra individual, de un grupo de muestras individuales, de una secuencia y de una serie de secuencias de un análisis.

También puede parar, hacer pausas y reanudar una secuencia, una serie de secuencias y un grupo de muestras en la lista de trabajo.

Cuando realiza una pausa en una secuencia, el sistema acaba el análisis de la muestra actual antes de que el usuario reanude el inicio del análisis de la muestra siguiente de la secuencia.



The screenshot shows the 'Agilent Cerity NDS for Pharmaceutical QA/QC - Cerity Administrator' window. The 'Instrument Panel' is active, displaying a 'Worklist' table with the following data:

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	

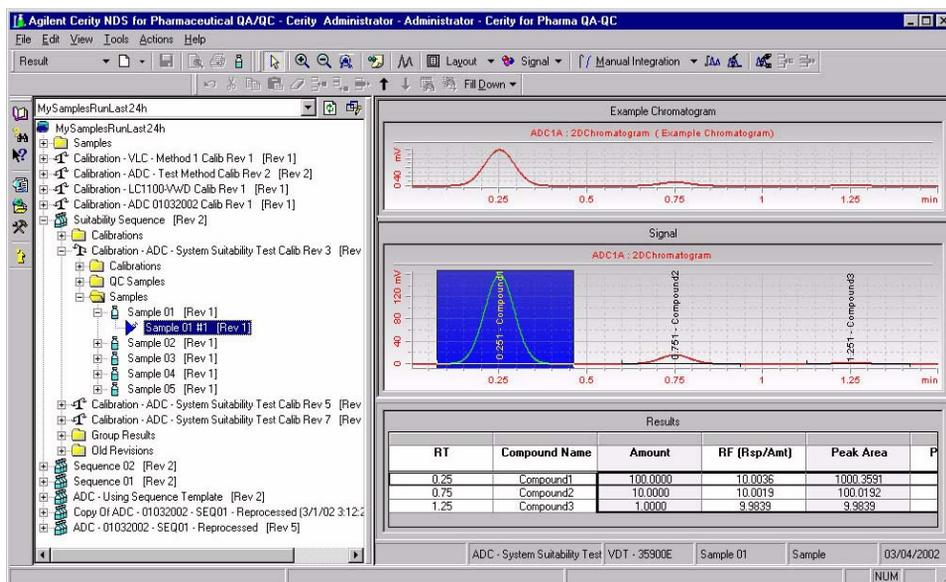
Below the Worklist table is an 'Online Plot | Logbook' section with a table of events:

Descrip	em	Comment	E-Sig	Timestamp	
Data ac	Hide Column	ADC	---	None	03/07/2002, 15:07:59
Run cor	Show All Columns	ADC	---	None	03/07/2002, 15:07:58
Collecti	Columns...	ADC	---	None	03/07/2002, 15:06:28
Run sta	Column Width...	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	Print	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	None	03/07/2002, 14:54:08
Run completed	ADC	---	None	None	03/07/2002, 14:54:08
Collecting data	ADC	---	None	None	03/07/2002, 14:52:38

Figura 14 Lista de trabajo de muestras o secuencias

## Revisión de resultados

Seleccione los resultados que necesite revisar del árbol de selección de la pantalla **Result**. Necesitará saber cómo están organizados los resultados en el árbol de selección. Si no ve el resultado, es posible que tenga que seleccionar un resultado de búsqueda (consulta) de la lista situada encima del árbol de selección o realizar una búsqueda en la base de datos.



**Figura 15** Pantalla Result

En la pantalla **Result**, también puede realizar cambios en los resultados y reprocesarlos. O bien, tras cambiar de método, puede reprocesarlos con la revisión más actual del método. Y puede reprocesar los resultados con un método diferente.

En la pantalla **Result**, también puede aceptar o rechazar resultados con el nivel de autorización otorgado por el administrador.

## Búsquedas en la base de datos

Para revisar o reprocesar resultados, debe encontrar primero los que le interesen.

### Consultas de resultados

Para ver resultados de la base de datos, consulte el sistema. Cerity NDS ya viene con consultas predeterminadas para ayudarle a comenzar.

- Seleccione una consulta de la **Query List** (lista) situada por encima del árbol de selección y vea los resultados ya creados mediante el **Query Wizard** (asistente de consulta).
- Si usted es un usuario avanzado, también puede definir sus propias consultas personalizadas con el **Query Wizard** (asistente de consulta). El usuario define consultas al configurar criterios de búsqueda en la base de datos de resultados que desee ver.

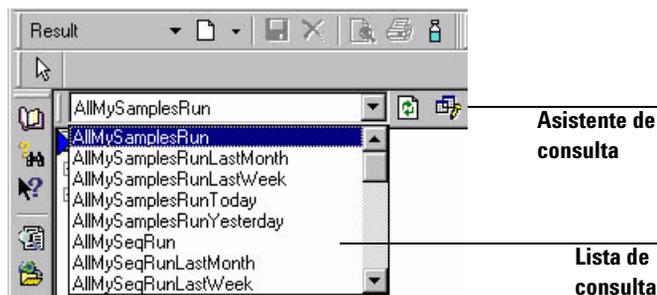


Figura 16 Lista de consulta y asistente de consulta

### Consultas de métodos

Puede seleccionar consultas para encontrar métodos que quiera editar.

### Otras consultas

También puede buscar un conjunto definido de muestras o secuencias no analizadas o de instrumentos configurados, aunque no será habitual que lo haga.

### Asistente de consulta

El **Query Wizard** (asistente de consulta) le ayuda a buscar la información que necesite. Cerity NDS proporciona un asistente de consulta para cada pantalla.



Figura 17 Asistente de consulta

## Edición de métodos

Una vez que haya configurado métodos desde el SOP o monográfico, podrá realizar fácilmente cambios mediante la pantalla Method.

La pantalla Method le permite realizar las acciones de edición siguientes en un método:

- Editar los parámetros del instrumento
- Editar variables de la muestra
- Editar una plantilla de secuencias (normalmente, esto lo realizarán únicamente los usuarios avanzados)
- Editar parámetros del análisis de datos
- Editar la disposición en la que se verán los resultados
- Seleccionar un tipo diferente para generar un informe

También puede editar cualquier método existente en la pantalla Method.

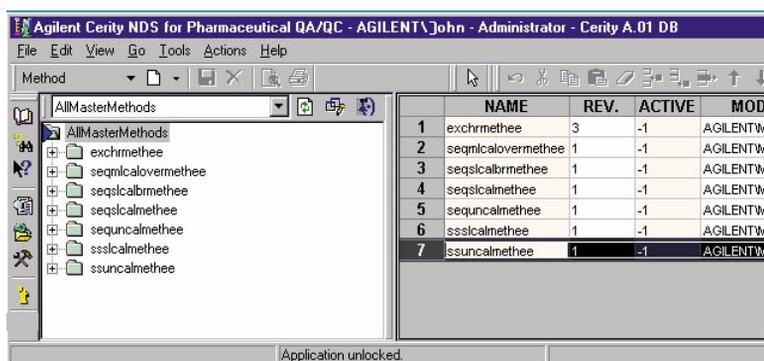


Figura 18 Pantalla Method

## Guardar datos en la base de datos

Un administrador de Cerity NDS puede configurar las acciones de auditoría para tareas específicas realizadas en la aplicación Cerity para control de calidad farmacéutico. Cerity NDS proporciona un formulario para disponer los comentarios de auditoría y almacena un registro de entradas de auditoría cuando el usuario guarda datos en la base de datos.

### Entradas de auditoría

Cuando guarde los cambios a un método, a una muestra o secuencia o a un resultado, o cuando vaya de un método o muestra al siguiente, aparecerá el cuadro de diálogo **Save Changes to the Database**. Éste es el formulario que proporciona Cerity NDS para introducir comentarios de auditoría.

Es posible que tenga que revisar la lista de cambios y seleccionar un motivo para los mismos. Puede ser necesaria una firma electrónica (Electronic Signature), que incluye el nombre de usuario y la contraseña, para registrar los cambios.

Cerity NDS permite que los administradores del sistema configuren qué tareas del sistema requieren comentarios de auditoría obligatorios y firma electrónica.

## 2 Fundamentos de Cerity para control de calidad farmacéutico

### Guardar datos en la base de datos

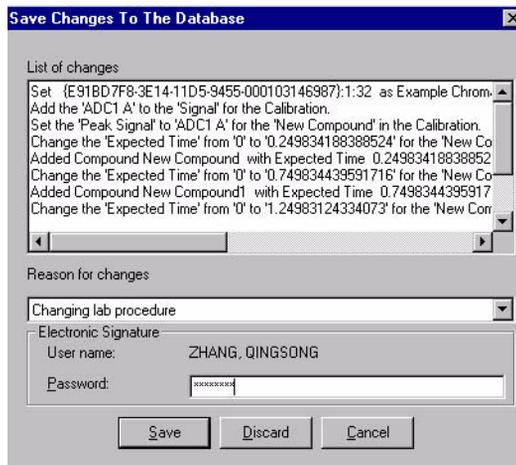


Figura 19 Cuadro de diálogo Save Changes To The Database

## Libros de registro de auditoría

El sistema Cerity NDS mantiene siempre un control de revisión estricto y registros de auditoría independientes del usuario en los registros electrónicos que administra. Todos los registros de auditoría aparecen en los libros de registro (Logbook) que se encuentran en las pantallas respectivas.

**Métodos** El **Method Logbook** (libro de registro de métodos) aparece en el espacio de trabajo Description cuando selecciona un método del árbol de selección de la pantalla Method.

**Muestras únicas** Puede encontrar el registro de auditoría para las muestras introducidas, pero no analizadas, en el libro de registro **Sample Logbook**. El libro de registro **Sample Logbook** aparece en el espacio de trabajo Single Samples de la pantalla Sample o Instrument.

Una vez se hayan analizado las muestras únicas, puede mostrarse el libro de registro de cada muestra en la pantalla Results haciendo clic en el botón **Sample Details** de la barra de herramientas.

**Secuencias** El registro de auditoría para las secuencias introducidas, pero no analizadas, se muestra en el libro de registro **Sequence Logbook** para la secuencia en la pantalla Sample o Instrument.

Una vez se ha analizado una secuencia, puede encontrar el libro de registro **Sequence Logbook** en la pantalla Result cuando selecciona la secuencia en el árbol de selección.

**Análisis de muestras o secuencias** Puede encontrar el registro de auditoría para un análisis de muestra o secuencia en el libro de registro del espacio de trabajo del instrumento en la pantalla Instrument.

La [Tabla 1](#) explica las columnas de los libros de registro que no son autoexplicatorias. La [Figura 20](#) muestra un ejemplo de un libro de registro.

**Tabla 1** Explicación de los contenidos de los libros de registro

Nombre de columna	Ejemplo de contenidos mostrados	Propósito
E-Sig	Signed None	Identifica acciones para las que se configura y aplica una firma electrónica (E-Sig) en Cerity NDS Software Administration.
Source	cerity_test\sspencer Automation UserStamp	Cuando <b>E-sig</b> está configurado, se captura el nombre de usuario que firma. Cuando <b>E-Sig</b> no está configurado, se captura bien el UserStamp asociado con la acción o, en el caso de acciones automatizadas, Automation.
Type	Audit Information	Muestra si los detalles están destinados a auditoría o son sólo información general.
Comment	Changing lab procedure Method released	Cuando hay razones de auditoría configuradas en Cerity para control de calidad farmacéutico Software Administration, se muestra el libro de registro <b>Method</b> que representa todas las columnas como en la <a href="#">Figura 20</a> .

## 2 Fundamentos de Cerity para control de calidad farmacéutico

### Guardar datos en la base de datos

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 created by operator: Demo User	Method	Initial configuration	Signed	06/11/2002, 08:22:05	wadlc001\demo	Audit	WADLC001

**Figura 20** Libro de registro Method Logbook mostrando todas las columnas

## Configuración de métodos

El método Cerity para control de calidad farmacéutico es la versión electrónica de su procedimiento, monográfico o SOP de análisis. Por consiguiente, los administradores del sistema o los analistas configurarán normalmente un método sólo una vez o con poca frecuencia.

Los métodos se configuran en dos partes. Primero se crea una plantilla de método con el **Method Wizard** (asistente de método). La *plantilla de método* proporciona un formato para permitirle introducir únicamente los parámetros relevantes para este análisis. Seguidamente se introducen los parámetros en la plantilla para crear un *método* en la pantalla Method.

*Consulte "Conceptos de los métodos Cerity para control de calidad farmacéutico" en la página 93 para obtener más información que le ayude a configurar métodos.*

### Creación de plantillas de métodos

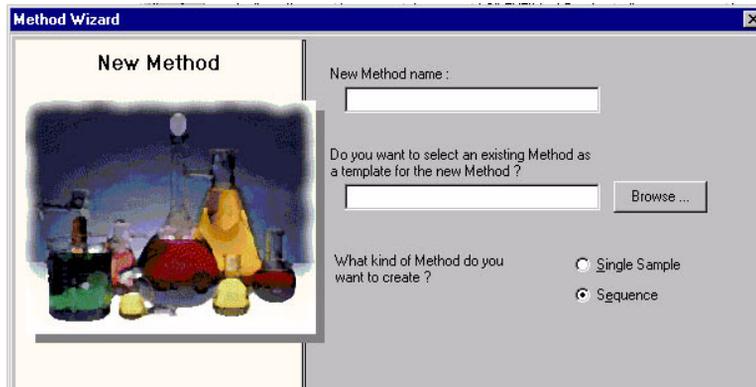
Antes de que pueda introducir los parámetros del instrumento o configurar una tabla de calibración, necesitará crear el esquema para el análisis. El **Method Wizard** (asistente de método) le permite elegir las opciones que necesite para crear una plantilla de método.

Alguna de las opciones que puede elegir cuando se desplace por el **Method Wizard** (asistente de método) son:

- Seleccionar un nombre de método para muestras únicas o secuencias
- Asignar el método a un instrumento
- Seleccionar opciones para configurar el análisis de los datos
- Seleccionar opciones para configurar la identificación de compuestos
- Seleccionar opciones para configurar la calibración
- Seleccionar opciones para configurar la cuantificación

## 2 Fundamentos de Cerity para control de calidad farmacéutico

### Configuración de métodos



**Figura 21** Method Wizard (Asistente de método)

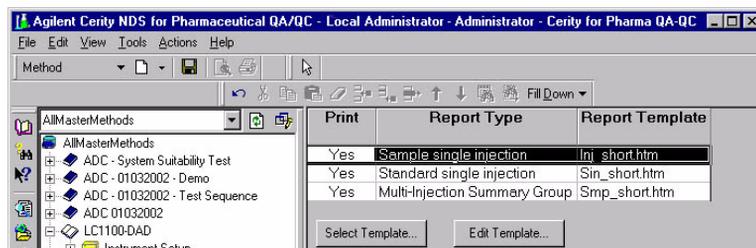
### Introducción de parámetros

Una vez haya acabado de crear una plantilla nueva de método, la pantalla Method muestra el método nuevo en el árbol de selección. Puede continuar introduciendo los parámetros iniciales en la pantalla Method.

### Generación de informes

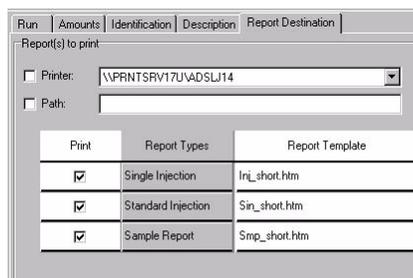
Cerity NDS puede generar informes al final del proceso de los datos. Pero antes, debe seleccionar los tipos de informe y las plantillas de informe del método. La plantilla del informe especifica los datos para el informe y la disposición de los campos para los valores que se muestren en el mismo. Cerity NDS accede a los datos indicados en la plantilla del informe para generar un informe.

**Selección del tipo de informe** Cerity para control de calidad farmacéutico proporciona un conjunto de tipos de informe predeterminados. Si selecciona **Reporting** en el árbol de selección cuando configure un método, los tipos de informe predeterminados aparecerán en el espacio de trabajo.



**Figura 22** Tipos de informe en la pantalla Method para muestras individuales

También puede seleccionar imprimir o generar un tipo de informe en la pantalla Sample para la muestra o secuencia de muestras ya introducidas.



**Figura 23** Tipos de informes para la pantalla Sample

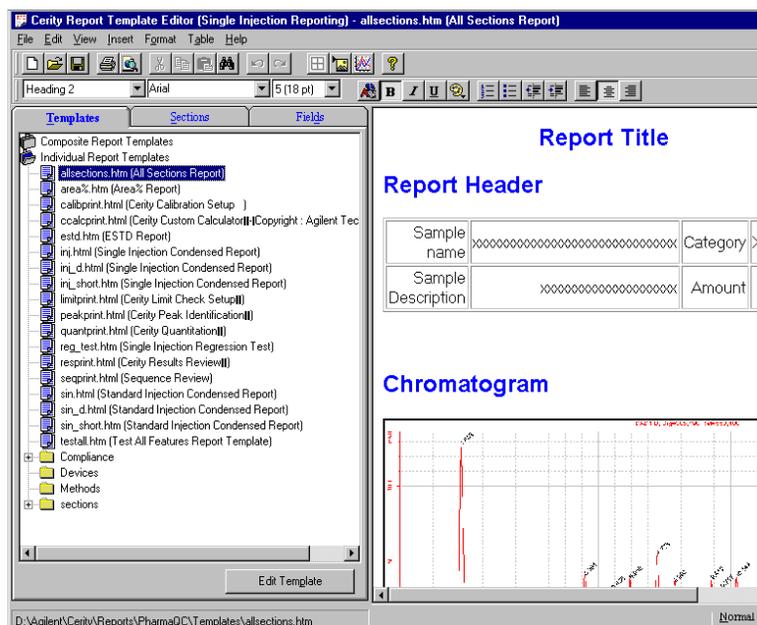
**Selección de plantilla de informe** Cada tipo de informe predeterminado utiliza una plantilla de informe predeterminada. No es posible cambiar un tipo de informe, pero puede seleccionar una plantilla diferente para el tipo de informe. Puede hacerlo en el espacio de trabajo Reporting.

**Edición de la plantilla de informe** Los administradores del sistema o los usuarios con las autorizaciones adecuadas, también pueden editar las plantillas existentes o crear nuevas con el Report Template Editor. El Cerity Report Template Editor le permite crear una plantilla de informe nueva o modificar una existente. Puede seleccionar entre las secciones previamente diseñadas y entre más de dos mil campos, para crear una plantilla de informe según sus especificaciones.

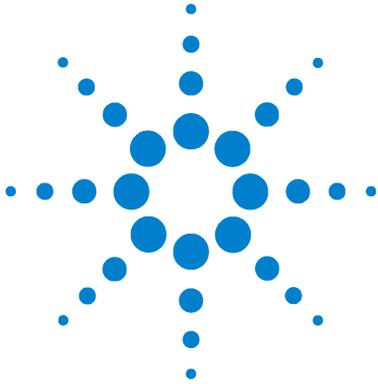
## 2 Fundamentos de Cerity para control de calidad farmacéutico

### Configuración de métodos

Puede acceder al *Cerity Report Template Editor* desde el espacio de trabajo Reporting cuando configure un método.



**Figura 24** Editor de Plantillas de Informe



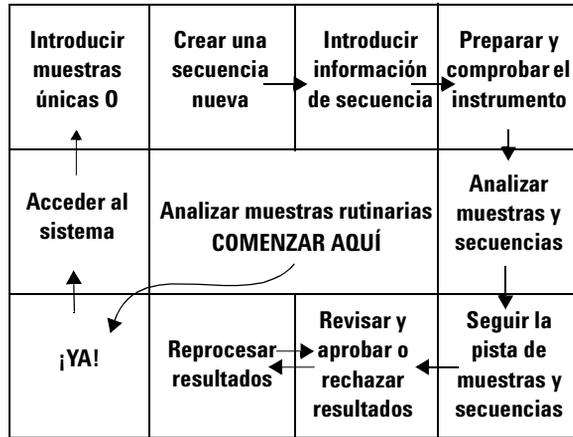
### 3 Análisis de muestras

Entrada de muestras y secuencias	49
Preparación del análisis	52
Programación y auditoría de análisis	53
Revisión del resultado	56
Aprobación/rechazo del resultado	62
Reprocesamiento de métodos calibrados	65
Revisión de resultados y de tablas de calibración	70
Revisión y trazabilidad en secuencias	75

Aprenda los conceptos que le ayudarán a comprender el análisis de muestras en Cerity NDS para control de calidad farmacéutico. Este capítulo le ayudará a completar los ejercicios del conjunto de “Análisis de muestras rutinarias” de las *Getting Started Cards*.



El esquema de instrucciones siguiente muestra la ruta para analizar muestras rutinarias. Comience con ¡YA! Cada sección es una serie de tareas que deben realizarse en el laboratorio.



Cada tema de este capítulo proporciona información fundamental para ayudarle a seguir los pasos de este esquema.

## Entrada de muestras y secuencias

### Entrada de muestras únicas

Una *muestra única o secuencia de Cerity para control de calidad farmacéutico* contiene toda la información sobre métodos, muestras y secuencias necesaria para adquirir y procesar datos. Esta información se añade a toda la información de análisis y a los datos primarios y procesados para dar el *resultado Cerity para control de calidad farmacéutico* de la muestra única o secuencia.

Puede introducir muestras únicas en uno de los tres lugares siguientes:

- Pantalla Sample - Espacio de trabajo Single Samples bajo la carpeta Sample Entry
- Pantalla Sample - Espacio de trabajo Single Samples bajo la carpeta Instrument
- Pantalla Instrument - Espacio de trabajo Single Samples bajo la carpeta Instrument

El panel **Sample Entry** le permite introducir la misma información de la muestra en cada lugar. Debe hacer clic en el botón **Apply** para asegurar que el sistema haya introducido la información.

**Run tasks to perform (Análisis a realizar):** Debe marcar **Quantify** para identificar los compuestos.

**Actualizaciones de calibración:** Puede seleccionar el nivel y tipo de actualización de los estándares de calibración.

The screenshot shows the 'Sample Entry' window with the following configuration:

- Sample Name:** ee121001
- Method:** ee\_121001\_i20\_25\_tst\_1
- Sample Type:** Calibration Standard
- Instrument:** EELC3
- Vial Number:** 1
- Injections:** 1
- Volume [µl]:** as method
- Run with:** Priority: Medium, Schedule: Unknown
- Task(s) to perform:**  Acquire,  Integrate,  Report,  Quantify
- Analyst:** SCHEIDERER,ROBIN
- Calibration:** Calibration Level: 1, Response Update: Average, Retention Time Update: Average, 75%

### 3 Análisis de muestras

#### Entrada de muestras y secuencias

**Sample variables (Variables de la muestra):** Introduzca la cantidad de muestra y los valores de cualquier multiplicador o divisor definido como variable de muestra en el método.

**Compound amounts (Cantidades de compuesto):** Si ha indicado cantidades variables de compuesto en el método calibrado, también puede cambiar estas cantidades.

**Report Destination (Destino del informe):** Consulte el Capítulo 4, "Configuración de métodos" para obtener más información que le ayude a definir, generar e imprimir informes.

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

**Guardar entradas de muestras** Haga clic en el botón **Apply** del espacio de trabajo Sample Entry para colocar la información de la muestra en la tabla de muestra y el botón **Save** para guardar las entradas y cambios en la base de datos.

**Libro de registro de muestras (Sample Logbook)** Cuando guarde la muestra en la base de datos de Cerity NDS, es posible que el sistema de auditoría de Cerity NDS para control de calidad farmacéutico le pida que introduzca un motivo de auditoría y que proporcione su firma electrónica antes de que pueda analizar dicha muestra. Puede ver una descripción de los cambios en el libro de registro **Sample Logbook**.

## Entrada de secuencias



**Secuencias nuevas** Utilice también el botón **New** para crear secuencias nuevas.

Una vez que haya creado una secuencia, podrá introducir información sobre la misma en tres lugares:

- Pantalla Sample bajo Sample Entry
- Pantalla Sample bajo la carpeta Instrument
- Pantalla Instrument bajo la carpeta Instrument.

**Sequence options** Puede introducir información de muestra en el mismo panel **Sample Entry** al igual que en las muestras únicas, pero encontrará las **Tasks to perform** y el **Report Destination** en las Sequence Options.

**Run tasks to perform (Análisis a realizar):** Son las mismas que para las muestras únicas pero **Allow Online Editing** es únicamente para secuencias.

**Report Destination (Destino del informe):** Puede introducir el destino del informe para toda la secuencia aquí, no en Sample Entry.

**Guardar entradas de secuencias** Haga clic en el botón **Apply** del espacio de trabajo Sample Entry para colocar la información de la muestra en la tabla de muestra y el botón **Save** para guardar las entradas y cambios en la base de datos.

Cuando se introduce una muestra única o secuencia, su número de revisión se pone en 1. El número de revisión se incrementa cuando se cambia la muestra única o secuencia.

**Libro de registro de secuencias (Sequence Logbook)** Cuando guarde la secuencia en la base de datos de Cerity NDS, es posible que el sistema de auditoría de Cerity NDS para control de calidad farmacéutico le pida que introduzca un motivo y que proporcione su firma electrónica antes de que pueda analizar dicha secuencia. Puede ver una descripción de los cambios en el libro de registro **Sequence Logbook**.

## Preparación del análisis

### Equilibrio del instrumento y de la columna

Cuando se crea un instrumento, su número de revisión se pone en 1. El número de revisión se incrementa si se cambia interactivamente la configuración del instrumento.

Puede equilibrar el instrumento y la columna desde el panel Instrument de la pantalla Instrument.

El panel Instrument da una imagen de los módulos de instrumentos que puede configurar. Haga clic sobre un módulo para acceder a los elementos de menú para introducir parámetros de instrumentos. Por ejemplo, puede arrancar o parar una bomba.

Introduzca los parámetros de equilibrado en el cuadro de diálogo **Set Pump**. Puede arrancar la bomba y vigilar la línea base tal como aparece en la representación en tiempo real.

### Valores reales

Puede ver y definir los valores en tiempo real de los parámetros de un instrumento determinado seleccionando **Device Actuals** en el menú View.

Para introducir estos “valores reales” en la ventana **Device Actuals**, seleccione el elemento de menú **Setup Actuals Window** del menú View. Ahora puede añadir o eliminar los ajustes.

### Representación en tiempo real

Antes de analizar una muestra o secuencia, defina los ejes y aspecto de la representación en tiempo real mediante un clic en el botón **Change**.

## Programación y auditoría de análisis

### Programación de muestras y secuencias

Puede analizar muestras únicas o secuencias desde las pantallas siguientes:

- En la carpeta Sample Entry de la pantalla Sample
- En la carpeta Instrument de la pantalla Sample
- En la carpeta Instrument de la pantalla Instrument



Seleccione una muestra única o grupo de muestras para analizarlas desde la tabla de muestras. Comience un análisis de muestra o secuencia con el botón Run una vez haya seleccionado la o las muestras únicas o secuencias que quiera analizar.

Utilice estas reglas para programar análisis:

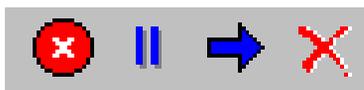
- Cuando comience un análisis para un grupo de muestras únicas o secuencias, se comienza a analizar la primera muestra o secuencia que seleccione. Las otras muestras o secuencias se ponen en la cola de análisis.
- El orden en el que comience un análisis de muestras o secuencias establece el orden de análisis en la cola.
- Si tiene que interrumpir una secuencia con una muestra de prioridad alta, tendrá que cancelar primero la secuencia. Seguidamente, coloque la muestra en la primera fila de la lista de trabajo y analícela. Consulte [“Seguimiento del análisis”](#) en la página 54 para obtener más información sobre la lista de trabajo.
- Puede definir el orden de análisis de muestras únicas según su prioridad. El estado de prioridad va desde Prioridad elevada, pasa por Prioridad media hasta Prioridad baja.

No es necesario que defina una programación para “programar” una muestra o secuencia.

## Seguimiento del análisis

### La lista de trabajo

La lista de trabajo de un instrumento le permite seguir el estado de las muestras y secuencias en la cola de análisis. Si tiene que quitar una muestra o secuencia de la **Worklist** (lista de trabajo), tendrá que completar o cancelar el análisis.



Para el instrumento seleccionado, al seleccionar una muestra o secuencia de la lista de trabajo se activan los botones **Abort**, **Pause**, **Resume** y **Remove**.

### Lo que puede hacer en la lista de trabajo

Puede realizar las tareas siguientes cuando siga la pista de muestras y secuencias con la **Worklist** (lista de trabajo):

- Ver el estado de las muestras y secuencias para todos los instrumentos del grupo seleccionado
- Ver el estado de las muestras y secuencias para un instrumento
- Cancelar un análisis de una muestra o secuencia
- Hacer un pausa en un análisis de una muestra o secuencia
- Reanudar un análisis de una muestra o secuencia
- Parar un análisis de una secuencia con el botón **Edit Sequence** para poner la secuencia en el modo edición

*Si hace clic en el botón **Edit Sequence** en la lista de trabajo pero no ocurre nada, significa que no se ha marcado la opción **Allow Online Editing** en el método.*

### Edición de una secuencia durante un análisis

Si ha marcado la casilla **Allow Online Editing** cuando ha configurado una secuencia, haga clic en el botón **Edit Sequence** en la lista de trabajo para editar la secuencia mientras se analiza. El sistema completa primero el proceso de la muestra que se está analizando y, seguidamente, hace una pausa para dejarle editar la secuencia o añadir muestras nuevas. Mientras se está analizando la secuencia, no podrá programar ninguna otra secuencia o muestra única en el instrumento.

Cuando reanude la secuencia, se analiza la inyección o línea de secuencia siguiente. El software Cerity NDS para control de calidad farmacéutico vuelve a calcular automáticamente todos los asuntos pendientes (por ejemplo, recalibraciones, resúmenes de grupos de muestras) para incluir las inyecciones añadidas recientemente.

### **Libro de registro de instrumentos (Instrument Logbook)**

Todos los eventos ocurridos durante un análisis se registran en el libro de registro **Instrument Logbook**.

Cerity para control de calidad farmacéutico registra los eventos siguientes en el libro de registro **Instrument Logbook**:

- Eventos en un análisis
- Errores
- Pausa o cancelación del instrumento

## Revisión del resultado

### ¿Qué ha sucedido con el resultado?

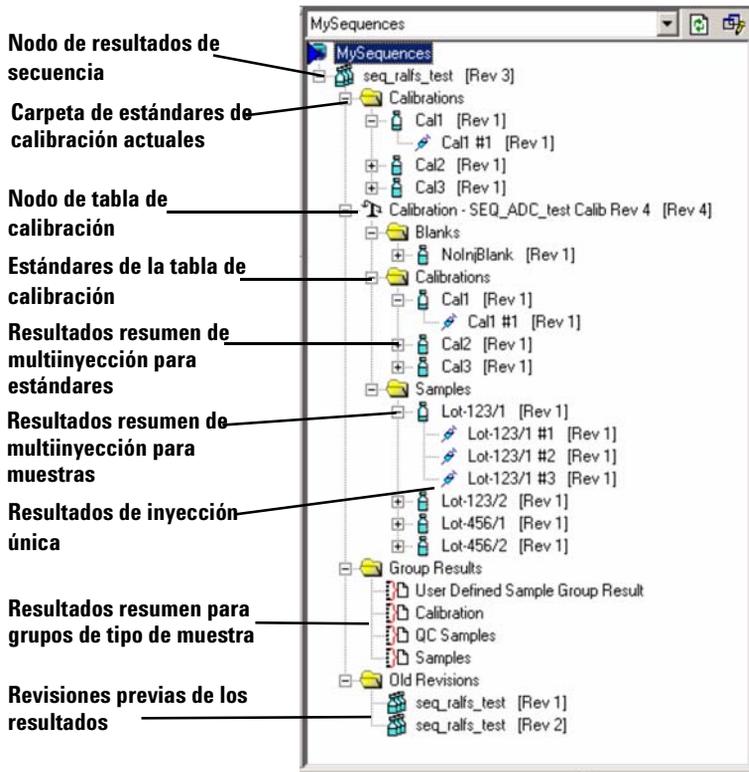
Un *resultado de Cerity para control de calidad farmacéutico* contiene datos y cálculos primarios y procesados, parámetros de métodos e información sobre muestras y secuencias.

Cuando necesite revisar un resultado, asegúrese de que esté mirando al conjunto de resultados correcto en la pantalla Result. Para acceder a un resultado que no sea visible para el usuario en el árbol de selección:

- Seleccione una consulta diferente en la lista de consultas
- Edite una consulta existente
- Haga clic en el botón **Redo Query** para renovar las selecciones
- Cambie la sección Data Review Layout para la revisión de datos del método para incluir el resultado que esté buscando y, seguidamente, reprocese.

*Consulte la sección "Formato para la revisión de datos" en la página 103 para obtener más detalles sobre la Disposición para la revisión de datos.*

## Organización de los resultados en el árbol de selección



Nodo de resultados de secuencia

Carpeta de estándares de calibración actuales

Nodo de tabla de calibración

Estándares de la tabla de calibración

Resultados resumen de multiinyección para estándares

Resultados resumen de multiinyección para muestras

Resultados de inyección única

Resultados resumen para grupos de tipo de muestra

Revisiones previas de los resultados

Figura 25 El árbol de selección Results

### NOTA

Observe que el nombre del método utilizado para las muestras únicas o la secuencia aparece en la carpeta de resultados de calibración.

### Visualización de las carpetas de calibración en la pantalla de resultados

La [Figura 25](#) muestra que el árbol de visualización Results contiene múltiples carpetas de calibración. Cada carpeta ofrece una información diferente:

<b>Nombre</b>	<b>Ubicación</b>	<b>Propósito</b>
<b>Carpeta de estándares de calibración actuales</b>	Inmediatamente debajo del nodo de resultados de secuencia	Permite navegar hasta la revisión más reciente de un estándar adquirido y utilizado en la secuencia.
<b>Nodo de tabla de calibración</b>	Identificada por el icono de la "balanza"	Permite navegar hasta la tabla o tablas de calibración creadas y utilizadas en la secuencia. Las tablas de calibración que no se usan en ningún cálculo no están accesibles.
<b>Estándares de la tabla de calibración</b>	Debajo del nodo de tabla de calibración	Permite navegar hasta las revisiones de los estándares utilizados para crear la tabla de calibración del nodo de tabla de calibración.

Tras el análisis (o reprocesamiento) inicial de una secuencia, las revisiones de la carpeta de estándares de calibración actuales y los estándares de la tabla de calibración son idénticas. No obstante, después de efectuarse cambios en la ejecución de un estándar, y antes del reprocesamiento, las revisiones de los estándares en las dos carpetas de calibración son diferentes; por ejemplo, el estándar puede ser Revisión 4 en la carpeta de estándares de calibración actuales (la revisión más reciente del estándar) pero Revisión 3 en los estándares de la tabla de calibración (la revisión del estándar utilizada en la tabla de calibración). Consulte también "[Revisión de resultados y de tablas de calibración](#)" en la página 70.

## Revisión de información de muestras y secuencias

**Muestras únicas** Debido a que la información sobre métodos y muestras está adjunta a los resultados que han producido, puede encontrarse fácilmente la información de la muestra para un análisis de inyección única. Cuando haga clic sobre el icono **Sample Details**, aparecerá el panel **Sample Entry** para la inyección única de la muestra única.

The screenshot displays the Agilent Certity NDS software interface. At the top, the title bar reads "Agilent Certity NDS for Pharmaceutical QA/QC - SCHEIDERER.ROBIN - Administrator - Certity for Pharma QA-QC". The main window is divided into several sections:

- Left Panel:** A tree view showing a hierarchy of results. The selected item is "wfi\_151001\_i20\_xsa\_3". A small icon of a vial is shown to the left of this panel, with arrows pointing to the tree and the Sample Entry panel.
- Right Panel:** A chromatogram titled "Signal" showing "WWD: Absorbance". The x-axis represents time in minutes (0 to 4), and the y-axis represents intensity in mAU (0 to 80). Several peaks are labeled with their retention times: 2.349, 2.613, 2.794, and 3.338. A prominent peak is visible at 3.693.
- Bottom Panel:** The "Sample Entry" tab is active, showing details for the selected sample:
  - Sample Name: wfi\_151001\_i20\_xsa\_3
  - Method: wfi\_121001\_i20\_2S\_tst\_1[01]
  - Sample Type: Sample
  - Instrument: MIO20
  - Vial Number: 1, Injections: 3, Volume [µl]: 5

### 3 Análisis de muestras

#### Revisión del resultado

**Secuencias** También puede encontrar fácilmente la información sobre muestras y secuencias para las secuencias de la pantalla Result. Cuando seleccione el resultado de la secuencia, aparecerá la tabla de secuencias y el panel de entrada de muestras.

The screenshot displays the 'Sequence Table' and 'Sample Entry' panels. The 'Sequence Table' contains the following data:

	Sample Name	Sample Type	Cal. Level	Bracketing	Custom Sample Group	Vial #
1	wfi_171001_i20_1FA_cl_1.1	Calibration	1	Open	1FA_cl_1	1
2	wfi_171001_i20_1FA_cl_2.1	Calibration	2	None	1FA_cl_2	1
3	wfi_171001_i20_1FA_cl_3.1	Calibration	3	None	1FA_cl_3	1
4	wfi_171001_i20_1FA_sa_1.1	Sample			1FA_sa_1	1
5	wfi_171001_i20_1FA_sa_2.1	Sample			1FA_sa_2	1
6	wfi_171001_i20_1FA_sa_3.1	Sample			1FA_sa_3	1
7	wfi_171001_i20_1FA_cl_1.2	Calibration	1	None	1FA_cl_1	1
8	wfi_171001_i20_1FA_cl_2.2	Calibration	2	None	1FA_cl_2	1
9	wfi_171001_i20_1FA_cl_3.2	Calibration	3	None	1FA_cl_3	1

The 'Sample Entry' panel shows the following details for the selected sample:

- Sample Name: wfi\_171001\_i20\_1FA\_cl\_1.1
- Sample Type: Calibration Standard
- Run: Run
- Amounts: Amounts
- Identification: Identification
- Description: Description
- Calibration Mode: Bracketing
- Calibration Level: Calibration Level

Cuando seleccione un resultado de inyección única para la secuencia y haga clic sobre el icono **Sample Details**, aparecerá el libro de registro **Sample Logbook**.

The screenshot displays the 'Example Chromatogram' and 'Logbook' panels. The 'Example Chromatogram' shows a signal plot with peaks labeled at retention times: 2.180, 2.388, 2.827, 2.768, 3.271, and 4.198. The x-axis is labeled 'min' and the y-axis is labeled 'mAU'. The 'Logbook' panel contains the following entries:

Description	Comment	E-Sig	Timestamp
Test completed.			10/17/2001, 04:33:05
Data acquisition completed			10/17/2001, 04:32:56
Run completed			10/17/2001, 04:32:56
Pressure at end of run: 74.74 bar			10/17/2001, 04:32:56
Right temperature at end of run: 25.89 deg. C			10/17/2001, 04:32:55
Left temperature at end of run: 25.24 deg. C			10/17/2001, 04:32:55

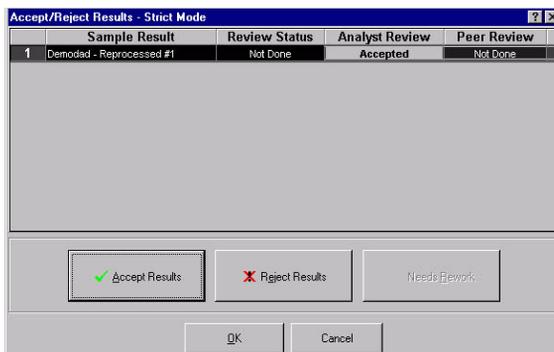
## Lo que puede hacer con los resultados de Cerity para control de calidad farmacéutico

Puede realizar las tareas siguientes cuando revise, reprocese y apruebe los resultados:

- Revisar los resultados para todos los diferentes conjuntos de datos de resultados
- Reintegrar
- Cambiar información sobre muestras y secuencias
- Retirar puntos de calibración
- Repetir cálculos con el método adjunto originalmente al resultado
- Reprocesar con la revisión actual del método
- Introducir valores para adiciones de compuestos y de variables de muestra al método
- Reprocesar con un método diferente
- Importar y reprocesar un archivo Agilent ChemStation o ANDI
- Aceptar o rechazar un resultado
- Marcar un resultado que necesite repetición del trabajo.

## Aprobación/rechazo del resultado

Cerity para control de calidad farmacéutico le permite aprobar, rechazar y enviar resultados para su reprocesamiento en función de los procedimientos de su empresa. Confirme la revisión de cada resultado mediante el cuadro de diálogo **Accept/Reject Results**.



**Figura 26** Cuadro de diálogo **Accept/Reject Results**

La revisión se aplica a todos los resultados de una muestra, es decir, las inyecciones únicas se revisan individualmente, y el resultado resumen se asigna a la muestra o secuencia.

## Niveles de aceptación de muestras

Hay tres niveles de aceptación Cerity para control de calidad farmacéutico definidos para todos los resultados.

- 1 Se requiere una revisión de analista (nivel 1) (realizado por usuarios con derechos de nivel 1, 2 o 3)
- 2 Se requiere una revisión en detalle (nivel 2) (realizado por usuarios con derechos de nivel 2 o 3)
- 3 Se requiere una revisión directiva (nivel 3) (realizado por usuarios con derechos de nivel 3)

## Derechos de revisión de los usuarios

El administrador del sistema de la aplicación Cerity NDS Administration puede asignar a los usuarios uno entre cuatro tipos de derechos de revisión. Estos derechos permiten que los usuarios acepten o rechacen resultados según un nivel de aceptación definido.

- 0 No se permite realizar revisiones
- 10 Se permite realizar una revisión de analista (nivel 1)
- 20 Se permite realizar una revisión en detalle o de analista (nivel 2)
- 30 Se permite realizar una revisión directiva o en detalle o de analista (nivel 3)

## Modos de revisión

En el momento de la instalación el administrador del sistema define el modo de revisión como estricto o no estricto

### Revisión estricta

La Revisión estricta es una política definida por el sistema en la que el laboratorio puede elegir únicamente la cantidad de niveles de aprobación. El modo Revisión estricta utiliza las reglas siguientes:

- Todos los niveles de aceptación de un resultado deben definirse en *Accepted* para que la aceptación general del resultado sea *Accepted*.
- Cada nivel debe firmarse antes de que pueda realizarse el nivel de revisión siguiente superior (es decir, debe definirse el nivel 1 de aceptación antes del 2, y el 2 antes del 3).
- El nivel de aprobación más alto que se ha aplicado a un resultado puede, en cualquier momento, cambiar el resultado desde *Accepted* a *Needs Rework*.

### 3 Análisis de muestras

#### Aprobación/rechazo del resultado

##### **Revisión no estricta**

La Revisión no estricta es una política definida por el laboratorio. El modo Revisión no estricta utiliza las reglas siguientes:

- No es necesario definir todos los niveles de aceptación: un nivel superior puede aceptar un nivel inferior o puede cambiar un rechazo de nivel inferior.
- Los niveles de aceptación se pueden ejecutar en cualquier orden.
- Todos los revisores pueden cambiar el estado de revisión desde *Accepted* a *Needs Rework*, pero únicamente el nivel superior puede reinicializar el estado de revisión general a *Needs Rework*.

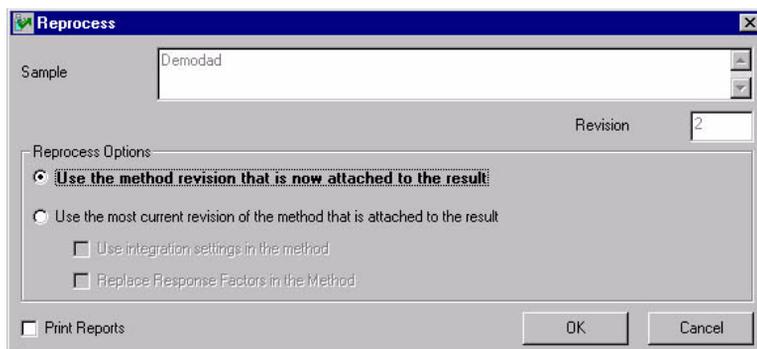
## Reprocesamiento de métodos calibrados

El *reprocesamiento* es la acción de recalcular los resultados de análisis en función de parámetros de proceso modificados. Puede reprocesar únicamente una muestra única o secuencia seleccionadas. No puede reprocesar inyecciones únicas ni muestras únicas en una secuencia.

Si una muestra o secuencia requiere reprocesamiento, puede realizar cambios en los resultados o en el método y, seguidamente, reprocesar el resultado.

### Opciones de reprocesamiento disponibles

Todos los parámetros de métodos e información de muestras utilizados para producir un resultado están adjuntos al resultado. La estructura del diseño determina las opciones para el reprocesamiento.



### Selección de opciones de reprocesamiento

Las opciones de reprocesamiento que seleccione dependen de los motivos del mismo. Cuando reprocese métodos calibrados, debe considerar cuidadosamente qué es lo que intenta conseguir. Utilice las pautas siguientes para efectuar su selección:

#### **Para estándares de calibración usando métodos de calibración específicos del instrumento:**

Cuando esté reprocesando una única muestra estándar de calibración o una secuencia específica del instrumento que contiene estándares de calibración y desee que sus cambios tengan efecto en cuantificaciones futuras, seleccione la opción **“Use the most current revision of the method that is attached to the result”** y (esto es importante) marque casilla **“Replace Response Factors in the Method”**.

Si no desea que su recalibración actualice el método, mantenga en blanco la casilla **“Replace Response Factors in the Method”** y seleccione la opción **“Use the method revision that is now attached to the result”**. Eso mantendrá los efectos de la recalibración separados del método. Sólo en caso de que sea necesario transferir los cambios de método en la cuantificación de la muestra o secuencia DEBE seleccionar **“Use the most current revision of the method that is attached to the result”**.

#### **Para muestras únicas y secuencias distintas de estándares de calibración usando métodos de calibración específicos:**

Cuando esté reprocesando muestras únicas objeto de análisis, blancos o controles de calidad, secuencias específicas del instrumento distintas de una recalibración o secuencias calibradas específicas de la secuencia, seleccione la opción **“Use the method revision that is now attached to the result”**.

Sólo en el caso de que desee usar cambios de parámetros de calibración u otros métodos, seleccione la opción **“Use the most current revision of the method that is attached to the result”**.

#### **Reproducción de datos antiguos:**

La opción **“Use the method revision that is now attached to the result”** se utiliza también para reproducir exactamente los mismos cálculos efectuados previamente. Es útil mostrar resultados históricos de muchos años atrás reevaluados de nuevo. También demuestra que no se han realizado modificaciones en los resultados desde entonces.

Utilice la [Tabla 2](#) para encontrar la opción de reprocesamiento requerida en casos más específicos.

**Tabla 2** Utilice esta tabla como ayuda para seleccionar las opciones de reprocesamiento en situaciones específicas

Si su motivo para reprocesar es:	Haga lo siguiente:	Cerity para control de calidad farmacéutico hace lo siguiente:
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Para cambiar algunos ajustes de integración para inyecciones únicas o</li> <li>• para introducir valores nuevos en los campos de entrada de muestras o</li> <li>• para retirar estándares de calibración de los datos de calibración o</li> <li>• para reprocesar una muestra o secuencia que se ha adquirido sin proceso o únicamente con proceso parcial.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Una vez haya realizado los cambios, seleccione la opción de reprocesamiento <b>Use the method revision that is now attached to the result.</b></li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li><b>a</b> Inicializa la tabla de calibración con la tabla de calibración inicial de la muestra o secuencia.</li> <li><b>b</b> Para los métodos específicos según el instrumento, si la tabla de calibración está actualizada, el método se actualiza según la configuración y los estándares de calibración. En los demás casos, se crea un nodo de calibración nuevo, independiente del método.</li> <li><b>c</b> Calcula la cuantificación, los cálculos personalizados y los límites.</li> </ul>
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Utilizar los ajustes de integración nuevos en la revisión más actual del método para todas las inyecciones o</li> <li>• reprocesar datos de secuencias antiguas utilizando una tabla de calibración nueva en la revisión más actual del método.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Seleccione la opción de reprocesamiento, <b>Use the method revision that is now attached to the result.</b></li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li><b>a</b> Inicializa la tabla de calibración con la revisión de la tabla de calibración más actual del método.</li> <li><b>b</b> Si los datos de reprocesamiento proceden de una revisión de calibración anterior o si el método es específico según la secuencia y quiere actualizar dicho método, active la casilla <b>Replace the response factors in the method.</b> En los demás casos, el método se actualiza automáticamente. Los estándares marcados como no válidos en el espacio de trabajo de calibración NO se utilizan.</li> <li><b>c</b> Cuantifica los estándares de calibración con la revisión de la tabla de calibración más actual.</li> <li><b>d</b> Calcula la cuantificación, los cálculos personalizados y los límites con los ajustes nuevos del método.</li> </ul>

### 3 Análisis de muestras

#### Reprocesamiento de métodos calibrados

**Tabla 2** Utilice esta tabla como ayuda para seleccionar las opciones de reprocesamiento en situaciones específicas (continuación)

Si su motivo para reprocesar es:	Haga lo siguiente:	Cerity para control de calidad farmacéutico hace lo siguiente:
<ul style="list-style-type: none"> <li>Reprocesar los datos con una revisión de método actualizada que incluya variables de muestra nuevas (no afecta a la calibración).</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Una vez haya realizado los cambios de método, configure el reprocesamiento para los campos de entrada de muestras nuevas.</li> <li>Introduzca los valores para las variables de muestra nuevas y seleccione la opción <b>Use the method revision that is now attached to the result.</b></li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Realiza los mismos pasos descritos más arriba.</li> <li>Cualquier otro cambio se utiliza también tanto para esta selección como para la de arriba.</li> </ul> <p>Debido a que Cerity para control de calidad farmacéutico adjunta la revisión más actual del método al resultado cuando el usuario configura el proceso de campos de entrada de muestras nuevos, seleccione la opción "Use the method revision that is now attached to the result".</p>
<ul style="list-style-type: none"> <li>Reprocesar los datos con una revisión de método actualizada que incluya compuestos nuevos (afecta a la calibración).</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Una vez haya realizado los cambios de método, configure el reprocesamiento para los campos de entrada de muestras nuevos.</li> <li>Introduzca los valores para las variables de muestra nuevas y seleccione la opción <b>Use the method revision that is now attached to the result.</b></li> </ul>	<p><b>a</b> Reintegra los resultados de inyección única con los ajustes de método.</p> <p><b>b</b> Actualiza la tabla de calibración de acuerdo con los ajustes de método y estándares de calibración de la secuencia. Se utilizan los estándares marcados como "no válidos" en el espacio de trabajo de calibración.</p> <p><b>c</b> Calcula la cuantificación, los cálculos personalizados y los límites con los ajustes nuevos del método. También se utiliza cualquier otro cambio.</p>
<ul style="list-style-type: none"> <li>Reprocesar con un método diferente.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Configure el reprocesamiento para un método diferente.</li> <li>Introduzca cualquier valor para las variables de muestra o cantidades de compuesto en el método nuevo y seleccione la opción <b>Use the method revision that is now attached to the result.</b></li> </ul>	<p><b>a</b> Reintegra los resultados de inyección única con los ajustes de método.</p> <p><b>b</b> Actualiza la tabla de calibración de acuerdo con los ajustes de método y estándares de calibración de la secuencia. Se utilizan los estándares marcados como "no válidos" en el espacio de trabajo de calibración.</p> <p><b>c</b> Calcula la cuantificación, los cálculos personalizados y los límites con los ajustes nuevos del método. También se utiliza cualquier otro cambio.</p>

#### PRECAUCIÓN

Cuando reprocesa con un método diferente, se añade al árbol de selección un nodo de calibración adicional con exactamente el mismo nombre.

## Reintegración

La aplicación para el control de calidad farmacéutico proporciona herramientas para la reintegración. Puede reintegrar eventos iniciales modificados y eventos calculados para los resultados o utilizar la reintegración para hacer que el sistema defina los parámetros de la integración. También puede integrar manualmente los picos únicos con sus propias líneas de base. Guarde los ajustes y resultados nuevos en la base de datos. Aún deberá reprocesar el resultado para recalibrar o volver a cuantificar.

## **Revisión de resultados y de tablas de calibración**

Para seguir el reprocesamiento de los resultados, debe entender el sistema de numeración de revisiones de resultados y de tablas de calibración.

### **Revisiones de resultados**

Cuando se crea una muestra única o secuencia, su número de revisión se pone en 1. El número de revisión se incrementa cuando se guarda la muestra única o secuencia en la base de datos. El análisis de la muestra única o secuencia incrementa el número de revisión en una unidad.

El resultado que se produce tiene el mismo número de revisión que la muestra única o secuencia que se ha analizado. Esto es debido a que el resultado contiene la revisión de toda la información de la muestra, secuencia y método en la muestra única o secuencia que se han analizado. El número de revisión del resultado se incrementa si se cambia uno o más parámetros en el resultado.

## Revisiones de resultados

### Secuencia de actualización única (sin agrupamiento)

**Tabla 3** Revisiones para una secuencia de actualización única

Paso	Acción (Use siempre <i>Save to database</i> )	Pantalla	Números de revisión		
			Secuencia	Muestra	Inyección Cromatograma
1	Crear una secuencia	Sample	1	N/D	N/D
2	Añadir una muestra a la tabla de secuencia	Sample	2	N/D	N/D
3	Cambiar cantidades de compuesto correspondientes a una muestra de la tabla de secuencia	Sample	3	N/D	N/D
4	Ejecutar la adquisición de la secuencia en el instrumento		4	1	1
5	Cambiar una entrada de muestra a cantidades diferentes	Result	5	1	1
6	Integrar manualmente el cromatograma de una inyección	Result	6	2	2
7	Reprocesar la secuencia	Result	8*	3	3
8	Cambiar una entrada de muestra a cantidades diferentes	Result	9	3	3
9	Integrar manualmente el cromatograma de una inyección	Result	10	4	4
10	Reprocesar la secuencia	Result	12*	5	5

\* La acción de reprocesar incrementa la revisión en dos unidades debido a procesos internos.

### Secuencia con agrupamiento

Para una secuencia con agrupamiento, la estrategia de revisión difiere como sigue:

Revisión de estándares de calibración:

- Para los estándares de un agrupamiento **opening**, la revisión de la muestra y el cromatograma aumenta en una unidad.
- Para los estándares usados en un agrupamiento **close and open**, la revisión de la muestra y el cromatograma aumenta en dos unidades.

Revisión de problemas calculados (incluye blancos y muestras de control de calidad):

- La revisión aumenta en una unidad tras el cálculo del resultado.

**Secuencia con agrupamiento general**

Revisión de estándares de calibración:

- El número de revisión de los estándares es 1 tras la adquisición.

Revisión de problemas calculados (incluye blancos y muestras de control de calidad):

- El número de revisión aumenta en una unidad tras el cálculo del resultado; por ejemplo, se vuelve 2 tras la adquisición inicial.

**Revisiones de tablas de calibración**

Cuando se crea una tabla de calibración, su número de revisión se pone en 1. El número de revisión se incrementa cuando se actualiza la tabla de calibración. Los ejemplos siguientes ilustran el control de revisión de la tabla de calibración. En todos los casos de las tablas se supone únicamente una inyección por estándar. El número de revisión de la tabla de calibración se incrementa cada vez que se analiza una muestra de calibración. Para calibraciones específicas según la secuencia, n es siempre 1.

**Tabla 4** Calibración de actualización única

Orden de secuencia	Nombre de la muestra	Revisión de tabla de calibración	
		Utilizada	Generada
1	Estándar 1, análisis 1	n	n+1
2	Estándar 2, análisis 1	n+1	n+2
3	Muestra 1a	n+2	
4	Muestra 1b	n+2	
5	Estándar 1, análisis 2	n+2	n+3

**Tabla 4** Calibración de actualización única (continuación)

Orden de secuencia	Nombre de la muestra	Revisión de tabla de calibración	
		Utilizada	Generada
6	Estándar 2, análisis 2	n+3	n+4
7	Muestra 2a	n+4	
8	Muestra 2b	n+4	
9	Estándar 1, análisis 3	n+4	n+5
10	Estándar 2, análisis 3	n+5	n+6

**Tabla 5** Calibración de agrupamiento

Orden de secuencia	Nombre de la muestra	Revisión de tabla de calibración		Grupo
		Utilizada	Generada	
1	Estándar 1, análisis 1	n	n+1	1 al abrirlo
2	Muestra 1a	n+2		1
3	Muestra 1b	n+2		1
4	Estándar 1, análisis 2	n+1	n+2/n+3*	1 al cerrarlo 2 al abrirlo
5	Muestra 2a	n+4		2
6	Muestra 2b	n+4		2
7	Estándar 1, análisis 3	n+3	n+4	2 al cerrarlo

\* Revisión n+2 al cerrar el Grupo 1, Revisión n+3 al abrir el Grupo 2.

El número de revisión de la tabla de calibración se cambia con cada modificación. Para el agrupamiento, se generan versiones intermedias de los datos de calibración que no se utilizan directamente para la calibración de muestras (por ejemplo, revisión 3 en [Tabla 5](#)).

### 3 Análisis de muestras

#### Revisión de resultados y de tablas de calibración

**Tabla 6** Calibración de agrupamiento general

Orden de secuencia	Nombre de la muestra	Revisión de tabla de calibración	
		Utilizada	Generada
1	Estándar 1, análisis 1	n	n+1
2	Muestra 1a	n+3	
3	Muestra 1b	n+3	
4	Estándar 1, análisis 2	n+1	n+2
5	Muestra 2a	n+3	
6	Muestra 2b	n+3	
7	Estándar 1, análisis 3	n+2	n+3

En el agrupamiento general, las muestras no se cuantifican hasta que se hayan analizado todos los estándares. Esto significa que la tabla de calibración se inicializa al inicio de la secuencia, después se actualiza dos veces (líneas 4 y 7) para producir las revisiones 2 y 3. Las muestras se cuantifican utilizando la revisión 3, que es el promedio de todos los puntos de calibración.

Para realizar un seguimiento del rendimiento cromatográfico coherente del sistema, los estándares de calibración deben distribuirse igualmente en toda la secuencia. Los problemas con la precisión de la calibración pueden detectarse mediante las estadísticas apropiadas o los factores de respuesta.

## Revisión y trazabilidad en secuencias

En Cerity NDS, todos los datos se mantienen y organizan o bien como inyecciones individuales o en secuencias. Siempre que se modifica un elemento de una secuencia, el cambio se documenta como una nueva revisión de la secuencia. Sin embargo, la revisión de secuencia no documenta los cambios en los análisis individuales contenidos dentro de esa secuencia; estos cambios se documentan en los libros de registro de los análisis individuales que se modifican. Por este motivo, no hay una conexión directa entre la revisión de la secuencia y el cambio dentro de la misma.

Las acciones de secuencia se documentan en un libro de registro de secuencias. Cada secuencia cuenta únicamente con un libro de registro en el que se almacenan y muestran todos los cambios y revisiones en el nivel de la secuencia. El libro de registro muestra siempre todas las entradas de datos. Esto significa que las revisiones de secuencias antiguas muestran todas las entradas, incluso aquellas dedicadas a revisiones más recientes. Esto dificulta el seguimiento de los cambios en las secuencias.

Las revisiones de secuencias antiguas se documentan y muestran bajo el nodo de secuencias actual. Las revisiones de secuencias antiguas no muestran los análisis relacionados ni los cambios en los mismos; esta información se encuentra sólo en los libros de registro de muestras individuales.

El proceso de revisión de las secuencias crea también más revisiones que las esperadas. Se crean revisiones para dos categorías de cambios:

- Cambios externos: cambios en los resultados efectuados por el usuario, por ejemplo, reintegración de un cromatograma de muestras.
- Cambios internos: cambios en el estado de secuencias, por ejemplo, cambio de una revisión de resultados de secuencias a “preparada para el reprocesamiento”.

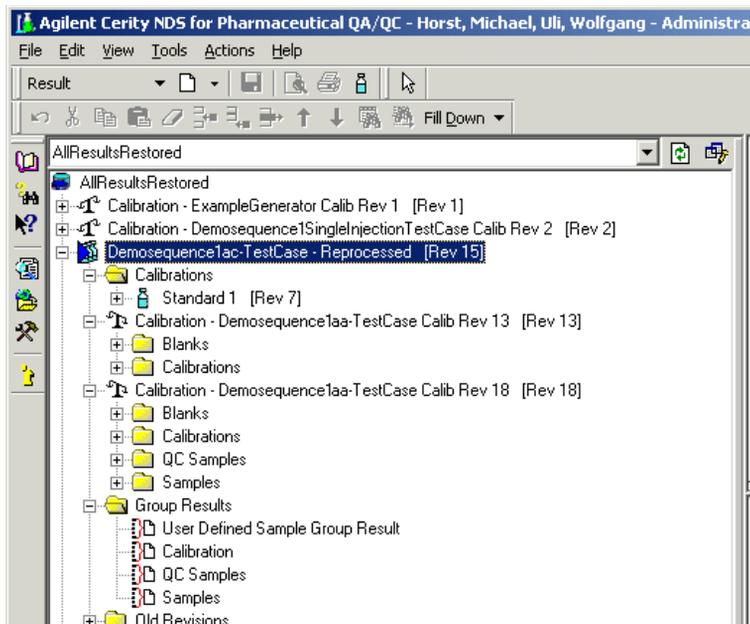
Ambas categorías de cambio crean nuevas revisiones de secuencias. Las revisiones de secuencias basadas en cambios externos son normalmente fáciles de seguir y entender. Sin embargo, las revisiones de secuencias internas son normalmente invisibles para el usuario y producen una revisión de secuencia nueva difícil de seguir y entender.

Esta sección describe cómo pueden seguirse y explicarse todas las revisiones de una secuencia, mediante datos de ejemplo. Proporciona unas directrices paso a paso para permitir la utilización de herramientas existentes de Cerity NDS para trazar el mapa de la historia de secuencias completa y comprenderla.

## **Directrices paso a paso para conseguir una trazabilidad de las revisiones de las secuencias**

### **Paso 1 Identificación de las revisiones de secuencias internas que no tienen impactos de cambio en la secuencia**

La pantalla de secuencias de Cerity NDS está organizada de la forma siguiente. El nombre de secuencia es la jerarquía de más alto nivel en la historia de la secuencia. Al seleccionarla y abrir el nodo de secuencia se muestran todos los subelementos de la secuencia. Estos subelementos son tests/resultados que se han ejecutado para la revisión actual, además de las revisiones de secuencia más antiguas. Para abrir de una vez todas las subcarpetas de un nodo de secuencia, hay que seleccionar y destacar la secuencia correspondiente y pulsar la tecla asterisco (\*) del teclado. Encontrará todos los resultados referidos a la revisión de secuencia actual (en este ejemplo rev 15 de la secuencia Demosequence1ac-TestCase) bajo el nodo de la revisión de secuencia actual, rev 15 (vea la [Figura 28](#) de la página 78). Esto incluye en especial todos los resultados de muestras con sus números de revisión actuales. Así puede seguirse y explicarse fácilmente el resultado actual. La [Figura 27](#) de la página 77 muestra la vista general de la secuencia con todas las subcarpetas en su versión más reciente.



**Figura 27** Revisión de secuencia inicial que muestra todas las carpetas

La [Figura 28](#) de la página 78 muestra todas las versiones anteriores de la secuencia. Están guardadas en la subcarpeta “Old Revisions”. La secuencia de ejemplo cuenta con 14 revisiones antiguas. Ahora tenemos que identificar las razones y acciones que han creado estas revisiones.

### 3 Análisis de muestras

#### Revisión y trazabilidad en secuencias

The screenshot displays the Agilent Cerity NDS interface. On the left, a tree view shows the sequence structure under 'AllResultsRestored'. A red box highlights the 'Old Revisions' folder, which contains a list of revisions for 'Demosequence1ac-TestCase' from Rev 1 to Rev 14. 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 lists 10 samples, including blanks, standards, and samples. Below the table, the 'Sample Entry' section is set to 'Sequence Logbook' and shows details for 'Blank-1'.

	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** Revisiones antiguas de la secuencia

Para identificar las razones de las revisiones se requiere una combinación de entradas del libro de registro de secuencia, libros de registro de muestras y el número de revisión. El primer paso para el seguimiento de estas revisiones es identificar las revisiones “internas”. Cerity NDS las crea basándose en modificaciones organizativas (por ejemplo, envíos para ejecución) que no cambian ningún registro de la secuencia. El software Cerity ejecuta estas modificaciones de secuencia como parte de su funcionalidad general.

Un ejemplo de creación de una revisión “interna” es la programación y ejecución de una secuencia para la adquisición de datos. Una vez completada la entrada de datos para la secuencia y el envío de la secuencia al sistema de adquisición, Cerity NDS aplica un cambio de estado interno a la secuencia (de “entrada de datos” a “preparada para la adquisición”). El siguiente cambio de estado es desde “preparada para la adquisición” a “adquisición iniciada” en un instrumento seleccionado. Para el usuario esto constituye sólo una acción que es “secuencia iniciada”. Sin embargo, Cerity NDS ve dos acciones y, por consiguiente, documenta dos revisiones de secuencia. Esta creación de revisiones internas es válida para cada ejecución de secuencia, independientemente de si la ejecución ha ocurrido como adquisición de datos o reprocesamiento de datos (véase también “[Revisiones de resultados](#)” en la [página 70](#)). La forma más rápida de identificar una revisión de secuencia interna es desde la marca de fecha y hora de la revisión situada en la parte superior del libro de registro de secuencia, como se muestra en la [Figura 29](#) de la [página 80](#). La marca de fecha y hora de la creación de la revisión es la primera actividad en la revisión de secuencia actual. Esta información del nivel más elevado muestra el estado actual de la secuencia, el operador que ha enviado dicha secuencia y la marca de fecha y hora del cambio de la base de datos (véase la [Figura 29](#) de la [página 80](#)). La marca de fecha y hora de la revisión inicial documenta también el usuario y su nombre, para facilitar aún más el seguimiento.

### 3 Análisis de muestras

#### Revisión y trazabilidad en secuencias

Marca de fecha y hora de revisión de secuencia inicial

Revision 1, **Ready for Analysis**, needs reprocessing, cannot be printed.  
Created by User1at 09/11/02, 18:36:13

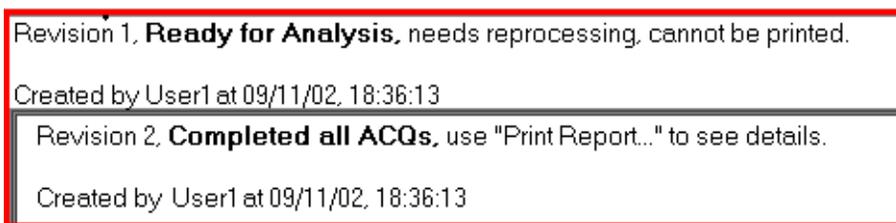
Description	Item	Comment	E-Sig	Timestamp
Sequence completed.	...	...	None	09/18/02, 19:55:42
Sample completed.	...	...	None	09/18/02, 19:55:36
Sample started.	...	...	None	09/18/02, 19:55:27
Sample completed.	...	...	None	09/18/02, 19:55:24
Sample started.	...	...	None	09/18/02, 19:55:14
Sample completed.	...	...	None	09/18/02, 19:55:11
Sample started.	...	...	None	09/18/02, 19:55:01
Sample completed.	...	...	None	09/18/02, 19:54:58
Sample started.	...	...	None	09/18/02, 19:54:47
Sample completed.	...	...	None	09/18/02, 19:54:45
Sample started.	...	...	None	09/18/02, 19:54:34
Sample completed.	...	...	None	09/18/02, 19:54:31
Sample started.	...	...	None	09/18/02, 19:54:21
Sample completed.	...	...	None	09/18/02, 19:54:18
Sample started.	...	...	None	09/18/02, 19:54:05
Sample completed.	...	...	None	09/18/02, 19:54:01
Sample started.	...	...	None	09/18/02, 19:53:47
Sample completed.	...	...	None	09/18/02, 19:53:44
Sample started.	...	...	None	09/18/02, 19:53:35
Sample completed.	...	...	None	09/18/02, 19:53:32
Sample started.	...	...	None	09/18/02, 19:53:22
Sample completed.	...	...	None	09/18/02, 19:53:19
Sample started.	...	...	None	09/18/02, 19:52:26
Sample completed.	...	...	None	09/18/02, 19:52:24
Sample started.	...	...	None	09/18/02, 19:52:14
Test started by user 'user3'	...	...	None	09/18/02, 19:52:13
Sequence started.	...	...	None	09/18/02, 19:52:12
Sequence queued.	...	...	None	09/18/02, 19:52:12
Sequence validated for correct input.	...	...	None	09/18/02, 19:52:11
Sequence 'Demosequence1 ac-TestCase - Reprocessed' reprocessing with method currently attached to the results, revision - 2	...	Updated	Signed	09/18/02, 19:51:27
Sequence completed.	...	...	None	09/18/02, 19:49:44
Sample completed.	...	...	None	09/18/02, 19:49:36
Sample started.	...	...	None	09/18/02, 19:49:26
Sample completed.	...	...	None	09/18/02, 19:49:22

**Figura 29** Marca de fecha y hora de revisión de secuencia inicial

Todas las revisiones de secuencia internas se identifican con una combinación del estado, que siempre es “needs reprocessing, can not be printed” (“necesita reprocesamiento, no puede imprimirse”) y la marca de fecha y hora. La marca de fecha y hora de una revisión de secuencia interna siempre es idéntica a la marca de la siguiente revisión de secuencia. La siguiente revisión de secuencia siempre tiene el estado de “reprocessing complete, use print report to see details” (“reprocesamiento completo, puede ver los detalles mediante el informe impreso”). La combinación de estas entradas con

marcas idénticas de fecha y hora identifica la primera revisión de secuencia como la interna en combinación con la revisión siguiente, véase la [Figura 30](#) de la página 81.

La [Figura 30](#) documenta que la revisión 1 de secuencia es una revisión “interna”, mientras que la revisión 2 de secuencia es el primer resultado de secuencia que además puede imprimirse.



**Figura 30** Superposición de dos marcas idénticas de fecha y hora de revisión de secuencia

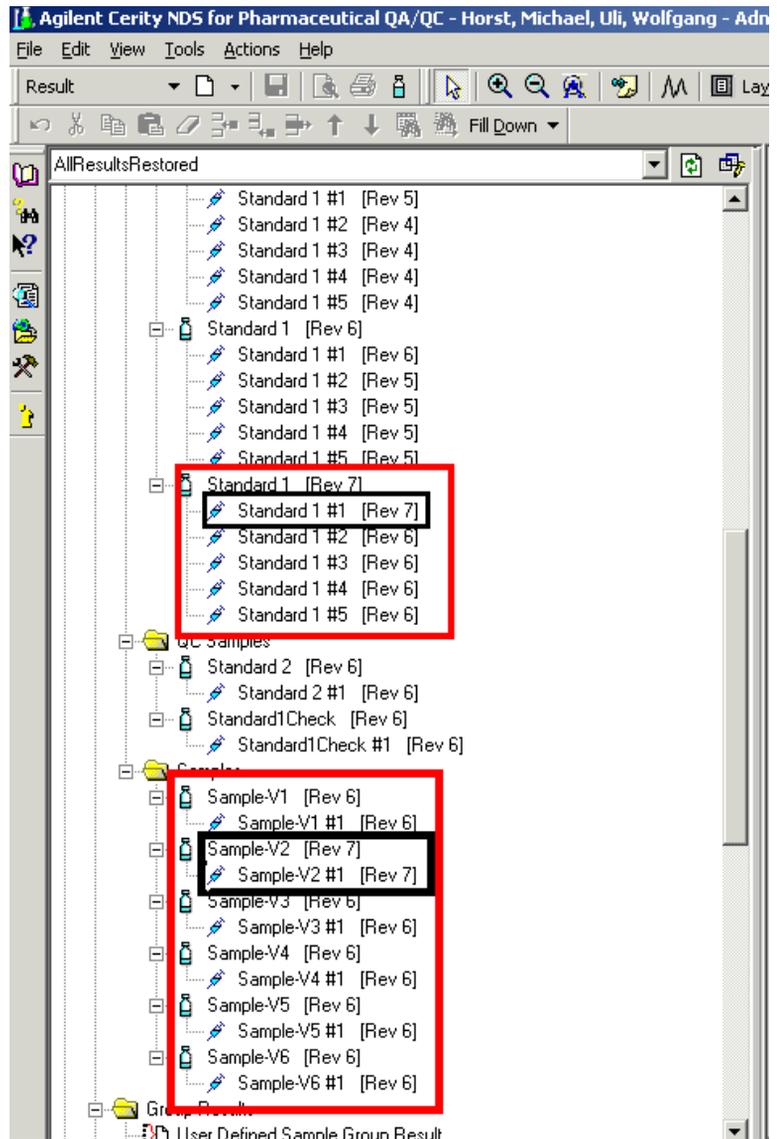
En resumen, puede identificar fácilmente todas las revisiones de secuencia creadas mediante ejecución o reprocesamiento de secuencias. Pueden identificarse revisiones internas de secuencia adicionales seleccionando cada revisión de secuencia y comparando la entrada de revisión y la marca de fecha y hora junto con el comentario. Las revisiones de secuencia que tengan la misma marca de fecha y hora y la misma identificación de usuario se corresponden y son el resultado del reprocesamiento de secuencias. Mediante un simple clic en cada revisión antigua se muestran estos datos y se posibilita el seguimiento y la documentación de todas las revisiones de secuencia creadas mediante la ejecución/reprocesamiento de secuencias.

**NOTA**

Las revisiones de secuencia creadas a través de la adquisición de datos y el reprocesamiento no presentan otros cambios que un resultado nuevo para todos los cálculos relacionados con una secuencia, por ejemplo, resultados de cuantificación. Estos resultados pueden imprimirse fácilmente para conseguir una documentación completa de los cambios. Los cambios en los análisis individuales o en los parámetros de análisis de datos se documentan en los libros de registro de muestras relacionados y, además, crean revisiones de secuencia separadas adicionales; véase también el paso 2.

**Paso 2 Efectuar el seguimiento de todos los cambios de secuencia creados por modificaciones de análisis individuales como, por ejemplo, la reintegración manual de estándares o modificaciones de métodos**

Si nos basamos en la identificación de las revisiones de secuencia de reprocesamiento, las revisiones de secuencia 3 y 8-9 fueron provocadas por cambios en la integración o calibración de las muestras de secuencias. La identificación de los cambios de los resultados requiere normalmente las revisiones de los resultados de las muestras individuales y la marca de fecha y hora de la creación de la revisión de secuencia. Puede identificar muestras con un paso de reanálisis individual adicional, ya que todas las revisiones de resultados de muestras se incrementan en 1 tan pronto como se ejecuta un cambio o reprocesamiento. En los datos de ejemplo de la [Figura 31](#) de la página 83, el número de revisión estándar de todos los resultados de inyección es seis (revisión uno en la adquisición de datos más cinco eventos de reprocesamiento). Es importante comprender que todas las revisiones de resultados deben tener el mismo número de revisión siempre que las revisiones de secuencia resulten del reprocesamiento y no se hayan aplicado modificaciones individuales.



**Figura 31** Identificación de resultados de muestras con modificación individual para la muestra V2 y el estándar 1

### 3 Análisis de muestras

#### Revisión y trazabilidad en secuencias

Tan pronto como se modifique el resultado individual, el número de revisión de la muestra modificada es más alto que todas las otras revisiones. En este ejemplo, dos revisiones de muestra, **V2** y **estándar 1**, rompen el requisito de “todos idénticos” de los resultados, tal como se muestra en la [Figura 31](#) de la página 83. Ambos tienen el número de revisión 7, que indica que estas muestras incluyen un paso de reprocesamiento individual. Los libros de registro de estas muestras presentan ahora los cambios actuales de las muestras individuales. La [Figura 32](#) muestra un subconjunto del libro de registro de muestras para la muestra V2.

The screenshot displays the Agilent Cerity NDS interface. At the top, the title bar reads "Agilent Cerity NDS for Pharmaceutical QA/QC - Horst, Michael, Uli, Wolfgang - Administrator - DB002\_Cerity A\_0104003 for Pharma QA-QC". Below the title bar is a menu bar (File, Edit, View, Tools, Actions, Help) and a toolbar. The main window is divided into several panes:

- Left Pane:** A tree view showing a hierarchy of "AllResultsRestored" containing folders for "Standard 1 #5 [Rev 5]", "Standard 1 [Rev 7]", "Standard 1 #1 [Rev 7]", "Standard 1 #2 [Rev 6]", "Standard 1 #3 [Rev 6]", and "Standard 1 #4 [Rev 6]".
- Right Pane (Results Table):** A table with the following data:
 

Compound Name	Injection#	RT	Peak Area	MeanArea
Hydrochlorothiazide	1	8.69	1711.85	1711.84603
Lisinopril				2328.21267
- Bottom Pane (Logbook):** A table with columns: Description, Item, Comment, E-Sig, Timestamp, Source, Type, Host. A red box highlights the following rows:
 

Description	Item	Comment	E-Sig	Timestamp	Source	Type	Host
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 4.10276142738179 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 8.306409730856 to 9.7992568621268 on signal VWD1 A, injection #1	SIMethod	Updated	Signed	09/12/02, 16:37:39	lab1\User2	Audit	CHEM22

**Figura 32** Subconjunto del libro de registro de muestra correspondiente a la muestra V2



El libro de registro presentado en la [Figura 33](#) indica únicamente un subconjunto de los cambios del estándar 1. El libro de registro muestra un par de cambios relacionados principalmente con la modificación de los eventos de integración individuales y de los ajustes de integración.

En resumen, la comprobación de los números de revisión de análisis de resultados (calibraciones, muestras y muestras QC) de la última revisión de secuencia documenta todas las muestras que se han reanalizado individualmente (“individualmente” significa “que no forma parte de un reprocesamiento de secuencia completo”). Si se identifica la cantidad de eventos de reprocesamiento de secuencia, también se conoce el número predeterminado de la revisión de resultado (como la cantidad de eventos de reprocesamiento más 1 para la adquisición inicial). Toda muestra que tenga un número de revisión más elevado que el número predeterminado debe contar con eventos de reanálisis individuales. En la secuencia ejemplo, éstos son dos muestras, la estándar 1 y la V2. Los libros de registro muestran los cambios actuales y permiten una trazabilidad completa de las modificaciones de reanálisis.

**Paso 3: Representación de modificaciones de muestras y revisiones de secuencias**

La representación de los cambios de resultados y de las revisiones de secuencia utiliza las marcas de fecha y hora de creación y modificación de secuencias. El estándar 1 se reanalizó el 09/12/02 a las 14:08:35 (hora en la que se guardan los cambios). La siguiente acción de guardar una secuencia se documenta a las 14:53:15. Esto significa que los cambios en el parámetro de integración para el estándar 1 son los cambios desde la revisión de secuencia 2 a la revisión 3. La documentación del cambio correspondiente a la revisión 3 se compone de las acciones siguientes: parámetro de integración modificado para el estándar 1 y aplicación de una autointegración para este estándar. La aplicación de estos parámetros creó la revisión de secuencia 4 (interna) y la revisión 5 (reprocesamiento completado).

La reintegración manual de V2 se guardó a las 16:37:39.

**NOTA**

La representación de los eventos reales para este ejemplo en concreto es muy difícil, ya que los ordenadores de este grupo no cuentan con marcas de fecha y hora sincronizadas. Esto puede verse desde el libro de registro mostrando las columnas de "host" y comprobando las horas locales correspondientes a los tres ordenadores distintos CHEM22, PCERITYAQ y CERITYDB.

---

Los dos pasos de reanálisis explican ahora dos de las restantes tres revisiones de secuencia. Por este motivo, la última información de revisión de secuencia debe documentarse en el libro de registro de secuencias.

**NOTA**

El guardado de las modificaciones de muestras individuales y el guardado de la secuencia son acciones independientes. Esto explica la delta en el momento de los cambios sobre el resultado y la siguiente revisión de secuencia.

---

**Paso 4: Revisión del libro de registro de secuencias en busca de modificaciones de calibración**

El libro de registro de secuencias almacena todos los eventos relativos a la secuencia. Estos eventos son, principalmente, ejecución de secuencias, creación, modificación y reprocesamiento de eventos, pero también incluyen modificaciones de entradas de muestras. En este ejemplo, el libro de registro de secuencias muestra cambios en la cantidad de muestra para las líneas de muestra 2, 3 y 11. Estos cambios se guardaron el 09/12/02 a las 16:29:48, tal como se muestra en la [Figura 34](#) de la página 88.

### 3 Análisis de muestras

#### Revisión y trazabilidad en secuencias

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-TestCase -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

No Sample Details available

**Figura 34** Subconjunto del libro de registro de muestras que representa modificaciones de cuantificación

Con estos cambios de cantidad de muestra, la documentación de todos los cambios para todas las revisiones de secuencia está completa. Queda por representar esto para las revisiones de secuencia abiertas restantes 3, 8 y 9.

**NOTA**

Si se hubieran sincronizado todos los PC de un grupo, habría sido posible una representación directa basada en las marcas de fecha y hora. Sin la sincronización de estas marcas nos basamos en las entradas de datos de organización del libro de registro de secuencias en riguroso orden de llegada. Esto significa que las entradas del libro de registro de secuencias no están clasificadas por la marca de fecha y hora sino por el orden de llegada.

La [Tabla 7](#) proporciona una vista general de todas las revisiones de secuencia, sus historiales de cambios y las razones de los cambios.

**Tabla 7** Documentación de las revisiones de secuencia, incluyendo elementos de cambio

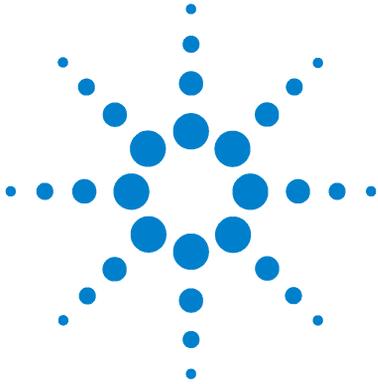
Núm. Rev.	Fecha	Marca de fecha y hora (no sincronizada)	Estado dado	Acción identificada	Razón de revisión	Explicación
1	11-Sep	18:36:15	Lista para analizar, requiere reprocesamiento	Adquis. completada	Interna	Revisión interna desde envío de secuencia
2		18:36:15	Adquis. completada, preparada para impresión	Adquis. completada, análisis de datos realizado	Primeros resultados	Adquisición de datos completada
3	12-Sep	14:53:15	Lista para analizar, requiere reprocesamiento	Una muestra modificada individualmente	Ha cambiado un resultado en la secuencia	Modificación de la muestra denominada estándar 1
4	12-Sep	15:25:36	No completa, requiere reprocesamiento	Envío a reprocesamiento	Interna	Relacionada con la rev. 5 con reprocesamiento
5	12-Sep	15:25:36	Lista para impresión	Reprocesamiento ejecutada	Reprocesamiento	Primer reprocesamiento ejecutado
6	12-Sep	17:07:54	No completa, requiere reprocesamiento	Envío a reprocesamiento	Interna	Interna debido al reprocesamiento

### 3 Análisis de muestras

#### Revisión y trazabilidad en secuencias

**Tabla 7** Documentación de las revisiones de secuencia, incluyendo elementos de cambio (continuación)

Núm. Rev.	Fecha	Marca de fecha y hora (no sincronizada)	Estado dado	Acción identificada	Razón de revisión	Explicación
7	12-Sep	17:07:54	Lista para impresión	Reprocesamiento completado	Resultado de secuencia actualizado	Segundo reprocesamiento ejecutado
8	12-Sep	17:28:07	No completa, requiere reprocesamiento	Modificación de los datos de cuantificación	Cambios en los resultados de las muestras	Cantidades de muestras modificadas
9	12-Sep	17:33:01	No completa, requiere reprocesamiento	Reintegración de la muestra V2	Cambios en los resultados de las muestras	Integración manual aplicada de la muestra V2
10	12-Sep	17:37:52	No completa, requiere reprocesamiento	Envío a reprocesamiento	Interna	Interna debido al reprocesamiento
11	12-Sep	17:37:52	Lista para impresión	Reprocesamiento completado	Reprocesamiento	Tercer reprocesamiento ejecutado
12	12-Sep	20:44:16	No completa, requiere reprocesamiento	Envío a reprocesamiento	Interna	Cuarto reprocesamiento ejecutado
13	12-Sep	20:44:16	Lista para impresión	Reprocesamiento completado	Reprocesamiento	
14	18-Sep		No completa, requiere reprocesamiento	Envío a reprocesamiento	Interna	Quinto reprocesamiento ejecutado
15	18-Sep		Revisión actual, preparada para impresión	Ninguna, revisión actual	Ninguna	Ninguna



## 4 Configuración de métodos

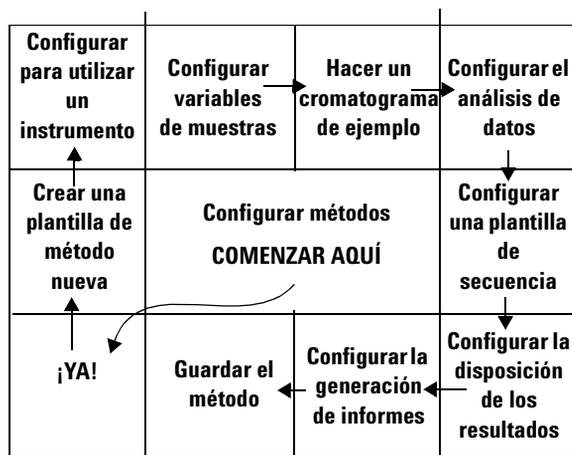
Conceptos de los métodos Cerity para control de calidad farmacéutico	93
Secciones de los métodos Cerity para control de calidad farmacéutico	98
Calibración	104
Cálculos personalizados	110
Formato para la revisión de datos	127
Generación de informes	130

Aprenda conceptos que le pueden ayudar a configurar métodos. Este capítulo le ayudará a completar los ejercicios de la parte Setting Up Methods de las *Getting Started Cards*.



## 4 Configuración de métodos

El esquema de instrucciones siguiente muestra a los usuarios avanzados y a los administradores el camino para configurar un método. Comience con ¡YA!.



Cada tema de este capítulo proporciona información fundamental para ayudarle a seguir este esquema.

# Conceptos de los métodos Cerity para control de calidad farmacéutico

Comienza a crear un método principal cuando selecciona **Method** en la lista **New** de la barra de herramientas Standard.

## Métodos principales

Un *método principal* es un método que sólo pueden editar los usuarios designados. Todos los usuarios pueden utilizar un método principal.

Cuando esté preparado para que otros usuarios modifiquen el *método principal*, puede publicar la revisión actual. Si su administrador activa la auditoría para la tarea “Publicar un método”, es posible que deba introducir su nombre de usuario y su contraseña para publicar el método.

Una vez haya publicado el método principal, cualquier usuario con derechos para editar métodos principales puede editar esta revisión. Si modifica el método principal, la revisión nueva permanecerá sin publicar hasta que vuelva a publicarla.

## Métodos de instrumentos

Un *método de instrumento* es un método principal publicado que se ha asignado a un instrumento nuevo. Cualquier usuario puede editar o utilizar un método de instrumento.

Una vez haya publicado un método principal, puede asignarlo a otro instrumento en el **Method Wizard** (asistente de método). Para asignar el método, debe crear un *método de instrumento* con el método publicado como plantilla. Los usuarios pueden editar entonces cualesquiera de los ajustes originales de la pantalla Method si tienen los derechos asignados por el administrador de Cerity NDS.

Si el instrumento al que está asignando el método está configurado de forma diferente que en el método original, asegúrese de cambiar los parámetros del instrumento en la pantalla Method.

Puede comenzar a crear un método de instrumento cuando selecciona **Instrument Method** en la lista **New** de la barra de herramientas Standard.

Véase la *"Method View" en la página 25* y *"Method Setup" en la página 44* para obtener más información sobre el Method Wizard (asistente de método) y la pantalla Method.

## Métodos para muestras únicas o secuencias

Cerity para control de calidad farmacéutico le permite crear métodos para muestras únicas y métodos para secuencias. Por consiguiente, únicamente se utiliza un método para todas las muestras de una secuencia.

Existen varias diferencias entre un método para muestras únicas y uno para secuencias:

- El método para secuencias contiene una tabla en la que puede configurar una secuencia que utilice frecuentemente.
- El método para secuencias organiza las muestras y los estándares en grupos para cálculos y generación de informes personalizados, como el grupo de muestras QC, el grupo de estándares de calibración, el grupo de muestras y el grupo de muestras personalizadas.
- Puede incluir Cálculos del ruido para secuencias pero no para muestras únicas.
- Puede seleccionar el orden de calibración y el procedimiento de calibración para secuencias.

## Métodos adjuntos a entradas y resultados

Cuando introduzca una muestra única o cree una secuencia nueva, seleccione el método que debe usarse con dicha muestra o secuencia. La información y las instrucciones contenidas en ese método permanecen adjuntas a la muestra o secuencia a lo largo de todo el análisis y en los resultados.

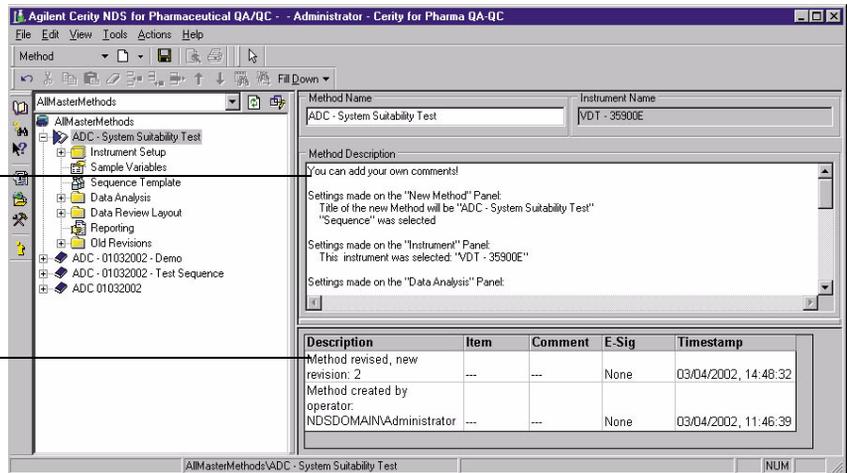
Esto significa que si cambia el valor de una entrada de muestra o un ajuste de integración y, a continuación, reprocesa, vuelve a realizar los cálculos con la revisión del método adjunta originalmente al resultado. Si cambia el método o quiere utilizar uno diferente para reprocesar los resultados, debe adjuntar primero la revisión actual o el método nuevo al resultado.

## Entradas de métodos y cambios

Las entradas de métodos y los cambios se describen en la figura siguiente.

**Method Description (Descripción del método):** Las selecciones en el Asistente de método aparecen en el espacio de trabajo Method Description.

**Method Logbook (Libro de registro de métodos):** Las entradas y cambios en el método aparecen en el Method Logbook.



## Revisiones de métodos

Cuando crea y guarda una plantilla de método con el Asistente de método, crea la revisión 1 del método. Cada vez que cambia y guarda el método tras las revisión 1, se crea una nueva. También se crea una revisión nueva una vez ha publicado un método principal.

Si selecciona una revisión de la carpeta Old Revisions en una carpeta de método seleccionado, la **Method Description** (descripción del método) y el **Method Logbook** (libro de registro del método) de dicha revisión aparecen en el espacio de trabajo.

## Lo que puede hacer con los métodos de Cerity para control de calidad farmacéutico

Los métodos de Cerity para control de calidad farmacéutico le permiten:

- Asignar un método a un instrumento para el control de instrumentos.
- Utilizar sus propios multiplicadores y divisores para calcular una concentración para cada muestra.
- Utilizar sus propias variables de muestra personalizadas para cálculos y generación de informes personalizados.
- Utilizar una tabla de secuencias como plantilla para todas las secuencias similares o repetidas.
- Utilizar un cromatograma de ejemplo para ayudarle a integrar e identificar los picos.
- Sumar áreas enteras del cromatograma.
- Introducir cantidades de compuestos variables para cada muestra para calibraciones de nivel único o de multinivel.
- Cuantificar las muestras en secuencias utilizando el estándar antes que las muestras, los estándares antes y después de las muestras o todos los estándares en la secuencia.

## Conceptos de los métodos Cerity para control de calidad farmacéutico

- Analizar muestras con un método que contiene factores de respuesta ya existentes o analizar secuencias cuya cuantificación de muestra se actualiza con estándares de calibración en la secuencia.
- Cuantificar compuestos no calibrados y picos no identificados utilizando factores de respuesta de compuestos calibrados.
- Utilizar sus propias variables y fórmulas personalizadas para calcular estadísticas de grupos de resultados y otros cálculos necesarios para su laboratorio.
- Ver notas y advertencias de “pasa/no pasa” cuando las variables y los cálculos no están dentro de los límites predefinidos.
- Ver cualquier campo, variable o cálculo disponibles en la disposición de los resultados y en los informes.
- Utilizar variables de idoneidad del sistema ya existentes para comprobar el rendimiento.
- Utilizar tipos de informes predefinidos asociados con plantillas que puede cambiar o crear para generar los informes que necesite.

# Secciones de los métodos Cerity para control de calidad farmacéutico

El método Cerity para control de calidad farmacéutico contiene todos los parámetros requeridos para el control de los instrumentos, la adquisición de datos y el análisis y la evaluación de datos. Además, el método contiene las variables de muestras y plantillas definidas por usted mismo para secuencias (plantilla de secuencia), revisión de resultados (disposición de revisión de datos) e informes (plantilla de informe).

Utilice el **Method Wizard** (asistente de método) para seleccionar las secciones y opciones que necesite que aparezcan en la plantilla de métodos de la pantalla Method. Todas las secciones que aparecen en la pantalla Method se describen en las secciones que siguen.

## Configuración de instrumentos

Esta sección le permite introducir parámetros para los instrumentos configurados.

Un *método de equilibrio* es un método configurado con parámetros de instrumentos únicamente para equilibrar la columna y estabilizar la línea de base.

Puede configurar un método de equilibrio para equilibrar el instrumento y la columna antes de un análisis, o al final de una secuencia para preparar la columna para la secuencia siguiente. Asegúrese de que define el volumen de inyección del inyector automático en cero.

## VARIABLES DE LAS MUESTRAS

Las variables de las muestras son factores y definiciones variables que se utilizan para la cuantificación, los cálculos personalizados y los informes.

### Variables de las muestras del sistema

La aplicación Pharmaceutical QA/QC proporciona variables de Multiplicador y Divisor para la cuantificación. La asignación de un nombre de encabezamiento activa las variables.

Cuando asigna un método que utiliza estas variables para una muestra o secuencia, las variables con sus valores predeterminados aparecen en la etiqueta **Amounts** del panel **Sample Entry**. Puede modificar el valor de estas variables para cada muestra antes de un análisis.

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				

### Variables de muestras personalizadas

Puede definir su propio grupo de variables como multiplicadores o divisores utilizados para cálculos personalizados e informes. Puede introducir nombres de encabezamientos, valores predeterminados y comentarios que aparecen en las tablas de informes de muestras.

## Plantilla de secuencia

Una *plantilla de secuencia* le permite introducir el orden y el número de estándares de calibración y muestras desconocidas en una tabla de secuencias.

## 4 Configuración de métodos

### Secciones de los métodos Cerity para control de calidad farmacéutico

La plantilla de secuencia aparece como la tabla de secuencias de la pantalla Sample una vez ha creado una secuencia para el método que utiliza la plantilla. Puede programar la secuencia para que se analice sin ningún cambio en la tabla basándose en la plantilla.

*Si necesita introducir estándares de calibración en la plantilla de secuencia, debe completar primero la configuración de la calibración en Data Analysis.*

	Sample Name	Sample Type	Cal. Level	Bracketing	Custom Sample Group	Vial #
1	wfj_171001_j20_1FA_cl_1.1	Calibration	1	Open	1FA_cl_1	1
2	wfj_171001_j20_1FA_cl_2.1	Calibration	2	None	1FA_cl_2	1
3	wfj_171001_j20_1FA_cl_3.1	Calibration	3	None	1FA_cl_3	1
4	wfj_171001_j20_1FA_sa_1.1	Sample			1FA_sa_1	1
5	wfj_171001_j20_1FA_sa_2.1	Sample			1FA_sa_2	1
6	wfj_171001_j20_1FA_sa_3.1	Sample			1FA_sa_3	1
7	wfj_171001_j20_1FA_cl_1.2	Calibration	1	None	1FA_cl_1	1
8	wfj_171001_j20_1FA_cl_2.2	Calibration	2	None	1FA_cl_2	1
9	wfj_171001_j20_1FA_cl_3.2	Calibration	3	None	1FA_cl_3	1
10	wfj_171001_j20_1FA_sa_1.2	Sample			1FA_sa_1	1
11	wfj_171001_j20_1FA_sa_2.2	Sample			1FA_sa_2	1

## Cromatograma de ejemplo

Un *Cromatograma de ejemplo* es cualquier cromatograma adquirido a partir de una inyección única que el usuario elige utilizar para configurar la integración y la identificación.

Puede crear primero un *Cromatograma de ejemplo* antes de configurar los parámetros de análisis de datos del método. El Cromatograma de ejemplo le permite comprobar los parámetros de integración y los eventos e identificar compuestos. También puede usar este cromatograma para comparar los resultados de otras muestras.

*Consulte “Produce an example chromatogram” en la Ayuda en línea para generar un Cromatograma de ejemplo inicial para un método.*

Seleccione un cromatograma de la base de datos o analice una muestra para generar un Cromatograma de ejemplo. Únicamente necesita un método “esqueleto” (únicamente parámetros de instrumentos) para generar un Cromatograma de ejemplo. No es necesario que seleccione un Cromatograma de ejemplo para configurar el análisis de datos.

## Integración

### Eventos iniciales y calculados

Puede definir eventos de integración iniciales y calculados para una señal única o para todas las señales procedentes de un detector.

### Herramientas para integrar un cromatograma

Puede cambiar los ajustes de integración en esta sección del método si no le gusta la integración predeterminada del Cromatograma de ejemplo.



- Integrate – El botón Integrate le permite integrar el Cromatograma de ejemplo una vez ha modificado los eventos.
- Autointegrate – Esta función calcula los ajustes predeterminados del cromatograma.

## Identificación de compuestos

### Opciones para añadir o eliminar identificaciones



Puede utilizar la barra de herramientas o los menús de acceso directo en el cromatograma y en la tabla de compuestos para añadir o eliminar identificaciones. Si quiere identificar todos los picos como compuestos, la forma más fácil de hacerlo es mediante el botón Add Times of Signal.

*Consulte la Technical Reference Guide para obtener más detalles sobre algoritmos de integración y el proceso de Cerity para control de calidad farmacéutico para identificar compuestos.*

### Suma de picos

Únicamente puede configurar la Suma de picos si selecciona la opción **Peak Summing** en el **Method Wizard** (asistente de método). Puede confinar interactivamente un área en el cromatograma para la suma de picos.

## Calibración

La aplicación Pharmaceutical QA/QC proporciona muchas opciones para configurar la calibración. Hay dos que destacan y que distinguen la calibración de Cerity para control de calidad farmacéutico de los otros programas y son:

- Puede introducir cantidades de estándares de calibración para cada muestra.
- Puede configurar la calibración para que se guarden los factores de respuesta en el método y utilizar los estándares de calibración para confirmar la calibración poco frecuente. También puede configurar la calibración de forma que tenga que recalibrar frecuentemente con los estándares de calibración introducidos durante una secuencia.

Consulte "[Calibración](#)" en la página 104 para obtener más información.

## Cuantificación

Un *grupo de compuestos* es un grupo de compuestos calibrados o no calibrados para los que quiere configurar cálculos personalizados y límites.

Los compuestos identificados que ha eliminado de la tabla de calibración aparecen en el espacio de trabajo Quantitation como compuestos no calibrados. Tanto para los compuestos no calibrados como para los picos no identificados, puede indicar un factor de respuesta basado en el del compuesto calibrado. También puede configurar *grupos de compuestos* para compuestos calibrados y no calibrados.

## Cálculos personalizados

Consulte "[Cálculos personalizados](#)" en la página 110 para obtener más detalles.

La aplicación Pharmaceutical QA/QC le permite incluir cálculos adicionales y sentencias condicionales que operan sobre los datos proporcionados por la cuantificación. Estos cálculos personalizados pueden utilizarse en cálculos posteriores y pueden mostrarse en la pantalla Results e imprimirse en informes. Se almacenan en la base de datos junto con los resultados generados automáticamente por el software.

## Límites

Puede definir límites para los tipos de resultados siguientes:

- Inyecciones únicas
- Resúmenes de multiinyección
- Grupos de tipo muestra, sólo para secuencias

Las variables y cálculos disponibles son los que estaban disponibles o que ha configurado para los distintos tipos de resultados en el espacio de trabajo Custom Calculations. Dentro de cada tipo de resultado puede configurar límites para grupos diferentes de muestras y aplicar estos límites a todos los compuestos o a los grupos de compuestos que configure en la cuantificación.

Todos los resultados de comprobación de límites para el mismo elemento único se combinan en un solo resultado.

### NOTA

Por ejemplo, puede configurar límites para los ftalatos que aparecen en los resultados de inyección única para el estándar de calibración. Aquí, configura un grupo de compuestos en cuantificación denominados ftalatos y asigna los ftalatos calibrados y los no calibrados al grupo.

## Formato para la revisión de datos

Consulte "[Formato para la revisión de datos](#)" en la página 127 para obtener más información.

La tabla de resultados y los elementos de resumen que aparecen en la pantalla Result dependen de sus selecciones en Formato para la revisión de datos.

## Generación de informes

Consulte "[Generación de informes](#)" en la página 130 para obtener más detalles.

Configure la generación de informes en el método. Puede cambiar algunos de los ajustes del método para cada muestra única o para una secuencia. Los informes se generan automáticamente mientras se analiza la muestra o secuencia y se pueden volver a generar durante el reprocesamiento.

## Calibración

### Selecciones para la calibración de Cerity para control de calidad farmacéutico

La *Calibración* determina los factores de respuesta mediante estándares de calibración para calcular las concentraciones absolutas de componentes en las muestras.

Un *estándar de calibración* es una muestra que contiene una cantidad conocida del compuesto que se quiere cuantificar.

Un *factor de respuesta* es el valor de la respuesta dividida por la cantidad para cada pico o la cantidad dividida por la respuesta. O se calcula a partir de un ajuste de curvas.

Una *calibración de nivel único* utiliza una concentración única de estándar para la curva de calibración. La curva de calibración presenta una línea recta con dos puntos, la concentración del estándar único frente al punto de respuesta y el punto cero.

Una *calibración multinivel* utiliza concentraciones múltiples de la disolución estándar y puede seleccionar el tipo de curva que se ajuste mejor a los datos.

La mayoría de las elecciones de calibración de Cerity para control de calidad farmacéutico las realizará en el **Method Wizard** (asistente de método). Una vez haya acabado con el **Method Wizard** y haya guardado las selecciones de calibración, no podrá cambiarlas. Deberá crear un método nuevo con selecciones nuevas.

#### Tabla de calibración de compuestos

Puede configurar una tabla de calibración nueva, mantener una tabla de calibración procedente de un método que haya copiado o configurar una calibración manual.

## Modos de calibración

Tanto para muestras únicas como para secuencias, puede configurar la calibración en el Asistente de método con las opciones siguientes:

- Una cantidad fija o variable para calibración de un solo nivel
- Una cantidad fija o variable para calibración multinivel
- Calibración manual

Si ha seleccionado **Variable Amounts** en el **Method Wizard**, puede introducir una cantidad nueva cuando introduzca una muestra o secuencia en la pantalla Sample. Si ha seleccionado **Fixed Amounts** en el **Method Wizard**, deberá introducir las cantidades para cada compuesto en Calibration en la pantalla Method. No podrá introducir una cantidad nueva cuando introduzca una muestra en la pantalla Sample.

## Recalibración y orden de cuantificación

Para las secuencias puede seleccionar el tipo de recalibración y el orden de la cuantificación de la muestra con los estándares de calibración:

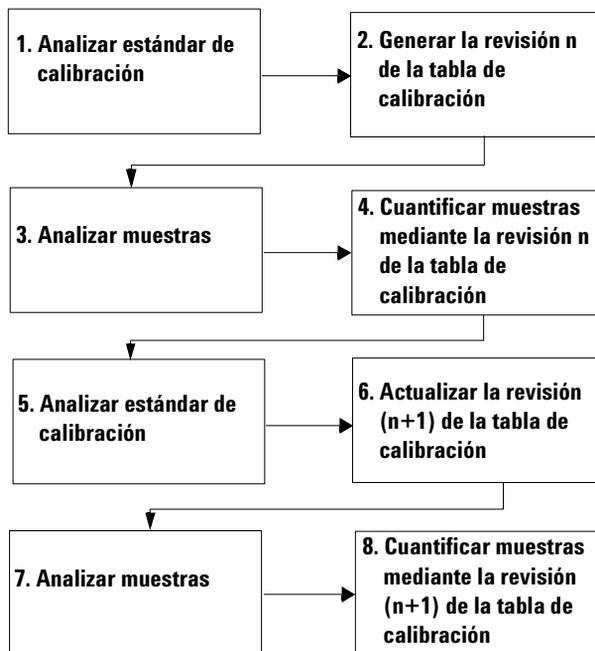
- **Calibración de actualización única**  
Se cuantifica un conjunto de muestras basándose en el estándar de calibración o en el promedio de los estándares de calibración que preceden al conjunto de muestras.
- **Calibración general**  
Los estándares de calibración se analizan y promedian antes de que se cuantifiquen las muestras (también denominado agrupamiento de “gran promedio”).
- **Agrupamiento**  
Se cuantifica un conjunto de muestras basándose en el promedio de los estándares de calibración anteriores y posteriores al conjunto de muestras.

## Calibración de actualización única

En la calibración de actualización única, la tabla de calibración se actualiza después de cada estándar. La tabla de calibración actualizada se utiliza para cuantificar las muestras sucesivas hasta el estándar de calibración siguiente. La secuencia de eventos se muestra en la [Figura 35](#).

La tabla de calibración puede inicializarse con tiempos de retención y factores de respuesta mediante la opción **Replace** para una calibración. Este modo se utiliza típicamente al comienzo de una secuencia de análisis de HPLC.

Para generar un promedio móvil de los tiempos de retención y/o factores de respuesta de los estándares de calibración, se utiliza la opción **Average** para la calibración. Este modo se utiliza típicamente una vez que se han sustituido los datos de calibración.



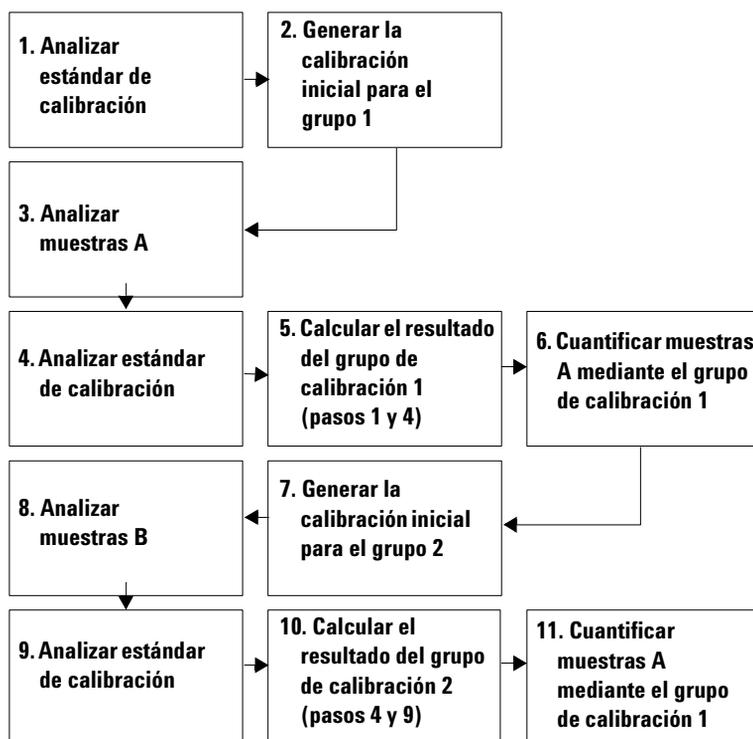
**Figura 35** Esquema de la recalibración de actualización individual

## Agrupamiento

En la calibración de agrupamiento, la tabla de calibración se actualiza mediante dos conjuntos de estándares de calibración, antes y después de las muestras. Las muestras no se cuantifican hasta que se ha analizado el segundo conjunto de estándares de calibración. La secuencia de eventos se muestra en la [Figura 36](#).

Los factores de respuesta ya están (o se sustituyen) al abrir el grupo y se promedian con los valores de calibración obtenidos al cerrar el grupo. Los tiempos de retención se tratan de la misma forma que en las calibraciones de actualización única.

Para la evaluación de las inyecciones de idoneidad del sistema, éste permite que se inserte una calibración de actualización única inicial al comienzo de la secuencia, antes de las calibraciones agrupadas.

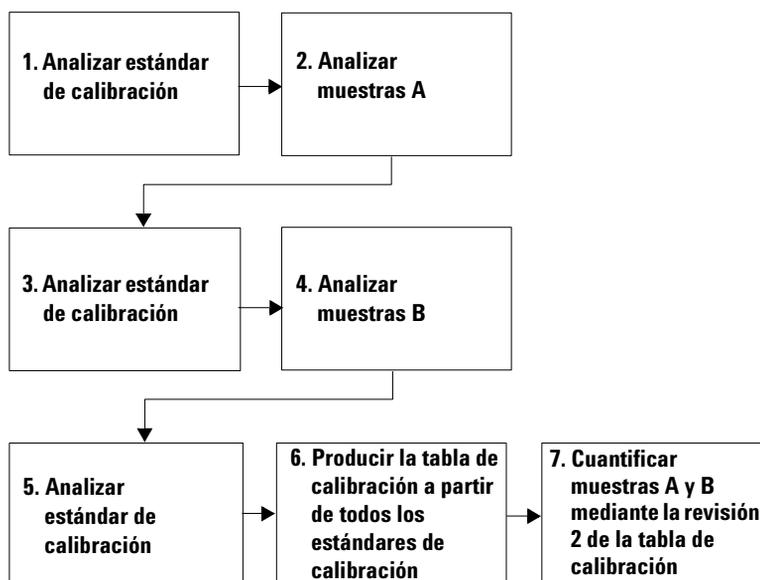


**Figura 36** Esquema de la recalibración de agrupamiento

## Agrupamiento general

En la calibración de agrupamiento general, la tabla de calibración se inicializa al comienzo de la secuencia. Los resultados del primer conjunto de estándares de la secuencia sustituyen a los resultados de calibración existentes. Todos los estándares de calibración de la secuencia se utilizan para producir una tabla de calibración al final de la secuencia. Esto se utiliza para cuantificar todas las muestras. La secuencia de eventos se muestra en la [Figura 37](#).

Los factores de respuesta se sustituyen al inicio de la secuencia con los valores del primer estándar de calibración y se promedian con los valores obtenidos durante la secuencia. Los tiempos de retención se tratan de la misma forma que en las calibraciones de actualización única.



**Figura 37** Esquema de la recalibración de agrupamiento general

## Procedimientos de calibración

Para las secuencias puede elegir entre dos procedimientos de calibración:

- Calibración específica de un instrumento
- Calibración específica de una secuencia

**Calibración específica de un instrumento** Este tipo de procedimiento de calibración calibra el instrumento para un análisis específico. Utilice este procedimiento cuando la calibración sea estable durante un periodo prolongado. Cuando analiza los estándares de calibración con el método, los factores de respuesta y las curvas de calibración se guardan en el método. Todas las muestras que utilizan este método se cuantifican con los factores de respuesta del método. Puede optar por actualizar la calibración con los nuevos estándares de calibración. Utilice este procedimiento principalmente con análisis de GC. Con este tipo de procedimiento se analizan muestras únicas.

**Calibración específica de una secuencia** Este procedimiento de calibración calibra el instrumento únicamente para la secuencia actual. Utilice este procedimiento cuando la calibración sea estable únicamente durante un tiempo corto. Los factores de respuesta no se guardan en el método. Se actualizan cada vez que analiza una secuencia con los estándares de calibración para un método. Utilice este procedimiento principalmente con análisis de LC.

## Cálculos personalizados

Puede acceder a los cálculos personalizados de Cerity para control de calidad farmacéutico mediante una interfase del tipo hoja de cálculo similar a Microsoft® Excel. La cantidad y tipo de hojas de cálculo, para las que puede configurar cálculos depende del tipo de método, muestra única o secuencia, y del tipo de resultado. Las variables disponibles de la base de datos dependen también del tipo de resultado.

### Tipos de resultados disponibles para cálculos personalizados

Un *tipo de resultado* es una categoría de resultado basada en una inyección, en un grupo de muestras o estándares o en una secuencia.

Un grupo de tipo muestra es un conjunto de resultados de secuencia agrupados de acuerdo con el tipo de muestra, como el estándar de calibración, muestra QC o grupos de muestras. También puede definir sus propios grupos de muestra personalizados.

Para las *muestras únicas*, los cálculos personalizados pueden configurarse para resultados de inyección única y para resúmenes de inyecciones múltiples. Utilice variables de método, incluyendo variables de muestras personalizadas definidas en el método, y resultados de cuantificación de compuestos y picos para configurar los cálculos.

Para las secuencias, los cálculos personalizados pueden configurarse para resultados de inyección única, resúmenes de inyecciones múltiples y *grupos de tipo muestra*.

### **El proceso de configurar cálculos personalizados**

Durante la configuración de los cálculos personalizados, usted añade columnas a la hoja de cálculo que contienen campos, variables y resultados ya existentes en la base de datos y, seguidamente, añade columnas nuevas que contienen las fórmulas para calcular las variables nuevas que defina.

Se dispone de diversos operadores matemáticos y sentencias condicionales para operar sobre las variables. La sintaxis para combinar las variables con estas funciones es esencialmente la misma que la de Microsoft Excel. Consulte la Ayuda de referencia en línea para encontrar las descripciones de todas las funciones disponibles.

Observe que si se agregan compuestos al método en una fecha posterior, hay que rehacer las hojas de cálculos personalizados para que se calculen los resultados de compuestos adicionales.

## **Generación de cálculos personalizados**

Para ayudarle a entender el proceso de configuración, mire cómo se generan los cálculos personalizados. Mientras observa esta figura, note que el sistema utiliza resultados de cálculo personalizados de inyecciones únicas para calcular resultados resumen de inyecciones múltiples. Éstos, a su vez, pueden utilizarse para calcular resultados de grupo de tipo muestra. Todos los resultados se almacenan en la base de datos y se toman de ella.

#### 4 Configuración de métodos Cálculos personalizados

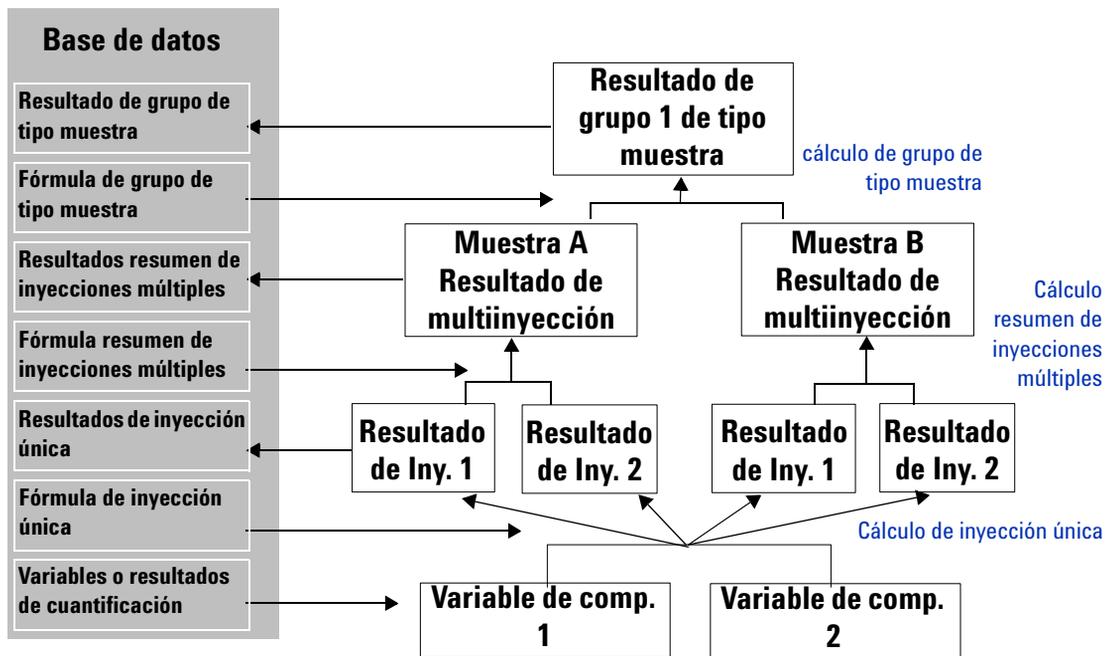


Figura 38 Jerarquía de cálculos generados

### Ejemplo de generación de cálculo

<b>Cálculos por grupo de muestras</b> (RSD de cantidades=STDEV (cantidad de la muestra A, cantidad de la muestra B))	<b>Grupo muestra 1</b>				<b>Grupo muestra 2</b>			
<b>Cálculos por muestra</b> (Cantidad media = promedio (cantidad Iny1 + cantidad Iny2))	<b>Muestra A</b>		<b>Muestra B</b>		<b>Muestra C</b>		<b>Muestra D</b>	
<b>Cálculos por inyección</b> (Cantidad%= Cantidad impureza/cantidad comp. principal*100)	Iny. 1	Iny. 2	Iny. 1	Iny. 2	Iny. 1	Iny. 2	Iny. 1	Iny. 2
<b>Desviación est. de las cantidades</b>	0,14				0,08			
<b>Cantidad media</b>	1,86		2,06		3,56		3,44	
<b>Cantidad (resultado existente)</b>	1,8	1,92	2,01	2,11	3,51	3,60	3,49	3,40
<b>Cantidad% (cálculo por inyección)</b>	0,15	0,16	0,17	0,18	0,29	0,30	0,29	0,28

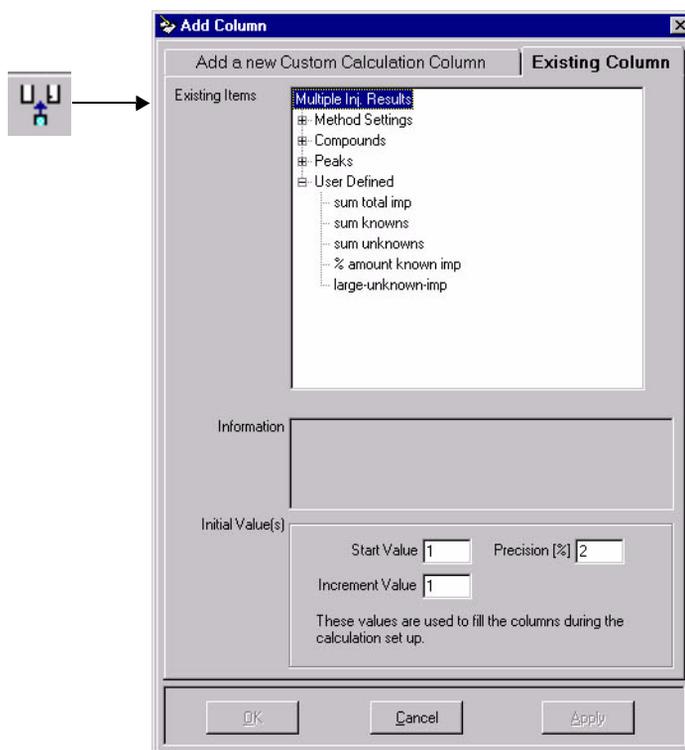
## Definición de la hoja de cálculo

Puede configurar los cálculos personalizados mediante una interfase familiar del tipo hoja de cálculo similar a Microsoft Excel. Estas hojas de cálculo le permiten configurar y realizar cálculos sobre los tipos de resultados para cada etapa del proceso de cálculo.

- La hoja de cálculo de inyección única, que funciona tras la cuantificación, le permite configurar un cálculo de inyección única para todos los tipos de muestras. (Figura 40)
- La hoja de cálculo resumen de inyección múltiple le permite configurar cálculos para inyecciones múltiples de la misma muestra (un cálculo para todos los tipos de muestras). (Figura 41)
- La hoja de cálculo de grupo de tipo muestra le permite configurar cálculos para un grupo del mismo tipo de muestra y para grupos de muestras personalizadas. (Figura 42)

### Adición de resultados/variables existentes

En las hojas de cálculo, primero añade una columna que contenga un resultado o variable existente antes de que pueda configurar una fórmula o cálculo nuevos que usen esta variable o resultado. Las variables o resultados existentes disponibles dependen del tipo de resultado.



**Figura 39** Lista de variables/resultados existentes para cálculos resumen de multiinyección.

#### Variables o resultados de inyección única

- Método y variables de muestras
- Integración de compuestos y resultados de cuantificación
- Integración de picos y resultados de cuantificación
- Variables de muestras personalizadas (configuradas en la sección Sample Variables del método)

**Variables o resultados resumen de multiinyección**

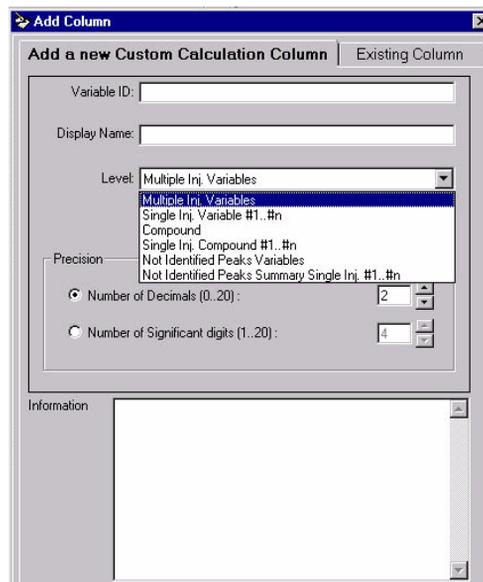
- Variables de método
- Integración de compuestos y resultados de cuantificación
- Integración de picos y resultados de cuantificación
- Variables o resultados definidos por el usuario: son los resultados del cálculo personalizado de la fórmula configurada en la hoja de cálculo de inyección única.

**Variables o resultados de grupo de tipo muestra**

Únicamente los resultados definidos por el usuario de los cálculos personalizados configurados en la hoja de cálculo resumen de multiinyección están disponibles como variables para configurar un cálculo para el grupo de tipo muestra.

La interfase de usuario del Cerity Report Template Editor y el glosario de la ayuda en línea contienen descripciones de todas las variables y resultados que están disponibles para los cálculos personalizados.

**Configuración de un cálculo personalizado nuevo** Usted también añade una columna de hoja de cálculo para configurar una fórmula para un cálculo personalizado cuyo resultado puede utilizarse como una variable para otros cálculos. Introduce el nombre de la pantalla y la identificación del sistema para el cálculo que quiera configurar.



## 4 Configuración de métodos Cálculos personalizados

Un *nivel* es una fila de la hoja de cálculo que contiene la fórmula o resultado del nuevo cálculo

Usted selecciona también un *nivel* para el cálculo. Los niveles del cálculo de la hoja de cálculo dependen del tipo de resultado. En los ejemplos de hojas de cálculo siguientes puede ver el nivel que elige para el cálculo.

### Niveles para hoja de cálculo de inyección única

La figura siguiente describe los niveles para la inyección única.

	A	B	C	D	E	F	G	H
<b>Nivel variable Single inj.:</b> Esta fila contiene la fórmula para producir el resultado resumen para la inyección única.	1					New	New	New
	2			Amount	Peak Area	Perc. of Nicotin	Sum Metabolites	AreaSum not ident. Peaks
<b>Niveles Identified compound o unidentified peak summary:</b> Estas filas contienen las fórmulas para producir resultados resumen para todos los compuestos identificados o picos no identificados.	3	-				%	mg/kg	
	4	Single Inj. Results						
	5	Single Inj. Variables					2.996	
	6	- Identified Compounds						
<b>Identified compound o unidentified peak, niveles #1...#n:</b> Estas filas contienen fórmulas para compuestos individuales o cálculos de picos.	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					18.005
	12		Unknown 1		5.0455			
	13		..		6.0103			
	14		Unknown n		6.9492			

**Figura 40** Hoja de cálculo de inyección única

### Niveles para hoja de cálculo resumen de multiinyección

La figura siguiente describe los niveles para un resumen de multiinyección.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	
<b>Nivel Multiple inj. variable:</b> Esta fila contiene la fórmula para producir el resultado resumen para todas las inyecciones únicas.	1			Amount	New	New	RSD of Sum Amount Metabolites	AreaSum not ident. Peaks	New	
	2				Sum Metabolites	Mean Amount			AreaSum not ident. Peaks	Mean of AreaSum not ident. Peaks
	3	-			mg/kg	mg/kg			%	
<b>Single inj. variable, niveles #1..#n:</b> Estas filas contienen las fórmulas para los cálculos sobre el resultado de inyección única del cálculo de variable de inyección única definido en su hoja de cálculo correspondiente.	4	Multiple Inj. Results					12.58			
	5	- Multiple Inj. Variable								
	6	Single Inj. #1			2.996					
	7	..			3.182					
<b>Niveles Identified compound o unidentified peak summary:</b> Estas filas contienen las fórmulas para producir resultados resumen para todas las inyecciones únicas para un compuesto o pico.	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				
<b>Identified compound o unidentified peak, niveles #1...#n:</b> Estas filas contienen fórmulas para cálculos para inyecciones únicas individuales para cada compuesto o pico.	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 Hoja de cálculo resumen de multiinyección

## 4 Configuración de métodos Cálculos personalizados

### Niveles para hoja de cálculo de grupo de tipo muestra

La **Figura 42** describe los niveles para grupos de tipo muestra.

#### Nivel Sample-type group variable:

Esta fila contiene la fórmula para producir el resultado resumen para cada grupo de muestras en la etiqueta.

#### Multi-injection summary (sample

**variable, niveles #1..#n:** Estas filas contienen las fórmulas para los cálculos de variable de inyección múltiple definidos en la hoja de cálculo de resumen de multiinyección.

#### Niveles Identified compound o

**unidentified peak summary:** Estas filas contienen las fórmulas para producir resultados resumen para todas las muestras de grupo para un compuesto o pico.

#### Identified compound o unidentified

**peak, niveles #1...#n:** Estas filas contienen fórmulas para cálculos para muestras de grupo individuales para cada compuesto o pico.

	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	-						12.59		
6							12.58		
7							12.02		
8							12.97		
9	-				2.002				
10					1.777				
11					1.996				
12					3.002				
13	-					4.995			
14					3.018				
15					4.988				
16					5.982				
17	+					8.003			
21	-					10.933			
22					5.347				
23					10.980				
24					11.883				
25	-								22.295
26								18.78	
27								22.02	
28								22.97	

**Figura 42** Hoja de cálculo de grupo de tipo muestra

### Funciones y sentencias condicionales

Para configurar una fórmula, introduzca una función matemática o sentencia condicional y las filas sobre las que opera en una sola celda. Un cálculo debe comenzar con el signo igual (=). Por ejemplo, la entrada de celda para calcular la Cantidad media por lote de nicotina metabolito I como en la figura de arriba, tendría el aspecto siguiente:

=AVERAGE(D10:D12)

Puede acceder a una lista completa de funciones matemáticas en el espacio de trabajo Custom Calculations cuando hace clic en el botón **Funcion** de la barra de herramientas Tools.



### Valores que se muestran durante la configuración

Durante la configuración del cálculo, Cerity NDS para control de calidad farmacéutico produce números aleatorios para llenar las celdas, ya que es posible que los resultados no estén disponibles siempre.

#### **Ejemplo** Suma de áreas media de las impurezas no identificadas por lote

Para mostrar cómo utilizar los conceptos para configurar un cálculo personalizado, esta sección le da un ejemplo que puede utilizar en su laboratorio.

Puede configurar un cálculo personalizado para calcular la media de la suma de áreas de las impurezas no identificadas por lote de muestras. No es necesario que identifique los compuestos para configurar este cálculo de forma que puede practicar con las instrucciones de más abajo en un método vacío.

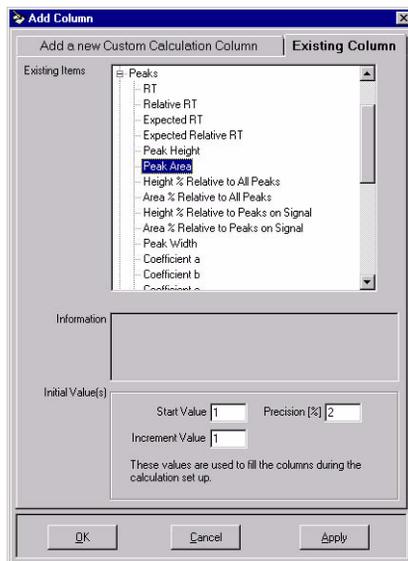
## 4 Configuración de métodos Cálculos personalizados

### Tarea 1 Configuración para sumar las áreas de picos no identificados en una inyección única

#### Pasos

- 1 En la hoja de cálculo de inyección única, añade una columna para introducir el resultado de integración existente, área de pico

#### Resultado

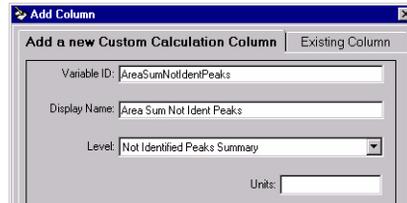


El espacio de trabajo contiene ahora una columna con las áreas de pico para los picos no identificados.

**Tarea 1** Configuración para sumar las áreas de picos no identificados en una inyección única (continuación)

**Pasos** **Resultado**

- 2 Añada una columna para contener el cálculo nuevo para la suma de áreas de los picos no identificados. (Consejo: nivel resumen de picos no identificados)



El espacio de trabajo contiene ahora una columna para la nueva variable Area Sum Not Ident Peaks.

- 3 Introduzca la fórmula para la suma de áreas de los picos no identificados. (Consejo: utilice la sintaxis, =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	

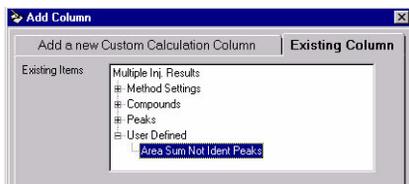
## 4 Configuración de métodos Cálculos personalizados

**Tarea 2** Configuración para promediar las sumas de áreas de los picos no identificados para todas las inyecciones de una muestra

### Pasos

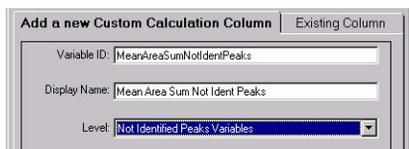
### Resultado

1 En la hoja de cálculo de resumen de multinyección, añada una columna para contener la variable configurada en la hoja de cálculo de inyección única, la suma de áreas de los picos no identificados.



El espacio de trabajo contiene ahora una columna con la suma de áreas para los picos no identificados.

2 Añada una columna para contener el cálculo nuevo para la media de las sumas de áreas de los picos no identificados para todas las inyecciones. (Consejo: nivel variables de picos no identificados)



El espacio de trabajo contiene ahora una columna para la nueva variable Mean Area Sum Not Ident Peaks.

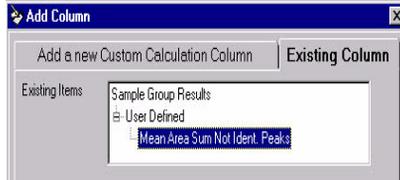
3 Introduzca la fórmula para la media de las sumas de áreas de los picos no identificados para todas las inyecciones. (Consejo: utilice la sintaxis, =AVERAGE(D10:D12))

	A	B	C	D	E
1					New
2				Area Sum Not Ident. Peaks	Mean Area Sum Not Ident. Peaks
3	-				
4			Multi-Injection Summary		
5	-		Multiple Inj. Variable		
6			Single Inj. #1		
7			..		
8			Single Inj. #n		
9	-		Not Identified Peaks		2.00
10			Single Inj. #1	0.99	
11			..	2.02	
12			Single Inj. #n	2.98	

**Tarea 3** Configuración para calcular la suma de áreas media para las muestras en el grupo de muestras

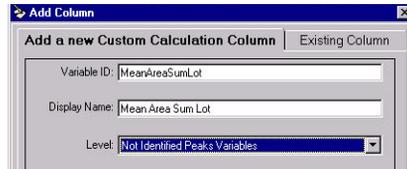
**Pasos** **Resultado**

1 En la hoja de cálculo de grupo de muestras, añada una columna para contener la variable configurada en la hoja de cálculo de multiinyección, la media de las sumas de áreas para todas las inyecciones.



El espacio de trabajo contiene ahora una columna con la suma de áreas para los picos no identificados.

2 Añada una columna para contener el cálculo nuevo para la media de las sumas de áreas de los picos no identificados para un lote de muestras. (Consejo: nivel de Variables de picos no identificados)



El espacio de trabajo contiene ahora una columna para la nueva variable Mean Area Sum Per Lot.

3 Introduzca la fórmula para la media de las sumas de áreas del lote. (Consejo: utilice la sintaxis, =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

## Otros ejemplos de cálculos personalizados

*Consulte el Ejercicio de aprendizaje inicial, "Configurar un método para identificar impurezas", para practicar la configuración de un cálculo personalizado.*

Puede encontrar instrucciones en la ayuda en línea (HowTos/Setting Up Methods/Set up custom calculations) para configurar los cálculos personalizados siguientes:

- Estadística de área de pico para inyecciones múltiples
- % de una impureza conocida
- % de impurezas conocidas totales
- % de una impureza desconocida
- % de impurezas desconocidas totales
- Factores de respuesta medios para inyecciones múltiples
- Factor de respuesta medio para cada compuesto en el grupo estándar de calibración
- Desviación típica para el factor de respuesta medio para cada compuesto en los estándares
- Desviación típica relativa (RSD) para el factor de respuesta medio para cada compuesto en los estándares
- Factor de respuesta relativo (RRF) entre picos
- Precisión de los estándares de comprobación comparada con la de los estándares de calibración
- Concentración y cantidad real de una muestra
- Cantidades ajustadas para compuestos individuales

## Relación entre las hojas de cálculo

Las hojas de cálculo están interrelacionadas, como se muestra en el ejemplo de arriba y en la [Figura 43](#) y la [Figura 44](#). Los resultados de la hoja de cálculo de inyección única se utilizan en la hoja de cálculo de resumen de multiinyección; estos resultados se utilizan, a su vez, en la hoja de cálculo de grupo de tipo muestra.

HOJA DE CÁLCULO DE INYECCIÓN ÚNICA

	A	B	C	D	E	F	G	H
	1			Amount	Peak Area	New Perc. of Nicotin	New Sum Metabolites	New AreaSum not ident. Peaks
<b>Valor calculado personalizado</b>	2							
	3	-				%	mg/kg	
	4	Single Inj. Results						
	5	Single Inj. Variables				<b>SUMA</b>	2.996	
	6	- Identified Compounds						
<b>Resultados de cuantificación</b>	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					<b>SUMA</b>	18.005
	12	Unknown 1				5.0455		
<b>Resultados de integración</b>	13	..				6.0103		
	14	Unknown n				6.9492		

HOJA DE CÁLCULO RESUMEN DE MULTIINYECCIÓN

	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					<b>RSD</b>	12.58	
<b>Marcador inyecciones múltiples</b>	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		<b>Media</b>		
	16	Single Inj. #n			4.0103				
<b>Los campos pueden estar escondidos para mejorar la claridad</b>	17	+ PCH					7.975		
	21	- Nicotin					5.347		
	22	Single Inj. #1			4.0158				
	23	..			5.9183		<b>Media</b>		
	24	Single Inj. #n			6.1065				
	25	- Not Identified						18.78	
	26	Single Inj. #1						18.005	<b>Media</b>
	27	..						17.345	
	28	Single Inj. #n						20.999	

Figura 43 Relación entre la hoja de cálculo de inyección única y la hoja de cálculo resumen de multiinyección

## 4 Configuración de métodos Cálculos personalizados

### HOJA DE CÁLCULO RESUMEN DE MULTIINYECCIÓN

	A	B	C	D	E	F	G	H	I
1				Amount	New	New	New	Area Sum not ident. Peaks	New
2			Sum Metabolites		Mean Amount	RSD of Sum Amount Metabolites	Mean of Area Sum not ident. Peaks		
3	-		mg/kg		mg/kg	%			
4	Multiple Inj. Results								
5	- Multiple Inj. Variable								
6			Single Inj. #1		2.996		12.58		
7			..		3.182				
8			Single Inj. #n		3.978				
9	- Nicot. Metabolit I								
10			Single Inj. #1	0.9993		1.777			
11			..	1.9496					
12			Single Inj. #n	2.3811					
13	- Nicot. Metabolit II								
14			Single Inj. #1	1.9968		3.018			
15			..	3.0465					
16			Single Inj. #n	4.0103					
17	+ PCH								
21	- Nicotin								
22			Single Inj. #1	4.0158		5.347			
23			..	5.9183					
24			Single Inj. #n	6.1065					
25	- Not Identified								
26			Single Inj. #1					18.005	18.78
27			..					17.345	
28			Single Inj. #n					20.999	

### HOJA DE CÁLCULO DE GRUPO DE TIPO MUESTRA

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

Marcador muestras en grupo de tipo muestra

**Figura 44** Relación entre la hoja de cálculo resumen de multiinyección y la hoja de cálculo de grupo de tipo muestra

## Formato para la revisión de datos

### Tipos de formato

Cerity para control de calidad farmacéutico muestra los resultados en la pantalla Result para los conjuntos de resultados siguientes:

- Inyección única, resumen de multiinyección y calibración

Para las secuencias, la aplicación muestra los resultados para los grupos de tipo muestra siguientes:

- Grupo de muestras QC
- Grupo de muestras
- Grupo de estándares de calibración
- Grupo de muestras personalizadas

### Selecciones de visualizaciones

En la sección Formato para la revisión de datos del método, puede elegir visualizar en la pantalla Result los resultados y tablas resumen, los títulos de información y las líneas de estado para cada conjunto de resultados, con las diferencias siguientes:

- Sólo para la visualización del resultado de inyección única, puede elegir mostrar la señal.
- Sólo para la visualización del resultado de calibración, puede elegir mostrar la tabla y la curva de calibración y la representación residual.

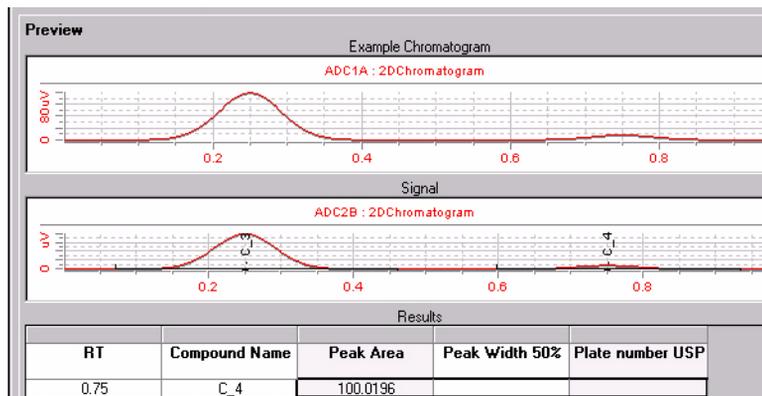
## Selecciones para la tabla de resultados

Para cada una de las tablas que puede elegir mostrar, puede seleccionar los campos y variables que aparecerán como encabezamientos de columna o elementos en las tablas.

Los campos y variables que aparecen para cada conjunto de resultados son los que proporciona el sistema o que configura el usuario como variables personalizadas o variables de cálculo personalizadas. Únicamente las variables que configura el usuario para cada grupo de tipo muestra en los cálculos personalizados, aparecen aquí para ese grupo de tipo muestra.

## Pantalla preliminar de las selecciones

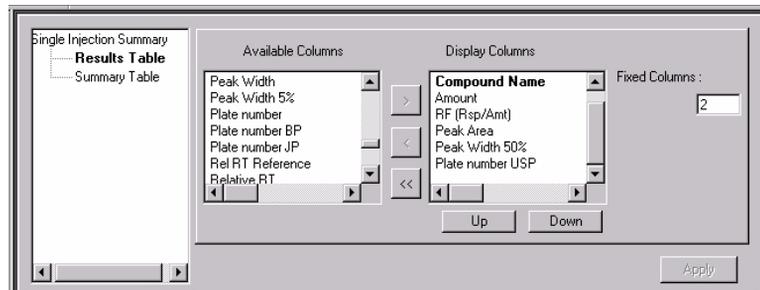
Cuando realice o cambie una selección, el cambio aparecerá en la sección Pantalla preliminar del espacio de trabajo Formato para la revisión de datos. El cambio no aparecerá hasta que haga clic en el botón **Apply**.



## Idoneidad del sistema

Puede producir valores de idoneidad del sistema en la pantalla Result si realiza dos acciones con Cerity para control de calidad farmacéutico:

- Marque la casilla de idoneidad del sistema en el **Method Wizard** (asistente de métodos).
- Seleccione los cálculos de idoneidad del sistema cuyos valores quiera que el sistema calcule en el elemento Formato para la revisión de los datos para las inyecciones únicas.



Entonces aparecerán los resultados de idoneidad del sistema en la tabla Results para las inyecciones únicas.

## Generación de informes

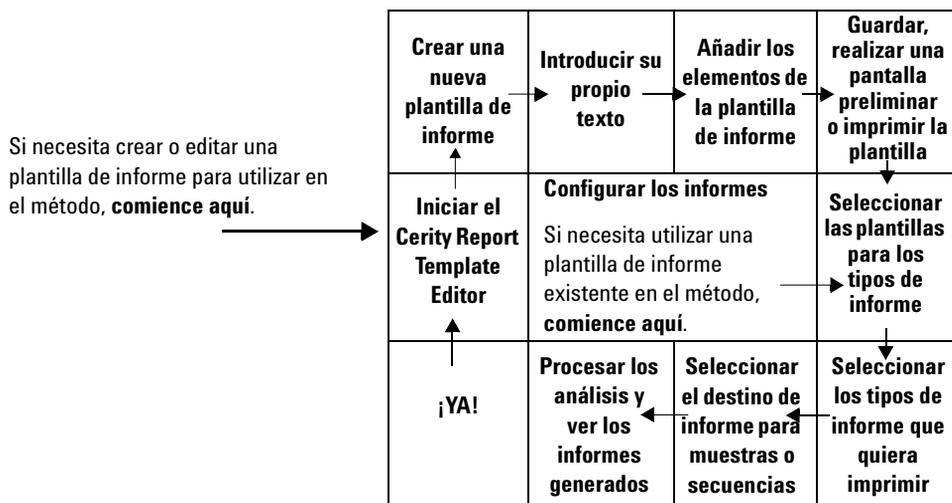
Cerity NDS para control de calidad farmacéutico proporciona una fácil generación de informes. Los informes pueden incluir:

- cromatogramas e imágenes
- resultados y tablas resumen
- cálculos típicos y personalizados
- información de encabezamiento y de pie de página

*Consulte la Technical Reference Guide para obtener más detalles sobre cómo Cerity para control de calidad farmacéutico genera informes.*

Los informes se generan una vez que se ha completado la cuantificación para una muestra. La generación de informes organiza y presenta valores de campos y resultados para varios tipos de informes mediante plantillas predefinidas. La generación de informes no realiza ningún cálculo. Usted selecciona los tipos de informe y las plantillas en el método. Puede ver o imprimir los informes en el Cerity Report Viewer.

El esquema de instrucciones siguiente muestra la ruta para los analistas y usuarios avanzados, para configurar, generar y visualizar informes. Comience con ¡YA!



Cada subtema de este tema proporciona información fundamental para ayudarle a seguir los pasos de este esquema.

## Tipos de informe

Un *tipo de informe* es la clase de informe generada para un tipo de resultado.

Cuando configura un método por primera vez, selecciona los tipos de informes que quiere imprimir cuando se analiza una muestra o secuencia con el método. Los tipos de informe disponibles para el método aparecen en el espacio de trabajo Reporting. No puede añadir nuevos tipos de informe en la lista de tipos.

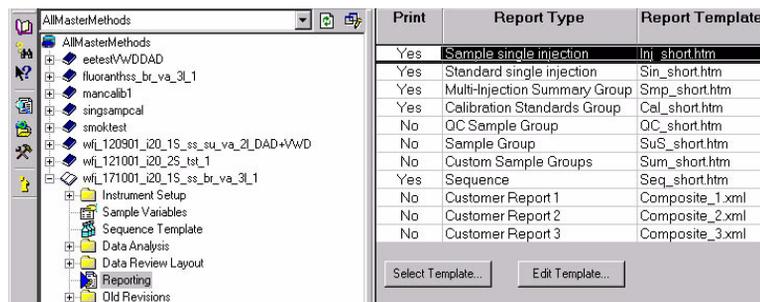


Figura 45 Espacio de trabajo Reporting de la pantalla Method

### Tipos de informe para muestras únicas

Los métodos configurados para muestras únicas proporcionan tipos de informes para tres tipos de resultados:

- Inyección única de muestra
- Inyección única de estándar
- Resumen de multiinyección

### Tipos de informe para secuencias

Los métodos configurados para secuencias incluyen once tipos de informe:

- Inyección única de muestra
- Inyección única de estándar
- Resumen de multiinyección
- Grupo de estándares de calibración
- Grupo de muestras QC
- Grupo de muestras
- Grupos de muestras personalizadas
- Secuencia
- Informes de cliente 1, 2 o 3

## Destino del informe

Puede cambiar los tipos de informe que se imprimen, ya realizado en la pantalla Method, cuando introduzca una muestra única o configure una secuencia. Puede hacerlo en la etiqueta **Report Destination** del panel **Sample Entry** de la pantalla Sample.

Sequence | Identification | Description | **Report Destination**

Report(s) to print:

Printer: \\PRNTRSRV17U\ADSLJ14

Path: \_\_\_\_\_

<input checked="" type="checkbox"/>	Standard Injection	Sin_short.htr
<input checked="" type="checkbox"/>	Sample Report	Smp_short.ht
<input checked="" type="checkbox"/>	Calibration Summary	Cal_short.htr
<input type="checkbox"/>	QC Summary	QC_short.htr
<input type="checkbox"/>	Sample Summary	SuS_short.ht
<input type="checkbox"/>	Summary Groups	Sum_short.ht

**Figura 46** Etiqueta Report destination del panel Sequence Options

*Debe añadir el nombre de la muestra o secuencia a la ruta para que pueda encontrar rápidamente los informes de dicha muestra o secuencia.*

El administrador de Cerity NDS define la ruta y la impresora para guardar e imprimir los informes. Puede cambiar la impresora en la que imprima los informes generados y/o cambiar la ruta en la que guarde los informes en la etiqueta **Report Destination** en la entrada de muestras.

## Plantillas de informe

Una *plantilla de informe* es un esquema que contiene la disposición de los campos, gráficos, imágenes y tablas cuyos valores quiere que aparezcan en el informe.

Cada tipo de informe está enlazado con una plantilla predeterminada que genera un informe del tipo seleccionado. Cuando se analiza una muestra o secuencia, la plantilla de informe da instrucciones a la base de datos para rellenar el informe con los valores de los campos y variables definidos en la disposición y contenido de dicha plantilla.

Puede elegir entre tres opciones para seleccionar una plantilla:

- Utilice la plantilla predeterminada ya enlazada con el tipo de informe
- Seleccione una plantilla predeterminada diferente para el tipo de informe
- Cree una plantilla nueva o edite una existente antes de seleccionarla como la plantilla para el tipo de informe

Cuando opte por editar una plantilla para un tipo de informe, aparecerán las plantillas únicamente para ese tipo en el Cerity Report Template Editor.

## Cerity Report Template Editor

El Cerity Report Template Editor le permite crear y modificar plantillas. Utilice el Cerity Report Template Editor para personalizar y dar formato a informes de Cerity NDS para control de calidad farmacéutico para que se ajusten a las necesidades de su laboratorio.



- Informes de cumplimiento
- Informes de dispositivos

Una vez haya seleccionado “new.htm”, aparecerá una plantilla de informe en el espacio de trabajo con el encabezamiento Report Title. Debe dar un nombre y guardar la plantilla nueva para que aparezca un título bajo la carpeta Individual Report Templates.

### **Plantillas de informe compuesto**

La Plantilla de informe compuesto le permite insertar más de una plantilla individual existente en la plantilla final.

Las plantillas de informe compuesto incluyen:

- Informes de multiinyección
- Informes de secuencias

Puede crear *plantillas de multiinyección* a partir de plantillas individuales mediante los componentes siguientes:

- Cubierta
- Instrumento
- Resumen de multiinyección
- Inyecciones únicas
- Inyecciones de estándar

La plantilla guardada aparece como un archivo XML bajo la carpeta Composite Report Template.

Puede crear *plantillas de secuencia* a partir de plantillas individuales mediante los componentes de informe siguientes:

- Cubierta
- Secuencia
- Instrumento
- Grupo de muestras personalizadas
- Grupo de muestras
- Grupo de muestras QC
- Grupo de estándares de calibración

- Resumen de multiinyección
- Inyecciones únicas
- Inyecciones de estándar

La plantilla de informe guardada aparece como un archivo XML bajo la carpeta Composite Report Template.

### **Títulos de plantilla**

El título de plantilla aparece en los lugares siguientes una vez haya guardado el archivo:

- Una descripción del nombre de archivo de la plantilla o sección
- En la barra de títulos de Microsoft Internet Explorer cuando realice la pantalla preliminar de una plantilla
- El nombre del archivo cuando guarde la plantilla por primera vez

El título de la plantilla y el encabezamiento del informe que aparece en la plantilla nueva no son iguales. Puede cambiar el encabezamiento del informe por cualquiera que necesite para dicho informe.

### **Plantillas nuevas a partir de existentes**

Puede crear plantillas nuevas a partir de otras determinadas de Cerity NDS o de las suyas propias. Todas las plantillas aparecen bajo la etiqueta **Templates**. Una vez haya seleccionado y modificado una plantilla de informe existente, sólo necesitará guardarla con un nombre de archivo nuevo. La plantilla nueva aparecerá bajo las carpetas Individual Report Templates o Composite Report Templates.

### **Editor de textos**

El editor de textos del Cerity Report Template Editor utiliza herramientas comunes que puede encontrar en la mayoría de procesadores de textos. Comience a editar la plantilla nueva con el cursor preparado para editar el encabezamiento del informe. Si necesita insertar un elemento en el informe, debe poner el cursor debajo del encabezamiento.

Puede realizar las tareas siguientes para introducir su propio texto en el informe:

- Introducir el nombre de los campos y descripciones.
- Cambiar la fuente y el tamaño del texto
- Cambiar la posición del texto
- Cambiar el énfasis en el texto
- Crear una lista con números o viñetas
- Definir las propiedades del fondo
- Cambiar el alineamiento del texto
- Cambiar el estilo del párrafo
- Cambiar el color del texto
- Restaurar el formato normal
- Crear o editar un encabezamiento o pie de página

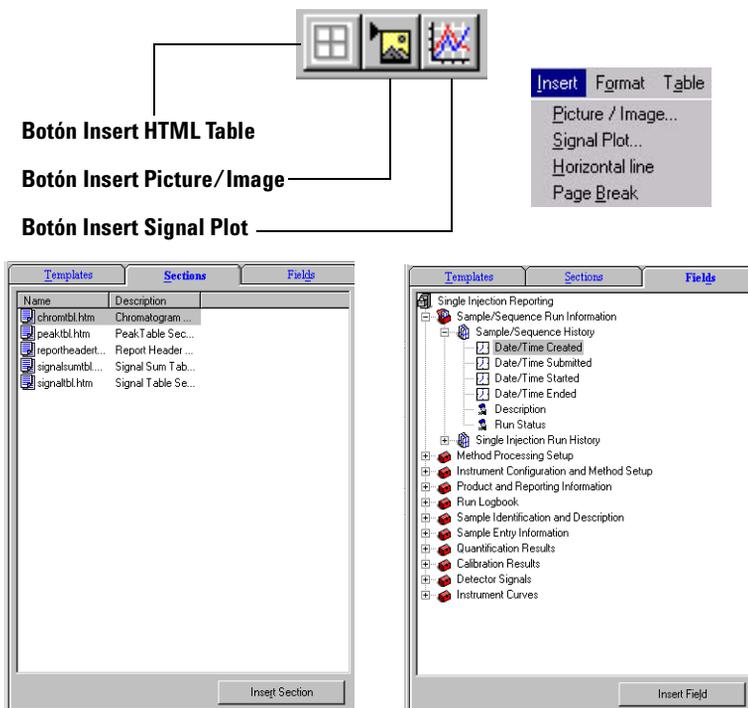
### Elementos de la plantilla de informe

El Cerity Report Template Editor proporciona Secciones y Campos para insertar en la plantilla del informe. Puede insertar las plantillas individuales guardadas como secciones. Estas secciones aparecen bajo la etiqueta **Sections** del Cerity Report Template Editor.

La etiqueta **Fields** proporciona todos los campos disponibles en las pantallas Sample, Method, Instrument y Result.

Puede insertar campos individuales, tablas, imágenes, representaciones de señales y otros elementos de informe en una plantilla de informe.

## 4 Configuración de métodos Generación de informes



### Formatos de elementos de informe

Puede configurar formatos en los cuadros de diálogo **Picture/Image**, **Signal Plot** y **Table**. Utilice cada cuadro de diálogo para seleccionar las opciones de formato. No se definen formatos para secciones o campos individuales.

### Pantalla preliminar o impresión de plantillas de informes

En el espacio de trabajo Report Template Editor, puede imprimir únicamente la plantilla de informe que aparece allí. Al seleccionar el elemento Preview template del menú **File**, puede asegurarse de que la plantilla esté completa y lista para imprimir. Puede imprimir la plantilla desde el programa Microsoft Internet Explorer.

## Acción de guardar una plantilla de informe

Hay diversas opciones para guardar una plantilla:

- Guardar la plantilla con el mismo nombre una vez haya editado un informe.

Cerity NDS para control de calidad farmacéutico proporciona plantillas predeterminadas que son de Sólo lectura. No puede editar estas plantillas a menos que el administrador de Cerity NDS cambie el permiso de directorio de la plantilla a Lectura/escritura.

- Guardar una plantilla como un archivo nuevo una vez la haya editado. Utilice el comando **Save As** del menú **File**.
- Guardar la plantilla como una sección.

Es necesario cambiar el título de la plantilla antes de cambiar el nombre del archivo de dicha plantilla. La plantilla nueva aparece en la etiqueta **Sections** y en la carpeta Sections bajo la etiqueta **Templates**. Ahora puede añadir la sección a otra plantilla.

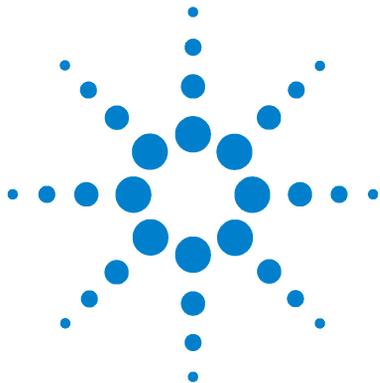
## Cerity Report Viewer

El administrador de Cerity NDS define la ruta al directorio que guarda los informes. El Cerity Report Viewer abre el directorio que guarda los informes para muestras y secuencias. Puede imprimir el informe únicamente desde el Cerity Report Viewer.

Puede imprimir informes de método desde el menú **File** en la pantalla Method. La base de datos rellena los campos existentes en la plantilla de método y coloca el informe en el Cerity Report Viewer. Puede imprimir el informe desde el Report Viewer.

## **4 Configuración de métodos**

### **Generación de informes**



## 5 Aplicaciones Administration y Maintenance

Configuración posterior a la instalación 142  
Administración y mantenimiento del sistema Cerity NDS 148

Las aplicaciones Administration y Maintenance de Cerity NDS para control de calidad farmacéutico permiten que los administradores del sistema configuren y administren Cerity NDS de su laboratorio. Este capítulo proporciona un conjunto de conceptos para ayudar a los administradores a desempeñar sus funciones en el laboratorio.



## Configuración posterior a la instalación

Una vez que haya instalado el software Cerity NDS para control de calidad farmacéutico, el administrador de Cerity NDS debe configurar a los usuarios de Cerity NDS para que utilicen la aplicación de control de calidad farmacéutico.

El administrador de Cerity NDS debe completar las tareas siguientes:

*Consulte en la System Administration Online Help las instrucciones para completar estas tareas.*

- Arrancar la aplicación Cerity NDS Administration
- Conectarse a la base de datos
- Establecer la configuración bootp únicamente si el laboratorio no utiliza DHCP para los instrumentos
- Añadir licencias
- Verificar la instalación con éxito
- Configurar una impresora predeterminada para el usuario de Cerity NDS Service
- Sincronizar las marcas de tiempo entre las máquinas Cerity NDS
- Añadir usuarios
- Añadir controladores de adquisición
- Añadir instrumentos
- Añadir un dispositivo
- Guardar cambios en la base de datos

Los conceptos de esta sección ayudan al administrador a ejecutar estas tareas.

## Aplicación Cerity NDS Administration

Utilice las herramientas de configuración Cerity NDS Administration para administrar el sistema. Seleccione **Cerity Software Administration** en el menú **Start** (Inicio) para acceder a la ventana de configuración.

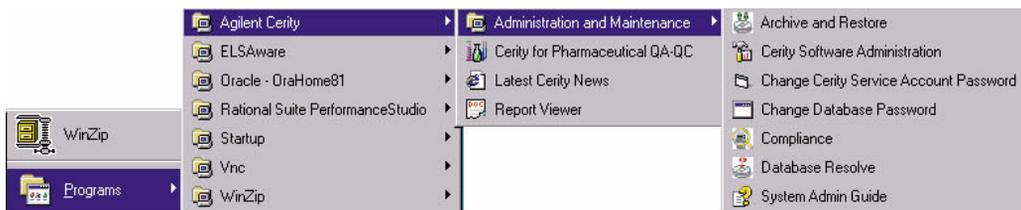


Figura 47 Elemento de menú Cerity NDS Administration

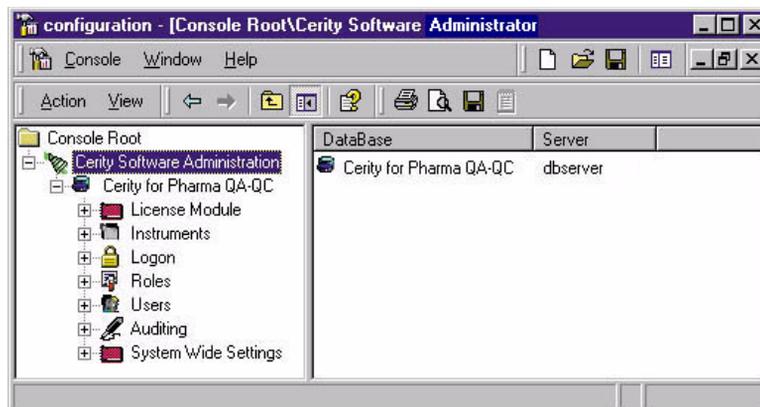
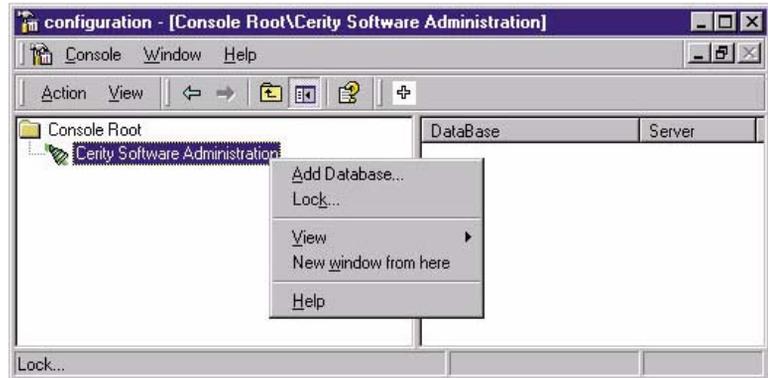


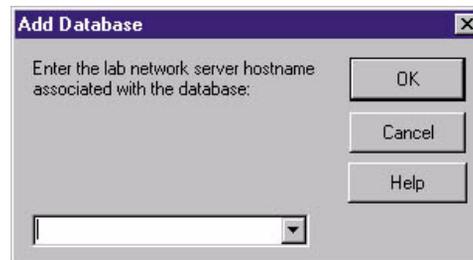
Figura 48 Ventana de configuración Cerity NDS Administration

## Conexión a una base de datos

Debe añadir la base de datos que gestionan las herramientas de configuración de Cerity Software Administration. Un clic con el botón derecho sobre la carpeta Cerity Software Administration de la ventana principal le permite añadir una base de datos. Una vez que haya añadido una base de datos, expanda su carpeta para acceder a sus propiedades y ajustes.



**Figura 49** Menú de acceso directo para añadir una base de datos



**Figura 50** Cuadro de diálogo Add Database

Si se trata de una instalación independiente (sistema Cerity NDS profesional), utilice el nombre del PC independiente.

## Licencia de Cerity NDS

El sistema autoriza un conjunto de licencias “demo” para los instrumentos y módulos de Cerity NDS durante la instalación. Este tipo de licencia es temporal. No es posible utilizar la licencia “demo” durante más de 30 días. Antes de que expire la licencia “demo”, debe comprar una licencia nueva de Agilent Technologies. Una vez haya comprado una licencia, debe autorizar la utilización de la nueva licencia basándose en el acuerdo de licencia.

La carpeta del **License Module** le permite:

- Ver la utilización de la licencia en todos los módulos instalados.
- Autorizar la utilización de una licencia
- Actualizar o añadir una licencia de Cerity NDS

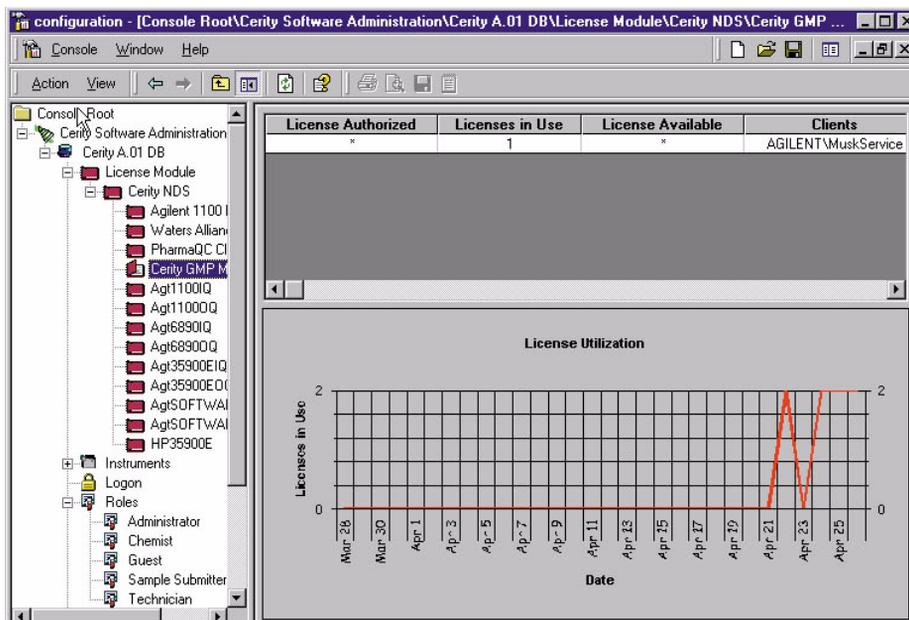


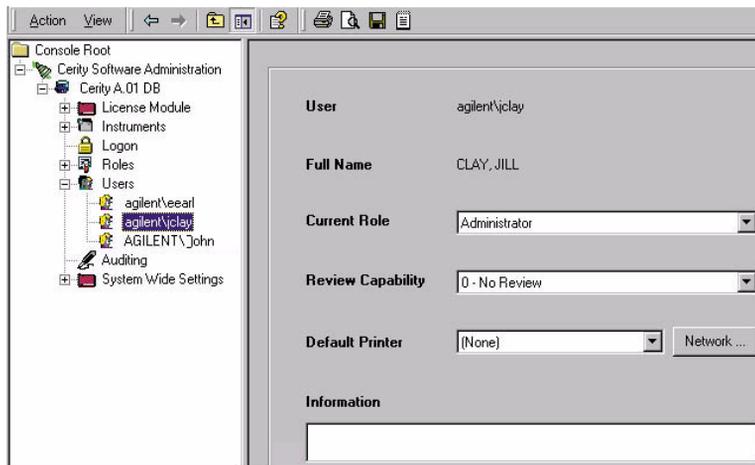
Figura 51 Elemento de licencia

## Introducción de usuarios

La carpeta Users le permite configurar usuarios en Cerity NDS.

Podrá:

- Añadir usuarios de Cerity NDS
- Activar y desactivar usuarios
- Asignar a los usuarios su perfil actual de funciones
- Asignar a los usuarios sus derechos de revisión
- Asignar una impresora predeterminada a cada usuario
- Copiar usuarios desde una base de datos a otra



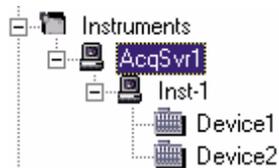
**Figura 52** Carpeta Users

## Introducción de instrumentos

Utilice la carpeta Instruments para añadir controladores de adquisición, instrumentos lógicos y dispositivos. Debe introducir los parámetros de los instrumentos y dispositivos en la aplicación Pharmaceutical QA/QC.

Podrá:

- Añadir y retirar controladores de adquisición
- Añadir y retirar instrumentos lógicos
- Añadir y retirar dispositivos
- Cambiar propiedades de conexión de dispositivos, instrumentos y servidores de adquisición
- Mover un instrumento lógico y los dispositivos unidos a un controlador de adquisición diferente
- Detener un instrumento



**Figura 53** Carpeta Instruments

## Administración y mantenimiento del sistema Cerity NDS

Una vez que los administradores han realizado las tareas posteriores a la instalación, deben mantener el sistema y pueden ejercer la opción de personalizar Cerity NDS para satisfacer sus propias necesidades de laboratorio. Los administradores deben saber cómo gestionar las características siguientes de Cerity NDS:

### Seguridad y auditoría

Los administradores pueden hacer lo siguiente para garantizar que el sistema es seguro:

- Establecer o cambiar la seguridad de acceso al sistema
- Cambiar la contraseña de la cuenta de Cerity NDS Network Server y para CAGDbAdmin
- Restringir el acceso al editor de registro
- Establecer autorizaciones sobre los directorios de Cerity NDS y Oracle
- Asignar perfiles de funciones a usuarios para restringir su acceso a funciones de Cerity para control de calidad farmacéutico
- Configurar la auditoría de forma que el sistema siga la pista de los cambios, del usuario que los realice y de la fecha y del motivo de dichos cambios de acuerdo con los procedimientos de la empresa.

### Formatos que afectan a todo el sistema

Los administradores pueden definir o cambiar los formatos numéricos o de fecha/hora para el Cerity NDS como un todo.

### **Mantenimiento de la base de datos**

Los administradores pueden realizar las acciones siguientes para mantener la base de datos:

- Archivar, restaurar o suprimir datos
- Realizar una copia de seguridad de la base de datos (puede definirse una copia de seguridad automática)
- Resolver incoherencias en la base de datos tras restaurar datos

### **Mantenimiento del sistema**

Los administradores pueden realizar las acciones siguientes para mantener el sistema:

- Imprimir los parámetros de configuración de Cerity NDS Software Administration
- Mostrar los detalles del host Cerity NDS
- Comprobar el estado, iniciar o detener los servicios Cerity NDS

Los conceptos de esta sección ayudan al administrador a realizar estas tareas.

*Consulte las instrucciones para completar estas tareas en la System Administration Online Help.*

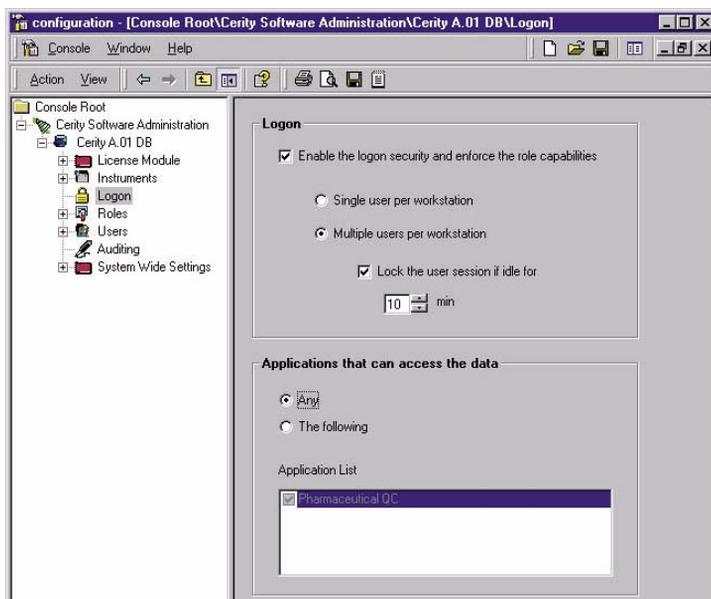
## Seguridad y auditoría

### Acceso al sistema

El elemento Logon de la ventana Cerity Software Administration Configuration controla el acceso de conexión al servidor Cerity y a los sistemas cliente. Por ejemplo, puede controlar la cantidad de usuarios que pueden conectarse al sistema Cerity NDS desde la misma estación de trabajo Windows.

Podrá:

- Activar y desactivar la seguridad de conexión al sistema
- Autorizar un usuario por ordenador
- Autorizar múltiples usuarios para un ordenador cliente
- Definir el tiempo de inactividad para bloquear automáticamente la aplicación para sesiones de usuario que compartan el mismo ordenador cliente
- Especificar la o las aplicaciones Cerity NDS que pueden acceder a la base de datos



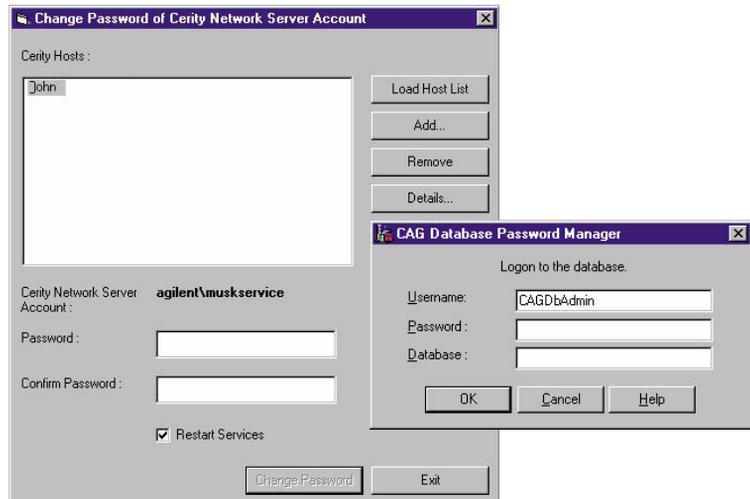
**Figura 54** Elemento Logon

### Cambios de contraseña

Puede cambiar las contraseñas para la cuenta de servidor y para la base de datos en la lista de herramientas de Administration y Maintenance. Puede acceder a estas dos herramientas desde el menú **Start** (Inicio). Cuando seleccione los elementos de menú **Change Password**, aparecerán sus cuadros de diálogo respectivos.



**Figura 55** Elementos de menú Change Password



**Figura 56** Cuadros de diálogo Change Password

### Autorizaciones para los directorios de Cerity NDS y Oracle

La tabla siguiente proporciona un resumen breve de directorios de Cerity NDS y Oracle importantes y de las autorizaciones de Windows recomendadas para acceder a ellos.

## 5 Aplicaciones Administration y Maintenance

### Administración y mantenimiento del sistema Cerity NDS

**Tabla 8** Autorizaciones de directorio de Windows

Nombre del directorio	Usuario o grupo	Autorizaciones recomendadas
Base de datos (p.ej., C:\Database)	TODOS	Autorizaciones para compartir: Sólo lectura
	Administrador de Cerity NDS	Autorizaciones para compartir y del sistema de archivos: Control completo
	Usuario de servicio de Cerity NDS	Autorizaciones para compartir y del sistema de archivos: Control completo
Entrada del registro de Cerity NDS (HKeyLocalMachine\Agilent\Cerity)	Grupo de administradores; TODOS	Autorizaciones para compartir y del sistema de archivos: Control completo Autorizaciones para compartir: Sólo lectura
Oracle\Ora81\Bin	SISTEMA	Autorizaciones para el sistema de directorios: Control completo
	Grupo de administradores	Autorizaciones para el sistema de directorios: Sólo lectura
Oracle\...\Oradata	SISTEMA	Autorizaciones para el sistema de directorios: Control completo
	Todos los otros usuarios	Autorizaciones para el sistema de directorios: Ninguna
Entrada del registro Oracle (HKeyLocalMachine\Software\Oracle)	SISTEMA	Autorizaciones para el sistema de directorios: Control completo
	Todos los otros usuarios	Autorizaciones para el sistema de directorios: Ninguna
Directorio System Temp (p. ej., C:\Temp), si no arrancan ciertos servicios.	Todos los usuarios	Autorizaciones para el sistema de directorios: Control completo
Cerity\Reports	TODOS	Autorizaciones para compartir: Sólo lectura
	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Cualquier usuario Windows que use Cerity NDS</li> <li>• Todos los clientes Cerity NDS</li> <li>• Administrador de Cerity NDS</li> </ul>	Autorizaciones para compartir: Control completo
Cerity\Reports\PharmaQC\Templates	TODOS	Autorizaciones para el sistema de archivos: Sólo lectura
	Cualquier usuario de Cerity NDS que necesite editar plantillas de informes	Autorizaciones para el sistema de archivos: Control completo
Cerity\Reports\PharmaQC\pharmaqc.dd (Diccionario de datos: contiene todos los campos, variables y resultados disponibles para el usuario)	Todos los usuarios y grupos	Autorizaciones para el sistema de archivos: Sólo lectura

**Tabla 8** Autorizaciones de directorio de Windows (continuación)

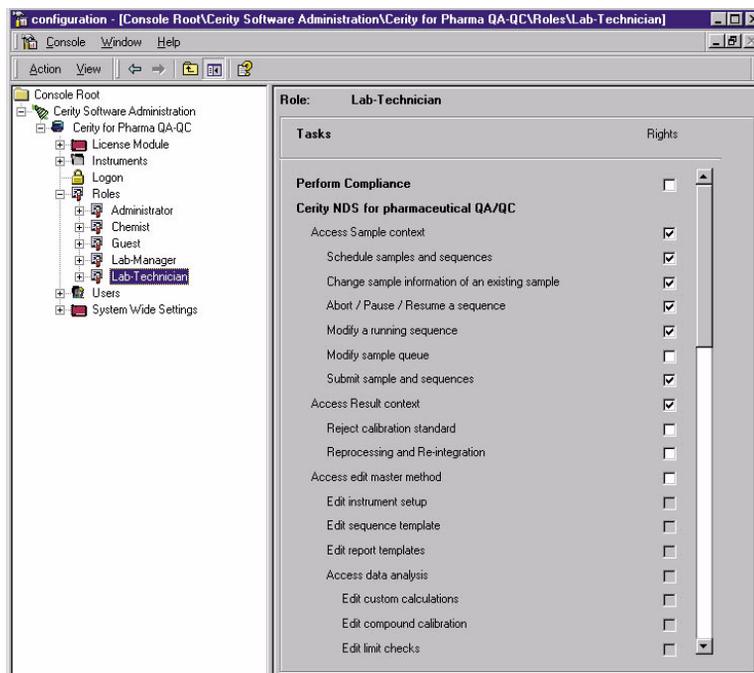
Nombre del directorio	Usuario o grupo	Autorizaciones recomendadas
Cerity\Reports\PharmaQC\Reports	TODOS	Autorizaciones para el sistema de archivos: Sólo lectura
	Usuario del servicio de Cerity NDS	Autorizaciones para el sistema de archivos: Control completo

### Asignación de perfil de funciones

La carpeta Roles le permite configurar derechos sobre tareas para los perfiles de funciones predeterminados: Administrador, Químico, Invitado, Usuario que envía muestras y Técnico.

Podrá:

- Añadir y retirar perfiles de funciones
- Copiar un perfil de funciones y sus derechos sobre tareas de una base de datos a otra
- Cambiar derechos sobre tareas de un perfil de funciones



**Figura 57** Carpeta Roles

### **Auditoría**

Cerity NDS para control de calidad farmacéutico proporciona un conjunto de tareas que da soporte a las directrices normativas de auditoría de registros electrónicos. El elemento Auditing le permite configurar los requisitos de auditoría de cada tarea.

Podrá:

- Requerir que los usuarios introduzcan un motivo de auditoría para una tarea
- Restringir usuarios a motivos de auditoría definidos por el administrador de Cerity NDS
- Requerir una firma electrónica para una tarea
- Crear una lista de motivos de auditoría
- Retirar motivos de auditoría de la lista
- Marcar o borrar requisitos de auditoría para una tarea

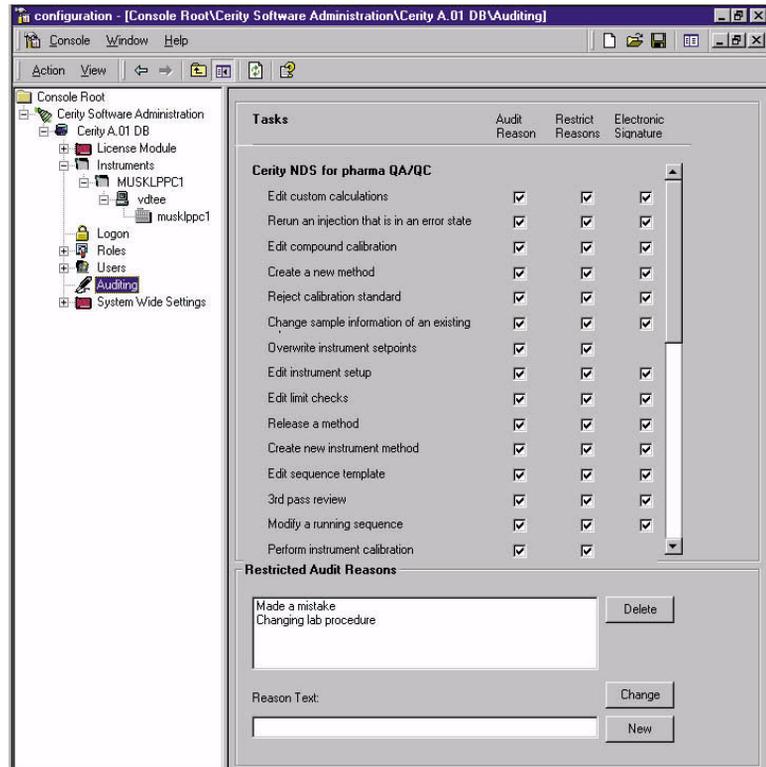


Figura 58 Elemento Auditing

## Formatos numéricos y de fecha que afectan a todo el sistema

Utilice la carpeta System Wide Settings para definir los ajustes numéricos y de fecha y hora. Los ajustes que afectan a todo el sistema afectan a las entradas de campo seleccionadas o a los valores de los resultados, como el ancho de pico para toda la base de datos de Cerity NDS.

Seleccione la carpeta System-Wide Settings para:

- Introducir la precisión decimal de los campos y valores de resultados que aparecen en tablas e informes
- Seleccionar la anotación para sustituir números mayores que la anchura de celda o campo
- Definir el formato de fecha y hora para los datos

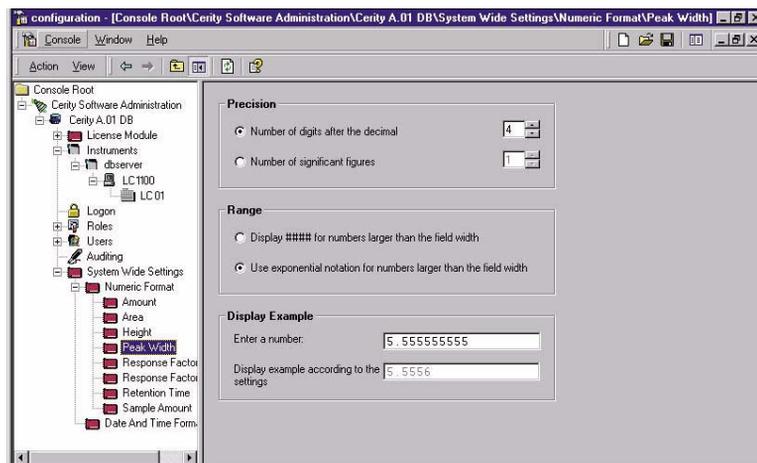


Figura 59 Carpeta System Wide Settings

## Mantenimiento de la base de datos

### Archive and Restore

Utilice la aplicación Archive and Restore para archivar, restaurar o suprimir datos de la base de datos. Seleccione el elemento de menú **Archive and Restore** del menú **Start** (Inicio) para acceder al primer panel de la aplicación Archive and Restore.

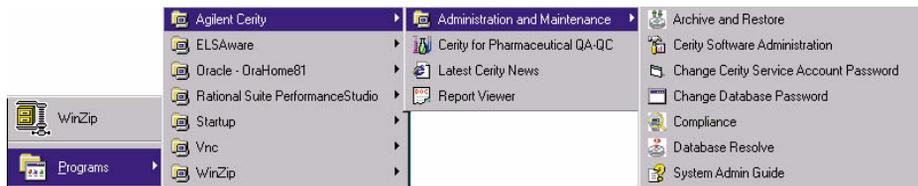


Figura 60 Elemento de menú Archive and Restore

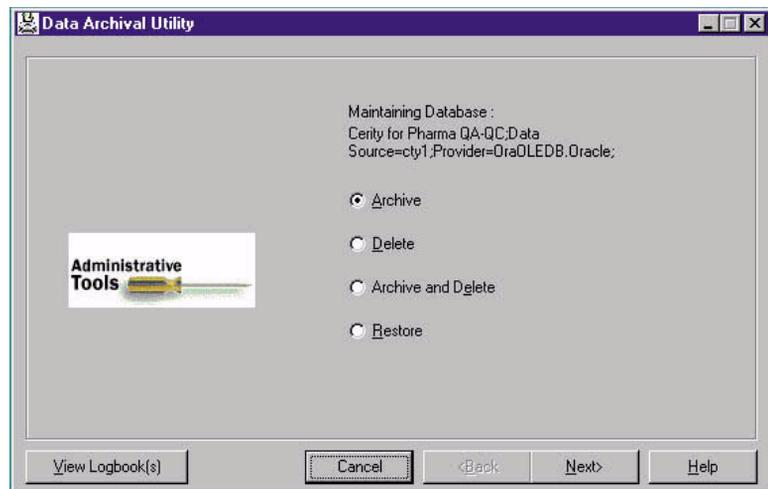


Figura 61 Primer panel de la utilidad Data Archival

### **Búsqueda en la base de datos para archivar o suprimir “objetos”**

La utilidad Cerity NDS Data Archive le permite guardar “objetos” de la base de datos, como muestras y secuencias introducidas, resultados de muestras y secuencias, información sobre instrumentos y métodos en un medio de archivo (disco u otro tipo de almacenamiento). La utilidad de archivo se usa para el almacenamiento a largo plazo. También puede usar esta herramienta para mover datos de una base de datos a otra. Una vez que haya archivado los datos, puede eliminar los datos viejos de la base de datos. Es necesario “limpiar” la base de datos de forma regular para mantener el buen rendimiento del sistema. Cerity NDS almacena los objetos archivados en los directorios del sistema de archivos de Windows.

*Consulte “Búsquedas en la base de datos” en la página 36 para obtener más información sobre el Asistente de consulta.*

La utilidad Data Archival utiliza el mismo **Query Wizard** (asistente de consulta) para encontrar estos objetos que se archivan que la aplicación Pharmaceutical QA/QC para encontrar los objetos que se configuran o editan.

**Restaurar “objetos” en la base de datos** La utilidad Data Archival restaura objetos en el sistema de archivos de Windows en cualquier unidad de la red en la misma base de datos o en una diferente de la red.

Cuando la utilidad Data Archival restaura objetos de una base de datos a una diferente, la utilidad Database Resolve comienza por sí misma a resolver las incoherencias entre las bases de datos. El usuario debe decidir qué versiones deben utilizarse si hay duplicados.

### **Sistema de copia de seguridad de Cerity NDS**

El software Cerity NDS también incluye las utilidades Cerity Database Backup e Import. Utilice las utilidades Cerity Database Backup e Import para crear copias de seguridad coherentes de los datos. Las utilidades mantienen sincronizados los objetos de la base de datos y los archivos Oracle. En el caso de pérdida de datos, puede recuperar todos los datos Cerity NDS contenidos en la base de datos antes de la última copia de seguridad. La utilidad de Backup de Cerity puede ejecutarse mientras la base de datos esté activa. Hace

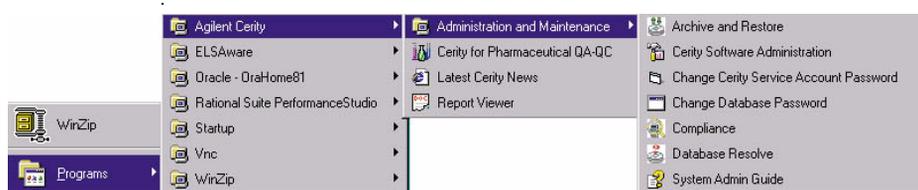
una pausa temporal sin ningún impacto sobre las secuencias que se estén analizando. La copia de seguridad puede restaurarse mediante la utilidad Import de Cerity.

Agilent recomienda que utilice otros programas de copia de seguridad/restauración, como los de Veritas Software, para crear copias de seguridad y restaurar trabajos para los archivos de objetos de la base de datos y, seguidamente, utilizar las utilidades Backup e Import de Cerity para ejecutar los trabajos. Las utilidades de Cerity proporcionan una interfase de línea de comandos con este objetivo. Las utilidades de Cerity gestionan la copia de seguridad y restauración de archivos Oracle, manteniéndolos sincronizados con los archivos de objetos de Cerity. Esto le permite utilizar las herramientas de copia de seguridad y SOP de acuerdo con las políticas de su empresa.

Consulte a su representante de Agilent Cerity NDS para establecer programas de copia de seguridad, de archivo y de eliminación que sean apropiados para su sistema.

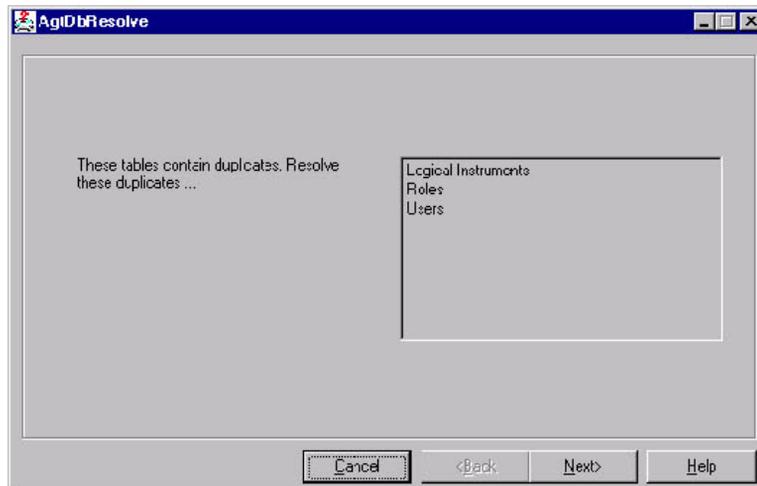
### Resolución de conflictos de nombres de base de datos

Puede resolver los conflictos de nombres de base de datos al ejecutar la utilidad **Database Resolve**. Seleccione el elemento de menú Database Resolve del menú **Start** para iniciar la utilidad.



**Figura 62** Elemento de menú Database Resolve

Una vez que un usuario se ha conectado al sistema, el sistema ejecuta la utilidad y muestra un mensaje que dice que no hay conflictos de nombre, o bien un panel que muestra los conflictos de nombres que deberá resolver el usuario. Si se encuentran nombres duplicados, los usuarios pueden resolver el nombre del perfil de funciones o del usuario y pueden elegir activar un instrumento.



**Figura 63** Pantalla Database Resolve

La utilidad Archive and Restore abre automáticamente la utilidad Database Resolve cuando intenta restaurar datos de una base de datos en otra diferente.

### **Bloqueo de objetos**

Cuando una aplicación accede a un objeto en la base de datos, por ejemplo, una muestra o un método, el objeto se bloquea automáticamente. Si falla el sistema, el bloqueo no se desactiva y el objeto queda en estado no disponible para los otros ordenadores de la red. En la mayoría de los casos, el reinicio de la aplicación en el ordenador en el que se produjo el fallo recupera los objetos bloqueados. Sin embargo, en los casos en los que el objeto no se recupera reiniciando la aplicación, la ejecución de uno de los comandos de la consulta *lockedobjects.sql* recuperará el objeto.

# Índice

## A

acceso al sistema  
  acceder a la base de datos, 150  
  configuración de usuarios, 150  
  seguridad, 150  
  tiempo de inactividad de la sesión, 150  
acceso autorizado, 17  
actualización de calibración, 49  
actualizar licencia, 145  
administrador, 14, 17, 153  
adquisición de datos, 11  
agrupamiento, 105  
añada momento de la señal, 101  
análisis de datos  
  cálculos personalizados, 102  
  calibración, 102  
  cromatograma de ejemplo, 100  
  cuantificación, 102  
  identificación, 101  
  integración, 101  
  límites, 103  
análisis de muestras, 12  
análisis pendientes, 49  
analizar  
  cancelar, 53, 54  
  cola, 54  
  edición de secuencia, 54  
  hacer una pausa, 54  
  interrumpir, 53  
  muestras únicas, 53  
  orden, 53  
  parar un análisis de una secuencia, 54  
  reanudar, 54  
  registrar eventos, 55  
  reglas de programación, 53  
  secuencia, 53  
analizar una muestra, 33

analizar una secuencia, 33  
árbol de selección, 26  
archivar, 14, 149, 157  
archivo Agilent ChemStation, 61  
archivo ANDI, 61  
archivo XML, 135  
asignación de perfil de funciones, 153  
Asistente de consulta, 26  
Asistente de métodos, 43  
ATCSP, 18  
auditoría  
  de una tarea, 154  
  firma electrónica, 154  
  libro de registro Sample, 40  
  libro de registro Sequence, 40  
  motivos, 148, 154  
  para un cambio, 148  
  requisitos, 154  
  seleccionar tareas, 39  
autorizaciones, 151  
autorizaciones de directorio, 151

## B

barra de herramientas  
  acción, 26  
  ayuda, 26, 28  
  editar, 27  
  estándar, 26  
base de datos  
  añadir, 144  
  herramientas de configuración, 144  
  incoherencias, 159  
base de datos relacional, 11  
botón Abort, 54  
botón New, 26  
botón Pause, 54

botón Remove, 54  
botón Resume, 54

## C

calculador de grupo de muestras, 118  
calculador personalizado  
  grupo de muestras, 118  
cálculos personalizados  
  añadir columnas, 114  
  análisis de datos, 102  
  configuración nueva, 115  
  configurar, 110, 119  
  ejemplo, 119 to 123  
  fórmula nueva, 114  
  generar, 111  
  hoja de cálculo, 113  
  otros ejemplos, 124  
  tipo de resultado, 110, 114  
  variables existentes, 114  
calibración  
  actualización única, 72, 106  
  agrupamiento, 73, 107  
  análisis de datos, 102  
  cantidad fija, 105  
  cantidad variable, 105  
  configurar, 102  
  de agrupamiento general, 74, 108  
  estándares, 102  
  factores de respuesta, 102, 106, 107  
  tabla, 106  
  tiempos de retención, 106  
calibración de actualización única, 72, 105, 106  
calibración de agrupamiento, 73, 107  
calibración de agrupamiento general, 74, 108  
calibración de un solo nivel, 104

## Índice

- calibración específica de un instrumento, [109](#)
  - calibración específica de una secuencia, [109](#)
  - calibración general, [105](#)
  - calibración multinivel, [104](#)
  - cambiar contraseña, [151](#)
  - campos, [45](#)
  - cantidad de muestra
    - modificar, [50](#)
  - cantidad variable de muestra
    - divisores, [50](#)
    - multiplicadores, [50](#)
  - Cerity
    - administrador, [14, 17](#)
    - base de datos, [16](#)
    - cliente de revisión, [11, 14](#)
    - componentes, [11](#)
    - controlador de adquisición, [11](#)
    - herramientas de consulta, [16](#)
    - informes, [152](#)
    - plantillas, [152](#)
    - registro de auditoría, [19](#)
    - seguridad, [17](#)
    - servidor de la base de datos, [11](#)
    - usuarios, [142](#)
  - Cerity Database Resolve, [14](#)
  - Cerity Report Template Editor
    - acceso, [46](#)
    - crear plantillas, [133](#)
    - crear plantillas de informe, [13](#)
    - editor de textos, [136](#)
    - Etiqueta Fields, [134](#)
    - Etiqueta Sections, [134](#)
    - Etiqueta Template, [134](#)
    - herramientas, [133](#)
    - modificar plantillas, [133](#)
  - Cerity Report Viewer
    - imprimir, [13](#)
    - informes guardados, [139](#)
    - ver, [13](#)
  - Cerity Software Administration
    - acerca de, [14](#)
    - añadir base de datos, [144](#)
    - herramientas de configuración, [143](#)
    - parámetros de configuración, [149](#)
  - Channel Partners, [18](#)
  - cliente de revisión, [14, 15](#)
  - clúster, [9](#)
  - cola, [54](#)
  - componentes de informe
    - plantillas de secuencia, [135](#)
  - componentes del informe
    - plantillas de multiinyección, [135](#)
  - comprobación de la identidad, [19](#)
  - comprobaciones de autorización, [17](#)
  - comprobaciones de dispositivos, [18](#)
  - configuración de método
    - destino del informe, [132](#)
    - mapa de carreteras, [92](#)
    - opciones, [43](#)
  - configuración de métodos
    - análisis de datos, [12](#)
    - cálculos personalizados, [12](#)
    - disposición de resultados, [12](#)
    - generación de informes, [13](#)
    - instrumento, [12](#)
    - límite, [12](#)
    - tipo de informe, [12](#)
  - configuración de usuarios, [150](#)
  - consulta
    - datos para revisar, [16](#)
    - herramientas, [16](#)
    - lista, [26](#)
    - para cada pantalla, [37](#)
    - predeterminada, [36](#)
    - resultados, [36](#)
  - contraseña, [14, 148, 151](#)
  - control de revisión, [19](#)
  - controlador de adquisición, [15](#)
  - creación de métodos
    - muestras únicas, [94](#)
    - secuencias, [94](#)
  - credenciales del usuario, [19](#)
  - cromatograma de ejemplo
    - análisis de datos, [100](#)
    - crear, [100](#)
    - utilización, [100](#)
  - Cualificación de la Instalación, [18](#)
  - Cualificación Operacional, [18](#)
  - cualificación operativa, [18](#)
  - cuantificación
    - análisis de datos, [102](#)
    - compuestos no calibrados, [102](#)
    - picos no identificados, [102](#)
    - resultados, [114](#)
  - cumplimiento de las normas, [14, 17](#)
- ## D
- datos
    - archivar, [18](#)
    - corrupción, [18](#)
    - incoherencias, [18](#)
    - objetos, [18](#)
    - recuperar, [16](#)
    - suprimir, [149, 157](#)
    - tipos, [22](#)
    - trazabilidad, [19](#)
  - datos de resultados, [11](#)
  - datos primarios, [11](#)
  - definidas por el usuario
    - resultados, [115](#)
  - definidos por el usuario
    - variables, [115](#)
  - derechos de revisión, [63](#)
    - accepted, [63](#)
    - revisión estricta, [63](#)
  - derechos sobre las tareas, [153](#)
  - destino del informe, [50, 51, 132](#)
  - diccionario de datos, [152](#)
  - diferencias entre métodos, [94](#)
  - dispositivos, [147](#)

**E**

- entrada de muestra
  - carpeta, 31
  - colocar información en la tabla, 50
  - destino del informe, 132
  - guardar información, 50
  - panel, 31
- entrada de muestras únicas
  - pantalla Instrument, 49
  - pantalla Sample, 49
- entrada de secuencias
  - pantalla Instrument, 50
  - pantalla Sample, 50
- equilibrar
  - columna, 52
  - instrumento, 52
- equilibrar parámetros, 52
- espacio de trabajo, 27
- Estación de trabajo NT, 8, 11
- estado de revisión
  - necesita reprocesamiento, 63
- estándares, 102
- estándares de calibración
  - promedio, 106
- Etiqueta Fields, 137
- Etiqueta Sections, 137
- Etiqueta Template, 134
- eventos calculados, 101
- eventos iniciales, 101

**F**

- factores de respuesta, 102, 106, 107
- firma electrónica
  - auditoría, 154
  - comprobación de la identidad, 19
  - credenciales, 19
  - marcada en el tiempo, 19
  - motivo de los cambios, 39
  - requisitos, 39
- formato para la revisión de datos
  - pantalla preliminar, 128
  - tabla de resultados, 103
- formatos de fecha y hora, 148

- formatos numéricos, 148
- formatos que afectan a todo el sistema
  - fecha y hora, 148, 156
  - numéricos, 148, 156
- función matemática, 118
- funciones, 118

**G**

- generación de informes, 44
- guardar cambios en la base de datos, 39

**H**

- herramientas de integración, 69
- hoja de cálculo, 113, 124
- hoja para cálculos, 113

**I**

- identificación de compuestos
  - añadir o eliminar, 101
- idoneidad del sistema
  - configurar, 129
  - inyecciones, 107
  - resultados, 129
  - valores, 129
- impresora predeterminada, 146
- información de muestras únicas
  - colocar en la tabla, 51
- informes
  - configurar, 130
  - formato, 137
  - generar, 130
  - mapa de carreteras, 130
  - ver o imprimir, 130
- ingenieros de soporte, 18
- instrumento
  - columna, 52
  - configurar, 98, 147
  - método, 93
  - pantalla, 33
- instrumento lógico, 147

**Integración**

- análisis de datos, 101
- cambiar cromatograma, 101
- eventos calculados, 101
- eventos iniciales, 101
- integración de picos, 114
- interrumpir un análisis, 53
- invitado, 153
- IQ, 18

**L**

- libro de registro
  - método, 40
  - muestra, 60
  - secuencia, 51
- libro de registro Instrument, 55
- libro de registro Sample, 60
- libro de registro Sequence, 41, 51
- licencia
  - actualizar, 145
  - añadir, 145
  - autorización, 145
  - utilización, 145
- licencia de usuario, 8
- límites
  - análisis de datos, 103
  - configurar, 103
  - tipo de resultado, 103
- lista de trabajo
  - estado del análisis, 34
  - seguir la pista de muestras y secuencias, 54
  - tareas, 54

**M**

- mantenimiento de la base de datos, 149
- mapa de carreteras
  - analizar muestras rutinarias, 48
  - configurar informes, 130
  - parámetros para configurar un método, 92
- menú de acceso directo, 27
- menú de ayuda, 28

## Índice

metadatos, 11  
método  
  acerca de, 96  
  crear, 43  
  descripción, 95  
  entradas adjuntas, 95  
  formato para la revisión de datos, 127  
  generación de informes, 103  
  libro de registro, 40, 96  
  pantalla, 25  
  parámetros, 43  
  plantilla, 43  
  principal, 93  
  publicar, 93  
  resultados adjuntos, 95  
  revisiones, 96  
  revisiones antiguas, 96  
métodos principal, 93  
modos de calibración  
  de un solo nivel, 104  
  multinivel, 104  
modos de revisión  
  revisión no estricta, 63  
muestra  
  analizar, 33, 34  
  estado, 34  
  introducir, 25  
  pantalla, 22  
muestras rutinarias  
  analizar, 48  
  mapa de carreteras, 48

## N

niveles de cálculo  
  acerca de, 116  
  grupo de tipo muestra, 118  
  inyección única, 116  
  resumen de multiinyección, 117  
número de revisión  
  incrementos, 70  
  revisión de resultados, 70

## O

object locking, 160  
objetos, 22  
OO/PV, 18

## P

panel Instrument  
  introducir parámetros, 52  
  módulos, 52  
pantalla  
  método, 25  
  muestra, 22  
  resultado, 24  
Pantalla Current, 26  
parámetros  
  análisis de datos, 38  
  generación de informes, 44  
  instrumento, 38  
  método, 43  
parámetros de instrumento  
  definir valores, 52  
  valores en tiempo real, 52  
perfiles de funciones  
  administrador, 153  
  invitado, 153  
  químico, 153  
  técnico, 153  
  usuario que envía muestras, 153  
plantilla  
  informe, 38  
  método, 43  
  secuencia, 38

plantilla de informe  
  campos, 13  
  creación, 45  
  crear, 134  
  crear a partir de una existente, 136  
  insertar elementos, 137  
  modificar, 45  
  nueva, 45  
  opciones de formato, 138  
  opciones de guardar, 138, 139  
  opciones de impresión, 138  
  predeterminada, 45  
  recuperar datos, 13  
  tablas, 13  
plantilla de informe predeterminada, 13  
plantilla de secuencia, 38, 100  
  pantalla Sample, 31  
plantillas de informe compuesto  
  multiinyección, 135  
  secuencia, 135  
plantillas de informe individual  
  cumplimiento de las normas, 134  
  dispositivo, 134  
  guardar informe nuevo, 135  
  inyección única, 134  
  método, 134  
plantillas de multiinyección, 135  
plantillas de secuencias, 135  
precisión decimal, 156  
procedimientos de calibración  
  calibración específica de un instrumento, 109  
  calibración específica de una secuencia, 109  
programar análisis, 53  
propiedades de conexión, 147  
publicar método, 93

## Q

químico, 153

**R**

recalibración, 104  
 recuperar datos, 16  
 registro, 148  
 registro de auditoría  
   control de revisión, 19  
   normativa, 19  
 registros electrónicos, 154  
 reintegrar  
   eventos calculados, 69  
   eventos iniciales, 69  
 relaciones entre hojas de cálculo, 124 to 126  
 representación en tiempo real, 52  
 reprocesamiento  
   acción de, 65  
   motivo para, 68  
   opciones, 65  
   servidores, 11  
 reprocesar resultados, 65  
 restaurar, 14, 149, 157  
 resultado  
   consulta, 56  
   encontrar, 56  
   pantalla, 24, 35  
   revisar, 35  
 resultados  
   aprobar, 62  
   aprobar/rechazar, 61  
   autointegrar, 69  
   campos, 128  
   cómo mostrarlos, 127  
   cuantificación, 114  
   integración de compuestos, 114  
   integración de picos, 114  
   rechazar, 62  
   reprocesar, 61  
   revisar, 61  
   revisiones avanzadas, 12  
   tipos de disposición, 127  
   variables, 128  
 revisión de resultados  
   muestras únicas, 59  
   secuencia, 60

revisiones  
   antiguas, 96  
   método, 96  
 revisiones de resultados, 70  
 revisiones de tablas de calibración, 72 to 74  
 revisions  
   old, 75

**S**

secuencia  
   analizar, 33, 34, 53  
   asignar, 31  
   configurar, 25  
   crear, 31  
   edición durante un análisis, 54  
   estado, 34  
   hacer una pausa, 34  
   parar, 34  
   reanudar, 34  
 seguridad  
   acceso al sistema, 148, 150  
   acceso autorizado, 17  
   autorizaciones de directorio, 148  
   cambiar contraseña, 148  
   perfiles de funciones, 148  
 sentencias condicionales, 118  
 sequence options  
   report destination, 51  
   run tasks to perform, 51  
 servicios de validación, 18  
 servidor de adquisición, 147  
 servidor de la base de datos, 11  
 Sistema cliente/servidor de Cerity, 8  
 Sistema profesional de Cerity, 8  
 suma de picos, 101  
 suprimir datos, 14

**T**

tabla de calibración de compuestos, 104  
 técnico, 153  
 tiempo de inactividad de la sesión, 150  
 tiempos de retención, 106

tipo de informe  
   generar, 44  
   imprimir, 44  
   predeterminado, 44  
   selección, 44  
 tipos de informe  
   configurar un método, 131  
   para una muestra única, 131  
   para una secuencia, 131  
 tipos de informe predeterminados, 44  
 tooltips, 28, 29  
 traceability, 75  
 trazabilidad, 19

**U**

usuario  
   añadir, 146  
   asignar perfil de funciones, 146  
   derechos de revisión, 146  
 usuario que envía muestras, 12, 153  
 Utilidad Cerity Archive and Restore, 157  
 Utilidad Compliance Check, 18  
 Utilidad Database Resolve, 158

**V**

validación del rendimiento, 18  
 valores reales  
   dispositivo, 52  
 valores reales de dispositivos, 52  
 variables  
   grupo de tipo muestra, 115  
   método, 114  
   muestra, 114  
   muestra personalizada, 114  
 variables de grupo de tipo muestra, 115  
 variables de la muestra, 38  
   sistema, 98  
 variables de la muestra del sistema, 98  
 variables de las muestras  
   modificar, 99  
   personalizar, 99  
 variables de método, 115  
 variables de muestras, 114

## Índice

variables de muestras personalizadas, [99](#),  
[114](#)  
variables existentes, [114](#)  
Verificación del Rendimiento, [18](#)  
vista  
    actual, [22](#)  
vista actual, [22](#)



**www.agilent.com**

## **En esta Guía...**

La Guía de conceptos presenta la “imagen completa” que hay detrás del Sistema de datos Cerity de Agilent para control de calidad farmacéutico que le ayudará a:

- Entender cómo utilizar los componentes de Cerity NDS
- Ahorrar tiempo utilizando la ayuda en línea

Esta guía incluye información sobre:

- Visión general del Cerity NDS
- Fundamentos de Cerity para QA/QC farmacéutico
- Conceptos del análisis de muestras
- Conceptos para la configuración de métodos
- Aplicaciones de administración y mantenimiento

© Agilent Technologies Deutschland GmbH 2003

Impreso en Alemania  
5/2003



G4000-95023



**Agilent Technologies**