



Mostra Convegno delle Soluzioni
e Applicazioni Verticali di Automazione,
Strumentazione, Sensori.



Mostra Convegno della
Manutenzione Industriale.



Mostra Convegno delle Tecnologie
per l'Analisi, la Distribuzione
e il Trattamento.



Mostra Convegno della Domotica
e delle Building Technologies.

24 ottobre



25 ottobre



**VALVOLE POMPE
COMPONENTI**

Veronafiere 24 - 25 ottobre





LabWare ELN v2

C. De Franceschi – LabWare Italia

DeFranceschi@LabWare.com

Futurelab 2012

Enterprise Laboratory Platform



LabWare ELN - panoramica

- Che cosa è un ELN?
- Caratteristiche e funzioni di LabWare ELN



Che cosa è un ELN?

- Il termine "quaderno di laboratorio elettronico" (ELN) risale agli anni 90, quando la possibilità di mettere insieme immagini, diagrammi, note, tabelle, etc. in un documento elettronico è diventata una realtà
- Alcuni prodotti ELN commerciali sono apparsi per la prima volta più di 10 anni fa, ma la loro popolarità è aumentata negli ultimi 5 anni.



Perché la necessità di un ELN in R&S?

- I sistemi LIMS non gestiscono molto bene i dati non strutturati (perché non sono progettati per farlo).
- I LIMS non sono mai stati progettati per garantire la difesa della «proprietà intellettuale»
- La R&S ha bisogno di sistemi basati su «esperimenti», che i LIMS non forniscono
- In R&S serve spesso un ambiente flessibile per i ricercatori, che non richieda il coinvolgimento di Amministratori di Sistema o programmatori per ridefinire il proprio sistema di gestione



Perché la necessità di un ELN in QA / QC?

(Laboratory Execution System LES)

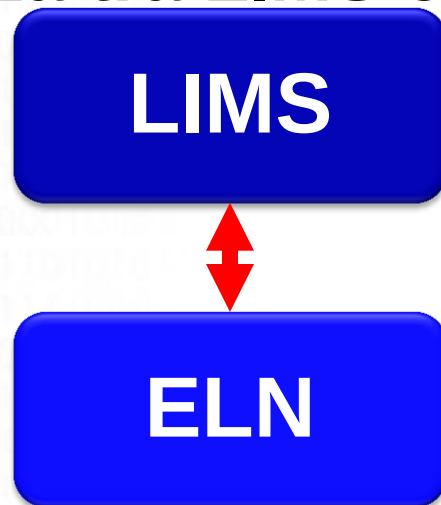
... ma un LIMS non fa
già gran parte di tutto
ciò?

- Per fornire agli utenti finali istruzioni facili da seguire (Method Execution)
- Per semplificare l'integrazione con gli strumenti
- Per automatizzare i calcoli
- Per acquisire tutti i dati grezzi
- Per acquisire dati di supporto (per esempio standard e/o reagenti utilizzati, setting degli strumenti, ecc.)
- In alcuni casi per fornire un sistema di «backup» in caso di mancata disponibilità del sistema principale.



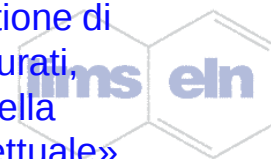
La convergenza di ELN e LIMS

- Alcuni sviluppatori LIMS hanno aggiunto capacità ELN e chi crea prodotti ELN sta iniziando ad aggiungere caratteristiche LIMS ai propri sistemi
- La maggior parte delle conferenze internazionali ora discutono della convergenza tra LIMS ed ELN



Tutto basato sulla gestione dei flussi e dei dati strutturati

Flessibilità, gestione di dati non strutturati, protezione della «proprietà intellettuale»



LabWare ELN

- Lo sviluppo è iniziato nel 2009
- Nel 2010 i «beta partner» hanno cominciato ad usarlo
- Rilascio della versione 1 a marzo 2011
- Versione 2 ad Ottobre 2012





LabWare ELN

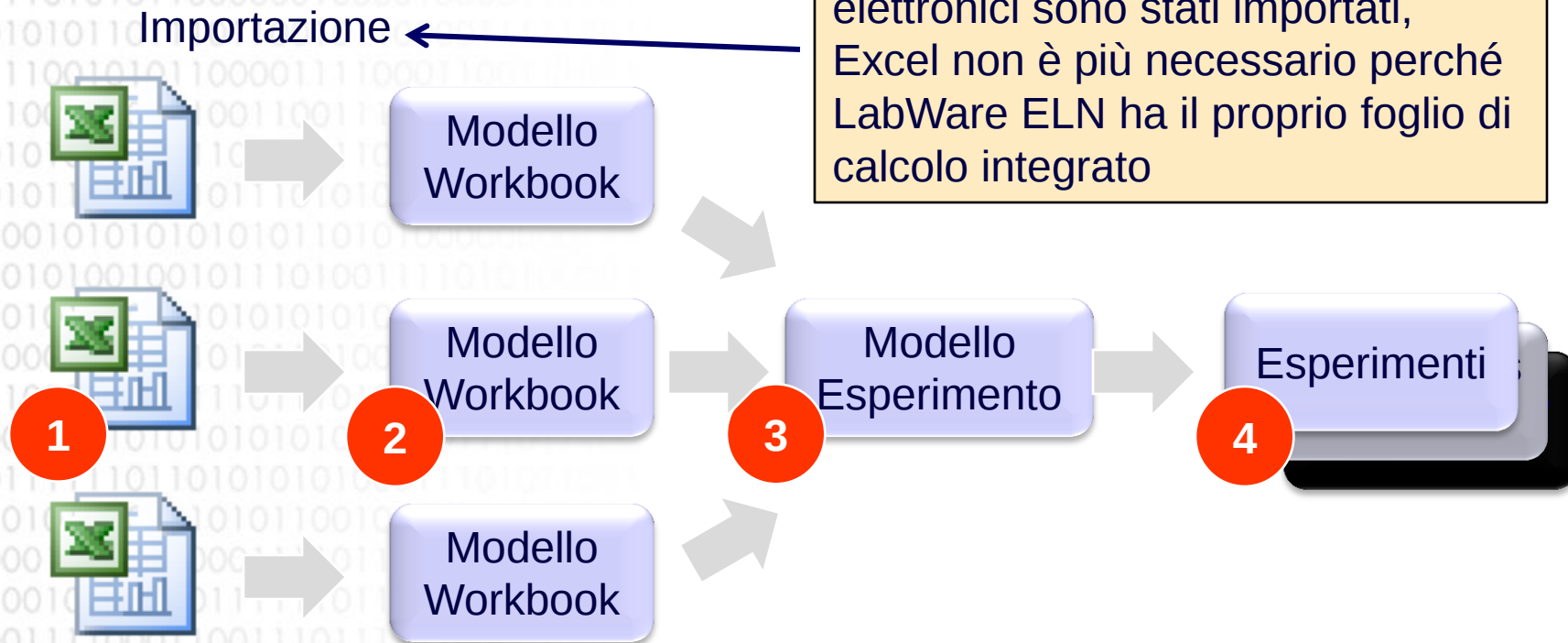
Ricerca e Sviluppo

Enterprise Laboratory Platform

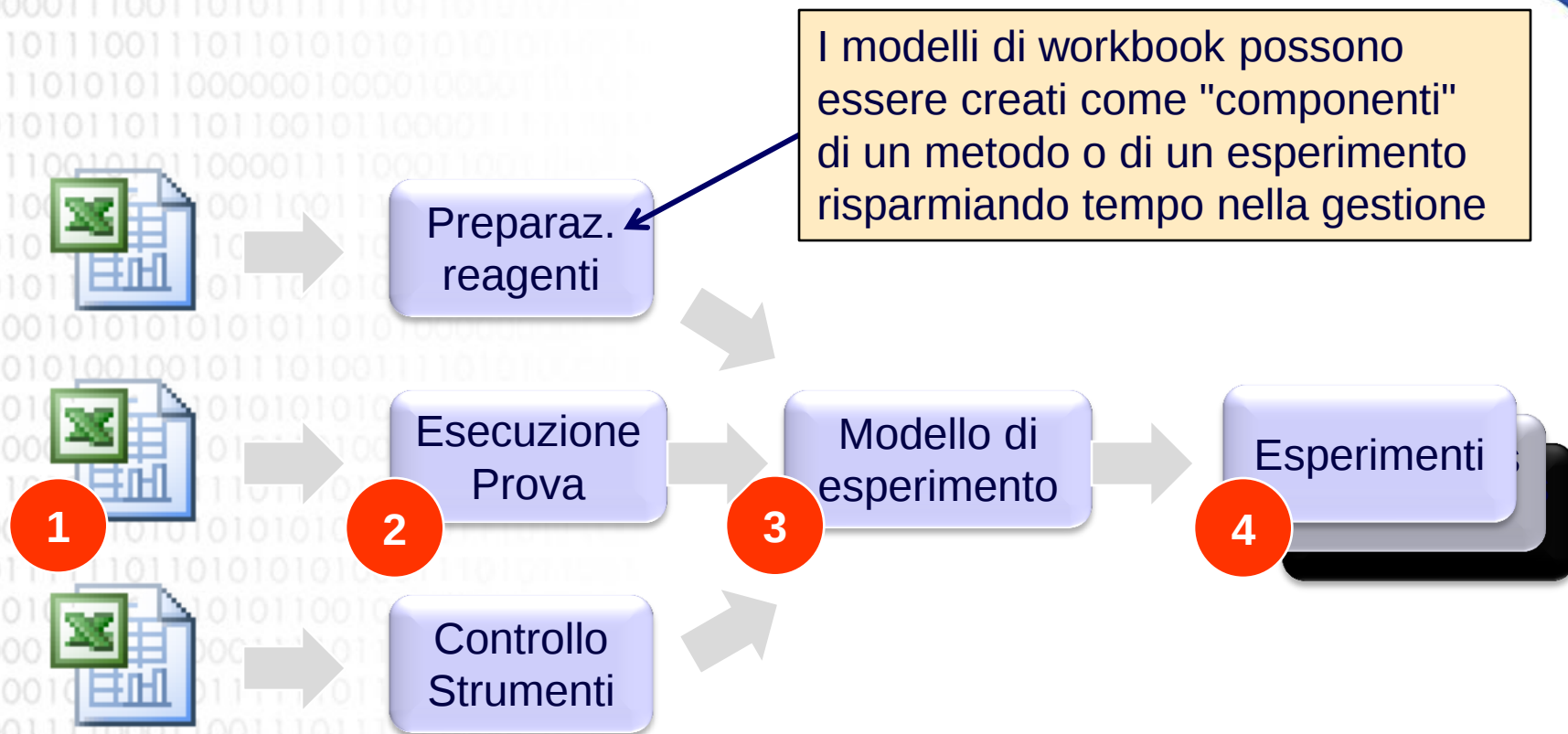


Concetti di base per la R&S

Nota: Una volta che i fogli elettronici sono stati importati, Excel non è più necessario perché LabWare ELN ha il proprio foglio di calcolo integrato



Concetti di base per la R&S / 2

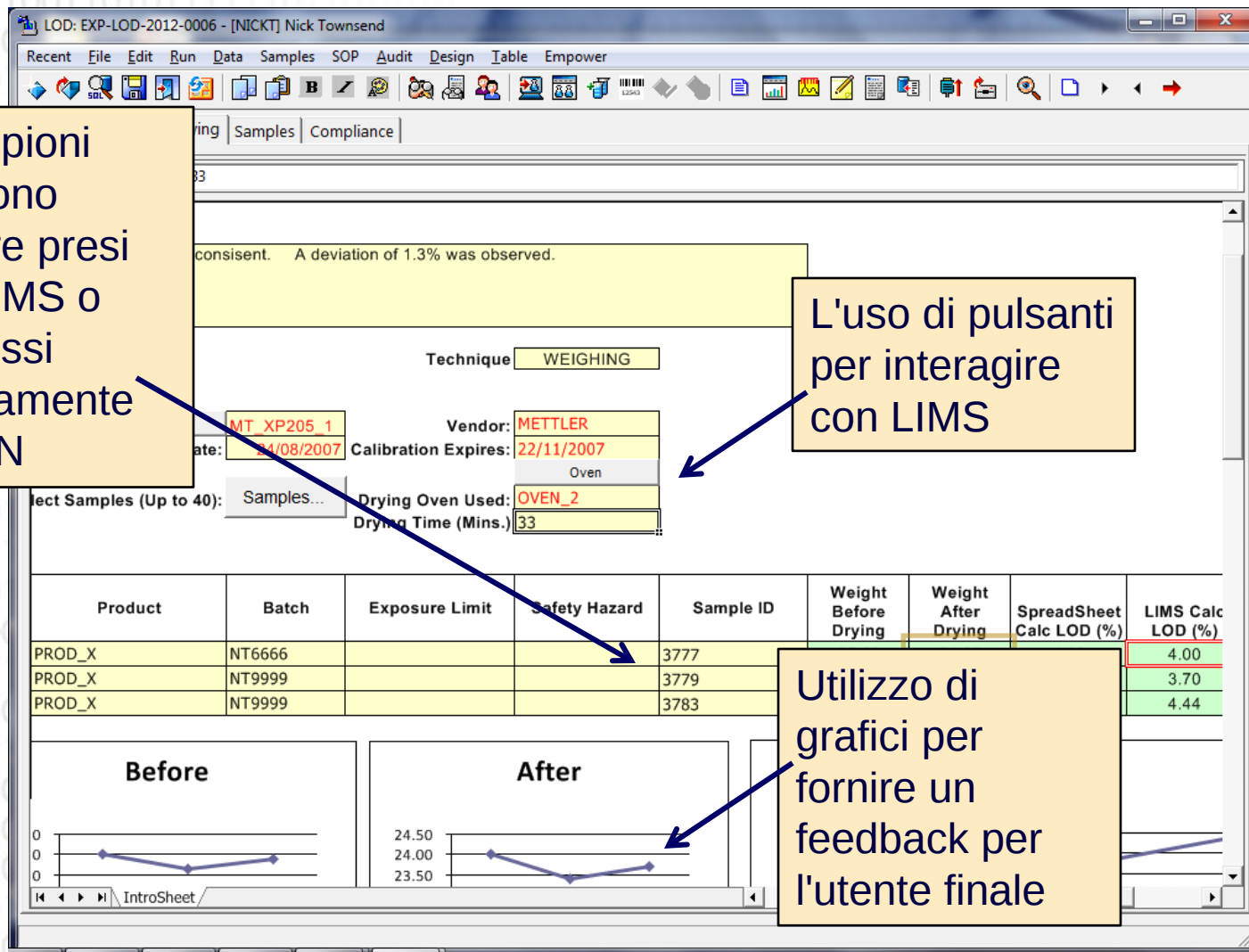


Interfaccia flessibile per la R&S

I campioni possono essere presi dal LIMS o immessi direttamente in ELN

L'uso di pulsanti per interagire con LIMS

Utilizzo di grafici per fornire un feedback per l'utente finale



Interfaccia flessibile per la R&S / 2

Conclusions:
The loss on drying is consistent. A deviation of 1.3

Balance: MT_XP205_1
Calibration Date: 24/08/2007 Calibration Expires: 22/11/2007
Select Samples (Up to 40): Samples... Drying Oven Used: OVEN_2
Drying Time (Mins.): 33

L'acquisizione diretta dei risultati dagli strumenti

Collect Instrument Data

Instrument: BAL_1
Grid Direction: Down
☐ Overwrite Grid Data ☐ Auto Accept Data
Request Data Accept Data: V

Product	Batch	Exposure Limit	Safety Hazard	Sample ID	Weight Before Drying	Weight After Drying	SpreadSheet Calc LOD (%)	LIMS Calc LOD (%)
PROD_X	NT6666			3777	25.00	24.00	4.00	4.00
PROD_X	NT9999			3779	24.30	23.40	3.70	3.70
PROD_X	NT9999			3783	24.80	23.70	4.44	4.44

Before **After** **LOD**

IntroSheet

eln

Interfaccia flessibile per la R&S / 3

LOD: EXP-LOD-2012-0006 - [NICKT] Nick Townsend

Recent File Edit Run Data Samples SOP Audit Design Table Empower

Summary Loss on Drying Samples Compliance

KEITH

Conclusions:
The loss on drying is consistent. A deviation of 1.3% was observed.

Technique **WEIGHING**

Balance: **MT_XP205_1** Vendor: **METTLER**
Calibration Date: **24/08/2007** Calibration Expires: **22/11/2007**
Oven

Select Samples (Up to 40): **Samples...** Drying Oven Used: **OVEN_2**
Drying Time (Mins.): **33**

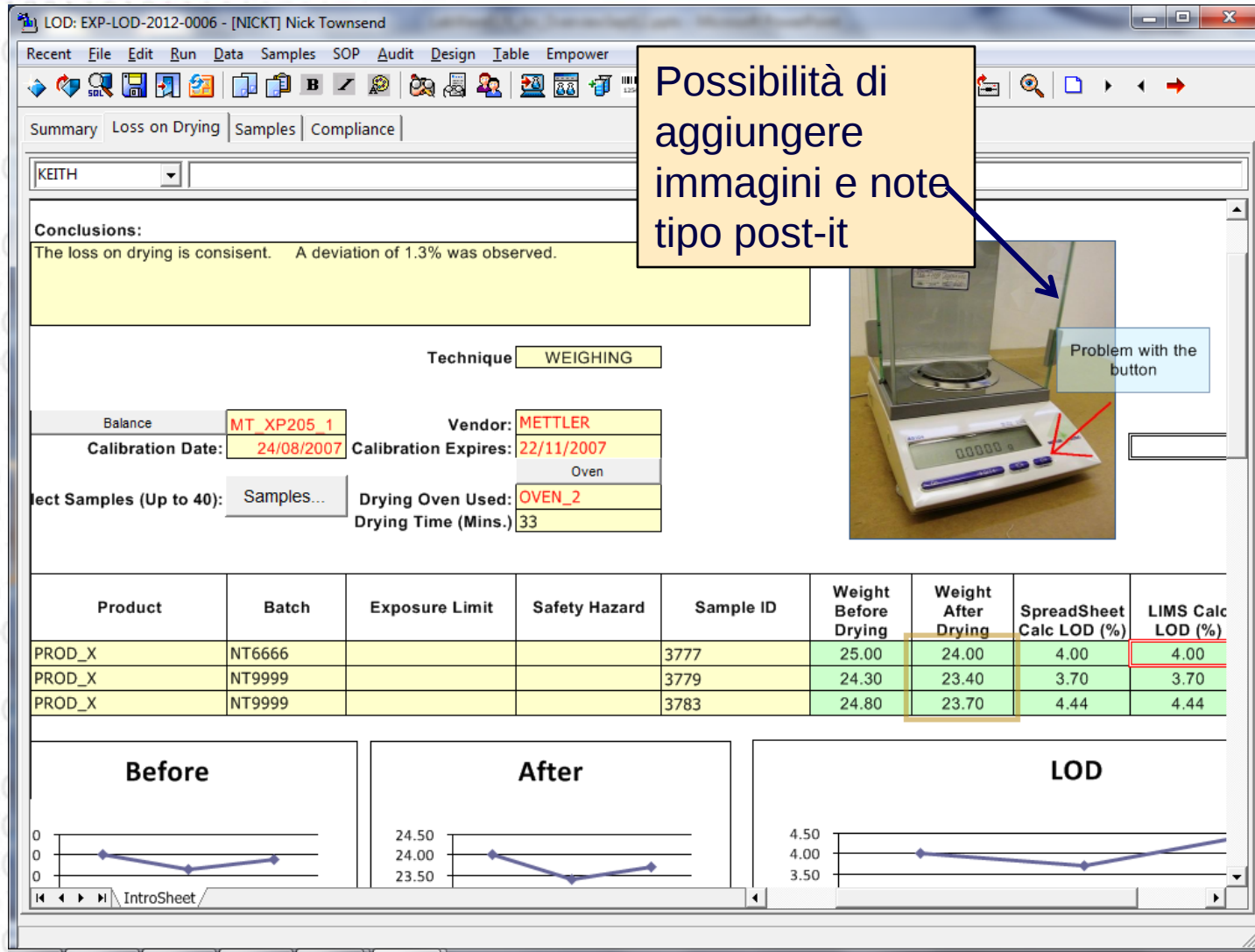
Product	Batch	Exposure Limit	Safety Hazard	Sample ID	Weight Before Drying	Weight After Drying	SpreadSheet Calc LOD (%)	LIMS Calc LOD (%)
PROD_X	NT6666			3777	25.00	24.00	4.00	4.00
PROD_X	NT9999			3779	24.30	23.40	3.70	3.70
PROD_X	NT9999			3783	24.80	23.70	4.44	4.44

Before **After** **LOD**

IntroSheet

Possibilità di aggiungere immagini e note tipo post-it

Problem with the button



Tracciabilità completa

LOD: EXP-LOD-2012-0006 - [NICKT] Nick Townsend

Recent File Edit Run Data Samples SOP Audit Design Table Empower

Summary Loss on Drying Samples Compliance

F17 44

Conclusions:
The loss on drying is consistent. A deviation of 1.3% was observed.

Technique: WEIGHING

Balance: MT_XP205_1 Vendor: METTLER
Calibration Date: 24/08/2007 Calibration Expires: 22/11/2007
Oven

Select Samples (Up to 40): Samples... Drying Oven Used: OVEN_2
Drying Time (Mins.): 44

09/09/2012 10:33:56 - NICKT [Nick Townsend]
I captured the reading too early

Tracciabilità completa di correzioni e possibilità di includere note esplicative

Audit Dialog
Specify an audit reason
Instrument Error
OK

Sample ID	Weight Before Drying	Weight After Drying	SpreadSheet Calc LOD (%)	LIMS Calc LOD (%)
3777	25.00	24.00	4.00	4.00
3779	24.30	23.40	3.70	3.70
3783	24.80	23.70	4.44	4.44

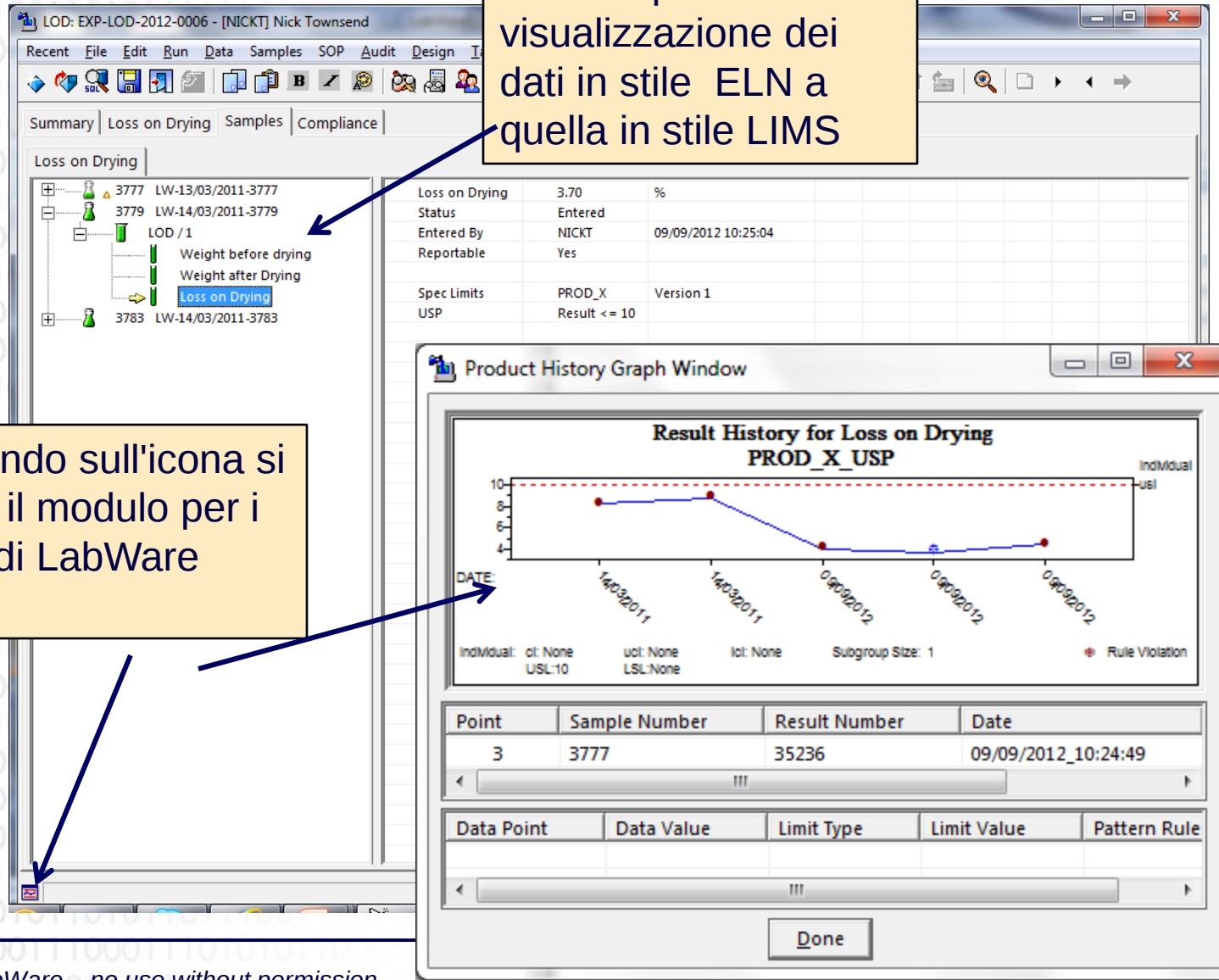
LOD



Perfetta integrazione con LIMS

E' facile passare dalla visualizzazione dei dati in stile ELN a quella in stile LIMS

Cliccando sull'icona si lancia il modulo per i trend di LabWare LIMS



Acquisizione di dati da file

IMPURITIES: EXP-IMPURITIES-2012-0001 - [NICKT] Nick Townsend

Recent File Edit Run Data Samples SOP Audit Design Table Empower

Summary GC Impurities example Samples

A1

Chromatographic Impurities by GC

Raw Data Filename C:\HPCHEM\1\DATA\4321.D
Injection Date 11/30/99 3:01:50 PM
GC Channel ADC1 A, ADC1 CHANNEL A
Column Temperature 220.000 Inj Vol: Manual

Ref. Peak RT 7.13

Peak Name	RT	RRT	Area	Area%
Ethyl Benzene	4.603	-2.53	146.95042	0.011
Toluene	3.59	-3.54	-	-
n-Propyl Benzene	5.842	-1.29	53.83807	0.004
mp-Ethyl Toluene	6.184	-0.95	16.89888	0.001
p-Xylene	4.696	-2.43	529.47638	0.044
Phenylacetylene	10.366	3.24	322.98962	0.025
Alpha Methylstyrene + o-Diethyl Benzene	9.232	2.10	130.20322	0.010
Secondary Butyl Benzene	6.94	-0.19	-	-
Percent Total Impurities				0.095

Spl1

Acquisizione di dati da file / 2

IMPURITIES: EXP-IMPURITIES-2012-0001 - [NICKT] Nick Townsend

Recent File Edit Run Data Samples SOP Audit Design Table Empower

Summary GC Impurities example Samples

A1

Chromatographic Impurities by GC

Filename: C:\HPCHEM\1\DATA\4321.D
Injection Date: 11/30/99
Channel: ADC1 A
Temperature: 220

Injection Date : 11/30/99 3:01:50 PM
Sample Name :
Acq. Operator :
Oven Temp : 220
Acq. Method : C:\HPCHEM\1\METHODS\N0.M
Last changed : 11/30/99 2:48:46 PM (modified after loading)
Analysis Method : C:\HPCHEM\1\METHODS\N0.M
Last changed : 11/30/99 3:24:23 PM (modified after loading)

vial : 1
Inj volume : Manual

Normalized Percent Report

Sorted By : Signal
Calib. Data Modified : 11/12/99 11:26:58 AM
Multiplier : 1.0000
Dilution : 1.0000

Signal 1: ADC1 A, ADC1 CHANNEL A
Uncalibrated peaks RF : 1.00000

RetTime [min]	Type	Area [uv*s]	Amt/Area	Norm %	Grp	Name
3.060		-	-	-		BEN
3.590		-	-	-		TOL
4.491	BV	1148.09473	1.00000	0.087335		?
4.603	VV	146.95042	9.56000e-1	0.010687		EB
4.696	VP	529.47638	1.10000	0.044305		P-XYL
4.810		-	-	-		M-XYL
5.157	BP	176.13106	1.00000	0.013398		?
5.270		-	-	-		CUMENE
5.435	BP	175.05788	1.00000	0.013317		?
5.550		-	-	-		O-XYL
5.842	BP	53.83807	1.00000	0.004095		N-PROPYL
6.184	PP	16.89888	1.00000	0.001285		MP-ET
6.940		-	-	-		SBB

Percent Total Impurities

Spl1

Cliccando sull'icona in basso a sinistra si aprirà il file originale dei dati grezzi



LabWare ELN

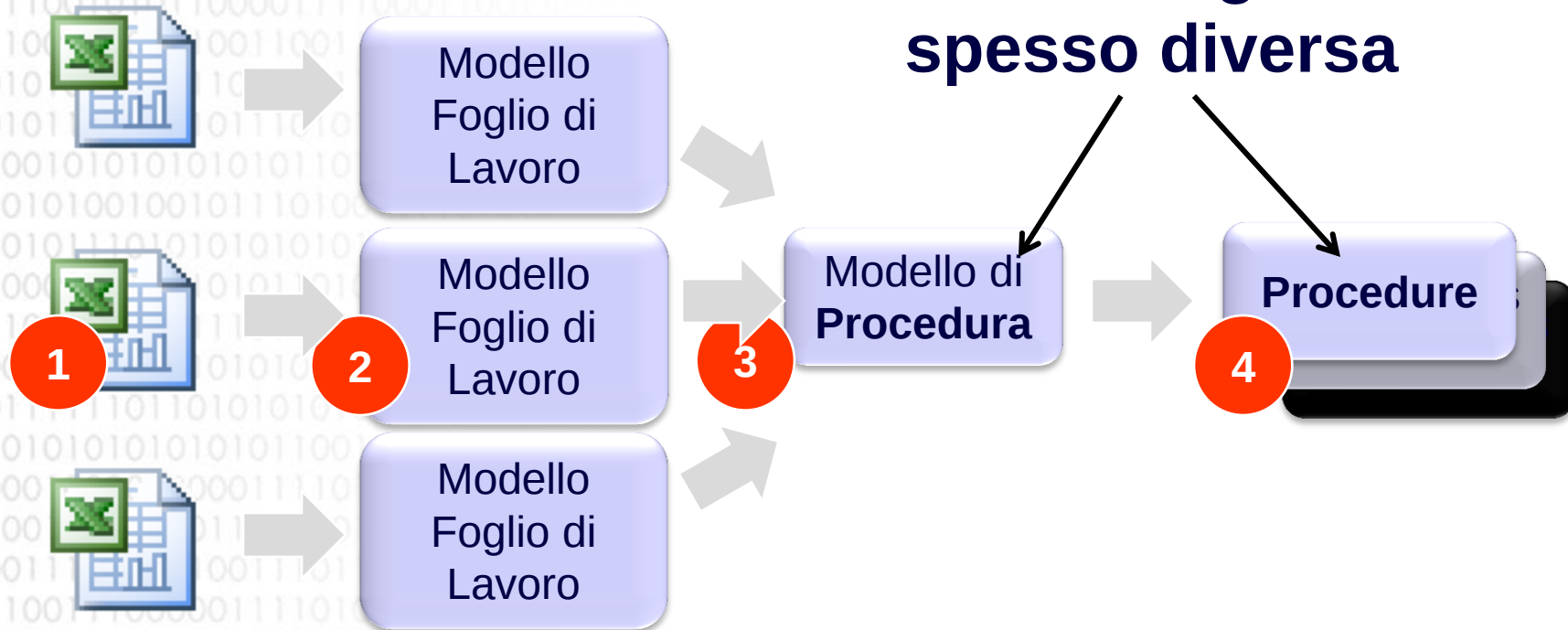
Controllo Qualità (QA/QC)

Enterprise Laboratory Platform



Concetti di base per il QA/QC

In QA / QC la
terminologia è
spesso diversa



QA/QC modalità “Method Execution” (LES)

The screenshot displays the LabWare LES software interface for a procedure document titled "GENERIC: EXP-GENERIC-2011-0010 - [NICKT] Nick Townsend". The interface includes a menu bar (Recent, File, Edit, Run, Data, Samples, SOP, Audit, Design, Table, Empower) and a toolbar. The main content area shows a procedure document with the following sections:

- 4. PROCEDURE**
- 4.1 Select Equipment**
- Select a free, calibrated and serviced UV Spectrophotometer model B1000. If required clean the instrument using SOP 56456.
- Select a convenient, calibrated, calibrated and serviced Balance suitable for weighing 1-100g quantities of material.
- Select a calibrated, 10ml Bulb Pipettes (Grade A)

Below the procedure text, there is a data entry field showing the formula $=RSQ(B9:B13,A9:A13)$. To the right of this field, a status indicator shows "Switch On" and "Instrument ready" with a value of 690.

A table of data is displayed:

Concentration mg/ml	Absorbance
10	0.8
25	0.99
50	1.09
75	1.16
100	1.29

Below the table, regression statistics are shown:

- Regression coef $R^2 = 0.93821$
- Correlation coef $R = 0.96861$
- m (slope) = 0.00489
- $1/m = 0.81$

A scatter plot with a linear regression line is also shown, with the equation $y = 0.0049x + 0.9115$.

Annotations highlight key features:

- Visualizzazione passo/passo della Procedura Operativa**: Points to the procedure text.
- Le sezioni del foglio di lavoro vengono abilitate passo/passo (ad esempio per la taratura delle apparecchiature e reagenti, etc)**: Points to the data entry field and the regression statistics.
- Comodo utilizzo di grafici e formule in stile Excel**: Points to the scatter plot and the regression statistics.

QA/QC modalità “Method Execution” (LES)

GENERIC: EXP-GENERIC-2011-0010 - [NICKT] Nick Townsend

Recent File Edit Run Data Samples SOP Audit Design Table Empower

Summary Generic Procedure Example Samples Compliance

4. PROCEDURE

4.1 Select Equipment

Select a free, calibrated and serviced UV Spectrophotometer model B1000. If required, use the instrument using SOP 56456.

Select a convenient, calibrated, calibrated and serviced Balance suitable for weighing small quantities of material.

Select a calibrated, 10ml Bulb Pipettes (Grade A)

B14 =RSQ(B9:B13,A9:A13)

Switch on UV Switch On Instrument ready

Wavelength nm 690

UV Warm up

000 : 00 : 23

Std. Concentration mg/ml	Absorbance
10	0.8
25	0.99
50	1.09
75	1.16
100	1.29

Regression coef R² = 0.93821

Correlation coef R = 0.96861

m (slope) = 0.00489

1/m = 0.81

OD

Concentration

Equipment Reagents Calibrate

Possibilità di utilizzare i timer per controllare l'esecuzione del metodo

Riepilogo visivo sulla conformità

GENERIC: EXP-GENERIC-2012-0001 - [NICKT] Nick Townsend

Recent File Edit Run Data Samples SOP Audit Design Table Empower

Summary Generic Procedure Example Samples Compliance

	Data Review Status	In Specification	In Control	In Calibration	In Compliance	Modified Data
Generic Procedure Example						
Equipment	?					
Reagents	?					
Calibrate	?					
Measurements						

L'uso dei colori per indicare condizioni non conformi alle attese

Un piattaforma comune per LIMS & ELN

LABWARE
Enterprise Laboratory Platform



Sample ID	Batch / Lot #	Sample ID	Safety Hazard	Customer	Weight Before Drying	Weight After Drying	Spread Sheet Calc. LOD (%)	LIMS Calc. LOD (%)
MOI CHOC POWDER	9123	0006	CHOC-ETV	CUSTOMER_A	94.00	93.50	0.53	0.53
MOI CHOC POWDER	9123	0007	CHOC-ETV	CUSTOMER_A	94.00	93.50	0.53	0.53
MOI CHOC POWDER	9123	0008	CHOC-ETV	CUSTOMER_A	94.00	93.50	0.53	0.53
MOI CHOC POWDER	9123	0009	CHOC-ETV	CUSTOMER_A	94.00	93.50	0.53	0.53
MOI CHOC POWDER	9123	0010	CHOC-ETV	CUSTOMER_A	94.00	93.50	0.53	0.53

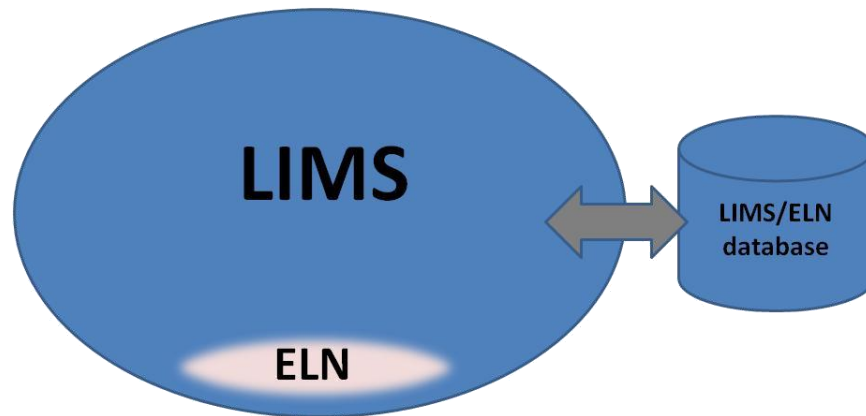
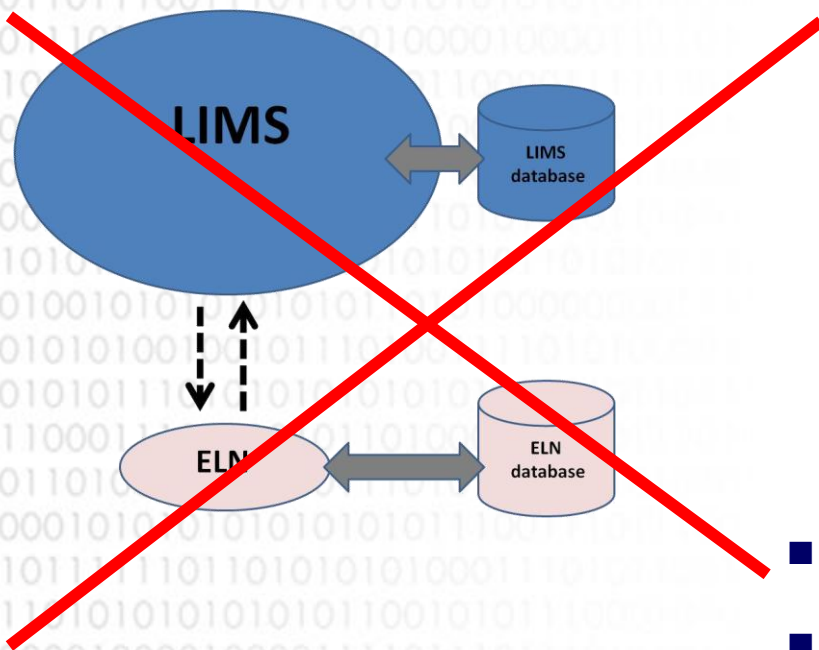
Grandi risparmi sui costi!



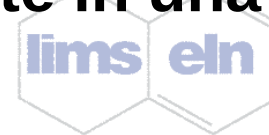
LIMS + ELN Relational Database



Un solo database per LIMS & ELN

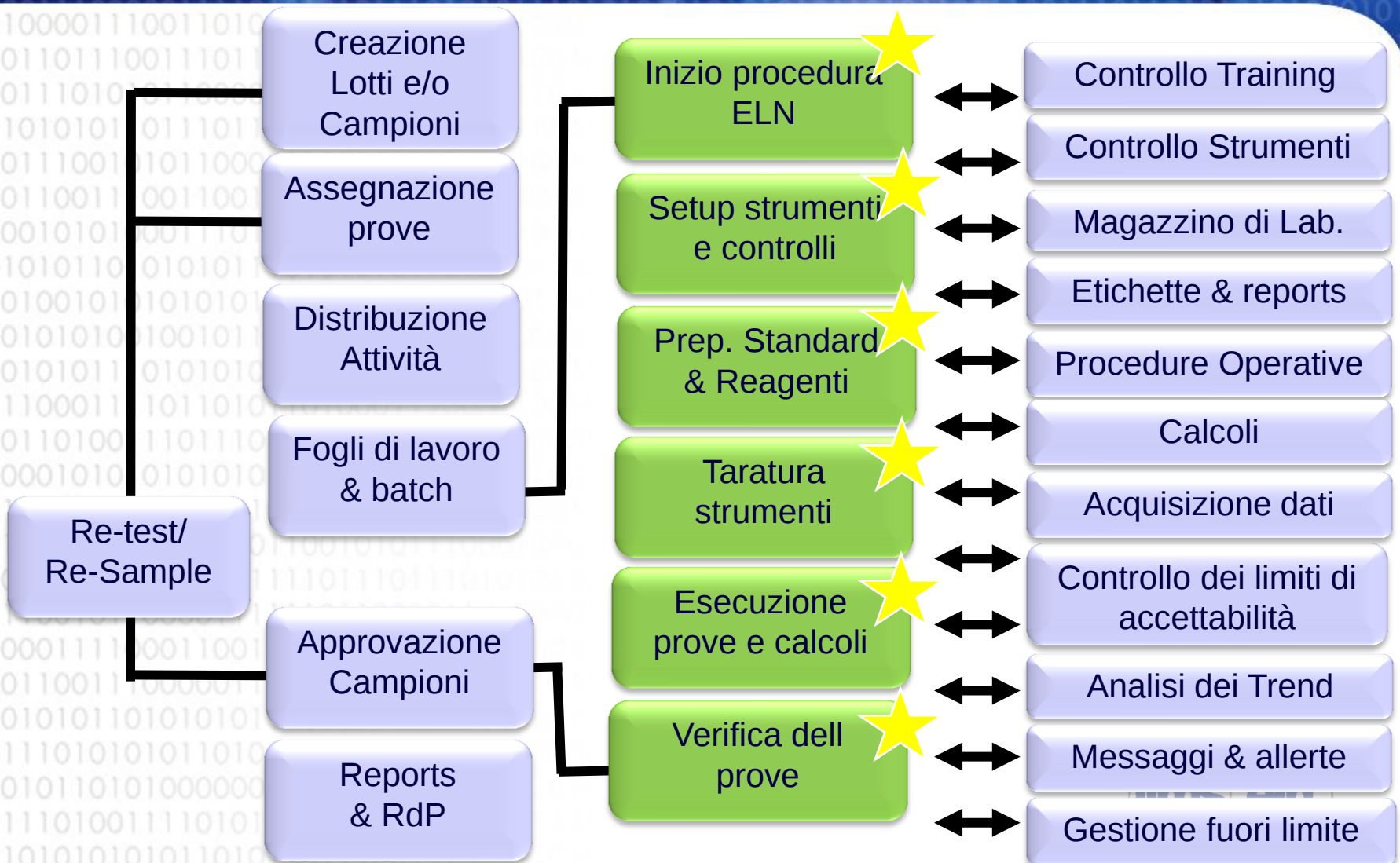


- Completamente integrato
- Nessuna duplicazione
- L'esecuzione delle prove e la loro approvazione sono totalmente integrate in una sola soluzione



Flusso di lavoro

★ Punti di integrazione





LabWare ELN v2 nuove funzionalità

Enterprise Laboratory Platform



LabWare ELN v2.0 – Nuove funzionalità

Caratteristiche principali e alcune nuove funzioni

■ **Miglioramento delle prestazioni**

- Apertura di Esperimenti che hanno da 1000 a 100 000 formule
- Applicazioni ELN che contengono un gran numero di mappature dati (ad esempio inserire in un colpo solo ~ 2.000 risultati da sistemi HPLC)

■ **Possibilità di modificare / rivedere / cancellare gli allegati agli esperimenti con cronologia delle revisioni**

■ **Tecnologia LabWare Active Sync™**

■ **Ulteriori funzionalità per la gestione della sicurezza degli esperimenti in ELN**

- Possibilità di bloccare la modifica di esperimenti usati da altri utenti (sola lettura come per esempio in Excel)
- Ulteriori privilegi funzionali specifici per ELN da assegnare agli utenti



LabWare ELN v2.0 – Nuove funzionalità

Caratteristiche principali e parziale lista funzioni

- **Ulteriori ELN supporto alle mappature dati**
 - Mappature delle prove. Gestione facilitata delle rianalisi
 - Drag n' Drop delle prove all'ELN
- **Nuovi tipi di note (ad es. “Post-it”)**
- **Possibilità di ricerche di dati ELN con Data Explorer**
- **Stampa / Archivia l'esperimento come Adobe PDF**



LabWare ELN v2.0 – Nuove Funzionalità

Ricerche con Data Explorer

Data Explorer

Recent File Query Results

Table: Experiments
Field: Experiment Number
Sort:
Show:
Criteria:
Or:

Experiments	Experiments	Test	Result	Result
Experiment Number	Name	Analysis	Name	Numeric Entry
☒	☒	☒	☒	☒
			Acetyl Salicylic Acid	> 9.9

Experiment Number	Name	Analysis	Name	Numeric Entry
1324	EMPOWER_ASSAY-2011-018	EMP_ASSAY_ASPRN	Acetyl Salicylic Acid	9.97
1324	EMPOWER_ASSAY-2011-018	EMP_ASSAY_ASPRN	Acetyl Salicylic Acid	10.03
1324	EMPOWER_ASSAY-2011-018	EMP_ASSAY_ASPRN	Acetyl Salicylic Acid	10.02
1324	EMPOWER_ASSAY-2011-018	EMP_ASSAY_ASPRN	Acetyl Salicylic Acid	10.0

Data Explorer

Recent File Query Results

Send to Folder
Send to Object Group Manager
Send to Excel
Print

Table: Experiments
Field: Experiment Number
Sort:
Show:
Criteria:
Or:

Experiments	Experiments	Test	Result	Result
Experiment Number	Name	Analysis	Name	Numeric Entry
☒	☒	☒	☒	☒
			Acetyl Salicylic Acid	> 9.9

Experiment Number	Name	Analysis	Name	Numeric Entry
1324	EMPOWER_ASSAY-2011-018	EMP_ASSAY_ASPRN	Acetyl Salicylic Acid	9.97
1324	EMPOWER_ASSAY-2011-018	EMP_ASSAY_ASPRN	Acetyl Salicylic Acid	10.03
1324	EMPOWER_ASSAY-2011-018	EMP_ASSAY_ASPRN	Acetyl Salicylic Acid	10.02
1324	EMPOWER_ASSAY-2011-018	EMP_ASSAY_ASPRN	Acetyl Salicylic Acid	10.0

LabWare ELN v2.0 – Nuove Funzionalità

Gruppi di Esperimenti ELN con possibilità di Drill Down

The screenshot displays the LabWare ELN v2.0 Object Group Manager interface. The left pane shows a hierarchical tree of experiments under the template 'ABSORB-280 (20)'. The right pane shows a detailed view of the selected experiment, 'EXP-ABSORB-280-2011-0016', including its description, assigned user, and a table of results with a status grid.

Object Group Manager: ELN_EXPERIMENTS-4

File Edit Refresh Approval Test Context

ELN_EXPERIMENTS-4

Template: ABSORB-280 (20)

- Experiments EXP-ABSORB-280-2010-0099
- Experiments EXP-ABSORB-280-2010-0102
- Experiments EXP-ABSORB-280-2010-0103
- Experiments EXP-ABSORB-280-2010-0113
- Experiments EXP-ABSORB-280-2010-0117
- Experiments EXP-ABSORB-280-2010-0122
- Experiments EXP-ABSORB-280-2010-0124
- Experiments EXP-ABSORB-280-2010-0125
- Experiments EXP-ABSORB-280-2010-0132
- Experiments EXP-ABSORB-280-2010-0145
- Experiments EXP-ABSORB-280-2010-0164
- Experiments EXP-ABSORB-280-2010-0171
- Experiments EXP-ABSORB-280-2010-0175
- Experiments EXP-ABSORB-280-2010-0180
- Experiments EXP-ABSORB-280-2010-0181
- Experiments EXP-ABSORB-280-2011-0002
- Experiments EXP-ABSORB-280-2011-0007
- Experiments EXP-ABSORB-280-2011-0014
- Experiments EXP-ABSORB-2011-0016**
- 11764 LW-02/21/2011-11764
 - PROTEIN_CONCENTRATION / 1
 - PH / 1
 - Instruments UV_SPECT_1
 - Instruments PH_1
 - Instruments HAMLTN_500
 - Standard Reagent PBS_BUFFER_0001_2010
 - Standard Reagent BSA_0002_2010
 - Experiments EXP-ABSORB-280-2011-0021

Template: JDK (2)

Preview

1 / 1 84%

BusinessObjects

Laboratory Experiment Report

Experiment Name	Description	Assigned To	Created On	Completed On	Closed	pH	Protein in Assay
EXP-ABSORB-280	Protein Concentration of Vaccine ACY103B	WIPPRECHT	3/12/2011	9:29:33 AM	F		

False= True=

Sheet Reviewed
Witnessed
In Control
In Specification
In Calibration
Modified Data
In Compliance
Data Review Status

LabWare ELN v2.0 – Nuove Funzionalità

Documenti ELN – Editor integrato

Experiment Number : 344-23123-348234293

Experiment Title : New Drug Development ASP-4433

Laboratory Technician : [Guido von Dahlen]

Date : 10.04.2012

Time : 10:22

Description of the Experiment :

The crossing of the vortex results in a flow velocity drop near the aperture. The phase difference between velocity path integrals taken along Path 1 and Path 2 differ by one unit of circulation $\frac{h}{m\lambda}$. (only a single vortex is inside the loop formed by the two paths). If points A and B are taken to be in the regions where the velocity does not change significantly during the phase slip, the velocity path integral $\int_A^B \mathbf{v} \cdot d\mathbf{l}$ before and after the slip occurred differ by one unit of circulation, or $\frac{h}{m\lambda}$. Assuming that velocities along any given path scale with the velocity v_0 at

Used Ingredients :

Compound :	Amount (%)	Comments :
Water	87,9	Tubwater
Sugar	2,3	white sugar
Antioxidant X	0,3	to keep it stable

- Editor di documenti: un componente Microsoft .Net nuovo installato in ambiente ELN
- Basato su modelli Word
- È possibile combinare il documento con fogli di calcolo basati su Cartelle di lavoro nello stesso esperimento
- Può essere predefinito nel modello
- Oppure i ricercatori possono aggiungere documenti «al volo»



Editor di documenti

LOD: EXP-LOD-2012-0006 - [NICKT] Nick Townsend

Recent File Edit Run Data Samples SOP Audit Design Table Empower

Summary Loss on Drying Samples Problem report Compliance

Normal Calibri 11 B I U 100%

PROBLEM REPORT

Nature of the problem	Instrument maintenance issue
Detail	While conducting the experiment I noticed a problem with the balance button. I think it may be introducing data errors. The errors seem intermittent.
Suggestions	The balance should be returned to the manufacturer for maintenance work.

Cliccando su "Aggiungi documento" si possono avere documenti in stile Word all'interno degli esperimenti



Conclusioni

Enterprise Laboratory Platform



I vantaggi di un'unica piattaforma software che integri LIMS ed ELN

- Una sola autenticazione al sistema con un'interfaccia senza soluzione di continuità per l'utente finale.
- Sistema di sicurezza comune (es. 21 CFR Part 11)
- Riutilizzo di molte funzioni LIMS all'interno di ELN
- Sistema integrato per l'acquisizione dei dati
- Singolo database per l'esecuzione di query e reporting
- Nessuna problema di sincronizzazione tra due sistemi diversi e nessuna duplicazione dei dati.
- Strumenti comuni per la configurazione e gestione del sistema
- Infrastrutture hardware condivise
- Supporto e processi di aggiornamento semplificati
- Semplificazione dei rapporti con un unico fornitore
- Nessun problema di compatibilità future
- ... e molto altro ancora



Riassunto

- **Dal 2009 abbiamo proposto grandi novità e funzionalità...**
- **LabWare ELN consente di realizzare molto rapidamente**
 - calcoli complessi
 - interazione bi-direzionale con LIMS
 - connessioni con gli strumenti
 - acquisizione di "dati non strutturati"
- **L'interfaccia in stile foglio di calcolo è molto intuitiva per gli utenti finali**
- **La nuova modalità basata su documenti offre possibilità molto interessanti**





LabWare Italia
Via Monte Baldo 6
37062 Villafranca di Verona (VR)
Tel. +39 045 4858886
Fax +39 045 5112074
Email infoIT@LabWare.com

Enterprise Laboratory Platform

