

Validierungsdokumentation
Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)

HiperScan GmbH

13. Juli 2015

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	7
Kontext dieses Dokuments	7
Gültigkeitsbereich dieses Dokuments	8
Validierungskonzept	8
Ablauf von Modellerstellung und Validierungsläufen	9
Besonderheiten einzelner Substanzklassen	11
Aussagekraft der Prüfung mit <i>Apo-Ident</i>	12
Fazit	12
Begriffserklärung	13
Zusammenfassung	17
Validierproben	17
Ergebnis der Validierung	17
Validierungsberichte	19
Alfason Basis Cresa®	19
Alfason® Repair	23
Angelikawurzelöl	27
Anisöl Bio	31
Basilikumöl	35
Beifußöl	39
Benzoe Siamöl 20%	43
Bepanthen® Lösung	47
Bepanthen® Wund- und Heilsalbe	51
Bergamottöl	55
Cajeput / Niaouliöl	59
Citronellöl	63
Citronenöl	67
Dermatop® Basissalbe	71
Dermifant® Kindercreme	75
Dexeryl®	79
Dimeticoni-Salbe 10% SR	83
Eucalyptusöl	87
Excipial® Mandelölsalbe	91
Fenchelöl	95
Fenistil® Gel	99
Fettsalben Asche Basis /Neribas	103
Fichtennadelöl	107
Fitalite™	111
Grapefruitöl Bio	115
Hydrophile Salben	119
Immortelleöl	125
Ingweröl	129
Kamillenöl, marokkanisch	133
Kamillenöl, röm.	137
Karottensamenöl	141
Kerasal® Basissalbe	145
Korianderöl	149
Kreuzkümmelöl	153
La Roche-Posay Cold Cream Naturel	157
La Roche-Posay Toleriane	161
Latschenkiefernöl	165
Lavendelöl	169
Lemongrasöl	173
Limettenöl	177

Liniment-Salben	181
Linola® Fett Creme / Linola® H Fett N	185
Linola® Sonnenschutz LSF 50 Lotion	189
Lipolotio urea 5% F Körperlotion	193
Lygal® Kopfsalbe N 3%	197
Lygal® Salbengrundlage	201
Majoranöl	205
Manukaöl	209
Muskatellersalbeiöl	213
Myrrhenöl	217
Nelkenöl	221
Neroliöl	225
Neuroderm® Pflege Lotio / Creme	229
Neuroderm® Pflegecreme Lipo	233
Optiderm® Lotion	237
Orangen-Aroma	241
Orangenöl	245
Ora-Sweet®	249
Palmarosaöl Bio	253
Panthenol-Salbe Lichtenstein	257
Patchouli Öl	261
Petitgrainöl	265
Pfefferminzöl	269
Ravensara	273
Rizol-Rohstoff	277
Rosen-Geranie-Öl Bio	281
Rosenholzöl	285
Rosmarinöl	289
Salbe Asche Basis / Neribas®	293
Salbeiöl	297
Salicyl-Vaselin 10%	301
Siam-Benzoe	305
Solutio Cordes / Thrombocid Gel	309
Spanischhopfenöl	313
Spearmintöl	317
Stomahésive® Adhäsivpaste	321
Teebaumöl	325
Thymianöl, rot	329
Tolu Res. 50% Öl	333
Vetiver Bourbon Öl	337
Wacholderbeeröl	341
Wachssalbe (stabilisiert)	345
Warzensalbe InfectoPharm® (NRF 11.31)	349
Wasserhaltige Salben	353
Weihrauchöl	357
Weißtannenöl	361
Wintergreenöl	365
Wofacutan Waschlotion	369
Ylang-Ylangöl	373
Ysopöl	377
Zedernöl	381
Zimtrindeöl	385
Zirbelkieferöl	389
Zypressenöl	393
Anhang	397
Zusätzliche Kalibrierproben (<i>Typ A</i>)	397

Zusätzliche Validierproben (<i>Typ B</i>)	399
Zusätzliche Validierproben (<i>Typ C</i>)	401
Anforderungen an die Validierung	403
Konformität von <i>Apo-Ident</i> mit dem <i>Europäischen Arzneibuch</i>	404
Literatur	405
Index	407

Einleitung

Der zweifelsfreie Nachweis der Identität von pharmazeutischen Ausgangsstoffen anhand einer Monographie oder herkömmlicher alternativer Methoden ist arbeitsaufwändig, zeitintensiv und ökonomisch oft nicht mehr sinnvoll. Neue Wege bietet hier die Nahinfrarotspektroskopie (NIR). Durch sie ist es möglich, relativ einfach über die Erstellung und Auswertung von Spektren eine schnelle und trotzdem sichere Identitätsprüfung vorzunehmen.

Das Analysesystem *Apo-Ident* wurde speziell für den Einsatz in der Apotheke entwickelt. Der Apotheker ist verpflichtet alle Ausgangsstoffe für Rezepturen in seiner Apotheke auf Identität zu prüfen. Dies geschieht in der Regel anhand der im europäischen Arzneibuch enthaltenen Monographien zu den jeweiligen Substanzen. Aber auch die NIR-Spektroskopie ist im europäischen Arzneibuch als Methode zur Identifikation beschrieben, die, abweichend zu den in den jeweiligen Monographien enthaltenen Methoden, zur Prüfung zugelassen ist, [1]

unter der Voraussetzung, dass die gleichen Ergebnisse („nämlich die Feststellung der Identität“ [2]) wie mit den beschriebenen Methoden und Geräten erzielt werden.

Das Analysesystem *Apo-Ident* dient der Identifikation von Ausgangsstoffen für die Rezeptur, wie sie nach *ApBetrO* §§ 6, 11 in der Apotheke durchgeführt werden muss (NIR-Spektroskopie als alternative Prüfmethode). *Apo-Ident* besteht aus drei Komponenten:

- Ein *NIR-Spektrometer*, welches die Spektren nicht vorverarbeiteter Ausgangsstoffe in einem Messgläschen in diffuser Reflexion bzw. Transflexion aufnimmt.
- Die Spektroskopiesoftware *QuickStep* steuert das Gerät und erfasst die Spektren und die Benutzer-Eingaben mittels eines apotheken-spezifischen Software-Plugins. Es generiert auch das Prüfprotokoll für die Dokumentation der Prüfung und zur Ablage des zu unterschreibenden Ausdrucks in der Apotheke.
- *Referenzdatenbanken* sind im Softwaremodul *IdentModul* enthalten. Diesem werden die Spektren von der *QuickStep*-Software zur Bewertung vorgelegt.

Die NIR-Spektroskopie ist eine sehr mächtige analytische Methode. Sie ist unter anderem in der Lage die Identität vieler chemischer Verbindungen und Gemische festzustellen, sofern eine geeignete Datenbank (fachlich korrekt: ein [chemometrisches Modell](#)) erstellt wurde. Die Identitätsprüfung mit *Apo-Ident* ist eine sehr sichere, sehr schnelle und leicht zu bedienende analytische Methode zur Prüfung einer großen Anzahl von Rezepturausgangsstoffen.

Kontext dieses Dokuments

Die Eignung von Gerät, Methode und Datenbank wird folgendermaßen belegt:

- *NIR-Spektroskopie als Methode zur Prüfung auf Identität*: Das *Ph. Eur.* [3] beschreibt in *Abschnitt 2.2.40* die NIR-Spektroskopie als analytische Methode, die unter anderem zur Identifikation von Ausgangsstoffen geeignet ist. Eine Validierung der Methode selbst ist folglich nicht erforderlich.
- *Funktionsfähigkeit des Geräts*: Das *Ph. Eur.* [3] beschreibt in *Abschnitt 2.2.40* ferner die Apparatur und die *Überprüfung der Funktionsfähigkeit*. Das Dokument *Erfüllung von 2.2.40 Ph. Eur. durch Apo-Ident* [4] stellt dieser Monographie die Umsetzung durch *Apo-Ident* gegenüber, um zu belegen, dass *Apo-Ident* den Vorgaben des Arzneibuches entspricht. Jedes einzelne Gerät, welches an eine Apotheke ausgeliefert wird, wird durch die dort beschriebene *Überprüfung der Funktionsfähigkeit* validiert. Dabei wird die Einheit aus Analysegeräte-Hardware und der Spektroskopiesoftware *QuickStep* beurteilt. Das Ergebnis wird in einem Prüfprotokoll dokumentiert, welches in der Apotheke verbleibt.
- *Die Validierung der Datenbank* wird für jede Substanzklasse separat dokumentiert. Der vorliegende Bericht dokumentiert die Validierung der Substanzklasse *Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)*.

Die *Arbeitsgemeinschaft der Pharmazierate Deutschlands (APD)* hat in ihrer Resolution vom 16. Oktober 2013 [5] klargestellt:

Bei NIR handelt es sich um eine Prüfmethode des Arzneibuches. Die Qualität der Prüfung ist von der hinterlegten Datenbank abhängig. Die APD sieht die Verwendung von NIR-Geräten bei gesicherter Validierung der dazu verwendeten Datenbanken als eine von mehreren möglichen Methoden zur Identitätsprüfung an.

Am 1. Oktober 2014 konkretisierte die APD weiter [6]:

Die Verwendung von Nahinfrarot ist eine anerkannte Prüfmethode nach Ph. Eur. 8. Für die Verwendung von NIR-Geräten in der Apotheke zur Prüfung der Identität von Ausgangsstoffen ist eine ausreichende und nachweisbare Validierung des verwendeten Gerätes erforderlich. Entscheidend ist die Qualität der vom Hersteller des Gerätes hinterlegten Datenbank. Chargenspezifische Unterschiede bei gleichen Ausgangssubstanzen müssen, wenn vorhanden, dabei berücksichtigt werden.

NIR ist also grundsätzlich geeignet. Die Validität der Referenzdatenbank wird mit der vorliegenden Validierungsdokumentation belegt.

Gültigkeitsbereich dieses Dokuments

Diese Validierungsdokumentation beschreibt die Ergebnisse der Validierung der Referenzdatenbank für die Substanzklasse *Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)*. Zu jeder veröffentlichten Version der Referenzdatenbank wird für alle enthaltenen Substanzklassen eine Validierungsdokumentation erstellt.

Die Referenzdatenbank ist in dem Softwaremodul *IdentModul* enthalten. Diesem werden während der Identprüfung mit *Apo-Ident* die Spektren von der dabei zum Einsatz kommenden *QuickStep*-Software zur Bewertung vorgelegt. In gleicher Weise werden bei den Validierungsläufen dem *IdentModul* alle Validierspektren nacheinander zur Bewertung vorgelegt. Das *IdentModul* antwortet jeweils (ohne Berücksichtigung der Eingangsvermutung) mit der identifizierten Substanz bzw. weist es als unbekannt ab. Diese Antwort wird für jede mögliche Eingangsvermutung auf Richtigkeit geprüft und gezählt.

Die Ergebnisse werden für jede Substanz zusammengefasst und in diesem Dokument wiedergegeben.

Die Kernaussagen dieses Validierungsberichts sind:

- Die Datenbank wird ausschließlich aus Spektren aufgebaut, welche durch die *HiperScan GmbH* an rückverfolgbaren Proben in pharmazeutischer Qualität aufgenommen wurden.
 - Die Proben werden über die apotheken-üblichen Quellen beschafft (*DAC III.2.: Bezugquellennachweis für Rezepturbestandteile* [7]).
 - Ein valides Herstellerzertifikat liegt vor (Gehalt, Reinheit und Identität der Charge).
 - Die Identität wurde von einem zertifizierten Prüflabor oder der *HiperScan GmbH* bestätigt.
- Jede Version der Referenzdatenbank (jedes Update) wird komplett validiert.
 - In drei separat ausgewerteten Validierungsläufen werden Kalibrierspektren, Spektren von unabhängigen Proben und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (weiter unten als *Typ A*, *B* bzw. *C* bezeichnet) dem *IdentModul* zur Bewertung vorgelegt.
 - Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.
 - Dabei werden auch die verschiedenen Substanzklassen auf gegenseitige Ablehnung geprüft, wo dies sachlich gerechtfertigt ist (siehe Abschnitt *Zusammenfassung*).
- Für jede einzelne Substanz ist die eindeutige Identifizierbarkeit durch *Apo-Ident* und die Abgrenzung gegen alle anderen Substanzen der Datenbank belegt.

Validierungskonzept

Die *Chemometrie* ist ein statistisches Verfahren, um aus Spektren die relevante chemische Information zu extrahieren. Die Mathematik bezeichnet dieses Verfahren als *Multivariate Datenanalyse*. Die Chemometrie geht dabei folgendermaßen vor:

1. Sammlung von Spektren für die *Kalibrierprobe*. Die Ergebnisse (Identitäten) der Kalibrierprobe müssen bekannt sein. Die Kalibrierproben müssen für jene Proben repräsentativ sein, die später bewertet werden sollen. Sie müssen also die verschiedenen möglichen (physikalischen) Ausprägungen berücksichtigen. (Aus diesem Grund ist der Bezug der Kalibrierproben für NIR aus dem Fachhandel der Verwendung von CRS-Referenzsubstanzen überlegen.)
2. Der erste mathematische Schritt heißt *Kalibrierung*. Dabei wird das [chemometrische Modell](#) aus den Spektren der *Kalibrierprobe* ([Referenzspektren](#)) berechnet und Grenzen sowie einige Parameter werden festgelegt. Mit dem *chemometrischen Modell* wird später aus dem Proben-spektrum das Analyseergebnis berechnet (*Prediction*).
3. Sammlung von weiteren Spektren für die *Validierprobe*, die von der *Kalibrierprobe* unabhängig sein soll. Auch die Ergebnisse (Identitäten) der *Validierprobe* müssen bekannt sein. Das Lehrbuch sieht eine Stichprobe vor, deren Umfang meist mit 25 % bis 50 % der *Kalibrierprobe* vorgeschlagen wird [8].
4. Der zweite datentechnische Schritt heißt *Validierung*. Dabei wird das erstellte [chemometrische Modell](#) anhand der Spektren der *Validierproben* evaluiert. Als Validierungsparameter für die Identifikation gibt das *Ph. Eur. Abschnitt 2.2.40* [3] die [Spezifität](#) und [Robustheit](#) vor.

Der Validierungsschritt nach Lehrbuch hat das Ziel, die Leistungsfähigkeit des erstellten Modells anhand einer Stichprobe abzuschätzen. Um die größtmögliche Genauigkeit zu erreichen, liegt das Augenmerk auf der Kalibrierprobe. In der Pharmazie steht die Sicherheit der Methode im Vordergrund. Um das Modell im regulatorischen Sinne [validieren](#) zu können, muss der Validierungsschritt Beweiskraft erhalten. Dafür muss die Validierprobe *repräsentativ und vollständig* sein, um alle Fälle abzuprüfen.

Die *ausreichende Anzahl an Chargen* muss in der Validierung sichergestellt werden, weil die Validierung letztlich belegt, ob die Anzahl an Chargen in der Kalibrierung ausgereicht hat.

Jede Substanz wird einzeln validiert. Die Validierungsergebnisse sind in diesem Report je Substanz dokumentiert. Außerdem geht aus den Unterlagen hervor, wie viele und welche Chargen zur Modellerstellung bzw. zur Modellvalidierung genutzt wurden.

Für jede Substanz wird mindestens ein Zertifikat von einem akkreditierten Prüflabor über die unabhängige Prüfung auf Identität der Probe eingeholt. Die Kennnummer des entsprechenden Prüfzertifikats wird im Report aufgeführt, sodass eine Rückverfolgbarkeit auf eine nach den Monographien des Arzneibuches geprüfte Substanz gegeben ist.

Ablauf von Modellerstellung und Validierungsläufen

Die Sicherheit der [chemometrischen Modelle](#) wird durch mehrere Maßnahmen bei der Modellerstellung gewährleistet, von denen der Validierungsschritt nur der letzte ist. Der Ablauf ist standardmäßig wie folgt. Er gilt insbesondere für die Arzneibuch-Substanzen *Arzneistoffe Fest*, *Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (mit Prüfzert.)*, *BtM-Arzneistoffe Fest* und *Drogen*. Sind bei einzelnen Substanzklassen Abweichungen erforderlich, so werden diese im Abschnitt [Besonderheiten einzelner Substanzklassen](#) dargelegt.

1. Sammeln der Referenzspektren (Kalibrierprobe)

- a) Beschaffung der Proben aus den gleichen Quellen, aus denen Apotheken ihre Rezeptursubstanzen beziehen (Caelo, Fagron, OTC, ..., siehe auch *DAC III.2. Bezugsquellennachweis für Rezepturbestandteile* [7]).
- b) Überprüfung der Eignung nach *ApBetrO* §§ 6, 11, also Verfügbarkeit eines validen Hersteller-Zertifikates über Identität, Reinheit und Gehalt der Charge.
- c) Erfassen von standardmäßig 40 Spektren der Probe in unterschiedlichen Lagen, an standardmäßig vier Geräten. Dabei erfolgt die Handhabung und Präsentation der Proben so wie später in der Apotheke.
- d) Sichtkontrolle auf Auffälligkeiten in den Spektren. Bei Hinweisen auf Messfehler ist die Messung zu wiederholen. Fehlt eine Signatur im Spektrum, wird die Substanz ggf. als wenig aussichtsreich

von vornherein ausgeschlossen (Die Spektren gehen trotzdem als unabhängige Spektren vom *Typ B* in die Validierung der Datenbank ein.)

- e) Prüfung auf Identität. Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist auf der jeweiligen Substanzseite dieser Validierungsdokumentation der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz. Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.
- f) Ist die Identität der neuen Probe nachgewiesen, wird sie als Referenzprobe deklariert und die Spektren werden für den Aufbau der Datenbank freigegeben.

2. Generieren der chemometrischen Modelle (Kalibrierung)

- a) Bestimmung der Transformationsmatrix aus den Referenzspektren mittels Varianzmaximierung [9, 8]. (Es gehen immer *alle* Referenzspektren ein, auch wenn bei einem Update nur wenige Spektren dazugekommen sind.) Alle Referenzspektren erhalten die gleiche Datenvorbehandlung, die auch später im Feld (in den Apotheken) auf jedes Messspektrum angewendet wird.
- b) Überprüfung, dass die Anzahl der verwendeten Hauptkomponenten weiterhin adäquat ist.
- c) Berechnen der Grenzen für jede Substanz aus den Streuungen der Referenzspektren. Die Rechenvorschrift ist für jede Substanz einer Substanzklasse einheitlich.
- d) Überprüfen der Abstände zwischen den Grenzen der trennbaren Substanzen: Die Distanzmatrix enthält die *Mahalanobis-Abstände* von jeder Substanz zu jeder anderen. Die Werte hin und zurück unterscheiden sich. Ist eine Distanz kleiner als 10, so müssen die Substanzen als nicht trennbar deklariert werden oder *beide* aus der Datenbank herausgenommen werden. (Die Spektren von herausgenommenen Substanzen verbleiben als unabhängige Spektren vom *Typ B* in der Validierung.)
- e) Überprüfung des Modells anhand der Referenzspektren. Kommt es zu *Falsch-Positiven* Ergebnissen, ist genauso zu verfahren wie im Falle zu geringer *Mahalanobis-Abstände*.
- f) Liegen für alle Substanzklassen chemometrische Modelle vor, die beide Kriterien erfüllen (Abstandsmatrix und keine *Falsch-Positiven*), so werden sie zusammen mit den Bewertungsalgorithmen zu einem *IdentModul* verbunden und verschlüsselt. Diese Einheit kann nicht mehr verändert werden. Sie wird durch die Validierung in ihrer Gesamtfunktion überprüft.

3. Zusammenstellen der Validierspektren (Validierproben)

Für die Validierung werden bereitgestellt:

- a) *Typ A*: Die Referenzspektren = Kalibrierspektren, aus denen die Datenbank aufgebaut wurde. Hierzu gehören auch Spektren von Substanzen, die mit dem *chemometrischen Modell* nicht identifiziert werden sollen, sie wurden aber in die Generierung mit aufgenommen, um die Selektivität zu erhöhen. (Das Modell „lernt“ dadurch, sich von anderen Substanzen abzugrenzen, die ihm eigentlich unbekannt sind.)
- b) *Typ B*: Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in die Generierung des jeweiligen Modells eingegangen sind, die aber durch die *HiperScan GmbH* gemessen wurden. Hierzu gehören auch Referenzspektren von anderen Substanzklassen und Spektren, die nicht als Referenzspektren deklariert sind.
- c) *Typ C*: Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld. Diese Messungen wurden in den Apotheken durch das Apothekenpersonal unter Alltagsbedingungen aufgenommen. Die Spektren gehören sowohl zu Substanzen der zu prüfenden Substanzklasse als auch zu Substanzen aus anderen Klassen.

Alle Hersteller-Chargen, von denen Spektren in die Validierung fließen, sind in diesem Dokument nach Substanzen sortiert aufgelistet: Für Substanzen welche in der Substanzklasse *Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)* enthalten sind in den jeweiligen Validierungsberichten; ansonsten in den Anhängen *A*, *B* und *C*.

Weiterhin gilt: Validierungsspektren dürfen nur entfernt werden, wenn sich ein Fehler des Spektrums belegen lässt. Die Spektren werden dabei nicht gelöscht, sondern mit Begründung, Datum und Namenszeichen im Kommentar auf eine *Blacklist* gesetzt.

Von welchen anderen Substanzklassen *Typ-B-* und *Typ-C*-Spektren für die Validierung herangezogen werden, behandelt der Abschnitt *Besonderheiten einzelner Substanzklassen*.

4. Validierungsläufe und Freigabe

- a) Dem *IdentModul* als Ganzes werden Validierspektren in gleicher Weise zur Bewertung übergeben, wie die Spektroskopiesoftware *QuickStep* gemessene Spektren übergibt.
- b) Nach Vorlage jedes Spektrums antwortet das *IdentModul*, ob es eine Substanz erkannt hat und welche Substanz erkannt wurde.
- c) die Antwort wird für jede mögliche Eingangsvermutung (jede messbare Substanz der Substanzklasse) auf Richtigkeit geprüft und nach *Richtig-Negativ*, *Falsch-Negativ*, *Richtig-Positiv* und *Falsch-Positiv* gezählt. Diese Zahlen werden für jede Substanz und zusätzlich im Abschnitt *Zusammenfassung* nach den Typen *A*, *B* und *C* getrennt angegeben.
- d) Es ist kein einziges *Falsch-Positives* Ergebnis zugelassen.
- e) Wird auch dieses Kriterium für alle Substanzklassen erfüllt, erfolgt die Freigabe des *IdentModuls*.

Besonderheiten einzelner Substanzklassen

Grundsätzlich beschafft und prüft die *HiperScan GmbH* das Hersteller-Zertifikat zur Charge, beauftragt eine externe Prüfung auf Identität der Probe oder führt diese selbst durch und bewahrt die Zertifikate auf. Dieser Ablauf ist wie beschrieben für die Arzneibuch-Substanzen eingerichtet, also für die Substanzklassen **Arzneistoffe Fest**, **Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (mit Prüfzert.)**, **BtM-Arzneistoffe Fest** und **Drogen**. Die *HiperScan GmbH* kann also die Identität der Referenzproben belegen. Bei den herstellerspezifischen Substanzklassen und anderen werden einzelne Schritte zum Teil etwas anders organisiert:

Die Substanzklasse **Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)** (oft als *Kosmetika* bezeichnet) enthält Substanzen, für welche keine Spezifikation die Anforderungen an die pharmazeutische Qualität festlegt, weder in einer Arzneibuch-Monographie, in einer Monographie des DAC/NRF noch durch eine Herstellerspezifikation. Folglich können weder die Identität noch Gehalt unabhängig überprüft werden. Zu den Referenzproben liegen keinerlei Zertifikate vor. Es wird hier also nur die Übereinstimmung der Probe mit früheren Proben dieses Produkts festgestellt. Und es wird eine Verwechslung mit den anderen Substanzen ausgeschlossen. (Erstellt der Hersteller einer solchen Substanz eine Spezifikation, legt Prüfmethoden fest und stellt Herstellerzertifikate nach *ApBetrO* §§6,11 zur Verfügung, so kann die *HiperScan GmbH* die Substanz zukünftig in die Substanzklasse *Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (mit Prüfzert.)* neu aufnehmen.)

Die Substanzklasse **HCK** enthält die HCK-Mikronährstoffe des Schweizer Unternehmens *Hepart AG*. Die *HiperScan GmbH* erhält die Referenzproben direkt vom Hersteller. Zu jeder Referenzprobe erhält die *HiperScan GmbH* auch Herstellerzertifikate und bewahrt diese auf. Eine erneute Überprüfung der Identität der Referenzprobe führt die *HiperScan GmbH* nicht durch. Die Identität der Referenzproben wird also durch die *Hepart AG* belegt. Die Spektren aller Chargen werden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen und gehen in die Datenbank ein.

Auch die Substanzklassen mit **TCM-Granulaten** sind lieferantenspezifisch getrennt. Die Granulate der Lieferanten *HerbaSinica*, *PhytoComm* und *China-Medica* sind anhand ihrer Spektren miteinander kaum vergleichbar, denn es werden Extrakte jeweils verschiedener Drogen-Chargen mit unterschiedlichen Trägermaterialien granuliert. Die Spektren aller Chargen dieser Lieferanten werden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen und gehen in die jeweilige Datenbank ein. Die Lieferanten organisieren die Prüfungen jeweils selbst und bewahren die Prüfzertifikate auf. Eine Besonderheit bildet der implementierte Ablauf mit *HerbaSinica*: Sie senden die Referenzproben an ein Prüflabor,

welches die Identität der Probe feststellt und das Gebinde weiter an die *HiperScan GmbH* schickt, wenn das Ergebnis positiv ist.

Das positive Prüfergebnis stellt fest, dass das Probenspektrum mit einer Charge des angegebenen Granulats dieses Lieferanten übereinstimmt und dass es keine Übereinstimmung mit einem anderen Granulat dieses Lieferanten gibt. Dabei sind alle Chargen der Lieferanten bekannt.

Aussagekraft der Prüfung mit *Apo-Ident*

Das Analyse-Ergebnis wird mit ausgefeilten statistischen Methoden nach aktuellem Stand von Wissenschaft und Technik ermittelt. Chemisches und pharmazeutisches Wissen geht in die Auswahl der Proben ein, an denen die Kalibrierspektren und die Validierspektren aufgenommen werden. Es beeinflusst ansonsten nicht die weiteren Schritte der Modellerstellung.

Verbal lässt sich die Aussage des Analyseergebnisses wie folgt formulieren. Dabei bedeutet „die Spektren stimmen überein“, dass die Kriterien *Mahalanobis-Abstand*, *Ausreißeranalyse* und *Korrelation* erfüllt sind, wie dies in *Erfüllung von 2.2.40 Ph. Eur. durch Apo-Ident* [4] dargestellt ist. „Die Spektren stimmen nicht überein“ bedeutet dagegen, dass mindestens das Kriterium *Mahalanobis-Abstand* nicht erfüllt ist.

Das positive Analyseergebnis „wurde identifiziert als ...“ ist sehr aussagekräftig, weil sowohl die Menge der berücksichtigten Substanzen als auch die Anzahl der zugrundeliegenden Proben sehr umfangreich ist.

1. Das Spektrum der vermessenen Probe stimmt mit Spektren der vorgegebenen Substanz überein.
2. Das Spektrum der vermessenen Probe stimmt mit keinem Spektrum irgendeiner anderen Substanz dieser Substanzklasse überein. Alle anderen Substanzen können also klar ausgeschlossen werden.
3. Da auch die Spektren von Substanzen aus anderen Substanzklassen, zur Validierung herangezogen wurden, ist belegt, dass kein Spektrum einer dieser anderen Substanzen mit der vorgegebenen Substanz übereinstimmt. (Zur Validierung herangezogen werden alle Substanzklassen mit denen ein Spektrenvergleich möglich und sinnvoll ist. Dies ist für jede Substanzklasse im Abschnitt *Zusammenfassung* dokumentiert.)
4. Gehört die vorgegebene Substanz zu einer Gruppe von Substanzen die untereinander nicht eindeutig mit *Apo-Ident* trennbar sind (*Substanzgruppe*), so wird die Übereinstimmung mit den Spektren einer oder mehrerer Substanzen dieser Gruppe bestätigt. Um welche dieser Substanzen es sich handelt, kann nicht eindeutig gesagt werden. Alle anderen Substanzen werden analog zu 2 und 3 ausgeschlossen.

Ein negatives Analyseergebnis „wurde nicht identifiziert als ...“ bedeutet dagegen:

1. Die angegebene Substanz konnte anhand des Spektrums dieser Probe nicht erkannt werden.
2. Die Identität dieser Probe wird nicht bestätigt.
3. Die Prüfung auf Identität ist nach den Vorgaben des Arzneibuches zu wiederholen.

Fazit

Bei der NIR-Spektroskopie handelt es sich um eine Prüfmethode des Arzneibuches. Sie ist bei gesicherter Validierung der Datenbank eine mögliche Methode zur Identitätsprüfung [5]. *Apo-Ident* entspricht als Nahinfrarot-Spektrometer den Kriterien des *Europäischen Arzneibuchs* und belegt mit der vorliegenden Validierungsdokumentation die Validität der Referenzdatenbank.

Damit ist Apo-Ident als alternatives Prüfverfahren für die Identifikation von Ausgangsstoffen in der Apotheke einsetzbar.

Begriffserklärung

Der folgende Abschnitt dient der Erklärung bzw. Definition von Fachbegriffen. Diese werden für das Verständnis dieser Dokumentation benötigt. Falls notwendig, werden Definitionen für das Analysesystem *Apo-Ident* konkretisiert.

Der Begriff Datenbank wird in diesem Dokument genauso wie im *Ph. Eur. Abschnitt 2.2.40 [3]* synonym mit [chemometrisches Modell](#) verwendet. Zur Differenzierung der voneinander relativ unabhängigen Datenbanken verwendet die *HiperScan GmbH* häufig auch den Begriff der [Substanzklasse](#) (vor allem im Plural). Die zum Aufbau der Datenbank verwendeten Spektren werden dagegen als Spektrensammlung bezeichnet, nicht als Datenbank.

In Substanzklassen sind die Substanzen des *IdentModuls* organisiert. Die Substanzklassen sind voneinander unabhängige Substanz-Datenbanken, die größtenteils auch unabhängig voneinander abonniert werden können. Zum einen werden in den Substanzklassen die flüssigen und halbfesten Substanzen von den festen Pulvern getrennt, weil sie gegen unterschiedliche Referenzen gemessen werden und deshalb die Spektren nicht vergleichbar sind. Zum anderen werden z.B. die Arzneibuch-Substanzen getrennt von den hersteller-spezifischen Datenbanken für TCM-Ausgangsstoffe (traditionelle chinesische Medizin) geführt.

Die einzelnen Substanzklassen müssen nur teilweise gegeneinander abgegrenzt werden. Oft besteht kein Verwechslungsrisiko, weil sie nur aus unterschiedlichen Quellen zu beziehen sind. Andererseits handelt es sich vielfach um Substanzen, die nicht unterschieden werden müssen. Beispielsweise muss *Huang Qi*-Granulat der Firma *HerbaSinica* weder von *Huang Qi*-Granulat der Firma *PhytoComm* abgegrenzt werden, noch ist eine Übereinstimmung zwingend. Hinter einer Substanzklasse steht jeweils ein einziges [chemometrisches Modell](#). (Wenngleich mehrere gegeneinander abgesicherte chemometrische Modelle zulässig wären.) Die Begriffe *Substanzklasse*, *chemometrisches Modell* und [Datenbanken](#) werden hier meist synonym gebraucht.

Eine Substanzgruppe fasst jeweils alle Substanzen innerhalb einer [Substanzklasse](#) zusammen, die anhand Ihrer NIR-Spektren nicht sicher voneinander unterschieden werden können. Alle anderen Substanzen der Datenbank können aber ausgeschlossen werden.

Die Bildung von Untergruppen wird im *Ph. Eur. Abschnitt 2.2.40 [3]* angesprochen. Auf diese Weise können EDV-technische Beschränkungen bei umfangreichen Datenbanken umgangen werden, und es ist möglich, einzelne Untergruppen mit verschiedenen Spektrenvorbehandlungen aufzubereiten. Die Validierung der Untergruppen gegeneinander ist erforderlich. Die *HiperScan GmbH* hat diese technischen Beschränkungen gelöst und verwendet innerhalb einer Substanzklasse keine Untergruppen mehr.

Die Hauptkomponentenanalyse [9, 8], auch *Principal Component Analysis* (PCA), ist ein Verfahren der multivariaten Statistik bzw. multivariaten Datenanalyse. Sie dient dazu, umfangreiche Datensätze zu strukturieren, zu vereinfachen und zu veranschaulichen, indem eine Vielzahl statistischer Variablen durch eine geringere Zahl möglichst aussagekräftiger Linearkombinationen (die *Hauptkomponenten*) beschrieben werden. Im *Apo-Ident Identmodul* wird die PCA zur Bewertung der aufgenommenen Spektrendaten (entspr. *Ph. Eur. 2.2.40 [3]*) genutzt.

Der Begriff Validierung ist in den beiden hier relevanten Zusammenhängen mit unterschiedlichen (wenn auch verwandten) Bedeutungen festgelegt.

Im Sinne der Fachdisziplin *Chemometrie* ist die Validierung ein Verfahrensschritt bei der Erstellung eines [chemometrischen Modells](#): Nachdem im Schritt der Kalibrierung aus einem Satz Referenzspektren eine Transformationsmatrix, Grenzen und verschiedene Parameter berechnet bzw. festgelegt worden sind [9, 8], bestimmt der Schritt der Validierung anhand der Validierspektren die Leistungsfähigkeit des Modells (Trennschärfe, Genauigkeit, ...). Standardmäßig ist hier eine Stichprobe vorgesehen. Damit die Validierung Beweiskraft erhält, muss der Validierspektren-Satz geeignet umfangreich gewählt werden (*repräsentativ* und *vollständig*). Mit den Begriffen *Validierungslauf* oder *Validierungsschritt* ist immer der Verfahrensschritt in diesem Sinne gemeint.

Im regulatorischen Sinne (der pharmazeutischen Produktion) ist die Validierung der dokumentierte Beweis, dass ein Prozess oder ein System die vorher spezifizierten Anforderungen im praktischen Einsatz reproduzierbar erfüllt. In diesem Sinne werden die Datenbanken von *Apo-Ident* erst mit der Validierungsdokumentation, zu der auch dieses Dokument gehört, zu validierten Datenbanken.

Das *Europäische Arzneibuch* verwendet den Begriff Validierung im *Abschnitt 2.2.40* im Sinne der Fachdisziplin *Chemometrie* [3].

Die Robustheit eines Verfahrens ist die Eigenschaft, durch Schwankungen der Umwelt (z.B. Temperatur oder Feuchtigkeit) nur wenig beeinflusst zu werden. Eine Methode ist robust, wenn die Umweltbedingungen das Endergebnis nicht oder nur unwesentlich verfälschen.

Die Spezifität einer Klassifikation (eines [chemometrischen Modells](#)) ist die [Richtig-Negativ-Rate](#).

Die Richtig-Negativ-Rate bezeichnet den Anteil der während der Validierung richtig als Nicht-Identität klassifizierten Spektren. Dies entspricht einer korrekten Klassifikation. Sie bedeutet, dass eine Substanz *A* bei der Identitätsprüfung auf Substanz *B* als „nicht identifiziert“ beurteilt wird. Die *Richtig-Negativ-Rate* entspricht der bedingten Häufigkeit

$$h(\text{abgewiesen}|\text{tatsächlich keine Identität}) = \frac{r_n}{r_n + f_p}$$

mit r_n als Gesamtzahl der *Richtig-Negativen* Klassifikationen und f_p als Gesamtzahl der *Falsch-Positiven* Klassifikationen. Für eine erfolgreiche Validierung eines *IdentModuls* müssen alle dieser Kategorie angehörenden vorgelegten Spektren als *entspricht nicht* klassifiziert werden.

Die Falsch-Positiv-Rate bezeichnet den Anteil der während der Validierung fälschlich als Identität klassifizierten Spektren. Dies ist die kritischste Art der möglichen Fehlklassifikation. Sie bedeutet, dass eine Substanz *A* bei der Identitätsprüfung auf Substanz *B* als „identifiziert“ beurteilt wird. Die *Falsch-Positiv-Rate* entspricht der bedingten Häufigkeit

$$h(\text{identifiziert}|\text{tatsächlich keine Identität}) = \frac{f_p}{r_n + f_p}$$

mit r_n als Gesamtzahl der *Richtig-Negativen* Klassifikationen und f_p als Gesamtzahl der *Falsch-Positiven* Klassifikationen. Für eine erfolgreiche Validierung eines *IdentModuls* wird eine *Falsch-Positiv-Rate* von Null für alle in die Validierung eingehenden Spektren verlangt. Dies ist gleichbedeutend mit einer Spezifität von 100%.

Die Richtig-Positiv-Rate bezeichnet den Anteil der während der Validierung richtig als Identität klassifizierten Spektren. Dies entspricht einer korrekten Klassifikation. Sie bedeutet, dass eine Substanz *A* bei der Identitätsprüfung auf Substanz *A* als „identifiziert“ beurteilt wird. Die *Richtig-Positiv-Rate* entspricht der bedingten Häufigkeit

$$h(\text{identifiziert}|\text{tatsächlich Identität}) = \frac{r_p}{r_p + f_n}$$

mit r_p als Gesamtzahl der *Richtig-Positiven* Klassifikationen und f_n als Gesamtzahl der *Falsch-Negativen* Klassifikationen. Die *Richtig-Positiv-Rate* ist ein Maß für die Erkennungsrate des validierten *Apo-Ident* Identmoduls.

Die Falsch-Negativ-Rate bezeichnet den Anteil der während der Validierung falsch als Nicht-Identität klassifizierten Spektren. Dies entspricht einer falschen Klassifikation. Sie bedeutet, dass eine Substanz *A* bei der Identitätsprüfung auf Substanz *A* als „nicht identifiziert“ beurteilt wird. Die *Falsch-Negativ-Rate* entspricht der bedingten Häufigkeit

$$h(\text{abgewiesen}|\text{tatsächlich Identität}) = \frac{f_n}{r_p + f_n}$$

mit f_n als Gesamtzahl der *Falsch-Negativen* Klassifikationen und r_p als Gesamtzahl der *Richtig-Positiven* Klassifikationen. Die *Falsch-Negativ-Rate* ist ein Maß für die Erkennungsrate des validierten *Apo-Ident* Identmoduls.

Ein chemometrisches Modell ist ein auf statistischen Methoden basierender Klassifikator [9, 8]. Durch den jeweiligen zum Einsatz kommenden Algorithmus (z.B. *Hauptkomponentenanalyse*, *Clusteranalyse*) wird das Maximum an chemischen Informationen aus Messdaten extrahiert. Dabei werden systematische oder physikalische Störgrößen durch geeignete Datenvorbehandlung möglichst eliminiert [10, 11].

An vielen Stellen in diesem Dokument wird im Sinne eines einfacheren Verständnisses der Begriff **Datenbank** anstelle von *chemometrisches Modell* verwendet – in gleicher Weise wie im *Ph. Eur. Abschnitt 2.2.40* [3].

Die Referenzproben werden zum Aufbau der Datenbank verwendet. An ihnen werden die *Referenzspektren* aufgenommen. In der Fachsprache der Chemometrie sagt man eher: Bei der *Kalibrierung* wird aus den an *Kalibrierproben* aufgenommenen *Kalibrierspektren* ein *chemometrisches Modell* generiert, dessen Qualität anschließend in der *Validierung* beurteilt wird.

Referenzproben werden aus apotheken-üblichen Quellen in pharmazeutischer Qualität beschafft. Ihre Identität wird geprüft. Die Referenzspektren werden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. In der Dokumentation werden u.a. Hersteller und Chargen-Nummer festgehalten.

Der Mahalanobis-Abstand ist ein Distanzmaß zweier Punkte im n -dimensionalen Vektorraum. Dabei wird die jeweilige Richtungskomponente des Abstands auf die *Standardabweichung* [12] einer n -dimensionalen Verteilung normiert. Im Falle der *Hauptkomponenten-Analyse* [9, 8] bezieht sich diese Normierung auf die Verteilung des jeweiligen Kalibrierdatensatzes einer Klassifikation (Substanz/Substanzgruppe) im *Hauptkomponentenraum* [8]. Der *Mahalanobis-Abstand* eines Punkts (Abbildung eines Spektrums) $\vec{y}$ im n -dimensionalen Hauptkomponentenraum zum Erwartungswert einer n -dimensionalen Verteilung $\mathbf{X}$ ergibt sich dann zu

$$d(\mathbf{X}, \vec{y}) = \sqrt{(\bar{\mathbf{X}} - \vec{y})^T \mathbf{S}^{-1} (\bar{\mathbf{X}} - \vec{y})} \quad \text{mit} \quad \mathbf{X} \in \mathbb{R}^{m \times n}, \vec{y} \in \mathbb{R}^m$$

[13]. Dabei entspricht m der Anzahl der genutzten Hauptkomponenten (Dimension des Hauptkomponentenraums) und n der Anzahl der im Kalibrierdatensatz vorhandenen Messungen (Spektren). $\bar{\mathbf{X}}$ ist der Erwartungswert der sich für den Kalibrierdatensatz ergebenden Verteilung (also der Mittelwert der n eingehenden Messungen). $\mathbf{S}^{-1}$ ist die inverse Kovarianzmatrix [12] der Verteilung $\mathbf{X}$.

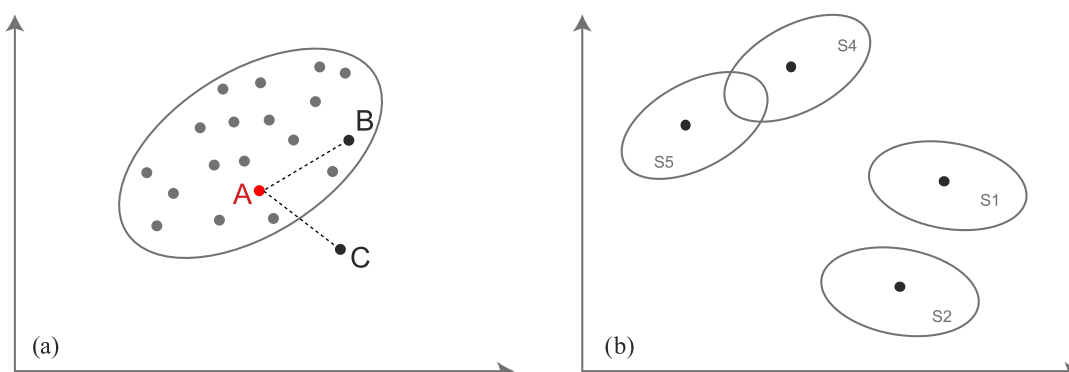


Abbildung 1: (a) Der *Mahalanobis-Abstand* von A zu B ist kleiner als von A zu C. Die euklidischen Distanzen sind jedoch gleich. (b) Der *Mahalanobis-Abstand* zwischen den beiden Messserien S4 und S5 ist kleiner als zwischen S1 und S2. Die euklidischen Distanzen sind jedoch gleich.

Der *Mahalanobis-Abstand* bietet Vorteile gegenüber dem euklidischen Abstand: Er berücksichtigt bei der Berechnung der Distanz die statistischen Eigenschaften einer Datenpunktmenge (Messserie), d.h. Mittelwert, Varianz und Kovarianz der Datenpunkte [14]. Der *Mahalanobis-Abstand* wird bei der Erstellung der Referenzdatenbank zur Bewertung der Spektren unterschiedlicher Proben einer Substanz eingesetzt.

Zusammenfassung

Zur Validierung der Substanzklasse *Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)* wurden insgesamt 10 945 Spektren von 509 verschiedenen Chargen von insgesamt 146 Substanzen herangezogen.

Validierproben

Die Validierproben lassen sich in die folgenden Kategorien einteilen:

Typ A Kalibrierspektren. Dies sind die in die Generierung des chemometrischen Modells eingegangenen Spektren. Sie wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Detaillierte Informationen zu den Chargen bzw. Proben finden sich auf den jeweiligen Validierungsberichten in den Abschnitten *Kalibrierproben* und *Typ A* bzw. in [Anhang A](#).

Substanzklasse	Substanzen	Chargen	Spektren
Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)	122	197	8482

Aus Kategorie *A* wurden insgesamt 8482 Spektren von 197 Chargen von 122 Substanzen in der Validierung berücksichtigt.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Detaillierte Informationen zu den Chargen bzw. Proben finden sich auf den jeweiligen Validierungsberichten im Abschnitt *Typ B* bzw. in [Anhang B](#).

Substanzklasse	Substanzen	Chargen	Spektren
Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)	63	73	2044

Aus Kategorie *B* wurden insgesamt 2044 Spektren von 73 Chargen von 63 Substanzen in der Validierung berücksichtigt.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgte durch *Apo-Ident*-Kunden. Detaillierte Informationen zu den Chargen bzw. Proben finden sich auf den jeweiligen Validierungsberichten im Abschnitt *Typ C* bzw. in [Anhang C](#).

Substanzklasse	Substanzen	Chargen	Spektren
Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)	60	291	419

Aus Kategorie *C* wurden insgesamt 419 Spektren von 291 Chargen von 60 Substanzen in der Validierung berücksichtigt.

Ergebnis der Validierung

Alle in der Substanzklasse *Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)* enthaltenen Substanzen/Substanzgruppen sind mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,000 06 %)	8482 (> 99,994 11 %)	0 (< 0,005 89 %)	788 826 (> 99,999 94 %)
Typ B	0 (< 0,000 26 %)	776 (71,652 82 %)	307 (28,347 18 %)	190 749 (> 99,999 74 %)
Typ C	0 (< 0,001 28 %)	289 (78,532 61 %)	79 (21,467 39 %)	39 018 (> 99,998 72 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen).

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Alfason Basis Cresa®
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	30723-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Alfason Basis Cresa®

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Alfason Basis Cresa®* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]

Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]

AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Alfason Basis Cresa®* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Astellas Pharma	Alfason Basis Cr...	12B11/77	30723	50	entfällt
Astellas Pharma	Alfason Basis Cr...	13D06/75	31071	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 90 Spektren von 2 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Alfason Basis Cresa®*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8392 Spektren aus insgesamt 188 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 4 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Alfason Basis Cresa®*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Astellas Pharma	Alfason Basis Cresa®	12B11/77	4

- 2040 Spektren aus insgesamt 66 Chargen von 62 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 1 Spektrum von 1 *Apo-Ident*-Kunden aus 1 Charge der Substanz/Substanzgruppe *Alfason Basis Cresa®*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Ichtyol/Phönix	Alfason Basis Cresa®	13E08/75	1

- 418 Spektren von 86 *Apo-Ident*-Kunden aus 290 Chargen von 59 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Alfason Basis Cresa®* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0060 %)	90 (> 99,4444 %)	0 (< 0,5556 %)	8392 (> 99,9940 %)
Typ B	0 (< 0,0245 %)	4 (k.A.)	0 (k.A.)	2040 (> 99,9755 %)
Typ C	0 (< 0,1196 %)	1 (k.A.)	0 (k.A.)	418 (> 99,8804 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30723	30723	0,00	27,70
31071	31071	0,00	28,03

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe **Alfason® Repair**
Substanzklasse Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum 09.07.2015
Berichtsnummer 30724-2015-07-09
Ausführende Firma HiperScan GmbH
Weißeritzstraße 3
01067 Dresden
Germany

Relevante Substanznamen

Alfason® Repair

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Alfason® Repair* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Alfason® Repair* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Astellas Pharma	Alfason® Repair	12F18/77	30724	50	entfällt
Astellas Pharma	Alfason® Repair	13E16/76	31069	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 90 Spektren von 2 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Alfason® Repair*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet.
- 8392 Spektren aus insgesamt 188 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des *chemometrischen Modells* eingegangen sind, sind die Proben in *Anhang A* aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 5 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Alfason® Repair*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Astellas Pharma	Alfason® Repair	12F18/77	5

- 2039 Spektren aus insgesamt 66 Chargen von 62 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in *Anhang B* aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 1 Spektrum von 1 *Apo-Ident*-Kunden aus 1 Charge der Substanz/Substanzgruppe *Alfason® Repair*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Astellas	Alfason® Repair	13H02/76	1

- 418 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 290 Chargen von 59 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in *Anhang C* aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Alfason® Repair* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0060 %)	90 (> 99,4444 %)	0 (< 0,5556 %)	8392 (> 99,9940 %)
Typ B	0 (< 0,0245 %)	5 (k.A.)	0 (k.A.)	2039 (> 99,9755 %)
Typ C	0 (< 0,1196 %)	1 (k.A.)	0 (k.A.)	418 (> 99,8804 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30724	30724	0,00	22,20
31069	31069	0,00	11,64

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Angelikawurzelöl
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	30535-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Angelikawurzelöl; Angelica archangelica oleum; Oleum Angelicae (e Radice)

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Angelikawurzelöl* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

- Hinweis zur Identifizierung von ätherischen Ölen: Einige ätherische Öle sind sowohl in der "Klasse Arzneistoffe Halbfest/Flüssig mit Zertifikat" als auch in der Klasse "Arzneistoffe Halbfest/Flüssig sonstige" enthalten.

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]

Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]

AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Angelikawurzelöl* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Taoasis	Angelikawurzelöl	zu erfassen	30535	40	entfällt
Taoasis	Angelikawurzelöl	33019-109871BAG90451	30964	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 80 Spektren von 2 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Angelikawurzelöl*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8402 Spektren aus insgesamt 189 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 0 Spektren von 0 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Angelikawurzelöl*.
- 2044 Spektren aus insgesamt 67 Chargen von 63 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 3 Spektren von 3 *Apo-Ident*-Kunden aus 3 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Angelikawurzelöl*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Caelo	Angelikawurzelöl	11352706	1
Caelo	Angelikawurzelöl	11352704	1
Taoasis	Angelikawurzelöl	33019-110236BAG904	1

- 416 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 288 Chargen von 59 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Angelikawurzelöl* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0060 %)	80 (> 99,3750 %)	0 (< 0,6250 %)	8402 (> 99,9940 %)
Typ B	0 (< 0,0245 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	2044 (> 99,9755 %)
Typ C	0 (< 0,1202 %)	0 (k.A.)	3 (k.A.)	416 (> 99,8798 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30535	30535	0,00	30,51
30964	30964	0,00	50,25

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe **Anisöl Bio**
Substanzklasse Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum 09.07.2015
Berichtsnummer 30670-2015-07-09
Ausführende Firma HiperScan GmbH
Weißeritzstraße 3
01067 Dresden
Germany

Relevante Substanznamen

Anisöl Bio

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Anisöl Bio* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

- Hinweis zur Identifizierung von ätherischen Ölen: Einige ätherische Öle sind sowohl in der "Klasse Arzneistoffe Halbfest/Flüssig mit Zertifikat" als auch in der Klasse "Arzneistoffe Halbfest/Flüssig sonstige" enthalten.

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Anisöl Bio* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Taoasis	Anisöl Bio	B080009-99431 BAG 90451	30670	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 40 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Anisöl Bio*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8442 Spektren aus insgesamt 189 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 0 Spektren von 0 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Anisöl Bio*.
- 2044 Spektren aus insgesamt 67 Chargen von 63 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 9 Spektren von 6 *Apo-Ident*-Kunden aus 7 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Anisöl Bio*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Schubert	Anisöl Bio	1236E0-1518	1
Taoasis	Anisöl Bio	26735-108555	1
Taoasis	Anisöl Bio	26735-111137	3
Taoasis	Anisöl Bio	26735-110455	1
Taoasis/Sanacorp	Anisöl Bio	26735-112250	1
Caelo	Anisöl Bio	12322503	1

- 410 Spektren von 85 *Apo-Ident*-Kunden aus 284 Chargen von 59 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Anisöl Bio* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0059 %)	40 (> 98,7500 %)	0 (< 1,2500 %)	8442 (> 99,9941 %)
Typ B	0 (< 0,0245 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	2044 (> 99,9755 %)
Typ C	0 (< 0,1220 %)	8 (k.A.)	1 (k.A.)	410 (> 99,8780 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30670	30670	0,00	135,60

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Basilikumöl
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	30751-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Basilikumöl; Ocimum basilicum oleum; Oleum ocimum basilicum

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Basilikumöl* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

- Hinweis zur Identifizierung von ätherischen Ölen: Einige ätherische Öle sind sowohl in der "Klasse Arzneistoffe Halbfest/Flüssig mit Zertifikat" als auch in der Klasse "Arzneistoffe Halbfest/Flüssig sonstige" enthalten.

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]

Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]

AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Basilikumöl* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Taoasis	Basilikumöl	21022-108746BAG90451	30751	40	entfällt
Taoasis	Basilikumöl	121018-109872BAG90451	30963	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 80 Spektren von 2 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Basilikumöl*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet.
- 8402 Spektren aus insgesamt 188 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des *chemometrischen Modells* eingegangen sind, sind die Proben in *Anhang A* aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 0 Spektren von 0 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Basilikumöl*.
- 2044 Spektren aus insgesamt 67 Chargen von 63 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in *Anhang B* aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 0 Spektren von 0 *Apo-Ident*-Kunden aus 0 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Basilikumöl*.
- 419 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 291 Chargen von 60 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in *Anhang C* aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Basilikumöl* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0060 %)	80 (> 99,3750 %)	0 (< 0,6250 %)	8402 (> 99,9940 %)
Typ B	0 (< 0,0245 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	2044 (> 99,9755 %)
Typ C	0 (< 0,1193 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	419 (> 99,8807 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30751	30751	0,00	283,63
30963	30963	0,00	42,15

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Beifußöl
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	30842-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Beifußöl; Oleum Artemisia vulgaris

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Beifußöl* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Beifußöl* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Apotheker S.B...	Beifußöl	7.9363	30842	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 40 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Beifußöl*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8442 Spektren aus insgesamt 189 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 0 Spektren von 0 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Beifußöl*.
- 2044 Spektren aus insgesamt 67 Chargen von 63 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 1 Spektrum von 1 *Apo-Ident*-Kunden aus 1 Charge der Substanz/Substanzgruppe *Beifußöl*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Caelo	Beifußöl	79363	1

- 418 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 290 Chargen von 59 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Beifußöl* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0059 %)	40 (> 98,7500 %)	0 (< 1,2500 %)	8442 (> 99,9941 %)
Typ B	0 (< 0,0245 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	2044 (> 99,9755 %)
Typ C	0 (< 0,1196 %)	1 (k.A.)	0 (k.A.)	418 (> 99,8804 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30842	30842	0,00	77,80

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe **Benzoe Siamöl 20%**
Substanzklasse Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum 09.07.2015
Berichtsnummer 30456-2015-07-09
Ausführende Firma HiperScan GmbH
Weißeritzstraße 3
01067 Dresden
Germany

Relevante Substanznamen

Benzoe Siamöl 20%; Oleum Styrax tonkinensis

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Benzoe Siamöl 20%* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Benzoe Siamöl 20%* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Taoasis	Benzoe Siamöl 20%	474034-96350	30456	40	entfällt
Taoasis	Benzoe Siamöl 20%	12990-114892	31256	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 80 Spektren von 2 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Benzoe Siamöl 20%*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8402 Spektren aus insgesamt 188 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 0 Spektren von 0 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Benzoe Siamöl 20%*.
- 2044 Spektren aus insgesamt 67 Chargen von 63 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 4 Spektren von 3 *Apo-Ident*-Kunden aus 4 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Benzoe Siamöl 20%*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Taoasis	Benzoe Siamöl 20%	541389-111081	1
Taoasis	Benzoe Siamöl 20%	548481-111780	1
Taoasis	Benzoe Siamöl 20%	474084-96350	1
Taoasis	Benzoe Siamöl 20%	518434-108321	1

- 415 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 287 Chargen von 59 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Benzoe Siamöl 20%* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0060 %)	80 (> 99,3750 %)	0 (< 0,6250 %)	8402 (> 99,9940 %)
Typ B	0 (< 0,0245 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	2044 (> 99,9755 %)
Typ C	0 (< 0,1205 %)	3 (k.A.)	1 (k.A.)	415 (> 99,8795 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30456	30456	0,00	707,55
31256	31256	0,00	702,05

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Bepanthen® Lösung
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	31047-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Bepanthen® Lösung

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Bepanthen® Lösung* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]

Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]

AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Bepanthen® Lösung* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Bayer	Bepanthen® Lösung	KP08DR1	31047	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 874 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 40 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Bepanthen® Lösung*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet.
- 8442 Spektren aus insgesamt 189 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des *chemometrischen Modells* eingegangen sind, sind die Proben in *Anhang A* aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 0 Spektren von 0 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Bepanthen® Lösung*.
- 1973 Spektren aus insgesamt 67 Chargen von 63 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in *Anhang B* aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 0 Spektren von 0 *Apo-Ident*-Kunden aus 0 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Bepanthen® Lösung*.
- 419 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 291 Chargen von 60 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in *Anhang C* aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Bepanthen® Lösung* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0059 %)	40 (> 98,7500 %)	0 (< 1,2500 %)	8442 (> 99,9941 %)
Typ B	0 (< 0,0253 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	1973 (> 99,9747 %)
Typ C	0 (< 0,1193 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	419 (> 99,8807 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
31047	31047	0,00	40,53

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Bepanthen® Wund- und Heilsalbe
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	31048-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Bepanthen® Wund- und Heilsalbe

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Bepanthen® Wund- und Heilsalbe* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]

Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]

AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Bepanthen® Wund- und Heilsalbe* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Bayer	Bepanthen® Wund-...	GP00LB9	31048	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 40 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Bepanthen® Wund- und Heilsalbe*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8442 Spektren aus insgesamt 189 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 0 Spektren von 0 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Bepanthen® Wund- und Heilsalbe*.
- 2044 Spektren aus insgesamt 67 Chargen von 63 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 0 Spektren von 0 *Apo-Ident*-Kunden aus 0 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Bepanthen® Wund- und Heilsalbe*.
- 419 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 291 Chargen von 60 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Bepanthen® Wund- und Heilsalbe* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0059 %)	40 (> 98,7500 %)	0 (< 1,2500 %)	8442 (> 99,9941 %)
Typ B	0 (< 0,0245 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	2044 (> 99,9755 %)
Typ C	0 (< 0,1193 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	419 (> 99,8807 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
31048	31048	0,00	30,84

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe **Bergamottöl**
Substanzklasse Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum 09.07.2015
Berichtsnummer 30307-2015-07-09
Ausführende Firma HiperScan GmbH
Weißeritzstraße 3
01067 Dresden
Germany

Relevante Substanznamen

Bergamottöl; Oleum Bergamottae

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Bergamottöl* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Bergamottöl* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
keine Angabe	Bergamottöl	00237459	30307	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 40 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Bergamottöl*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8442 Spektren aus insgesamt 189 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 0 Spektren von 0 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Bergamottöl*.
- 2044 Spektren aus insgesamt 67 Chargen von 63 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 8 Spektren von 7 *Apo-Ident*-Kunden aus 8 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Bergamottöl*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Kaders	Bergamottöl	130564	1
Noweda	Bergamottöl	271858	1
Taoasis	Bergamottöl	32338-109135	1
Taoasis	Bergamottöl	32579-111866	1
Taoasis	Bergamottöl	33110-110701	1
Taoasis	Bergamottöl	96243	1
Taoasis	Bergamottöl	B130301-110610	1
Bombastus	Bergamottöl	264008	1

- 411 Spektren von 86 *Apo-Ident*-Kunden aus 283 Chargen von 59 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Bergamottöl* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0059 %)	40 (> 98,7500 %)	0 (< 1,2500 %)	8442 (> 99,9941 %)
Typ B	0 (< 0,0245 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	2044 (> 99,9755 %)
Typ C	0 (< 0,1217 %)	1 (k.A.)	7 (k.A.)	411 (> 99,8783 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30307	30307	0,00	55,29

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Cajeput / Niaouliöl
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	30382-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Cajeput / Niaouliöl; Cajeput; Niaouliöl; Oleum Niaouli

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Cajeput / Niaouliöl* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

- Hinweis zur Identifizierung von ätherischen Ölen: Einige ätherische Öle sind sowohl in der "Klasse Arzneistoffe Halbfest/Flüssig mit Zertifikat" als auch in der Klasse "Arzneistoffe Halbfest/Flüssig sonstige" enthalten.

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]

Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]

AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Cajeput / Niaouliöl* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Taoasis	Cajeput	T149I11	30382	40	entfällt
Taoasis	Cajeput	130829-112094 BAG 90451	31136	40	entfällt
Caelo	Niaouliöl	13099606	31420	40	AR-14_FG-012561-01
Taoasis	Niaouliöl	34167-116962	31548	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 160 Spektren von 4 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Cajeput* / *Niaouliöl*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet.
- 8322 Spektren aus insgesamt 186 Chargen von 120 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des *chemometrischen Modells* eingegangen sind, sind die Proben in *Anhang A* aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 40 Spektren von 2 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Cajeput* / *Niaouliöl*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Caelo	Niaouliöl	13099606	20
Taoasis	Niaouliöl	34167-116962	20

- 2004 Spektren aus insgesamt 65 Chargen von 62 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in *Anhang B* aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 4 Spektren von 4 *Apo-Ident*-Kunden aus 4 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Cajeput* / *Niaouliöl*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
PVL	Cajeput	150712	1
Aurica	Cajeput	11024710	1
Taoasis	Cajeput	24077-106468	1
Taoasis/Sanacorp	Cajeput	L201323018-113057	1

- 415 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 287 Chargen von 59 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Cajeput* / *Niaouliöl* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0060 %)	160 (> 99,6875 %)	0 (< 0,3125 %)	8322 (> 99,9940 %)
Typ B	0 (< 0,0250 %)	40 (> 98,7500 %)	0 (< 1,2500 %)	2004 (> 99,9750 %)
Typ C	0 (< 0,1205 %)	3 (k.A.)	1 (k.A.)	415 (> 99,8795 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30382	30382	0,00	38,11
31136	31136	0,00	47,04
31420	31420	0,00	28,10
31548	31548	0,00	33,16

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Citronellöl
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	31550-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Citronellöl; Melissenöl, indisch; Oleum Citronellae; Oleum Cymbopogon winterianus

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Citronellöl* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

- Hinweis zur Identifizierung von ätherischen Ölen: Einige ätherische Öle sind sowohl in der "Klasse Arzneistoffe Halbfest/Flüssig mit Zertifikat" als auch in der Klasse "Arzneistoffe Halbfest/Flüssig sonstige" enthalten.

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]

Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]

AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Citronellöl* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Taoasis	Citronellöl	140121-115623	31550	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 40 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Citronellöl*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8442 Spektren aus insgesamt 189 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 20 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Citronellöl*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Taoasis	Citronellöl	140121-115623	20

- 2024 Spektren aus insgesamt 66 Chargen von 62 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 0 Spektren von 0 *Apo-Ident*-Kunden aus 0 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Citronellöl*.
- 419 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 291 Chargen von 60 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Citronellöl* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0059 %)	40 (> 98,7500 %)	0 (< 1,2500 %)	8442 (> 99,9941 %)
Typ B	0 (< 0,0247 %)	20 (> 97,5000 %)	0 (< 2,5000 %)	2024 (> 99,9753 %)
Typ C	0 (< 0,1193 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	419 (> 99,8807 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
31550	31550	0,00	30,00

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Citronenöl
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	31558-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Citronenöl; Limonis aetheroleum; Oleum Citri

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Citronenöl* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

- Hinweis zur Identifizierung von ätherischen Ölen: Einige ätherische Öle sind sowohl in der "Klasse Arzneistoffe Halbfest/Flüssig mit Zertifikat" als auch in der Klasse "Arzneistoffe Halbfest/Flüssig sonstige" enthalten.

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Citronenöl* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Taoasis	Citronenöl	D04LI14M-117513	31558	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 40 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Citronenöl*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8442 Spektren aus insgesamt 189 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 20 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Citronenöl*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Taoasis	Citronenöl	D04LI14M-117513	20

- 2024 Spektren aus insgesamt 66 Chargen von 62 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 0 Spektren von 0 *Apo-Ident*-Kunden aus 0 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Citronenöl*.
- 419 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 291 Chargen von 60 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Citronenöl* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0059 %)	40 (> 98,7500 %)	0 (< 1,2500 %)	8442 (> 99,9941 %)
Typ B	0 (< 0,0247 %)	20 (> 97,5000 %)	0 (< 2,5000 %)	2024 (> 99,9753 %)
Typ C	0 (< 0,1193 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	419 (> 99,8807 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
31558	31558	0,00	35,74

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Dermatop® Basissalbe
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	31060-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Dermatop® Basissalbe

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Dermatop® Basissalbe* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Dermatop® Basissalbe* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Sanofi aventis	Dermatop® Basiss...	3F052A	31060	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 40 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Dermatop® Basissalbe*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8442 Spektren aus insgesamt 189 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 0 Spektren von 0 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Dermatop® Basissalbe*.
- 2044 Spektren aus insgesamt 67 Chargen von 63 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident-Kunden*. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 0 Spektren von 0 *Apo-Ident-Kunden* aus 0 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Dermatop® Basissalbe*.
- 419 Spektren von 87 *Apo-Ident-Kunden* aus 291 Chargen von 60 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident-Kunden* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Dermatop® Basissalbe* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0059 %)	40 (> 98,7500 %)	0 (< 1,2500 %)	8442 (> 99,9941 %)
Typ B	0 (< 0,0245 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	2044 (> 99,9755 %)
Typ C	0 (< 0,1193 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	419 (> 99,8807 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
31060	31060	0,00	26,32

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Dermifant® Kindercreme
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	30970-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Dermifant® Kindercreme; Allergika Dermifant® Kindercreme

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Dermifant® Kindercreme* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Dermifant® Kindercreme* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Allergika	Dermifant® Kinde...	1210082	30970	40	entfällt
Allergika	Dermifant® Kinde...	1303033	31062	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 80 Spektren von 2 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Dermifant® Kindercreme*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8402 Spektren aus insgesamt 188 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 0 Spektren von 0 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Dermifant® Kindercreme*.
- 2044 Spektren aus insgesamt 67 Chargen von 63 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 0 Spektren von 0 *Apo-Ident*-Kunden aus 0 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Dermifant® Kindercreme*.
- 419 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 291 Chargen von 60 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Dermifant® Kindercreme* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0060 %)	80 (> 99,3750 %)	0 (< 0,6250 %)	8402 (> 99,9940 %)
Typ B	0 (< 0,0245 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	2044 (> 99,9755 %)
Typ C	0 (< 0,1193 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	419 (> 99,8807 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30970	30970	0,00	20,58
31062	31062	0,00	24,49

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Dexeryl®
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	31512-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Dexeryl®

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Dexeryl®* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Dexeryl®* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Pierre Fabre	Dexeryl®	G99016	31512	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 40 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Dexeryl®*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8442 Spektren aus insgesamt 189 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 20 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Dexeryl®*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Pierre Fabre	Dexeryl®	G99016	20

- 2024 Spektren aus insgesamt 66 Chargen von 62 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 0 Spektren von 0 *Apo-Ident*-Kunden aus 0 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Dexeryl®*.
- 419 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 291 Chargen von 60 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Dexeryl®* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0059 %)	40 (> 98,7500 %)	0 (< 1,2500 %)	8442 (> 99,9941 %)
Typ B	0 (< 0,0247 %)	20 (> 97,5000 %)	0 (< 2,5000 %)	2024 (> 99,9753 %)
Typ C	0 (< 0,1193 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	419 (> 99,8807 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
31512	31512	0,00	17,03

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe **Dimeticoni-Salbe 10% SR**
Substanzklasse Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum 09.07.2015
Berichtsnummer 30356-2015-07-09
Ausführende Firma HiperScan GmbH
Weißeritzstraße 3
01067 Dresden
Germany

Relevante Substanznamen

Dimeticoni-Salbe 10% SR; Unguentum Dimeticoni 10% SR

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Dimeticoni-Salbe 10% SR* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Dimeticoni-Salbe 10% SR* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
apomix	Dimeticoni-Salbe...	07B140711	30356	29	entfällt
apomix	Dimeticoni-Salbe...	05B120412	30553	40	entfällt
apomix	Dimeticoni-Salbe...	08B041213	31243	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 109 Spektren von 3 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Dimeticoni-Salbe 10% SR*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8373 Spektren aus insgesamt 187 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 1 Spektrum von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Dimeticoni-Salbe 10% SR*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
apomix	Dimeticoni-Salbe 10% SR	07B140711	1

- 2043 Spektren aus insgesamt 66 Chargen von 62 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 1 Spektrum von 1 *Apo-Ident*-Kunden aus 1 Charge der Substanz/Substanzgruppe *Dimeticoni-Salbe 10% SR*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Apomix/Phönix	Dimeticoni-Salbe 10% SR	8A041213	1

- 418 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 290 Chargen von 59 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Dimeticoni-Salbe 10% SR* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0060 %)	109 (> 99,5413 %)	0 (< 0,4587 %)	8373 (> 99,9940 %)
Typ B	0 (< 0,0245 %)	1 (k.A.)	0 (k.A.)	2043 (> 99,9755 %)
Typ C	0 (< 0,1196 %)	1 (k.A.)	0 (k.A.)	418 (> 99,8804 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30356	30356	0,00	14,81
30553	30553	0,00	19,18
31243	31243	0,00	23,70

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe **Eucalyptusöl**
Substanzklasse Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum 09.07.2015
Berichtsnummer 30966-2015-07-09
Ausführende Firma HiperScan GmbH
Weißeritzstraße 3
01067 Dresden
Germany

Relevante Substanznamen

Eucalyptusöl; Eucalypti aetheroleum; Oleum Eucalypti

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Eucalyptusöl* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

- Hinweis zur Identifizierung von ätherischen Ölen: Einige ätherische Öle sind sowohl in der "Klasse Arzneistoffe Halbfest/Flüssig mit Zertifikat" als auch in der Klasse "Arzneistoffe Halbfest/Flüssig sonstige" enthalten.

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Eucalyptusöl* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Taoasis	Eucalyptusöl	527885-109705A	30966	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 40 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Eucalyptusöl*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8442 Spektren aus insgesamt 189 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 80 Spektren von 2 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Eucalyptusöl*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Taoasis	Eucalyptusöl	T150I11	40
Taoasis	Eucalyptusöl	T51I10	40

- 1964 Spektren aus insgesamt 65 Chargen von 62 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 4 Spektren von 3 *Apo-Ident*-Kunden aus 4 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Eucalyptusöl*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Taoasis	Eucalyptusöl	33364-110871	1
Caelo	Eucalyptusöl	11324112	1
Taoasis	Eucalyptusöl	543495-112704	1
Taoasis	Eucalyptusöl	130205-111868	1

- 415 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 287 Chargen von 59 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Eucalyptusöl* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0059 %)	40 (> 98,7500 %)	0 (< 1,2500 %)	8442 (> 99,9941 %)
Typ B	0 (< 0,0255 %)	0 (< 0,6250 %)	80 (> 99,3750 %)	1964 (> 99,9745 %)
Typ C	0 (< 0,1205 %)	0 (k.A.)	4 (k.A.)	415 (> 99,8795 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der [Mahalanobis-Abstand](#) zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30966	30966	0,00	44,88

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe **Excipial® Mandelölsalbe**
Substanzklasse Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum 09.07.2015
Berichtsnummer 30720-2015-07-09
Ausführende Firma HiperScan GmbH
Weißeritzstraße 3
01067 Dresden
Germany

Relevante Substanznamen

Excipial® Mandelölsalbe

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Excipial® Mandelölsalbe* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Excipial® Mandelölsalbe* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Spirig Pharma	Excipial® Mandel...	M023	30720	40	entfällt
Spirig Pharma	Excipial® Mandel...	M031	31090	40	entfällt
Spirig Pharma	Excipial® Mandel...	N012	31278	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 120 Spektren von 3 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Excipial® Mandelölsalbe*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet.
- 8362 Spektren aus insgesamt 188 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des *chemometrischen Modells* eingegangen sind, sind die Proben in *Anhang A* aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 0 Spektren von 0 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Excipial® Mandelölsalbe*.
- 2044 Spektren aus insgesamt 67 Chargen von 63 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in *Anhang B* aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 0 Spektren von 0 *Apo-Ident*-Kunden aus 0 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Excipial® Mandelölsalbe*.
- 419 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 291 Chargen von 60 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in *Anhang C* aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Excipial® Mandelölsalbe* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0060 %)	120 (> 99,5833 %)	0 (< 0,4167 %)	8362 (> 99,9940 %)
Typ B	0 (< 0,0245 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	2044 (> 99,9755 %)
Typ C	0 (< 0,1193 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	419 (> 99,8807 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30720	30720	0,00	67,32
31090	31090	0,00	76,16
31278	31278	0,00	74,83

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Fenchelöl
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	31140-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Fenchelöl; Foeniculum vulgare var. dulce oleum

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Fenchelöl* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

- Hinweis zur Identifizierung von ätherischen Ölen: Einige ätherische Öle sind sowohl in der "Klasse Arzneistoffe Halbfest/Flüssig mit Zertifikat" als auch in der Klasse "Arzneistoffe Halbfest/Flüssig sonstige" enthalten.

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Fenchelöl* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Taoasis	Fenchelöl	L16813D-111973 BAG 90451	31140	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 40 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Fenchelöl*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet.
- 8442 Spektren aus insgesamt 189 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des *chemometrischen Modells* eingegangen sind, sind die Proben in *Anhang A* aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 0 Spektren von 0 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Fenchelöl*.
- 2044 Spektren aus insgesamt 67 Chargen von 63 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in *Anhang B* aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 0 Spektren von 0 *Apo-Ident*-Kunden aus 0 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Fenchelöl*.
- 419 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 291 Chargen von 60 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in *Anhang C* aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Fenchelöl* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0059 %)	40 (> 98,7500 %)	0 (< 1,2500 %)	8442 (> 99,9941 %)
Typ B	0 (< 0,0245 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	2044 (> 99,9755 %)
Typ C	0 (< 0,1193 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	419 (> 99,8807 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
31140	31140	0,00	82,67

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Fenistil® Gel
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	31045-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Fenistil® Gel

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Fenistil® Gel* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Fenistil® Gel* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Novartis	Fenistil® Gel	N00927A	31045	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 40 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Fenistil® Gel*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8442 Spektren aus insgesamt 189 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 0 Spektren von 0 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Fenistil® Gel*.
- 2044 Spektren aus insgesamt 67 Chargen von 63 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 0 Spektren von 0 *Apo-Ident*-Kunden aus 0 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Fenistil® Gel*.
- 419 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 291 Chargen von 60 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Fenistil® Gel* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0059 %)	40 (> 98,7500 %)	0 (< 1,2500 %)	8442 (> 99,9941 %)
Typ B	0 (< 0,0245 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	2044 (> 99,9755 %)
Typ C	0 (< 0,1193 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	419 (> 99,8807 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
31045	31045	0,00	31,56

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Fettsalben Asche Basis /Neribas
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	31013-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Fettsalben Asche Basis /Neribas; Asche Basis® Fettsalbe; Neribas®Fettsalbe

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Fettsalben Asche Basis /Neribas* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Fettsalben Asche Basis /Neribas* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Chiesi	Asche Basis® Fet...	23014A	31013	40	entfällt
Jenapharm	Neribas®Fettsalbe	32032C	31489	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 80 Spektren von 2 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Fettsalben Asche Basis /Neribas*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8402 Spektren aus insgesamt 188 Chargen von 120 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 0 Spektren von 0 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Fettsalben Asche Basis /Neribas*.
- 2044 Spektren aus insgesamt 67 Chargen von 63 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 0 Spektren von 0 *Apo-Ident*-Kunden aus 0 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Fettsalben Asche Basis /Neribas*.
- 419 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 291 Chargen von 60 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Fettsalben Asche Basis /Neribas* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0060 %)	80 (> 99,3750 %)	0 (< 0,6250 %)	8402 (> 99,9940 %)
Typ B	0 (< 0,0245 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	2044 (> 99,9755 %)
Typ C	0 (< 0,1193 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	419 (> 99,8807 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
31013	31013	0,00	33,49
31489	31489	0,00	40,96

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Fichtennadelöl
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	30613-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Fichtennadelöl; Oleum Pini sibiricum; Piceae aetheroleum

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Fichtennadelöl* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

- Hinweis zur Identifizierung von ätherischen Ölen: Einige ätherische Öle sind sowohl in der "Klasse Arzneistoffe Halbfest/Flüssig mit Zertifikat" als auch in der Klasse "Arzneistoffe Halbfest/Flüssig sonstige" enthalten.

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]

Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]

AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Fichtennadelöl* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Caelo	Fichtennadelöl	11220801	30613	40	entfällt
Taoasis	Fichtennadelöl	29828-103169 BAG 90451	30672	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 80 Spektren von 2 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Fichtennadelöl*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8402 Spektren aus insgesamt 188 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 40 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Fichtennadelöl*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Taoasis	Fichtennadelöl	zu erfassen	40

- 2004 Spektren aus insgesamt 67 Chargen von 62 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 12 Spektren von 8 *Apo-Ident*-Kunden aus 9 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Fichtennadelöl*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Caelo	Fichtennadelöl	10185604	1
Caelo	Fichtennadelöl	11324401	4
Caelo	Fichtennadelöl	13152001	1
Primavera	Fichtennadelöl	1670814	1
Taoasis	Fichtennadelöl	29828-107964	1
Taoasis	Fichtennadelöl	531766-109893	1
Taoasis	Fichtennadelöl	534474-111585	1
Taoasis/Sanacorp	Fichtennadelöl	534474-111869	1
Taoasis/Sanacorp	Fichtennadelöl	534474-113171	1

- 407 Spektren von 85 *Apo-Ident*-Kunden aus 282 Chargen von 59 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Fichtennadelöl* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0060 %)	80 (> 99,3750 %)	0 (< 0,6250 %)	8402 (> 99,9940 %)
Typ B	0 (< 0,0250 %)	0 (< 1,2500 %)	40 (> 98,7500 %)	2004 (> 99,9750 %)
Typ C	0 (< 0,1229 %)	4 (k.A.)	8 (k.A.)	407 (> 99,8771 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der [Mahalanobis-Abstand](#) zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30613	30613	0,00	35,20
30672	30672	0,00	26,29

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Fitalite™
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	31492-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Fitalite™

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Fitalite™* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Fitalite™* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Fagron	Fitalite™	14B18-T01-010352	31492	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 40 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Fitalite*TM. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8442 Spektren aus insgesamt 189 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 20 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Fitalite*TM.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Fagron	Fitalite TM	14B18-T01-010352	20

- 2024 Spektren aus insgesamt 66 Chargen von 62 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt [Typ B](#) aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 0 Spektren von 0 *Apo-Ident*-Kunden aus 0 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Fitalite*TM.
- 419 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 291 Chargen von 60 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt [Typ C](#) aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Fitalite*TM ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0059 %)	40 (> 98,7500 %)	0 (< 1,2500 %)	8442 (> 99,9941 %)
Typ B	0 (< 0,0247 %)	20 (> 97,5000 %)	0 (< 2,5000 %)	2024 (> 99,9753 %)
Typ C	0 (< 0,1193 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	419 (> 99,8807 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
31492	31492	0,00	22,48

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Grapefruitöl Bio
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	30538-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Grapefruitöl Bio; Citrus paradisi oleum

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Grapefruitöl Bio* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

- Hinweis zur Identifizierung von ätherischen Ölen: Einige ätherische Öle sind sowohl in der "Klasse Arzneistoffe Halbfest/Flüssig mit Zertifikat" als auch in der Klasse "Arzneistoffe Halbfest/Flüssig sonstige" enthalten.

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Grapefruitöl Bio* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Taoasis	Grapefruitöl Bio	zu erfassen	30538	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 40 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Grapefruitöl Bio*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8442 Spektren aus insgesamt 190 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 0 Spektren von 0 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Grapefruitöl Bio*.
- 2044 Spektren aus insgesamt 67 Chargen von 63 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 0 Spektren von 0 *Apo-Ident*-Kunden aus 0 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Grapefruitöl Bio*.
- 419 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 291 Chargen von 60 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Grapefruitöl Bio* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0059 %)	40 (> 98,7500 %)	0 (< 1,2500 %)	8442 (> 99,9941 %)
Typ B	0 (< 0,0245 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	2044 (> 99,9755 %)
Typ C	0 (< 0,1193 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	419 (> 99,8807 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30538	30538	0,00	66,46

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Hydrophile Salben
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	30634-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Hydrophile Salben; Abitima® clinic Gesichtscreme; Abitima® clinic Körpercreme; Allergika Dermifant® Kinderlotion; Asche Basis® Creme; Asche Basis® Lotio; Basiscreme Nature; Basiscreme Taoasis; Dermatop Basiscreme; Dermifant® Kinderlotion; DMS®-Basiscreme Classic; DMS®-Basiscreme High Classic; DMS®-Basiscreme High Classic Plus; Excipial® Hydrocreme; Excipial® U Lipolotio; Excipial® U10 Lipolotio; Lipoderm® Lotion; Neribas® Creme; Physiogel® Hypoallergen Creme; Thrombocid® Salbe

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Hydrophile Salben* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Hydrophile Salben* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Bayer	Neribas® Creme	21076A	30634	40	entfällt
Spirig Pharma	Lipoderm® Lotion	K057	30635	40	entfällt
Chiesi	Asche Basis® Creme	03117A	30713	40	entfällt
Spirig Pharma	Excipial® Hydroc...	I013	30725	40	entfällt
Spirig Pharma	Excipial® U Lipo...	M042	30732	60	entfällt
Spirig Pharma	Excipial® U10 Li...	M021	30733	60	entfällt
Actavis	Abitima® clinic ...	072013	30736	40	entfällt
benel	Thrombocid® Salbe	410B113	30772	40	entfällt
Chiesi	Asche Basis® Creme	22197A	30775	40	entfällt
Chiesi	Asche Basis® Lotio	21042A	30828	40	entfällt
Spirig Pharma	Excipial® Hydroc...	I013	30836	40	entfällt
Stiefel	Physiogel® Hypoa...	343P	30838	40	entfällt
Actavis	Abitima® clinic ...	46820	30845	40	entfällt
Allergika	Dermifant® Kinde...	1301020	30971	40	entfällt
Taoasis	Basiscreme Taoasis	121205-2276	31041	40	entfällt
Intendis	Neribas® Creme	21076A	31050	40	entfällt
Actavis	Abitima® clinic ...	110712	31058	40	entfällt
Actavis	Abitima® clinic ...	051112	31061	40	entfällt
Allergika	Dermifant® Kinde...	1306020	31064	40	entfällt
Spirig Pharma	Excipial® U10 Li...	N025	31066	40	entfällt
Spirig Pharma	Excipial® U Lipo...	N031	31067	40	entfällt
Chiesi	Asche Basis® Lotio	24049A	31068	40	entfällt
Spirig Pharma	Lipoderm® Lotion	M065	31072	40	entfällt
Chiesi	Asche Basis® Creme	24220A	31085	40	entfällt
Spirig Pharma	Excipial® Hydroc...	N013	31089	40	entfällt
Bayer	Neribas® Creme	21076A	31095	40	entfällt
Bene	Thrombocid® Salbe	410B113	31098	40	entfällt
Stiefel	Physiogel® Hypoa...	6940	31100	40	entfällt
Taoasis	Basiscreme Taoasis	130124-3021	31115	40	entfällt
Sanofi aventis	Dermatop Basiscr...	3F031A	31234	40	entfällt
KOKO	DMS®-Basiscreme ...	L010K13	31236	80	entfällt
Spirig Pharma	Excipial® Hydroc...	N013	31277	40	entfällt
Spirig Pharma	Excipial® U Lipo...	N085	31280	40	entfällt
Spirig Pharma	Excipial® U10 Li...	N047	31281	40	entfällt
KOKO	DMS®-Basiscreme ...	L026G13	31307	40	entfällt
KOKO	DMS®-Basiscreme ...	L032A14	31308	40	entfällt
KOKO	DMS®-Basiscreme ...	L014L13	31309	40	entfällt
Spirig Pharma	Lipoderm® Lotion	R023	31535	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 777 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 1600 Spektren von 38 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Hydrophile Salben*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 6882 Spektren aus insgesamt 158 Chargen von 105 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 22 Spektren von 3 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Hydrophile Salben*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Spirig Pharma	Lipoderm® Lotion	R023	20
Caelo	Abitima® clinic Gesichtscreme	zu erfassen	1
123	Abitima® clinic Gesichtscreme	1234	1

- 1854 Spektren aus insgesamt 66 Chargen von 61 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in *Anhang B* aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 118 Spektren von 32 *Apo-Ident*-Kunden aus 84 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Hydrophile Salben*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
actavis/Gehe	Abitima® clinic Körpercreme	60513	2
Caelo	Abitima® clinic Körpercreme	110712	3
Actavis / Noweda	Abitima® clinic Gesichtscreme	142371	1
Noweda	Abitima® clinic Gesichtscreme	146735	1
Actavis/Noweda	Abitima® clinic Gesichtscreme	148417	1
Actavis/ Noweda	Abitima® clinic Gesichtscreme	148496	1
Actavis/Gehe	Abitima® clinic Gesichtscreme	148495	1
Actavis	Abitima® clinic Körpercreme	20912	2
Actavis/Gehe	Abitima® clinic Körpercreme	51112	1
Abitima	Abitima® clinic Körpercreme	52015/051112	1
actavis/Gehe	Abitima® clinic Körpercreme	112015	1
Roche/AHD	Abitima® clinic Körpercreme	142620	1
Actavis/Noweda	Abitima® clinic Körpercreme	370313	1
Caelo	Asche Basis® Lotio	33055A	2
Caelo	Asche Basis® Lotio	32054A	2
chiesi/gehe	Asche Basis® Lotio	33056A	2
chiesi/gehe	Asche Basis® Creme	33246A	3
Chiesi	Asche Basis® Lotio	333056A	2
Chiesi/Noweda	Asche Basis® Creme	34247A	1
chiesi/gehe	Asche Basis® Lotio	34058A	1
Chiesi/Gehe	Asche Basis® Creme	34248A	1
Chiesi/V.d.L.	Asche Basis® Creme	34250A	2
Chiesi/Noweda	Asche Basis® Creme	41258A	1
Chiesi	Asche Basis® Creme	34251A	2
Chiesi/Gehe	Asche Basis® Creme	41260A	1
Caelo	Asche Basis® Creme	41265B	1
Chiesi	Asche Basis® Creme	14178A	1
chiesi / Noweda	Asche Basis® Creme	23213A	1
Chiesi/Phoenix	Asche Basis® Creme	24215A	1

fortgesetzt auf folgender Seite

fortgesetzt von vorheriger Seite

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Chiesi/	Asche Basis® Creme	41266A	1
Chiesi GmbH	Asche Basis® Creme	24214A	2
Chiesi	Asche Basis® Creme	24217A	1
Chiesi/Gehe	Asche Basis® Creme	24218A	2
Chiesi	Asche Basis® Creme	24220A	1
Chiesi/AHD	Asche Basis® Creme	31222A	2
chiesi/gehe	Asche Basis® Creme	24221A	2
Chiesi/Phoenix	Asche Basis® Creme	31225A	1
Chiesi/Gehe	Asche Basis® Creme	31224A	4
Chiesi/AHD	Asche Basis® Creme	31223A	1
chiesi /Jenne	Asche Basis® Creme	31227a	1
Caelo	Asche Basis® Creme	31226A	1
Chiesi	Asche Basis® Creme	31227A	2
Chiesi/AHD	Asche Basis® Creme	31228A	3
Chiesi/Noweda	Asche Basis® Creme	31229A	2
Chiesi/Noweda	Asche Basis® Creme	31232A	2
Chiesi	Asche Basis® Creme	32233A	2
Phönix	Asche Basis® Creme	322344	1
Chiesi/AHD	Asche Basis® Creme	32234A	1
Chiesi	Asche Basis® Creme	32236A	3
Alliance Healthcare	Asche Basis® Creme	33237A	3
Chiesi / Noweda	Asche Basis® Creme	33238A	1
Chiesi/ phoenix	Asche Basis® Creme	33239A	1
Alliance Healthcare	Asche Basis® Creme	33240A	3
Chiesi/ Noweda	Asche Basis® Creme	33241A	1
Chiesi/Gehe	Asche Basis® Lotio	23047A	1
Chiesi/AHD	Asche Basis® Lotio	24049A	2
Koko GmbH	DMS®-Basiscreme High Classic	L031A14	2
Jenapharm/Alliance	Neribas® Creme	YY000C3	1
Stiefel/Sanacorp	Physiogel® Hypoallergen Creme	10000	1

- 301 Spektren von 83 *Apo-Ident*-Kunden aus 207 Chargen von 49 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in *Anhang C* aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Hydrophile Salben* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0073 %)	1600 (> 99,9688 %)	0 (< 0,0313 %)	6882 (> 99,9927 %)
Typ B	0 (< 0,0270 %)	20 (90,9091 %)	2 (9,0909 %)	1854 (> 99,9730 %)
Typ C	0 (< 0,1661 %)	105 (88,9831 %)	13 (11,0169 %)	301 (> 99,8339 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig

geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz- proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30634	30634	0,00	34,22
30635	30635	0,00	32,65
30713	30713	0,00	42,19
30725	30725	0,00	29,48
30732	30732	0,00	27,67
30733	30733	0,00	26,16
30736	30736	0,00	35,07
30772	30772	0,00	16,32
30775	30775	0,00	41,18
30828	30828	0,00	20,86
30836	30836	0,00	33,70
30838	30838	0,00	10,29
30845	30845	0,00	15,19
30971	30971	0,00	19,09
31041	31041	0,00	19,26
31050	31050	0,00	36,79
31058	31058	0,00	41,58
31061	31061	0,00	33,50
31064	31064	0,00	22,51
31066	31066	0,00	21,90
31067	31067	0,00	26,24
31068	31068	0,00	20,78
31072	31072	0,00	23,58
31085	31085	0,00	36,92
31089	31089	0,00	16,49
31095	31095	0,00	38,50
31098	31098	0,00	18,72
31100	31100	0,00	18,94
31115	31115	0,00	22,38
31234	31234	0,00	41,84
31236	31236	0,00	38,31
31277	31277	0,00	13,02
31280	31280	0,00	20,37
31281	31281	0,00	25,21
31307	31307	0,00	18,07
31308	31308	0,00	35,28
31309	31309	0,00	42,65
31535	31535	0,00	19,93

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Immortelleöl
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	30450-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Immortelleöl; Helichrysum italicum oleum

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Immortelleöl* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Immortelleöl* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Taoasis	Immortelleöl	L03111DN-102431	30450	40	entfällt
Taoasis	Immortelleöl	L24113D-113148 BAG 90451	31138	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 80 Spektren von 2 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Immortelleöl*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8402 Spektren aus insgesamt 188 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 0 Spektren von 0 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Immortelleöl*.
- 2044 Spektren aus insgesamt 67 Chargen von 63 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 4 Spektren von 2 *Apo-Ident*-Kunden aus 4 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Immortelleöl*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Taoasis	Immortelleöl	L03111DN	1
Taoasis	Immortelleöl	L13613DN	1
Taoasis	Immortelleöl	33111D	1
Fagron	Immortelleöl	L10712D-111673	1

- 415 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 287 Chargen von 59 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Immortelleöl* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0060 %)	80 (> 99,3750 %)	0 (< 0,6250 %)	8402 (> 99,9940 %)
Typ B	0 (< 0,0245 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	2044 (> 99,9755 %)
Typ C	0 (< 0,1205 %)	0 (k.A.)	4 (k.A.)	415 (> 99,8795 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30450	30450	0,00	34,21
31138	31138	0,00	36,66

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Ingweröl
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	30451-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Ingweröl; Oleum Zingiber officinalis; Zingiber officinalis oleum

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Ingweröl* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]

Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]

AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Ingweröl* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Taoasis	Ingweröl	6454-92725	30451	40	entfällt
Taoasis	Ingweröl	130114-110686BAG90451	30958	40	entfällt
Taoasis	Ingweröl	40592A-112718 BAG 90451	31142	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 120 Spektren von 3 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Ingweröl*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8362 Spektren aus insgesamt 187 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 0 Spektren von 0 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Ingweröl*.
- 2044 Spektren aus insgesamt 67 Chargen von 63 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 1 Spektrum von 1 *Apo-Ident*-Kunden aus 1 Charge der Substanz/Substanzgruppe *Ingweröl*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Taoasis	Ingweröl	6454-92725	1

- 418 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 290 Chargen von 59 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Ingweröl* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0060 %)	120 (> 99,5833 %)	0 (< 0,4167 %)	8362 (> 99,9940 %)
Typ B	0 (< 0,0245 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	2044 (> 99,9755 %)
Typ C	0 (< 0,1196 %)	0 (k.A.)	1 (k.A.)	418 (> 99,8804 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30451	30451	0,00	18,37
30958	30958	0,00	32,49
31142	31142	0,00	30,23

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Kamillenöl, marokkanisch
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	30844-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Kamillenöl, marokkanisch; Marokkanisches Kamillenöl; Oleum ormenis multicaulis; Ormenis multicaulis oleum

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Kamillenöl, marokkanisch* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

- Hinweis zur Identifizierung von ätherischen Ölen: Einige ätherische Öle sind sowohl in der "Klasse Arzneistoffe Halbfest/Flüssig mit Zertifikat" als auch in der Klasse "Arzneistoffe Halbfest/Flüssig sonstige" enthalten.

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Kamillenöl, marokkanisch* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Taoasis	Kamillenöl, maro...	6982-1074109BAC90451	30844	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 40 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Kamillenöl, marokkanisch*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8442 Spektren aus insgesamt 189 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 40 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Kamillenöl, marokkanisch*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Taoasis	Kamillenöl, marokkanisch	6159-93239	40

- 2004 Spektren aus insgesamt 66 Chargen von 62 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 3 Spektren von 2 *Apo-Ident*-Kunden aus 3 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Kamillenöl, marokkanisch*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Taoasis	Kamillenöl, marokkanisch	6159-93239	1
Taoasis	Kamillenöl, marokkanisch	6631-104465	1

- 416 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 288 Chargen von 59 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell

identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Kamillenöl, marokkanisch* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0059 %)	40 (> 98,7500 %)	0 (< 1,2500 %)	8442 (> 99,9941 %)
Typ B	0 (< 0,0250 %)	0 (< 1,2500 %)	40 (> 98,7500 %)	2004 (> 99,9750 %)
Typ C	0 (< 0,1202 %)	0 (k.A.)	3 (k.A.)	416 (> 99,8798 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der [Mahalanobis-Abstand](#) zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30844	30844	0,00	48,86

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Kamillenöl, röm.
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	31254-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Kamillenöl, röm.; Anthemis nobilis oil

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Kamillenöl, röm.* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

- Hinweis zur Identifizierung von ätherischen Ölen: Einige ätherische Öle sind sowohl in der "Klasse Arzneistoffe Halbfest/Flüssig mit Zertifikat" als auch in der Klasse "Arzneistoffe Halbfest/Flüssig sonstige" enthalten.

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Kamillenöl, röm.* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Taoasis	Kamillenöl, röm.	34561-112874	31254	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 40 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Kamillenöl, röm.*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet.
- 8442 Spektren aus insgesamt 189 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des *chemometrischen Modells* eingegangen sind, sind die Proben in *Anhang A* aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 0 Spektren von 0 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Kamillenöl, röm.*.
- 2044 Spektren aus insgesamt 67 Chargen von 63 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in *Anhang B* aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 0 Spektren von 0 *Apo-Ident*-Kunden aus 0 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Kamillenöl, röm.*.
- 419 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 291 Chargen von 60 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in *Anhang C* aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Kamillenöl, röm.* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0059 %)	40 (> 98,7500 %)	0 (< 1,2500 %)	8442 (> 99,9941 %)
Typ B	0 (< 0,0245 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	2044 (> 99,9755 %)
Typ C	0 (< 0,1193 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	419 (> 99,8807 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
31254	31254	0,00	48,07

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Karottensamenöl
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	31555-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Karottensamenöl; Daucus carota oil

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Karottensamenöl* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Karottensamenöl* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Taoasis	Karottensamenöl	937-117443	31555	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 40 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Karottensamenöl*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8442 Spektren aus insgesamt 189 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 20 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Karottensamenöl*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Taoasis	Karottensamenöl	937-117443	20

- 2024 Spektren aus insgesamt 66 Chargen von 62 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 0 Spektren von 0 *Apo-Ident*-Kunden aus 0 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Karottensamenöl*.
- 419 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 291 Chargen von 60 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Karottensamenöl* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0059 %)	40 (> 98,7500 %)	0 (< 1,2500 %)	8442 (> 99,9941 %)
Typ B	0 (< 0,0247 %)	20 (> 97,5000 %)	0 (< 2,5000 %)	2024 (> 99,9753 %)
Typ C	0 (< 0,1193 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	419 (> 99,8807 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
31555	31555	0,00	25,44

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe **Kerasal® Basissalbe**
Substanzklasse Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum 09.07.2015
Berichtsnummer 30995-2015-07-09
Ausführende Firma HiperScan GmbH
Weißeritzstraße 3
01067 Dresden
Germany

Relevante Substanznamen

Kerasal® Basissalbe

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Kerasal® Basissalbe* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Kerasal® Basissalbe* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Spirig Pharma	Kerasal® Basissa...	M031	30995	40	entfällt
Spirig Pharma	Kerasal® Basissa...	N011	31081	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 80 Spektren von 2 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Kerasal® Basissalbe*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8402 Spektren aus insgesamt 189 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 0 Spektren von 0 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Kerasal® Basissalbe*.
- 2044 Spektren aus insgesamt 67 Chargen von 63 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 2 Spektren von 2 *Apo-Ident*-Kunden aus 2 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Kerasal® Basissalbe*.
- 417 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 289 Chargen von 59 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Kerasal® Basissalbe* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0060 %)	80 (> 99,3750 %)	0 (< 0,6250 %)	8402 (> 99,9940 %)
Typ B	0 (< 0,0245 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	2044 (> 99,9755 %)
Typ C	0 (< 0,1199 %)	2 (k.A.)	0 (k.A.)	417 (> 99,8801 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30995	30995	0,00	128,76
31081	31081	0,00	125,81

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Korianderöl
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	31552-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Korianderöl; Oleum Coriandri

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Korianderöl* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

- Hinweis zur Identifizierung von ätherischen Ölen: Einige ätherische Öle sind sowohl in der "Klasse Arzneistoffe Halbfest/Flüssig mit Zertifikat" als auch in der Klasse "Arzneistoffe Halbfest/Flüssig sonstige" enthalten.

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]

Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]

AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Korianderöl* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Taoasis	Korianderöl	9324-114961	31552	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 40 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Korianderöl*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8442 Spektren aus insgesamt 189 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 20 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Korianderöl*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Taoasis	Korianderöl	9324-114961	20

- 2024 Spektren aus insgesamt 66 Chargen von 62 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 0 Spektren von 0 *Apo-Ident*-Kunden aus 0 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Korianderöl*.
- 419 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 291 Chargen von 60 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Korianderöl* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0059 %)	40 (> 98,7500 %)	0 (< 1,2500 %)	8442 (> 99,9941 %)
Typ B	0 (< 0,0247 %)	20 (> 97,5000 %)	0 (< 2,5000 %)	2024 (> 99,9753 %)
Typ C	0 (< 0,1193 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	419 (> 99,8807 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
31552	31552	0,00	37,36

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe **Kreuzkümmelöl**
Substanzklasse Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum 09.07.2015
Berichtsnummer 30449-2015-07-09
Ausführende Firma HiperScan GmbH
Weißeritzstraße 3
01067 Dresden
Germany

Relevante Substanznamen

Kreuzkümmelöl; Oleum Cuminum cyminum

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Kreuzkümmelöl* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Kreuzkümmelöl* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Taoasis	Kreuzkümmelöl	348912-71369	30449	40	entfällt
Taoasis	Kreuzkümmelöl	130910-113031 BAG 90451	31141	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 80 Spektren von 2 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Kreuzkümmelöl*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet.
- 8402 Spektren aus insgesamt 188 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des *chemometrischen Modells* eingegangen sind, sind die Proben in *Anhang A* aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 0 Spektren von 0 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Kreuzkümmelöl*.
- 2044 Spektren aus insgesamt 67 Chargen von 63 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in *Anhang B* aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Charge-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 2 Spektren von 2 *Apo-Ident*-Kunden aus 2 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Kreuzkümmelöl*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Taoasis	Kreuzkümmelöl	24081-106027	1
Taoasis	Kreuzkümmelöl	121217-111221	1

- 417 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 289 Chargen von 59 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in *Anhang C* aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Kreuzkümmelöl* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0060 %)	80 (> 99,3750 %)	0 (< 0,6250 %)	8402 (> 99,9940 %)
Typ B	0 (< 0,0245 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	2044 (> 99,9755 %)
Typ C	0 (< 0,1199 %)	0 (k.A.)	2 (k.A.)	417 (> 99,8801 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30449	30449	0,00	107,81
31141	31141	0,00	159,25

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	La Roche-Posay Cold Cream Naturel
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	30829-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

La Roche-Posay Cold Cream Naturel

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *La Roche-Posay Cold Cream Naturel* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *La Roche-Posay Cold Cream Naturel* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
La Roche-Posay	La Roche-Posay C...	54J01P	30829	40	entfällt
La Roche-Posay	La Roche-Posay C...	54K31P	31074	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 80 Spektren von 2 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *La Roche-Posay Cold Cream Naturel*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8402 Spektren aus insgesamt 188 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 0 Spektren von 0 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *La Roche-Posay Cold Cream Naturel*.
- 2044 Spektren aus insgesamt 67 Chargen von 63 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 0 Spektren von 0 *Apo-Ident*-Kunden aus 0 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *La Roche-Posay Cold Cream Naturel*.
- 419 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 291 Chargen von 60 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *La Roche-Posay Cold Cream Naturel* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0060 %)	80 (> 99,3750 %)	0 (< 0,6250 %)	8402 (> 99,9940 %)
Typ B	0 (< 0,0245 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	2044 (> 99,9755 %)
Typ C	0 (< 0,1193 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	419 (> 99,8807 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30829	30829	0,00	136,37
31074	31074	0,00	126,88

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	La Roche-Posay Toleriane
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	30827-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

La Roche-Posay Toleriane

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *La Roche-Posay Toleriane* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *La Roche-Posay Toleriane* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
La Roche-Posay	La Roche-Posay T...	54J901	30827	40	entfällt
La Roche-Posay	La Roche-Posay T...	54K500	31094	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 80 Spektren von 2 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *La Roche-Posay Toleriane*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8402 Spektren aus insgesamt 188 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 0 Spektren von 0 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *La Roche-Posay Toleriane*.
- 2044 Spektren aus insgesamt 67 Chargen von 63 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 2 Spektren von 1 *Apo-Ident*-Kunden aus 2 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *La Roche-Posay Toleriane*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Caelo	La Roche-Posay Toleriane	54J500	1
Roche/AHD	La Roche-Posay Toleriane	54J800	1

- 417 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 289 Chargen von 59 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *La Roche-Posay Toleriane* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0060 %)	80 (> 99,3750 %)	0 (< 0,6250 %)	8402 (> 99,9940 %)
Typ B	0 (< 0,0245 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	2044 (> 99,9755 %)
Typ C	0 (< 0,1199 %)	2 (k.A.)	0 (k.A.)	417 (> 99,8801 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30827	30827	0,00	17,56
31094	31094	0,00	15,58

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Latschenkiefernöl
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	31542-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Latschenkiefernöl; Oleum Pini Pumilionis; Pini pumilionis aetherolum

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Latschenkiefernöl* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

- Hinweis zur Identifizierung von ätherischen Ölen: Einige ätherische Öle sind sowohl in der "Klasse Arzneistoffe Halbfest/Flüssig mit Zertifikat" als auch in der Klasse "Arzneistoffe Halbfest/Flüssig sonstige" enthalten.

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Latschenkiefernöl* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Taoasis	Latschenkiefernöl	586-116867	31542	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 40 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Latschenkiefernöl*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8442 Spektren aus insgesamt 189 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 20 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Latschenkiefernöl*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Taoasis	Latschenkiefernöl	586-116867	20

- 2024 Spektren aus insgesamt 66 Chargen von 62 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 0 Spektren von 0 *Apo-Ident*-Kunden aus 0 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Latschenkiefernöl*.
- 419 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 291 Chargen von 60 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Latschenkiefernöl* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0059 %)	40 (> 98,7500 %)	0 (< 1,2500 %)	8442 (> 99,9941 %)
Typ B	0 (< 0,0247 %)	20 (> 97,5000 %)	0 (< 2,5000 %)	2024 (> 99,9753 %)
Typ C	0 (< 0,1193 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	419 (> 99,8807 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
31542	31542	0,00	30,05

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Lavendelöl
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	30961-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Lavendelöl; Lavendula officinalis oleum; Oleum Lavendula officinalis

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Lavendelöl* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

- Hinweis zur Identifizierung von ätherischen Ölen: Einige ätherische Öle sind sowohl in der "Klasse Arzneistoffe Halbfest/Flüssig mit Zertifikat" als auch in der Klasse "Arzneistoffe Halbfest/Flüssig sonstige" enthalten.

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Lavendelöl* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Taoasis	Lavendelöl	L16812DN-108661BAG90451	30961	40	entfällt
Taoasis	Lavendelöl	110186BAG90451	30962	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 80 Spektren von 2 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Lavendelöl*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet.
- 8402 Spektren aus insgesamt 188 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des *chemometrischen Modells* eingegangen sind, sind die Proben in *Anhang A* aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 0 Spektren von 0 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Lavendelöl*.
- 2044 Spektren aus insgesamt 67 Chargen von 63 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in *Anhang B* aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 0 Spektren von 0 *Apo-Ident*-Kunden aus 0 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Lavendelöl*.
- 419 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 291 Chargen von 60 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in *Anhang C* aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Lavendelöl* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0060 %)	80 (> 99,3750 %)	0 (< 0,6250 %)	8402 (> 99,9940 %)
Typ B	0 (< 0,0245 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	2044 (> 99,9755 %)
Typ C	0 (< 0,1193 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	419 (> 99,8807 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30961	30961	0,00	32,83
30962	30962	0,00	10,78

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe **Lemongrasöl**
Substanzklasse Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum 09.07.2015
Berichtsnummer 30661-2015-07-09
Ausführende Firma HiperScan GmbH
Weißeritzstraße 3
01067 Dresden
Germany

Relevante Substanznamen

Lemongrasöl; Cymbopogonis aetheroleum

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Lemongrasöl* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Lemongrasöl* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Bombastus	Lemongrasöl	263571	30661	40	entfällt
Bombastus	Lemongrasöl	278923	31185	40	entfällt
Bombastus	Lemongrasöl	278526	31187	40	entfällt
Taoasis	Lemongrasöl	130930-116754	31549	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 160 Spektren von 4 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Lemongrasöl*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8322 Spektren aus insgesamt 186 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 20 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Lemongrasöl*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Taoasis	Lemongrasöl	130930-116754	20

- 2024 Spektren aus insgesamt 66 Chargen von 62 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 5 Spektren von 5 *Apo-Ident*-Kunden aus 5 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Lemongrasöl*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Bombastus	Lemongrasöl	270423	1
Taoasis	Lemongrasöl	130930-115336	1
Primavera	Lemongrasöl	11401144	1
Taoasis	Lemongrasöl	13131-112982	1
Taoasis	Lemongrasöl	532897-111140	1

- 414 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 286 Chargen von 59 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Lemongrasöl* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0060 %)	160 (> 99,6875 %)	0 (< 0,3125 %)	8322 (> 99,9940 %)
Typ B	0 (< 0,0247 %)	20 (> 97,5000 %)	0 (< 2,5000 %)	2024 (> 99,9753 %)
Typ C	0 (< 0,1208 %)	5 (k.A.)	0 (k.A.)	414 (> 99,8792 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der [Mahalanobis-Abstand](#) zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30661	30661	0,00	51,50
31185	31185	0,00	59,57
31187	31187	0,00	54,80
31549	31549	0,00	52,30

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Limettenöl
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	31544-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Limettenöl; Citrus aurantifolia oil

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Limettenöl* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Limettenöl* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Taoasis	Limettenöl	059-117571	31544	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 40 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Limettenöl*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8442 Spektren aus insgesamt 189 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 20 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Limettenöl*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Taoasis	Limettenöl	059-117571	20

- 2024 Spektren aus insgesamt 66 Chargen von 62 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 0 Spektren von 0 *Apo-Ident*-Kunden aus 0 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Limettenöl*.
- 419 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 291 Chargen von 60 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Limettenöl* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0059 %)	40 (> 98,7500 %)	0 (< 1,2500 %)	8442 (> 99,9941 %)
Typ B	0 (< 0,0247 %)	20 (> 97,5000 %)	0 (< 2,5000 %)	2024 (> 99,9753 %)
Typ C	0 (< 0,1193 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	419 (> 99,8807 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
31544	31544	0,00	75,07

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Liniment-Salben
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	30731-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Liniment-Salben; Amciderm® Basiscreme; Excipial® U Hydrolotio; Linola® Ö/W-Creme; Linola® Sept; NourivanTM Antiox

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Liniment-Salben* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Liniment-Salben* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Spirig Pharma	Excipial® U Hydr. ...	M016	30731	40	entfällt
Dr. Wolff	Linola® Ö/W-Creme	238482	30834	40	entfällt
Spirig Pharma	Excipial® U Hydr. ...	M063	31073	40	entfällt

fortgesetzt auf folgender Seite

fortgesetzt von vorheriger Seite

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Dr. Wolff	Linola® Sept	334080	31079	40	entfällt
Dr. Wolff	Linola® Ö/W-Creme	334010	31133	40	entfällt
Spirig Pharma	Excipial® U Hydr...	N013	31279	40	entfällt
Dr. Wolff	Linola® Ö/W-Creme	432480	31312	40	entfällt
Fagron	Nourivan™ Antiox	14C11-T09-010959	31495	40	entfällt
Almirall	Amciderm® Basisc...	313311	31509	40	entfällt
Spirig Pharma	Excipial® U Hydr...	R014	31536	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 400 Spektren von 10 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Liniment-Salben*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet.
- 8082 Spektren aus insgesamt 181 Chargen von 117 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des *chemometrischen Modells* eingegangen sind, sind die Proben in *Anhang A* aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 60 Spektren von 3 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Liniment-Salben*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Fagron	Nourivan™ Antiox	14C11-T09-010959	20
Almirall	Amciderm® Basiscreme	313311	20
Spirig Pharma	Excipial® U Hydrolotio	R014	20

- 1984 Spektren aus insgesamt 64 Chargen von 60 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in *Anhang B* aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 27 Spektren von 11 *Apo-Ident*-Kunden aus 19 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Liniment-Salben*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Dr. Wolff/Malteser	Linola® Ö/W-Creme	338990	1
Dr. August Wolff/Ebert	Linola® Ö/W-Creme	431250	1
Dr. August Wolff/Ebert	Linola® Ö/W-Creme	432970	1
Dr. Wolff/Gehe	Linola® Ö/W-Creme	432490	2
Dr. August Wolff	Linola® Ö/W-Creme	233140	1
Dr. Wolff	Linola® Ö/W-Creme	432480	1
Dr. Wolff/Noweda	Linola® Ö/W-Creme	233200	1
Dr. Wolff/ Anzag	Linola® Ö/W-Creme	234193	1
Caelo	Linola® Ö/W-Creme	238484	1
Dr. Wolff	Linola® Ö/W-Creme	238482	1
Dr. Wolff/Gehe	Linola® Ö/W-Creme	238520	4
Caelo	Linola® Ö/W-Creme	238530	4
Caelo	Linola® Ö/W-Creme	239181	1
Dr. Wolff/Malteser	Linola® Ö/W-Creme	330751	1
Caelo	Linola® Ö/W-Creme	330760	1
chiesi / Noweda	Linola® Ö/W-Creme	331460	1
Dr. August Wolff/Ebert	Linola® Ö/W-Creme	333640	2
Euro OTC	Linola® Ö/W-Creme	333730	1
Dr. Wolff/Malteser	Linola® Ö/W-Creme	333880	1

- 392 Spektren von 86 *Apo-Ident*-Kunden aus 272 Chargen von 59 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Liniment-Salben* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0062 %)	400 (> 99,8750 %)	0 (< 0,1250 %)	8082 (> 99,9938 %)
Typ B	0 (< 0,0252 %)	60 (> 99,1667 %)	0 (< 0,8333 %)	1984 (> 99,9748 %)
Typ C	0 (< 0,1276 %)	27 (> 98,1481 %)	0 (< 1,8519 %)	392 (> 99,8724 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der [Mahalanobis-Abstand](#) zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30731	30731	0,00	34,21
30834	30834	0,00	23,26
31073	31073	0,00	27,36

fortgesetzt auf folgender Seite

fortgesetzt von vorheriger Seite

Proben-ID	Referenz- proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
31079	31079	0,00	21,10
31133	31133	0,00	23,19
31279	31279	0,00	30,70
31312	31312	0,00	30,89
31495	31495	0,00	18,04
31509	31509	0,00	37,35
31536	31536	0,00	28,31

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Linola® Fett Creme / Linola® H Fett N
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	30576-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Linola® Fett Creme / Linola® H Fett N; Linola® Fett Creme; Linola® H Fett N

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Linola® Fett Creme / Linola® H Fett N* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]

Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]

AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Linola® Fett Creme / Linola® H Fett N* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Dr. Wolff	Linola® H Fett N	231610	30576	40	entfällt
Dr. Wolff	Linola® Fett Creme	235260	30771	40	entfällt
Dr. Wolff	Linola® H Fett N	333080	31092	40	entfällt
Dr. Wolff	Linola® Fett Creme	337280	31096	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 941 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 160 Spektren von 4 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Linola® Fett Creme / Linola® H Fett N*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8322 Spektren aus insgesamt 186 Chargen von 120 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 0 Spektren von 0 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Linola® Fett Creme / Linola® H Fett N*.
- 2040 Spektren aus insgesamt 67 Chargen von 63 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 2 Spektren von 1 *Apo-Ident*-Kunden aus 2 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Linola® Fett Creme / Linola® H Fett N*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
dr.wolff	Linola® Fett Creme	337770	1
Caelo	Linola® Fett Creme	238540	1

- 417 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 289 Chargen von 59 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Linola® Fett Creme / Linola® H Fett N* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0060 %)	160 (> 99,6875 %)	0 (< 0,3125 %)	8322 (> 99,9940 %)
Typ B	0 (< 0,0245 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	2040 (> 99,9755 %)
Typ C	0 (< 0,1199 %)	2 (k.A.)	0 (k.A.)	417 (> 99,8801 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30576	30576	0,00	26,56
30771	30771	0,00	16,30
31092	31092	0,00	18,85
31096	31096	0,00	20,35

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Linola® Sonnenschutz LSF 50 Lotion
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	30832-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Linola® Sonnenschutz LSF 50 Lotion

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Linola® Sonnenschutz LSF 50 Lotion* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Linola® Sonnenschutz LSF 50 Lotion* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Dr. Wolff	Linola® Sonnensch...	134530	30832	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 40 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Linola® Sonnenschutz LSF 50 Lotion*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8442 Spektren aus insgesamt 189 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 0 Spektren von 0 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Linola® Sonnenschutz LSF 50 Lotion*.
- 2044 Spektren aus insgesamt 67 Chargen von 63 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 0 Spektren von 0 *Apo-Ident*-Kunden aus 0 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Linola® Sonnenschutz LSF 50 Lotion*.
- 419 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 291 Chargen von 60 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Linola® Sonnenschutz LSF 50 Lotion* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0059 %)	40 (> 98,7500 %)	0 (< 1,2500 %)	8442 (> 99,9941 %)
Typ B	0 (< 0,0245 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	2044 (> 99,9755 %)
Typ C	0 (< 0,1193 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	419 (> 99,8807 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30832	30832	0,00	70,65

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe **Lipolotio urea 5% F Körperlotion**
Substanzklasse Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum 09.07.2015
Berichtsnummer 30973-2015-07-09
Ausführende Firma HiperScan GmbH
Weißeritzstraße 3
01067 Dresden
Germany

Relevante Substanznamen

Lipolotio urea 5% F Körperlotion; Allergika Lipolotio urea 5% F Körperlotion

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Lipolotio urea 5% F Körperlotion* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Lipolotio urea 5% F Körperlotion* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Allergika	Lipolotio urea 5...	1205050	30973	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 40 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Lipolotio urea 5% F Körperlotion*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8442 Spektren aus insgesamt 189 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 0 Spektren von 0 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Lipolotio urea 5% F Körperlotion*.
- 2044 Spektren aus insgesamt 67 Chargen von 63 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 0 Spektren von 0 *Apo-Ident*-Kunden aus 0 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Lipolotio urea 5% F Körperlotion*.
- 419 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 291 Chargen von 60 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Lipolotio urea 5% F Körperlotion* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0059 %)	40 (> 98,7500 %)	0 (< 1,2500 %)	8442 (> 99,9941 %)
Typ B	0 (< 0,0245 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	2044 (> 99,9755 %)
Typ C	0 (< 0,1193 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	419 (> 99,8807 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30973	30973	0,00	19,78

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe **Lygal® Kopfsalbe N 3%**
Substanzklasse Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum 09.07.2015
Berichtsnummer 31049-2015-07-09
Ausführende Firma HiperScan GmbH
Weißeritzstraße 3
01067 Dresden
Germany

Relevante Substanznamen

Lygal® Kopfsalbe N 3%

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Lygal® Kopfsalbe N 3%* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Lygal® Kopfsalbe N 3%* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Taurus	Lygal® Kopfsalbe...	124311	31049	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 40 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Lygal® Kopfsalbe N 3%*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet.
- 8442 Spektren aus insgesamt 189 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des *chemometrischen Modells* eingegangen sind, sind die Proben in *Anhang A* aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 0 Spektren von 0 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Lygal® Kopfsalbe N 3%*.
- 2044 Spektren aus insgesamt 67 Chargen von 63 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in *Anhang B* aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident-Kunden*. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 0 Spektren von 0 *Apo-Ident-Kunden* aus 0 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Lygal® Kopfsalbe N 3%*.
- 419 Spektren von 87 *Apo-Ident-Kunden* aus 291 Chargen von 60 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident-Kunden* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in *Anhang C* aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Lygal® Kopfsalbe N 3%* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0059 %)	40 (> 98,7500 %)	0 (< 1,2500 %)	8442 (> 99,9941 %)
Typ B	0 (< 0,0245 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	2044 (> 99,9755 %)
Typ C	0 (< 0,1193 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	419 (> 99,8807 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
31049	31049	0,00	39,42

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Lygal® Salbengrundlage
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	31014-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Lygal® Salbengrundlage

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Lygal® Salbengrundlage* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Lygal® Salbengrundlage* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Taurus	Lygal® Salbengru...	121302P	31014	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 40 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Lygal® Salbengrundlage*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet.
- 8442 Spektren aus insgesamt 189 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des *chemometrischen Modells* eingegangen sind, sind die Proben in *Anhang A* aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 0 Spektren von 0 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Lygal® Salbengrundlage*.
- 2044 Spektren aus insgesamt 67 Chargen von 63 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in *Anhang B* aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident-Kunden*. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 0 Spektren von 0 *Apo-Ident-Kunden* aus 0 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Lygal® Salbengrundlage*.
- 419 Spektren von 87 *Apo-Ident-Kunden* aus 291 Chargen von 60 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident-Kunden* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in *Anhang C* aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Lygal® Salbengrundlage* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0059 %)	40 (> 98,7500 %)	0 (< 1,2500 %)	8442 (> 99,9941 %)
Typ B	0 (< 0,0245 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	2044 (> 99,9755 %)
Typ C	0 (< 0,1193 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	419 (> 99,8807 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
31014	31014	0,00	38,30

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe **Majoranöl**
Substanzklasse Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum 09.07.2015
Berichtsnummer 30454-2015-07-09
Ausführende Firma HiperScan GmbH
Weißeritzstraße 3
01067 Dresden
Germany

Relevante Substanznamen

Majoranöl; Origanum majorana oleum

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Majoranöl* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Majoranöl* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Taoasis	Majoranöl	29293-98717	30454	40	entfällt
Taoasis	Majoranöl	130312-111991 BAG 90451	31137	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 80 Spektren von 2 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Majoranöl*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8402 Spektren aus insgesamt 188 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 0 Spektren von 0 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Majoranöl*.
- 2044 Spektren aus insgesamt 67 Chargen von 63 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 13 Spektren von 5 *Apo-Ident*-Kunden aus 6 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Majoranöl*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Herbasinica	Majoranöl	12041602	7
Taoasis	Majoranöl	130312-111347	1
Taoasis	Majoranöl	130312-111870	1
Caelo	Majoranöl	13041601	1
Caelo	Majoranöl	13121301	1
Taoasis/Gehe	Majoranöl	29293-98717	2

- 406 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 285 Chargen von 59 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Majoranöl* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0060 %)	80 (> 99,3750 %)	0 (< 0,6250 %)	8402 (> 99,9940 %)
Typ B	0 (< 0,0245 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	2044 (> 99,9755 %)
Typ C	0 (< 0,1232 %)	11 (k.A.)	2 (k.A.)	406 (> 99,8768 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30454	30454	0,00	52,69
31137	31137	0,00	57,51

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe **Manukaöl**
Substanzklasse Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum 09.07.2015
Berichtsnummer 31545-2015-07-09
Ausführende Firma HiperScan GmbH
Weißeritzstraße 3
01067 Dresden
Germany

Relevante Substanznamen

Manukaöl

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Manukaöl* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Manukaöl* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Taoasis	Manukaöl	1235-116650	31545	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 40 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Manukaöl*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8442 Spektren aus insgesamt 189 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 20 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Manukaöl*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Taoasis	Manukaöl	1235-116650	20

- 2024 Spektren aus insgesamt 66 Chargen von 62 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 0 Spektren von 0 *Apo-Ident*-Kunden aus 0 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Manukaöl*.
- 419 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 291 Chargen von 60 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Manukaöl* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0059 %)	40 (> 98,7500 %)	0 (< 1,2500 %)	8442 (> 99,9941 %)
Typ B	0 (< 0,0247 %)	20 (> 97,5000 %)	0 (< 2,5000 %)	2024 (> 99,9753 %)
Typ C	0 (< 0,1193 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	419 (> 99,8807 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
31545	31545	0,00	27,47

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe **Muskatellersalbeiöl**
Substanzklasse Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum 09.07.2015
Berichtsnummer 30749-2015-07-09
Ausführende Firma HiperScan GmbH
Weißeritzstraße 3
01067 Dresden
Germany

Relevante Substanznamen

Muskatellersalbeiöl; Oleum Salviae sclarea

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Muskatellersalbeiöl* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

- Hinweis zur Identifizierung von ätherischen Ölen: Einige ätherische Öle sind sowohl in der "Klasse Arzneistoffe Halbfest/Flüssig mit Zertifikat" als auch in der Klasse "Arzneistoffe Halbfest/Flüssig sonstige" enthalten.

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Muskatellersalbeiöl* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Taoasis	Muskatellersalbe...	487962-107805BAG90451	30749	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 40 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Muskatellersalbeiöl*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8442 Spektren aus insgesamt 189 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 0 Spektren von 0 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Muskatellersalbeiöl*.
- 2044 Spektren aus insgesamt 67 Chargen von 63 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 1 Spektrum von 1 *Apo-Ident*-Kunden aus 1 Charge der Substanz/Substanzgruppe *Muskatellersalbeiöl*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Taoasis	Muskatellersalbeiöl	487962-106655	1

- 418 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 290 Chargen von 59 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Muskatellersalbeiöl* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0059 %)	40 (> 98,7500 %)	0 (< 1,2500 %)	8442 (> 99,9941 %)
Typ B	0 (< 0,0245 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	2044 (> 99,9755 %)
Typ C	0 (< 0,1196 %)	1 (k.A.)	0 (k.A.)	418 (> 99,8804 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30749	30749	0,00	15,94

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe **Myrrhenöl**
Substanzklasse Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum 09.07.2015
Berichtsnummer 30748-2015-07-09
Ausführende Firma HiperScan GmbH
Weißeritzstraße 3
01067 Dresden
Germany

Relevante Substanznamen

Myrrhenöl; Oleum Myrrha

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Myrrhenöl* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Myrrhenöl* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Taoasis	Myrrhenöl	22920-105398BAG90451	30748	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 40 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Myrrhenöl*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8442 Spektren aus insgesamt 189 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 0 Spektren von 0 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Myrrhenöl*.
- 2044 Spektren aus insgesamt 67 Chargen von 63 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 0 Spektren von 0 *Apo-Ident*-Kunden aus 0 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Myrrhenöl*.
- 419 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 291 Chargen von 60 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Myrrhenöl* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0059 %)	40 (> 98,7500 %)	0 (< 1,2500 %)	8442 (> 99,9941 %)
Typ B	0 (< 0,0245 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	2044 (> 99,9755 %)
Typ C	0 (< 0,1193 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	419 (> 99,8807 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30748	30748	0,00	114,23

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe **Nelkenöl**
Substanzklasse Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum 09.07.2015
Berichtsnummer 31270-2015-07-09
Ausführende Firma HiperScan GmbH
Weißeritzstraße 3
01067 Dresden
Germany

Relevante Substanznamen

Nelkenöl; Caryophylli floris aetheroleum; Gewürznelkenöl; Oleum Caryophylli

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Nelkenöl* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

- Hinweis zur Identifizierung von ätherischen Ölen: Einige ätherische Öle sind sowohl in der "Klasse Arzneistoffe Halbfest/Flüssig mit Zertifikat" als auch in der Klasse "Arzneistoffe Halbfest/Flüssig sonstige" enthalten.

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Nelkenöl* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Caelo	Nelkenöl	12380605	31270	38	entfällt
Taoasis	Nelkenöl	2891012-116936	31557	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 78 Spektren von 2 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Nelkenöl*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet.
- 8404 Spektren aus insgesamt 188 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des *chemometrischen Modells* eingegangen sind, sind die Proben in *Anhang A* aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 22 Spektren von 2 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Nelkenöl*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Caelo	Nelkenöl	12380605	2
Taoasis	Nelkenöl	2891012-116936	20

- 2022 Spektren aus insgesamt 65 Chargen von 62 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in *Anhang B* aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 0 Spektren von 0 *Apo-Ident*-Kunden aus 0 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Nelkenöl*.
- 419 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 291 Chargen von 60 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in *Anhang C* aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Nelkenöl* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0059 %)	78 (> 99,3590 %)	0 (< 0,6410 %)	8404 (> 99,9941 %)
Typ B	0 (< 0,0247 %)	22 (> 97,7273 %)	0 (< 2,2727 %)	2022 (> 99,9753 %)
Typ C	0 (< 0,1193 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	419 (> 99,8807 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
31270	31270	0,00	661,19
31557	31557	0,00	619,11

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe **Neroliöl**
Substanzklasse Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum 09.07.2015
Berichtsnummer 31260-2015-07-09
Ausführende Firma HiperScan GmbH
Weißeritzstraße 3
01067 Dresden
Germany

Relevante Substanznamen

Neroliöl; Citrus aurantium var. amara oleum

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Neroliöl* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Neroliöl* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Taoasis	Neroliöl	91029-115714	31260	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 40 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Neroliöl*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8442 Spektren aus insgesamt 189 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 0 Spektren von 0 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Neroliöl*.
- 2044 Spektren aus insgesamt 67 Chargen von 63 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt [Typ B](#) aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 0 Spektren von 0 *Apo-Ident*-Kunden aus 0 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Neroliöl*.
- 419 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 291 Chargen von 60 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt [Typ C](#) aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Neroliöl* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0059 %)	40 (> 98,7500 %)	0 (< 1,2500 %)	8442 (> 99,9941 %)
Typ B	0 (< 0,0245 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	2044 (> 99,9755 %)
Typ C	0 (< 0,1193 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	419 (> 99,8807 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
31260	31260	0,00	53,60

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Neuroderm® Pflege Lotio / Creme
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	30722-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Neuroderm® Pflege Lotio / Creme; Neuroderm® Pflege Lotio; Neuroderm® Pflegecreme

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Neuroderm® Pflege Lotio / Creme* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]

Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]

AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Neuroderm® Pflege Lotio / Creme* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Infectopharm	Neuroderm® Pfleg...	S041214.1	30722	40	entfällt
Infectopharm	Neuroderm® Pfleg...	S041204.1	31070	40	entfällt
Infectopharm	Neuroderm® Pfleg...	S021307.1	31102	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 924 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 120 Spektren von 3 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Neuroderm® Pflege Lotio / Creme*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8362 Spektren aus insgesamt 187 Chargen von 120 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 0 Spektren von 0 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Neuroderm® Pflege Lotio / Creme*.
- 2023 Spektren aus insgesamt 67 Chargen von 63 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 1 Spektrum von 1 *Apo-Ident*-Kunden aus 1 Charge der Substanz/Substanzgruppe *Neuroderm® Pflege Lotio / Creme*.
- 418 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 290 Chargen von 59 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Neuroderm® Pflege Lotio / Creme* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0060 %)	120 (> 99,5833 %)	0 (< 0,4167 %)	8362 (> 99,9940 %)
Typ B	0 (< 0,0247 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	2023 (> 99,9753 %)
Typ C	0 (< 0,1196 %)	1 (k.A.)	0 (k.A.)	418 (> 99,8804 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30722	30722	0,00	25,20
31070	31070	0,00	26,90
31102	31102	0,00	15,66

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Neuroderm® Pflegecreme Lipo
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	30721-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Neuroderm® Pflegecreme Lipo; Neuroderm® Pflegecreme Lipo

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Neuroderm® Pflegecreme Lipo* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Neuroderm® Pflegecreme Lipo* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Infectopharm	Neuroderm® Pfleg...	S031202.1	30721	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 40 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Neuroderm® Pflegecreme Lipo*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8442 Spektren aus insgesamt 189 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 0 Spektren von 0 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Neuroderm® Pflegecreme Lipo*.
- 2044 Spektren aus insgesamt 67 Chargen von 63 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 0 Spektren von 0 *Apo-Ident*-Kunden aus 0 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Neuroderm® Pflegecreme Lipo*.
- 419 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 291 Chargen von 60 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Neuroderm® Pflegecreme Lipo* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0059 %)	40 (> 98,7500 %)	0 (< 1,2500 %)	8442 (> 99,9941 %)
Typ B	0 (< 0,0245 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	2044 (> 99,9755 %)
Typ C	0 (< 0,1193 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	419 (> 99,8807 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30721	30721	0,00	50,95

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Optiderm® Lotion
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	31266-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Optiderm® Lotion

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Optiderm® Lotion* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Optiderm® Lotion* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Almirall	Optiderm® Lotion	341431	31266	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 40 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Optiderm® Lotion*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8442 Spektren aus insgesamt 189 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 0 Spektren von 0 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Optiderm® Lotion*.
- 2044 Spektren aus insgesamt 67 Chargen von 63 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt [Typ B](#) aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 0 Spektren von 0 *Apo-Ident*-Kunden aus 0 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Optiderm® Lotion*.
- 419 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 291 Chargen von 60 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt [Typ C](#) aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Optiderm® Lotion* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0059 %)	40 (> 98,7500 %)	0 (< 1,2500 %)	8442 (> 99,9941 %)
Typ B	0 (< 0,0245 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	2044 (> 99,9755 %)
Typ C	0 (< 0,1193 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	419 (> 99,8807 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
31266	31266	0,00	18,09

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Orangen-Aroma
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	31190-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Orangen-Aroma

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Orangen-Aroma* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Orangen-Aroma* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Caelo	Orangen-Aroma	13123307	31190	40	entfällt
Caelo	Orangen-Aroma	13406108	31402	40	entfällt
Fagron	Orangen-Aroma	13H23-B41-295530	31510	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 120 Spektren von 3 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Orangen-Aroma*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8362 Spektren aus insgesamt 187 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 100 Spektren von 3 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Orangen-Aroma*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Caelo	Orangen-Aroma	11069914	40
Symrise	Orangen-Aroma	113	40
Fagron	Orangen-Aroma	13H23-B41-295530	20

- 1944 Spektren aus insgesamt 64 Chargen von 62 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 16 Spektren von 8 *Apo-Ident*-Kunden aus 12 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Orangen-Aroma*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Caelo	Orangen-Aroma	13406108	2
Caelo	Orangen-Aroma	14150706	2
Caelo	Orangen-Aroma	12149707	1
Caelo	Orangen-Aroma	12216712	2
Caelo	Orangen-Aroma	14150707	1
Caelo	Orangen-Aroma	12356502	1
Caelo	Orangen-Aroma	13123305	1
Caelo	Orangen-Aroma	13123309	2

fortgesetzt auf folgender Seite

fortgesetzt von vorheriger Seite

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Caelo	Orangen-Aroma	12356503	1
Caelo	Orangen-Aroma	13330206	1
Caelo	Orangen-Aroma	23051201	1
Caelo	Orangen-Aroma	25031304	1

- 403 Spektren von 85 *Apo-Ident*-Kunden aus 279 Chargen von 59 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Orangen-Aroma* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0060 %)	120 (> 99,5833 %)	0 (< 0,4167 %)	8362 (> 99,9940 %)
Typ B	0 (< 0,0257 %)	88 (88,0000 %)	12 (12,0000 %)	1944 (> 99,9743 %)
Typ C	0 (< 0,1241 %)	16 (k.A.)	0 (k.A.)	403 (> 99,8759 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der [Mahalanobis-Abstand](#) zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
31190	31190	0,00	290,49
31402	31402	0,00	257,69
31510	31510	0,00	501,39

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe **Orangenöl**
Substanzklasse Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum 09.07.2015
Berichtsnummer 30960-2015-07-09
Ausführende Firma HiperScan GmbH
Weißeritzstraße 3
01067 Dresden
Germany

Relevante Substanznamen

Orangenöl; Citrus sinensis oleum; Oleum Citrus sinensis

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Orangenöl* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Orangenöl* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Taoasis	Orangenöl	121109-110685BAG90451	30960	30	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 30 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Orangenöl*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet.
- 8452 Spektren aus insgesamt 189 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des *chemometrischen Modells* eingegangen sind, sind die Proben in *Anhang A* aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 0 Spektren von 0 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Orangenöl*.
- 2044 Spektren aus insgesamt 67 Chargen von 63 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in *Anhang B* aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 0 Spektren von 0 *Apo-Ident*-Kunden aus 0 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Orangenöl*.
- 419 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 291 Chargen von 60 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in *Anhang C* aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Orangenöl* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0059 %)	30 (> 98,3333 %)	0 (< 1,6667 %)	8452 (> 99,9941 %)
Typ B	0 (< 0,0245 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	2044 (> 99,9755 %)
Typ C	0 (< 0,1193 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	419 (> 99,8807 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30960	30960	0,00	32,97

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Ora-Sweet®
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	31282-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Ora-Sweet®

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Ora-Sweet®* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Ora-Sweet®* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Perrigo	Ora-Sweet®	3062252	31282	40	entfällt
Fagron	Ora-Sweet®	3062252	31306	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 80 Spektren von 2 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Ora-Sweet®*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8402 Spektren aus insgesamt 189 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 0 Spektren von 0 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Ora-Sweet®*.
- 2044 Spektren aus insgesamt 67 Chargen von 63 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt [Typ B](#) aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 0 Spektren von 0 *Apo-Ident*-Kunden aus 0 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Ora-Sweet®*.
- 419 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 291 Chargen von 60 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt [Typ C](#) aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Ora-Sweet®* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0060 %)	80 (> 99,3750 %)	0 (< 0,6250 %)	8402 (> 99,9940 %)
Typ B	0 (< 0,0245 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	2044 (> 99,9755 %)
Typ C	0 (< 0,1193 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	419 (> 99,8807 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
31282	31282	0,00	236,35
31306	31306	0,00	237,08

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Palmarosaöl Bio
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	30597-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Palmarosaöl Bio; Oleum Palmarosa Bio

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Palmarosaöl Bio* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]

Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]

AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Palmarosaöl Bio* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Taoasis	Palmarosaöl Bio	17524-105015BAG90451	30597	40	entfällt
Taoasis	Palmarosaöl Bio	17524-105015 BAG 90451	30671	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 80 Spektren von 2 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Palmarosaöl Bio*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8402 Spektren aus insgesamt 188 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 0 Spektren von 0 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Palmarosaöl Bio*.
- 2044 Spektren aus insgesamt 67 Chargen von 63 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 3 Spektren von 3 *Apo-Ident*-Kunden aus 2 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Palmarosaöl Bio*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Taoasis/Taoasis	Palmarosaöl Bio	121018-111872	2
Taoasis	Palmarosaöl Bio	121018-111094	1

- 416 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 289 Chargen von 59 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Palmarosaöl Bio* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0060 %)	80 (> 99,3750 %)	0 (< 0,6250 %)	8402 (> 99,9940 %)
Typ B	0 (< 0,0245 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	2044 (> 99,9755 %)
Typ C	0 (< 0,1202 %)	3 (k.A.)	0 (k.A.)	416 (> 99,8798 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30597	30597	0,00	100,11
30671	30671	0,00	99,24

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Panthenol-Salbe Lichtenstein
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	30727-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Panthenol-Salbe Lichtenstein

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Panthenol-Salbe Lichtenstein* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Panthenol-Salbe Lichtenstein* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Winthrop	Panthenol-Salbe ...	2290680H	30727	40	entfällt
Winthrop	Panthenol-Salbe ...	2290718H	31091	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 80 Spektren von 2 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Panthenol-Salbe Lichtenstein*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8402 Spektren aus insgesamt 188 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 0 Spektren von 0 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Panthenol-Salbe Lichtenstein*.
- 2044 Spektren aus insgesamt 67 Chargen von 63 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident-Kunden*. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 0 Spektren von 0 *Apo-Ident-Kunden* aus 0 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Panthenol-Salbe Lichtenstein*.
- 419 Spektren von 87 *Apo-Ident-Kunden* aus 291 Chargen von 60 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident-Kunden* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Panthenol-Salbe Lichtenstein* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0060 %)	80 (> 99,3750 %)	0 (< 0,6250 %)	8402 (> 99,9940 %)
Typ B	0 (< 0,0245 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	2044 (> 99,9755 %)
Typ C	0 (< 0,1193 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	419 (> 99,8807 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30727	30727	0,00	300,68
31091	31091	0,00	282,14

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Patchouli Öl
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	31547-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Patchouli Öl; Oleum Patchouli

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Patchouli Öl* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Patchouli Öl* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Taoasis	Patchouli Öl	130930-112789	31547	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 40 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Patchouli Öl*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet.
- 8442 Spektren aus insgesamt 189 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des *chemometrischen Modells* eingegangen sind, sind die Proben in *Anhang A* aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 20 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Patchouli Öl*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Taoasis	Patchouli Öl	130930-112789	20

- 2024 Spektren aus insgesamt 66 Chargen von 62 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in *Anhang B* aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 0 Spektren von 0 *Apo-Ident*-Kunden aus 0 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Patchouli Öl*.
- 419 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 291 Chargen von 60 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in *Anhang C* aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Patchouli Öl* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0059 %)	40 (> 98,7500 %)	0 (< 1,2500 %)	8442 (> 99,9941 %)
Typ B	0 (< 0,0247 %)	20 (> 97,5000 %)	0 (< 2,5000 %)	2024 (> 99,9753 %)
Typ C	0 (< 0,1193 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	419 (> 99,8807 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
31547	31547	0,00	30,27

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Petitgrainöl
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	30653-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Petitgrainöl; Oleum Citrus aurantium

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Petitgrainöl* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Petitgrainöl* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Taoasis	Petitgrainöl	zu erfassen	30653	40	entfällt
Taoasis	Petitgrainöl	29551-105402BAG90451	30752	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 80 Spektren von 2 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Petitgrainöl*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8402 Spektren aus insgesamt 189 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 0 Spektren von 0 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Petitgrainöl*.
- 2044 Spektren aus insgesamt 67 Chargen von 63 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt [Typ B](#) aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 0 Spektren von 0 *Apo-Ident*-Kunden aus 0 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Petitgrainöl*.
- 419 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 291 Chargen von 60 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt [Typ C](#) aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Petitgrainöl* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0060 %)	80 (> 99,3750 %)	0 (< 0,6250 %)	8402 (> 99,9940 %)
Typ B	0 (< 0,0245 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	2044 (> 99,9755 %)
Typ C	0 (< 0,1193 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	419 (> 99,8807 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30653	30653	0,00	26,99
30752	30752	0,00	20,55

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Pfefferminzöl
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	30930-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Pfefferminzöl; Japanisches Heilöl; Menthae piperitae aetheroleum; Oleum Menthae piperitae dopp. rectific.

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Pfefferminzöl* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

- Hinweis zur Identifizierung von ätherischen Ölen: Einige ätherische Öle sind sowohl in der "Klasse Arzneistoffe Halbfest/Flüssig mit Zertifikat" als auch in der Klasse "Arzneistoffe Halbfest/Flüssig sonstige" enthalten.

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Pfefferminzöl* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Taoasis	Pfefferminzöl	443428-83579	30930	40	entfällt
Taoasis	Pfefferminzöl	525728-109217B	30965	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 80 Spektren von 2 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Pfefferminzöl*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8402 Spektren aus insgesamt 188 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 0 Spektren von 0 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Pfefferminzöl*.
- 2044 Spektren aus insgesamt 67 Chargen von 63 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 1 Spektrum von 1 *Apo-Ident*-Kunden aus 1 Charge der Substanz/Substanzgruppe *Pfefferminzöl*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Caelo	Pfefferminzöl	12114225	1

- 418 Spektren von 86 *Apo-Ident*-Kunden aus 290 Chargen von 59 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Pfefferminzöl* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0060 %)	80 (> 99,3750 %)	0 (< 0,6250 %)	8402 (> 99,9940 %)
Typ B	0 (< 0,0245 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	2044 (> 99,9755 %)
Typ C	0 (< 0,1196 %)	1 (k.A.)	0 (k.A.)	418 (> 99,8804 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30930	30930	0,00	113,03
30965	30965	0,00	123,93

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Ravensara
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	30386-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Ravensara

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Ravensara* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Ravensara* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Taoasis	Ravensara	T170I11	30386	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 40 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Ravensara*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8442 Spektren aus insgesamt 189 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 0 Spektren von 0 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Ravensara*.
- 2044 Spektren aus insgesamt 67 Chargen von 63 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt [Typ B](#) aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 0 Spektren von 0 *Apo-Ident*-Kunden aus 0 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Ravensara*.
- 419 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 291 Chargen von 60 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt [Typ C](#) aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Ravensara* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0059 %)	40 (> 98,7500 %)	0 (< 1,2500 %)	8442 (> 99,9941 %)
Typ B	0 (< 0,0245 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	2044 (> 99,9755 %)
Typ C	0 (< 0,1193 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	419 (> 99,8807 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30386	30386	0,00	31,55

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Rizol-Rohstoff
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	30369-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Rizol-Rohstoff

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Rizol-Rohstoff* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

- Hinweis zur Identifizierung von Rizinusöl bzw. Rizol-Rohstoff: Rizinusöl und Rizol (mit Sauerstoff angereichertes Rizinusöl) sind spektral nicht (sicher) voneinander zu unterscheiden.

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]

Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]

AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Rizol-Rohstoff* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Einhorn-Apoth. ...	Rizol-Rohstoff	200812174102290W	30369	25	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 25 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Rizol-Rohstoff*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8457 Spektren aus insgesamt 189 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 0 Spektren von 0 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Rizol-Rohstoff*.
- 2044 Spektren aus insgesamt 67 Chargen von 63 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 3 Spektren von 2 *Apo-Ident*-Kunden aus 2 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Rizol-Rohstoff*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Arkeo Immun UG	Rizol-Rohstoff	1192HJ	2
Steidl/Phytolab	Rizol-Rohstoff	200812174102290	1

- 416 Spektren von 86 *Apo-Ident*-Kunden aus 289 Chargen von 59 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Rizol-Rohstoff* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0059 %)	25 (> 98,0000 %)	0 (< 2,0000 %)	8457 (> 99,9941 %)
Typ B	0 (< 0,0245 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	2044 (> 99,9755 %)
Typ C	0 (< 0,1202 %)	0 (k.A.)	3 (k.A.)	416 (> 99,8798 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30369	30369	0,00	66,45

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Rosen-Geranie-Öl Bio
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	30536-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Rosen-Geranie-Öl Bio; Pelargonium graveolens oleum

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Rosen-Geranie-Öl Bio* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der **chemometrischen Modelle** gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Rosen-Geranie-Öl Bio* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Taoasis	Rosen-Geranie-Öl...	zu erfassen	30536	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 40 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Rosen-Geranien-Öl Bio*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8442 Spektren aus insgesamt 190 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 0 Spektren von 0 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Rosen-Geranien-Öl Bio*.
- 2044 Spektren aus insgesamt 67 Chargen von 63 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 4 Spektren von 4 *Apo-Ident*-Kunden aus 4 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Rosen-Geranien-Öl Bio*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Bombastus	Rosen-Geranien-Öl Bio	22625-106677	1
Taoasis/Taoasis	Rosen-Geranien-Öl Bio	22625-104463	1
Taoasis	Rosen-Geranien-Öl Bio	130111-110467	1
Taoasis	Rosen-Geranien-Öl Bio	130111-112615	1

- 415 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 287 Chargen von 59 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Rosen-Geranien-Öl Bio* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0059 %)	40 (> 98,7500 %)	0 (< 1,2500 %)	8442 (> 99,9941 %)
Typ B	0 (< 0,0245 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	2044 (> 99,9755 %)
Typ C	0 (< 0,1205 %)	4 (k.A.)	0 (k.A.)	415 (> 99,8795 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30536	30536	0,00	45,33

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe **Rosenholzöl**
Substanzklasse Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum 09.07.2015
Berichtsnummer 31556-2015-07-09
Ausführende Firma HiperScan GmbH
Weißeritzstraße 3
01067 Dresden
Germany

Relevante Substanznamen

Rosenholzöl; Oleum Aniba roseodora

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Rosenholzöl* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Rosenholzöl* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Taoasis	Rosenholzöl	11572-116545	31556	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 40 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Rosenholzöl*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8442 Spektren aus insgesamt 189 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 20 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Rosenholzöl*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Taoasis	Rosenholzöl	11572-116545	20

- 2024 Spektren aus insgesamt 66 Chargen von 62 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 0 Spektren von 0 *Apo-Ident*-Kunden aus 0 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Rosenholzöl*.
- 419 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 291 Chargen von 60 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Rosenholzöl* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0059 %)	40 (> 98,7500 %)	0 (< 1,2500 %)	8442 (> 99,9941 %)
Typ B	0 (< 0,0247 %)	20 (> 97,5000 %)	0 (< 2,5000 %)	2024 (> 99,9753 %)
Typ C	0 (< 0,1193 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	419 (> 99,8807 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
31556	31556	0,00	60,03

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe **Rosmarinöl**
Substanzklasse Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum 09.07.2015
Berichtsnummer 31551-2015-07-09
Ausführende Firma HiperScan GmbH
Weißeritzstraße 3
01067 Dresden
Germany

Relevante Substanznamen

Rosmarinöl; Oleum Rosmarini; Rosmarini aetheroleum

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Rosmarinöl* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

- Hinweis zur Identifizierung von ätherischen Ölen: Einige ätherische Öle sind sowohl in der "Klasse Arzneistoffe Halbfest/Flüssig mit Zertifikat" als auch in der Klasse "Arzneistoffe Halbfest/Flüssig sonstige" enthalten.

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Rosmarinöl* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Taoasis	Rosmarinöl	3231031-117639	31551	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 40 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Rosmarinöl*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8442 Spektren aus insgesamt 189 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 20 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Rosmarinöl*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Taoasis	Rosmarinöl	3231031-117639	20

- 2024 Spektren aus insgesamt 66 Chargen von 62 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 0 Spektren von 0 *Apo-Ident*-Kunden aus 0 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Rosmarinöl*.
- 419 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 291 Chargen von 60 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Rosmarinöl* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0059 %)	40 (> 98,7500 %)	0 (< 1,2500 %)	8442 (> 99,9941 %)
Typ B	0 (< 0,0247 %)	20 (> 97,5000 %)	0 (< 2,5000 %)	2024 (> 99,9753 %)
Typ C	0 (< 0,1193 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	419 (> 99,8807 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
31551	31551	0,00	22,94

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe **Salbe Asche Basis / Neribas®**
Substanzklasse **Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)**
Berichtsdatum **09.07.2015**
Berichtsnummer **30774-2015-07-09**
Ausführende Firma **HiperScan GmbH**
Weißeritzstraße 3
01067 Dresden
Germany

Relevante Substanznamen

Salbe Asche Basis / Neribas®; Asche Basis® Salbe; Neribas® Salbe

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Salbe Asche Basis / Neribas®* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Salbe Asche Basis / Neribas®* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Chiesi	Asche Basis® Salbe	21038A	30774	40	entfällt
Chiesi	Asche Basis® Salbe	21038A	30833	40	entfällt
Bayer	Neribas® Salbe	21053B	30969	40	entfällt
Bayer	Neribas® Salbe	21053B	30994	40	entfällt
Chiesi	Asche Basis® Salbe	21038A	31080	40	entfällt
Jenapharm	Neribas® Salbe	31064C	31093	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 905 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 240 Spektren von 6 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Salbe Asche Basis / Neribas®*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8242 Spektren aus insgesamt 187 Chargen von 120 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 0 Spektren von 0 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Salbe Asche Basis / Neribas®*.
- 2004 Spektren aus insgesamt 67 Chargen von 63 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 10 Spektren von 5 *Apo-Ident*-Kunden aus 6 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Salbe Asche Basis / Neribas®*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Chiesi Gmbh	Asche Basis® Salbe	21039A	1
Chiesi/Phoenix	Asche Basis® Salbe	23042A	1
Anzag/Ichtyol-Gesellsch. ...	Asche Basis® Salbe	23043A	1
Chiesi/AHD	Asche Basis® Salbe	31045A	3
Phönix	Asche Basis® Salbe	31047A	3
Chiesi	Asche Basis® Salbe	33049A	1

- 409 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 285 Chargen von 59 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Salbe Asche Basis* / *Neribas®* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0061 %)	240 (> 99,7917 %)	0 (< 0,2083 %)	8242 (> 99,9939 %)
Typ B	0 (< 0,0250 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	2004 (> 99,9750 %)
Typ C	0 (< 0,1222 %)	10 (k.A.)	0 (k.A.)	409 (> 99,8778 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30774	30774	0,00	34,92
30833	30833	0,00	36,49
30969	30969	0,00	45,85
30994	30994	0,00	45,93
31080	31080	0,00	35,00
31093	31093	0,00	40,89

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe **Salbeiöl**
Substanzklasse Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum 09.07.2015
Berichtsnummer 31139-2015-07-09
Ausführende Firma HiperScan GmbH
Weißeritzstraße 3
01067 Dresden
Germany

Relevante Substanznamen

Salbeiöl; Oleum Salviae; Salvia officinalis oleum

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Salbeiöl* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

- Hinweis zur Identifizierung von ätherischen Ölen: Einige ätherische Öle sind sowohl in der "Klasse Arzneistoffe Halbfest/Flüssig mit Zertifikat" als auch in der Klasse "Arzneistoffe Halbfest/Flüssig sonstige" enthalten.

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Salbeiöl* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Taoasis	Salbeiöl	526975-112642 BAG 90451	31139	40	entfällt
Taoasis	Salbeiöl	34052-114939	31257	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 80 Spektren von 2 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Salbeiöl*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8402 Spektren aus insgesamt 188 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 40 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Salbeiöl*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Taoasis	Salbeiöl	24858-79297	40

- 2004 Spektren aus insgesamt 66 Chargen von 62 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 0 Spektren von 0 *Apo-Ident*-Kunden aus 0 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Salbeiöl*.
- 419 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 291 Chargen von 60 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Salbeiöl* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0060 %)	80 (> 99,3750 %)	0 (< 0,6250 %)	8402 (> 99,9940 %)
Typ B	0 (< 0,0250 %)	0 (< 1,2500 %)	40 (> 98,7500 %)	2004 (> 99,9750 %)
Typ C	0 (< 0,1193 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	419 (> 99,8807 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
31139	31139	0,00	39,99
31257	31257	0,00	23,81

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe **Salicyl-Vaselin 10%**
Substanzklasse Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum 09.07.2015
Berichtsnummer 31521-2015-07-09
Ausführende Firma HiperScan GmbH
Weißeritzstraße 3
01067 Dresden
Germany

Relevante Substanznamen

Salicyl-Vaselin 10%; Acidum salicylicum cum vaselino albo 10 per centum

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Salicyl-Vaselin 10%* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Salicyl-Vaselin 10%* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Bombastus	Salicyl-Vaselin ...	287820	31521	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 40 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Salicyl-Vaseline 10%*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8442 Spektren aus insgesamt 189 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 20 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Salicyl-Vaseline 10%*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Bombastus	Salicyl-Vaseline 10%	287820	20

- 2024 Spektren aus insgesamt 66 Chargen von 62 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 0 Spektren von 0 *Apo-Ident*-Kunden aus 0 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Salicyl-Vaseline 10%*.
- 419 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 291 Chargen von 60 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Salicyl-Vaseline 10%* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0059 %)	40 (> 98,7500 %)	0 (< 1,2500 %)	8442 (> 99,9941 %)
Typ B	0 (< 0,0247 %)	20 (> 97,5000 %)	0 (< 2,5000 %)	2024 (> 99,9753 %)
Typ C	0 (< 0,1193 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	419 (> 99,8807 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
31521	31521	0,00	105,02

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe **Siam-Benzoe**
Substanzklasse Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum 09.07.2015
Berichtsnummer 31490-2015-07-09
Ausführende Firma HiperScan GmbH
Weißeritzstraße 3
01067 Dresden
Germany

Relevante Substanznamen

Siam-Benzoe; Benzoe Siam

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Siam-Benzoe* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Siam-Benzoe* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Primavera	Siam-Benzoe	3602151	31490	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 40 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Siam-Benzoe*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8442 Spektren aus insgesamt 189 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 20 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Siam-Benzoe*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Primavera	Siam-Benzoe	3602151	20

- 2024 Spektren aus insgesamt 66 Chargen von 62 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt [Typ B](#) aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 0 Spektren von 0 *Apo-Ident*-Kunden aus 0 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Siam-Benzoe*.
- 419 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 291 Chargen von 60 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt [Typ C](#) aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Siam-Benzoe* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0059 %)	40 (> 98,7500 %)	0 (< 1,2500 %)	8442 (> 99,9941 %)
Typ B	0 (< 0,0247 %)	20 (> 97,5000 %)	0 (< 2,5000 %)	2024 (> 99,9753 %)
Typ C	0 (< 0,1193 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	419 (> 99,8807 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
31490	31490	0,00	32,08

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Solutio Cordes / Thrombocid Gel
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	30773-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Solutio Cordes / Thrombocid Gel; Solutio Cordes®; Thrombocid® Gel

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Solutio Cordes / Thrombocid Gel* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Solutio Cordes / Thrombocid Gel* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Bene	Thrombocid® Gel	401B101	30773	40	entfällt
ICHTHYOL	Solutio Cordes®	12B006	30996	40	entfällt
ICHTHYOL	Solutio Cordes®	13B001	31076	40	entfällt
Bene	Thrombocid® Gel	401B101	31099	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 160 Spektren von 4 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Solutio Cordes / Thrombocid Gel*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8322 Spektren aus insgesamt 187 Chargen von 120 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 40 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Solutio Cordes / Thrombocid Gel*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
ICHTHYOL	Solutio Cordes®	09B008	40

- 2004 Spektren aus insgesamt 66 Chargen von 62 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 21 Spektren von 6 *Apo-Ident*-Kunden aus 5 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Solutio Cordes / Thrombocid Gel*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
ICHTHYOL-GESELLSCHAFT	Solutio Cordes®	13B001	1
Gehe/Ichthyol	Solutio Cordes®	14b006	1
Ichthyol/Phönix	Solutio Cordes®	12B0005	1
Ichthyol/Phönix	Solutio Cordes®	12B005	17
Ichthyol	Solutio Cordes®	13B002	1

- 398 Spektren von 86 *Apo-Ident*-Kunden aus 286 Chargen von 59 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Solutio Cordes / Thrombocid Gel* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0060 %)	160 (> 99,6875 %)	0 (< 0,3125 %)	8322 (> 99,9940 %)
Typ B	0 (< 0,0250 %)	10 (25,0000 %)	30 (75,0000 %)	2004 (> 99,9750 %)
Typ C	0 (< 0,1256 %)	4 (19,0476 %)	17 (80,9524 %)	398 (> 99,8744 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der [Mahalanobis-Abstand](#) zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30773	30773	0,00	45,50
30996	30996	0,00	55,17
31076	31076	0,00	51,54
31099	31099	0,00	46,15

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Spanischhopfenöl
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	31554-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Spanischhopfenöl; Oleum Origani cretici; Oreganoöl; Organumöl

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Spanischhopfenöl* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

- Hinweis zur Identifizierung von ätherischen Ölen: Einige ätherische Öle sind sowohl in der "Klasse Arzneistoffe Halbfest/Flüssig mit Zertifikat" als auch in der Klasse "Arzneistoffe Halbfest/Flüssig sonstige" enthalten.

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Spanischhopfenöl* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Taoasis	Spanischhopfenöl	0131022-117999	31554	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 40 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Spanischhopfenöl*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8442 Spektren aus insgesamt 189 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 20 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Spanischhopfenöl*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Taoasis	Spanischhopfenöl	0131022-117999	20

- 2024 Spektren aus insgesamt 66 Chargen von 62 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 0 Spektren von 0 *Apo-Ident*-Kunden aus 0 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Spanischhopfenöl*.
- 419 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 291 Chargen von 60 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Spanischhopfenöl* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0059 %)	40 (> 98,7500 %)	0 (< 1,2500 %)	8442 (> 99,9941 %)
Typ B	0 (< 0,0247 %)	20 (> 97,5000 %)	0 (< 2,5000 %)	2024 (> 99,9753 %)
Typ C	0 (< 0,1193 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	419 (> 99,8807 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
31554	31554	0,00	108,56

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe **Spearmintöl**
Substanzklasse Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum 09.07.2015
Berichtsnummer 30453-2015-07-09
Ausführende Firma HiperScan GmbH
Weißeritzstraße 3
01067 Dresden
Germany

Relevante Substanznamen

Spearmintöl; Mentha spicata oleum

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Spearmintöl* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Spearmintöl* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Taoasis	Spearmintöl	27537-96244	30453	40	entfällt
Taoasis	Spearmintöl	33894-111575 BAG 90451	31135	30	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 70 Spektren von 2 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Spearmintöl*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8412 Spektren aus insgesamt 188 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 0 Spektren von 0 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Spearmintöl*.
- 2044 Spektren aus insgesamt 67 Chargen von 63 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 1 Spektrum von 1 *Apo-Ident*-Kunden aus 1 Charge der Substanz/Substanzgruppe *Spearmintöl*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Taoasis	Spearmintöl	27537-96244	1

- 418 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 290 Chargen von 59 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Spearmintöl* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0059 %)	70 (> 99,2857 %)	0 (< 0,7143 %)	8412 (> 99,9941 %)
Typ B	0 (< 0,0245 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	2044 (> 99,9755 %)
Typ C	0 (< 0,1196 %)	1 (k.A.)	0 (k.A.)	418 (> 99,8804 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30453	30453	0,00	48,98
31135	31135	0,00	48,24

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe **Stomahésive® Adhäsivpaste**
Substanzklasse **Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)**
Berichtsdatum 09.07.2015
Berichtsnummer 30974-2015-07-09
Ausführende Firma HiperScan GmbH
Weißeritzstraße 3
01067 Dresden
Germany

Relevante Substanznamen

Stomahésive® Adhäsivpaste

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Stomahésive® Adhäsivpaste* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Stomahésive® Adhäsivpaste* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
ConvaTec Inc.	Stomahésive® Adh. ...	2D117	30974	50	entfällt
ConvaTec Inc.	Stomahésive® Adh. ...	2M084	31087	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 90 Spektren von 2 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Stomahésive® Adhäsivpaste*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8392 Spektren aus insgesamt 188 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 10 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Stomahésive® Adhäsivpaste*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
ConvaTec Inc.	Stomahésive® Adhäsivpaste	2D117	10

- 2034 Spektren aus insgesamt 66 Chargen von 62 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 0 Spektren von 0 *Apo-Ident*-Kunden aus 0 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Stomahésive® Adhäsivpaste*.
- 419 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 291 Chargen von 60 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Stomahésive® Adhäsivpaste* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0060 %)	90 (> 99,4444 %)	0 (< 0,5556 %)	8392 (> 99,9940 %)
Typ B	0 (< 0,0246 %)	10 (k.A.)	0 (k.A.)	2034 (> 99,9754 %)
Typ C	0 (< 0,1193 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	419 (> 99,8807 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30974	30974	0,00	102,10
31087	31087	0,00	96,21

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Teebaumöl
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	30959-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Teebaumöl; Melaleuca alternifolia oleum; Oleum Melaleuca alternifolia

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Teebaumöl* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

- Hinweis zur Identifizierung von ätherischen Ölen: Einige ätherische Öle sind sowohl in der "Klasse Arzneistoffe Halbfest/Flüssig mit Zertifikat" als auch in der Klasse "Arzneistoffe Halbfest/Flüssig sonstige" enthalten.

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]

Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]

AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Teebaumöl* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Taoasis	Teebaumöl	533902-109942BAG91303	30959	40	entfällt
Taoasis	Teebaumöl	34828-113642 BAG 91303	31134	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 80 Spektren von 2 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Teebaumöl*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8402 Spektren aus insgesamt 188 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 0 Spektren von 0 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Teebaumöl*.
- 2044 Spektren aus insgesamt 67 Chargen von 63 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 0 Spektren von 0 *Apo-Ident*-Kunden aus 0 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Teebaumöl*.
- 419 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 291 Chargen von 60 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Teebaumöl* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0060 %)	80 (> 99,3750 %)	0 (< 0,6250 %)	8402 (> 99,9940 %)
Typ B	0 (< 0,0245 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	2044 (> 99,9755 %)
Typ C	0 (< 0,1193 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	419 (> 99,8807 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30959	30959	0,00	96,01
31134	31134	0,00	85,30

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe **Thymianöl, rot**
Substanzklasse Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum 09.07.2015
Berichtsnummer 30929-2015-07-09
Ausführende Firma HiperScan GmbH
Weißeritzstraße 3
01067 Dresden
Germany

Relevante Substanznamen

Thymianöl, rot; Thymus vulgaris Thymol oleum

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Thymianöl, rot* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

- Hinweis zur Identifizierung von ätherischen Ölen: Einige ätherische Öle sind sowohl in der "Klasse Arzneistoffe Halbfest/Flüssig mit Zertifikat" als auch in der Klasse "Arzneistoffe Halbfest/Flüssig sonstige" enthalten.

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Thymianöl, rot* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Taoasis	Thymianöl, rot	31911-109378	30929	40	entfällt
Taoasis	Thymianöl, rot	9434-115427	31259	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 80 Spektren von 2 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Thymianöl, rot*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8402 Spektren aus insgesamt 188 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 0 Spektren von 0 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Thymianöl, rot*.
- 2044 Spektren aus insgesamt 67 Chargen von 63 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 1 Spektrum von 1 *Apo-Ident*-Kunden aus 1 Charge der Substanz/Substanzgruppe *Thymianöl, rot*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Taoasis	Thymianöl, rot	33092-111620	1

- 418 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 290 Chargen von 59 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Thymianöl, rot* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0060 %)	80 (> 99,3750 %)	0 (< 0,6250 %)	8402 (> 99,9940 %)
Typ B	0 (< 0,0245 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	2044 (> 99,9755 %)
Typ C	0 (< 0,1196 %)	1 (k.A.)	0 (k.A.)	418 (> 99,8804 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30929	30929	0,00	96,64
31259	31259	0,00	71,21

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Tolu Res. 50% Öl
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	30651-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Tolu Res. 50% Öl

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Tolu Res. 50% Öl* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Tolu Res. 50% Öl* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Taoasis	Tolu Res. 50% Öl	zu erfassen	30651	40	entfällt
Taoasis	Tolu Res. 50% Öl	493887-105383BAC90451	30767	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 80 Spektren von 2 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Tolu Res. 50% Öl*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8402 Spektren aus insgesamt 189 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 0 Spektren von 0 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Tolu Res. 50% Öl*.
- 2044 Spektren aus insgesamt 67 Chargen von 63 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 1 Spektrum von 1 *Apo-Ident*-Kunden aus 1 Charge der Substanz/Substanzgruppe *Tolu Res. 50% Öl*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Taoasis	Tolu Res. 50% Öl	493887-105384	1

- 418 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 290 Chargen von 59 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Tolu Res. 50% Öl* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0060 %)	80 (> 99,3750 %)	0 (< 0,6250 %)	8402 (> 99,9940 %)
Typ B	0 (< 0,0245 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	2044 (> 99,9755 %)
Typ C	0 (< 0,1196 %)	1 (k.A.)	0 (k.A.)	418 (> 99,8804 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30651	30651	0,00	38,37
30767	30767	0,00	36,63

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Vetiver Bourbon Öl
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	31546-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Vetiver Bourbon Öl; Vetiveria zizanioides oil

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Vetiver Bourbon Öl* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Vetiver Bourbon Öl* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Taoasis	Vetiver Bourbon Öl	7141-116418	31546	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 40 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Vetiver Bourbon Öl*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8442 Spektren aus insgesamt 189 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 20 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Vetiver Bourbon Öl*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Taoasis	Vetiver Bourbon Öl	7141-116418	20

- 2024 Spektren aus insgesamt 66 Chargen von 62 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 0 Spektren von 0 *Apo-Ident*-Kunden aus 0 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Vetiver Bourbon Öl*.
- 419 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 291 Chargen von 60 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Vetiver Bourbon Öl* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0059 %)	40 (> 98,7500 %)	0 (< 1,2500 %)	8442 (> 99,9941 %)
Typ B	0 (< 0,0247 %)	20 (> 97,5000 %)	0 (< 2,5000 %)	2024 (> 99,9753 %)
Typ C	0 (< 0,1193 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	419 (> 99,8807 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
31546	31546	0,00	39,10

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Wacholderbeeröl
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	31559-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Wacholderbeeröl; Juniperi aetheroleum; Oleum Juniperi e Baccarae; Wacholderöl

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Wacholderbeeröl* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

- Hinweis zur Identifizierung von ätherischen Ölen: Einige ätherische Öle sind sowohl in der "Klasse Arzneistoffe Halbfest/Flüssig mit Zertifikat" als auch in der Klasse "Arzneistoffe Halbfest/Flüssig sonstige" enthalten.

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Wacholderbeeröl* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Taoasis	Wacholderbeeröl	4155-116757	31559	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 40 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Wacholderbeeröl*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet.
- 8442 Spektren aus insgesamt 189 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des *chemometrischen Modells* eingegangen sind, sind die Proben in *Anhang A* aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 20 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Wacholderbeeröl*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Taoasis	Wacholderbeeröl	4155-116757	20

- 2024 Spektren aus insgesamt 66 Chargen von 62 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in *Anhang B* aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 0 Spektren von 0 *Apo-Ident*-Kunden aus 0 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Wacholderbeeröl*.
- 419 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 291 Chargen von 60 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in *Anhang C* aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Wacholderbeeröl* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0059 %)	40 (> 98,7500 %)	0 (< 1,2500 %)	8442 (> 99,9941 %)
Typ B	0 (< 0,0247 %)	20 (> 97,5000 %)	0 (< 2,5000 %)	2024 (> 99,9753 %)
Typ C	0 (< 0,1193 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	419 (> 99,8807 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
31559	31559	0,00	21,40

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Wachssalbe (stabilisiert)
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	31111-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Wachssalbe (stabilisiert); Unguentum cereum

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Wachssalbe (stabilisiert)* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Wachssalbe (stabilisiert)* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Caelo	Wachssalbe (stab. ...)	13072102	31111	40	entfällt
Caelo	Wachssalbe (stab. ...)	13307701	31167	40	entfällt
Caelo	Wachssalbe (stab. ...)	14073701	31444	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 120 Spektren von 3 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Wachssalbe (stabilisiert)*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8362 Spektren aus insgesamt 187 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 81 Spektren von 3 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Wachssalbe (stabilisiert)*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Caelo	Wachssalbe (stabilisiert)	09361101	40
Caelo	Wachssalbe (stabilisiert)	12352501	40
Caelo	Wachssalbe (stabilisiert)	zu erfassen	1

- 1963 Spektren aus insgesamt 65 Chargen von 62 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 46 Spektren von 30 *Apo-Ident*-Kunden aus 22 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Wachssalbe (stabilisiert)*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Caelo	Wachssalbe (stabilisiert)	12033701	4
Caelo	Wachssalbe (stabilisiert)	12352501	1
Caelo	Wachssalbe (stabilisiert)	1218702	2
Caelo	Wachssalbe (stabilisiert)	13307802	3
Caelo	Wachssalbe (stabilisiert)	1021303	1
Caelo	Wachssalbe (stabilisiert)	11321302	1
Caelo	Wachssalbe (stabilisiert)	11355202	1
Caelo	Wachssalbe (stabilisiert)	7071204	1

fortgesetzt auf folgender Seite

fortgesetzt von vorheriger Seite

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Caelo	Wachssalbe (stabilisiert)	12033602	2
Anzag 07.12.12	Wachssalbe (stabilisiert)	12128702	1
Caelo	Wachssalbe (stabilisiert)	12378701	2
Caelo	Wachssalbe (stabilisiert)	12209402	1
Caelo	Wachssalbe (stabilisiert)	13072102	5
Caelo	Wachssalbe (stabilisiert)	13159302	4
Caelo	Wachssalbe (stabilisiert)	20051012-1	1
Caelo	Wachssalbe (stabilisiert)	20121305	1
Caelo	Wachssalbe (stabilisiert)	13307701	7
Caelo	Wachssalbe (stabilisiert)	14073701	4
Caelo	Wachssalbe (stabilisiert)	14073801	1
Caelo	Wachssalbe (stabilisiert)	14235901	1
Caelo	Wachssalbe (stabilisiert)	1114E3212	1
Caelo	Wachssalbe (stabilisiert)	2113Q-03212	1

- 373 Spektren von 78 *Apo-Ident*-Kunden aus 269 Chargen von 59 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in *Anhang C* aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Wachssalbe (stabilisiert)* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0060 %)	120 (> 99,5833 %)	0 (< 0,4167 %)	8362 (> 99,9940 %)
Typ B	0 (< 0,0255 %)	80 (98,7654 %)	1 (1,2346 %)	1963 (> 99,9745 %)
Typ C	0 (< 0,1340 %)	45 (97,8261 %)	1 (2,1739 %)	373 (> 99,8660 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenzproben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
31111	31111	0,00	46,22
31167	31167	0,00	51,11
31444	31444	0,00	49,42

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Warzensalbe InfectoPharm® (NRF 11.31)
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	30730-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Warzensalbe InfectoPharm® (NRF 11.31)

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Warzensalbe InfectoPharm® (NRF 11.31)* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]

Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]

AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Warzensalbe InfectoPharm® (NRF 11.31)* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Infectopharm	Warzensalbe Infe. ...	S031201.1	30730	40	entfällt
Infectopharm	Warzensalbe Infe. ...	S031201.1	30905	40	entfällt
Infectopharm	Warzensalbe Infe. ...	S121103.1	30906	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 120 Spektren von 3 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Warzensalbe InfectoPharm®* (NRF 11.31). Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8362 Spektren aus insgesamt 188 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 2 Spektren von 2 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Warzensalbe InfectoPharm®* (NRF 11.31).

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
123	Warzensalbe InfectoPharm® (N...	1234567	1
Caelo	Warzensalbe InfectoPharm® (N...	1234	1

- 2042 Spektren aus insgesamt 66 Chargen von 62 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 8 Spektren von 7 *Apo-Ident*-Kunden aus 6 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Warzensalbe InfectoPharm®* (NRF 11.31).

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Infectopharm	Warzensalbe InfectoPharm® (N...	3013I-07003	1
Infectopharm	Warzensalbe InfectoPharm® (N...	S111202	1

- 411 Spektren von 86 *Apo-Ident*-Kunden aus 285 Chargen von 59 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen

dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Warzensalbe InfectoPharm® (NRF 11.31)* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0060 %)	120 (> 99,5833 %)	0 (< 0,4167 %)	8362 (> 99,9940 %)
Typ B	0 (< 0,0245 %)	0 (k.A.)	2 (k.A.)	2042 (> 99,9755 %)
Typ C	0 (< 0,1217 %)	8 (k.A.)	0 (k.A.)	411 (> 99,8783 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der [Mahalanobis-Abstand](#) zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenzproben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30730	30730	0,00	393,65
30905	30905	0,00	392,82
30906	30906	0,00	390,15

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Wasserhaltige Salben
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	30555-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Wasserhaltige Salben; Dermatest Basis Salbe; Excipial® Lipocreme; Fabitop® Basis Creme

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Wasserhaltige Salben* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]

Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]

AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Wasserhaltige Salben* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Fontapharm	Fabitop® Basis C...	GRWW1	30555	40	entfällt
Spirig Pharma	Excipial® Lipocr...	I011	30726	40	entfällt
P&M Cosmetics	Dermatest Basis ...	120911	30737	40	entfällt
Fontapharm	Fabitop® Basis C...	GRWW1	30835	40	entfällt

fortgesetzt auf folgender Seite

fortgesetzt von vorheriger Seite

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
P&M Cosmetics	Dermatest Basis ...	070615	31053	20	entfällt
Fontapharm	Fabitol® Basis C...	6RWW2	31082	40	entfällt
Spirig Pharma	Excipial® Lipocr...	N017	31088	40	entfällt
Spirig Pharma	Excipial® Lipocr...	N017	31276	40	entfällt
P&M Cosmetics	Dermatest Basis ...	231115	31288	40	entfällt
Spirig Pharma	Excipial® Lipocr...	R011	31520	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 380 Spektren von 10 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Wasserhaltige Salben*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8102 Spektren aus insgesamt 182 Chargen von 119 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 80 Spektren von 2 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Wasserhaltige Salben*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Spirig Pharma	Excipial® Lipocrema	R011	20
P&M Cosmetics	Dermatest Basis Salbe	251115	60

- 1964 Spektren aus insgesamt 65 Chargen von 61 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 12 Spektren von 7 *Apo-Ident*-Kunden aus 11 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Wasserhaltige Salben*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
P&M Cosmetics/Anzag	Dermatest Basis Salbe	122631	1

- 407 Spektren von 86 *Apo-Ident*-Kunden aus 280 Chargen von 57 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Wasserhaltige Salben* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0062 %)	380 (> 99,8684 %)	0 (< 0,1316 %)	8102 (> 99,9938 %)
Typ B	0 (< 0,0255 %)	20 (25,0000 %)	60 (75,0000 %)	1964 (> 99,9745 %)
Typ C	0 (< 0,1229 %)	8 (k.A.)	4 (k.A.)	407 (> 99,8771 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der [Mahalanobis-Abstand](#) zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenzproben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30555	30555	0,00	17,49
30726	30726	0,00	48,17
30737	30737	0,00	42,07
30835	30835	0,00	14,50
31053	31053	0,00	32,17
31082	31082	0,00	16,36
31088	31088	0,00	28,43
31276	31276	0,00	32,29
31288	31288	0,00	44,28
31520	31520	0,00	27,81

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Weihrauchöl
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	30843-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Weihrauchöl; Oleum Boswellia serrata; Oleum Olibanum

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Weihrauchöl* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Weihrauchöl* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Apotheker S.B. ...	Weihrauchöl	3.26550	30843	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 40 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Weihrauchöl*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8442 Spektren aus insgesamt 189 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 0 Spektren von 0 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Weihrauchöl*.
- 2044 Spektren aus insgesamt 67 Chargen von 63 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 1 Spektrum von 1 *Apo-Ident*-Kunden aus 1 Charge der Substanz/Substanzgruppe *Weihrauchöl*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Taoasis	Weihrauchöl	549702-112299	1

- 418 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 290 Chargen von 59 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Weihrauchöl* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0059 %)	40 (> 98,7500 %)	0 (< 1,2500 %)	8442 (> 99,9941 %)
Typ B	0 (< 0,0245 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	2044 (> 99,9755 %)
Typ C	0 (< 0,1196 %)	0 (k.A.)	1 (k.A.)	418 (> 99,8804 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30843	30843	0,00	97,99

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Weißtannenöl
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	31032-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Weißtannenöl; Oleum Abies alba; Weisstanne Öl

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Weißtannenöl* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]

Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]

AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Weißtannenöl* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Taoasis	Weißtannenöl	120830-111781	31032	40	entfällt
Taoasis	Weißtannenöl	211-114751	31255	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 80 Spektren von 2 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Weißtannenöl*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet.
- 8402 Spektren aus insgesamt 188 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des *chemometrischen Modells* eingegangen sind, sind die Proben in *Anhang A* aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 0 Spektren von 0 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Weißtannenöl*.
- 2044 Spektren aus insgesamt 67 Chargen von 63 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in *Anhang B* aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 0 Spektren von 0 *Apo-Ident*-Kunden aus 0 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Weißtannenöl*.
- 419 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 291 Chargen von 60 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in *Anhang C* aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Weißtannenöl* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0060 %)	80 (> 99,3750 %)	0 (< 0,6250 %)	8402 (> 99,9940 %)
Typ B	0 (< 0,0245 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	2044 (> 99,9755 %)
Typ C	0 (< 0,1193 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	419 (> 99,8807 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
31032	31032	0,00	75,78
31255	31255	0,00	63,88

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe **Wintergreenöl**
Substanzklasse Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum 09.07.2015
Berichtsnummer 30455-2015-07-09
Ausführende Firma HiperScan GmbH
Weißeritzstraße 3
01067 Dresden
Germany

Relevante Substanznamen

Wintergreenöl; Gaultheria procumbens oleum

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Wintergreenöl* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Wintergreenöl* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Taoasis	Wintergreenöl	423129090971	30455	40	entfällt
Taoasis	Wintergreenöl	5411006-117696	31543	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 80 Spektren von 2 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Wintergreenöl*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8402 Spektren aus insgesamt 188 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 16 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Wintergreenöl*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Taoasis	Wintergreenöl	5411006-117696	16

- 2028 Spektren aus insgesamt 66 Chargen von 62 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 6 Spektren von 5 *Apo-Ident*-Kunden aus 6 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Wintergreenöl*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Taoasis	Wintergreenöl	423121-90971	1
Caelo	Wintergreenöl	10318703	1
Caelo	Wintergreenöl	13099202	1
Caelo	Wintergreenöl	10318714	1
Caelo	Wintergreenöl	13099205	1
Taoasis	Wintergreenöl	97540	1

- 413 Spektren von 86 *Apo-Ident*-Kunden aus 285 Chargen von 59 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen

dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Wintergreenöl* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0060 %)	80 (> 99,3750 %)	0 (< 0,6250 %)	8402 (> 99,9940 %)
Typ B	0 (< 0,0247 %)	16 (k.A.)	0 (k.A.)	2028 (> 99,9753 %)
Typ C	0 (< 0,1211 %)	5 (k.A.)	1 (k.A.)	413 (> 99,8789 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der [Mahalanobis-Abstand](#) zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30455	30455	0,00	400,52
31543	31543	0,00	462,21

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Wofacutan Waschlotion
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	30972-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Wofacutan Waschlotion

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Wofacutan Waschlotion* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]

Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]

AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Wofacutan Waschlotion* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Kesla Pharma	Wofacutan Waschl...	0974.12	30972	40	entfällt
Kesla Pharma	Wofacutan Waschl...	0389.13	31065	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 80 Spektren von 2 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Wofacutan Waschlotion*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8402 Spektren aus insgesamt 188 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 0 Spektren von 0 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Wofacutan Waschlotion*.
- 2044 Spektren aus insgesamt 67 Chargen von 63 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt [Typ B](#) aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident-Kunden*. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 0 Spektren von 0 *Apo-Ident-Kunden* aus 0 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Wofacutan Waschlotion*.
- 419 Spektren von 87 *Apo-Ident-Kunden* aus 291 Chargen von 60 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident-Kunden* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt [Typ C](#) aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Wofacutan Waschlotion* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0060 %)	80 (> 99,3750 %)	0 (< 0,6250 %)	8402 (> 99,9940 %)
Typ B	0 (< 0,0245 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	2044 (> 99,9755 %)
Typ C	0 (< 0,1193 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	419 (> 99,8807 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30972	30972	0,00	20,23
31065	31065	0,00	21,69

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Ylang-Ylangöl
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	31506-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Ylang-Ylangöl; Canangöl; Oleum Ylang-Ylang

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Ylang-Ylangöl* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

- Hinweis zur Identifizierung von ätherischen Ölen: Einige ätherische Öle sind sowohl in der "Klasse Arzneistoffe Halbfest/Flüssig mit Zertifikat" als auch in der Klasse "Arzneistoffe Halbfest/Flüssig sonstige" enthalten.

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Ylang-Ylangöl* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Taoasis	Ylang-Ylangöl	140114-115612	31506	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 40 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Ylang-Ylangöl*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet.
- 8442 Spektren aus insgesamt 189 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des *chemometrischen Modells* eingegangen sind, sind die Proben in *Anhang A* aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 20 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Ylang-Ylangöl*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Taoasis	Ylang-Ylangöl	140114-115612	20

- 2024 Spektren aus insgesamt 66 Chargen von 62 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in *Anhang B* aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 0 Spektren von 0 *Apo-Ident*-Kunden aus 0 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Ylang-Ylangöl*.
- 419 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 291 Chargen von 60 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in *Anhang C* aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Ylang-Ylangöl* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0059 %)	40 (> 98,7500 %)	0 (< 1,2500 %)	8442 (> 99,9941 %)
Typ B	0 (< 0,0247 %)	20 (> 97,5000 %)	0 (< 2,5000 %)	2024 (> 99,9753 %)
Typ C	0 (< 0,1193 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	419 (> 99,8807 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
31506	31506	0,00	77,21

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe **Ysopöl**
Substanzklasse Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum 09.07.2015
Berichtsnummer 30537-2015-07-09
Ausführende Firma HiperScan GmbH
Weißeritzstraße 3
01067 Dresden
Germany

Relevante Substanznamen

Ysopöl; Hyssopus officinalis oleum

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Ysopöl* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Ysopöl* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Taoasis	Ysopöl	zu erfassen	30537	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 40 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Ysopöl*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8442 Spektren aus insgesamt 190 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 0 Spektren von 0 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Ysopöl*.
- 2044 Spektren aus insgesamt 67 Chargen von 63 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 1 Spektrum von 1 *Apo-Ident*-Kunden aus 1 Charge der Substanz/Substanzgruppe *Ysopöl*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Taoasis	Ysopöl	31095-105392	1

- 418 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 290 Chargen von 59 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Ysopöl* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0059 %)	40 (> 98,7500 %)	0 (< 1,2500 %)	8442 (> 99,9941 %)
Typ B	0 (< 0,0245 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	2044 (> 99,9755 %)
Typ C	0 (< 0,1196 %)	1 (k.A.)	0 (k.A.)	418 (> 99,8804 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30537	30537	0,00	31,68

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Zedernöl
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	30654-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Zedernöl; Oleum Cedrus deodara

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Zedernöl* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Zedernöl* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Taoasis	Zedernöl	zu erfassen	30654	40	entfällt
Taoasis	Zedernöl	26473-83914BAG90451	30750	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 80 Spektren von 2 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Zedernöl*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8402 Spektren aus insgesamt 189 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 0 Spektren von 0 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Zedernöl*.
- 2044 Spektren aus insgesamt 67 Chargen von 63 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 2 Spektren von 2 *Apo-Ident*-Kunden aus 2 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Zedernöl*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Taoasis/Phönix	Zedernöl	3292687	1
Taoasis GmbH	Zedernöl	32812	1

- 417 Spektren von 86 *Apo-Ident*-Kunden aus 289 Chargen von 59 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Zedernöl* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0060 %)	80 (> 99,3750 %)	0 (< 0,6250 %)	8402 (> 99,9940 %)
Typ B	0 (< 0,0245 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	2044 (> 99,9755 %)
Typ C	0 (< 0,1199 %)	1 (k.A.)	1 (k.A.)	417 (> 99,8801 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30654	30654	0,00	48,60
30750	30750	0,00	37,05

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe	Zimtrindeöl
Substanzklasse	Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum	09.07.2015
Berichtsnummer	30957-2015-07-09
Ausführende Firma	HiperScan GmbH Weißeritzstraße 3 01067 Dresden Germany

Relevante Substanznamen

Zimtrindeöl; Oleum Cinnamomi ceylanici; Zimtöl (Ceylon)

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Zimtrindeöl* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

- Hinweis zur Identifizierung von ätherischen Ölen: Einige ätherische Öle sind sowohl in der "Klasse Arzneistoffe Halbfest/Flüssig mit Zertifikat" als auch in der Klasse "Arzneistoffe Halbfest/Flüssig sonstige" enthalten.

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]

Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]

AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Zimtrindeöl* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Taoasis	Zimtrindeöl	121108-109782BAG90451	30957	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 40 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Zimtrindeöl*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet.
- 8442 Spektren aus insgesamt 189 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des *chemometrischen Modells* eingegangen sind, sind die Proben in *Anhang A* aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 0 Spektren von 0 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Zimtrindeöl*.
- 2044 Spektren aus insgesamt 67 Chargen von 63 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in *Anhang B* aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 0 Spektren von 0 *Apo-Ident*-Kunden aus 0 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Zimtrindeöl*.
- 419 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 291 Chargen von 60 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in *Anhang C* aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Zimtrindeöl* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0059 %)	40 (> 98,7500 %)	0 (< 1,2500 %)	8442 (> 99,9941 %)
Typ B	0 (< 0,0245 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	2044 (> 99,9755 %)
Typ C	0 (< 0,1193 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	419 (> 99,8807 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30957	30957	0,00	420,47

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe **Zirbelkieferöl**
Substanzklasse Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum 09.07.2015
Berichtsnummer 31553-2015-07-09
Ausführende Firma HiperScan GmbH
Weißeritzstraße 3
01067 Dresden
Germany

Relevante Substanznamen

Zirbelkieferöl; Oleum Pinus cembra

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Zirbelkieferöl* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Zirbelkieferöl* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Taoasis	Zirbelkieferöl	4892-117271	31553	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 40 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Zirbelkieferöl*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet.
- 8442 Spektren aus insgesamt 189 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des *chemometrischen Modells* eingegangen sind, sind die Proben in *Anhang A* aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 20 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Zirbelkieferöl*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Taoasis	Zirbelkieferöl	4892-117271	20

- 2024 Spektren aus insgesamt 66 Chargen von 62 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in *Anhang B* aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 0 Spektren von 0 *Apo-Ident*-Kunden aus 0 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Zirbelkieferöl*.
- 419 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 291 Chargen von 60 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in *Anhang C* aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Zirbelkieferöl* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0059 %)	40 (> 98,7500 %)	0 (< 1,2500 %)	8442 (> 99,9941 %)
Typ B	0 (< 0,0247 %)	20 (> 97,5000 %)	0 (< 2,5000 %)	2024 (> 99,9753 %)
Typ C	0 (< 0,1193 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	419 (> 99,8807 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
31553	31553	0,00	36,33

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

VALIDIERUNGSBERICHT

IdentModul 0.97-2015-07-08

Validierte Substanz/Substanzgruppe **Zypressenöl**
Substanzklasse Arzneistoffe Halbfest/Flüssig (sonstige)
Berichtsdatum 09.07.2015
Berichtsnummer 30457-2015-07-09
Ausführende Firma HiperScan GmbH
Weißeritzstraße 3
01067 Dresden
Germany

Relevante Substanznamen

Zypressenöl; Cupressus sempervirens oleum

Besondere Hinweise

Bei der Auswahl der Substanz/Substanzgruppe *Zypressenöl* werden dem Benutzer folgende Hinweise angezeigt:

keine Hinweise

Anwendbare Dokumente

978-3-7692-5416-7 *Europäisches Arzneibuch 7. Ausgabe, Grundwerk 2011* [3]
Komm2.2.40 *Erfüllung von Ph. Eur. 7.0 Monographie 2.2.40 durch Apo-Ident* [4]
AA004.01 *Arbeitsanweisung Datenbank-Validierung Apo-Ident*

Validierungsmethode

Die Validierung wird nach jeder Änderung des chemometrischen Modells (auch „Datenbank“) durchgeführt und erfolgt in drei Schritten:

1. Das chemometrische Modell wird aus den Kalibrierspektren durch einen PCA-Algorithmus errechnet. Die Kalibrierspektren stammen von den Kalibrierproben aller Substanzen dieser Klasse.
2. In dem generierten chemometrischen Modell werden die Abstände zwischen allen trennbaren Substanzen auf den vorgegebenen Sicherheitsabstand überprüft.
3. Dem generierten chemometrischen Modell werden alle geeigneten Spektren zur Bewertung vorgelegt. In drei Läufen werden dabei nacheinander die Referenzspektren (*Typ A*), Spektren von unabhängigen Proben (*Typ B*) und Spektren von unabhängigen Proben aus dem Feld (*Typ C*) vorgelegt. Dabei darf es zu keinem einzigen *Falsch-Positiven* Ergebnis kommen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Validierungsläufe ein Bericht generiert. Dieser wird revisionssicher zusammen mit den Parametern der Modellerstellung archiviert.

Kalibrierproben

In die Generierung der [chemometrischen Modelle](#) gehen ausschließlich Spektren ein, die durch die *HiperScan GmbH* an rückführbaren Proben aufgenommen werden. Von der Substanz/Substanzgruppe *Zypressenöl* sind folgende Proben eingegangen:

Lieferant	Substanz	Charge	Proben-ID	Spektren	Zertifikat
Taoasis	Zypressenöl	457749-105281	30457	40	entfällt

Validierproben

Zur Validierung wurden insgesamt 10 945 Spektren vorgelegt. Die Ergebnisse wurden nach folgenden Proben-Kategorien getrennt ausgewertet:

Typ A Alle Kalibrierspektren.

- 40 Spektren von 1 Referenzprobe der Substanz/Substanzgruppe *Zypressenöl*. Diese Proben sind weiter oben im Abschnitt [Kalibrierproben](#) aufgelistet.
- 8442 Spektren aus insgesamt 189 Chargen von 121 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Kalibrierproben* aufgelistet. Für Validierspektren von Substanzen die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, jedoch in die Generierung des [chemometrischen Modells](#) eingegangen sind, sind die Proben in [Anhang A](#) aufgelistet.

Typ B Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Ausführung der Messung durch die *HiperScan GmbH*.

- 0 Spektren von 0 Referenzproben der Substanz/Substanzgruppe *Zypressenöl*.
- 2044 Spektren aus insgesamt 67 Chargen von 63 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie sind für alle weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ B* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang B](#) aufgelistet.

Typ C Spektren von unabhängigen Proben, die nicht in den Aufbau der Datenbank eingegangen sind. Die Ausführung der Messung erfolgt durch *Apo-Ident*-Kunden. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

- 2 Spektren von 1 *Apo-Ident*-Kunden aus 2 Chargen der Substanz/Substanzgruppe *Zypressenöl*.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Taoasis	Zypressenöl	487749-108547	1
Taoasis	Zypressenöl	487749-107790	1

- 417 Spektren von 87 *Apo-Ident*-Kunden aus 289 Chargen von 59 weiteren Substanzen. Diese Spektren wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie sind bei allen weiteren Substanzen dieser Klasse im jeweiligen Abschnitt *Typ C* aufgelistet, sofern die Substanz mit diesem Modell identifizierbar ist. Für die Validierspektren von Substanzen, die nicht mit diesem Modell identifizierbar sind, sind die Proben in [Anhang C](#) aufgelistet.

Ergebnis der Validierung

Die Substanz/Substanzgruppe *Zypressenöl* ist mittels NIR-Spektroskopie mit *Apo-Ident* eindeutig von allen anderen Substanzen unterscheidbar.

	Falsch-Positiv	Richtig-Positiv	Falsch-Negativ	Richtig-Negativ
Typ A	0 (< 0,0059 %)	40 (> 98,7500 %)	0 (< 1,2500 %)	8442 (> 99,9941 %)
Typ B	0 (< 0,0245 %)	0 (k.A.)	0 (k.A.)	2044 (> 99,9755 %)
Typ C	0 (< 0,1199 %)	1 (k.A.)	1 (k.A.)	417 (> 99,8801 %)

Die in Klammern angegebenen Werte geben die jeweiligen aus den Häufigkeiten bestimmten Erwartungswerte für die Parameter in Prozent an. Ist die Häufigkeit Null oder gleich der Anzahl der Versuche, wird stattdessen die Größenordnung der statistischen Sicherheit ausgewiesen (Angabe mit Vergleichszeichen). Ist die Anzahl der Versuche kleiner als 20, wird kein Prozentwert angegeben.

Identitätsübereinstimmung laut Prüfung auf Identität mittels NIR

Für jede Substanz wird ein Zertifikat über die korrekte Identität bei einem unabhängigen GMP-zertifizierten Prüflabor eingeholt. Kann die Identität der Probe mittels NIR auf eine unabhängig geprüfte Referenzprobe bezogen werden, so ist in der folgenden Tabelle der *Mahalanobis-Abstand* zu dieser Referenzprobe angegeben, sowie der *Mahalanobis-Abstand* zur nächsten nicht-identischen Substanz:

Proben-ID	Referenz-proben-ID	Abstand zur Referenzprobe	Abstand zur nächsten Fremdprobe
30457	30457	0,00	47,80

Solche Proben untermauern die statistische Streuung der Originalen Referenzsubstanz, können aber keine neuen Aspekte bzw. Ausprägungsformen der Substanz hinzufügen.

Anhang A: Zusätzliche Kalibrierproben (Typ A)

Entfällt.

Anhang B: Zusätzliche Validierproben (Typ B)

In die Validierung gehen notwendigerweise auch Spektren von Substanzen ein, die nicht mit diesem Modell identifiziert werden können. Auf diese Weise wird überprüft, dass das Modell auch unbekannte Substanzen abweist. Die Spektren dieser Proben wurden durch die *HiperScan GmbH* aufgenommen. Sie werden dem *Typ B* zugeordnet. Darunter befinden sich auch die Kalibrierspektren von anderen Modellen.

Die Proben stammen aus 22 Chargen. Daran wurden 961 Spektren aufgenommen. Die Spektren, die an unabhängigen Proben von Substanzen aufgenommen wurden, die mit dem Modell identifiziert werden können, sind bei den einzelnen Substanzen jeweils im Abschnitt *Typ B* aufgelistet und tauchen in dieser Liste nicht noch einmal auf.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren	Zertifikat
Audor	Lipoid S 100	zu erfassen	40	entfällt
Bayer	Ultrabas®	33851A	40	entfällt
Bayer	Ultrapril®	22100A	40	entfällt
Bayer	Ultrasicc®	33614A	40	entfällt
Caelo	Ultraschall-Kont...	12031301	40	entfällt
Dr. Wolff	Linola akut 0,5%	334620	40	entfällt
Dr. Wolff	Linola Hautmilch	433240	60	entfällt
Euro OTC	Capsaicin Flüssig...	2908036-01	41	entfällt
Fagron	Versatile™	14B19-T02-010391	60	entfällt
Fagron	Versatile™ Rich	14B19-T08-101395	60	entfällt
ICHTHYOL	Milch Cordes® O/...	10D032	40	entfällt
keine Angabe	Wildrosen-Öl	94930-95763	40	entfällt
KOKO	dermaviduals® Ba...	L003L13	60	entfällt
Paddock	Ora-Blend®	2280130	40	entfällt
Paddock	Ora-Blend® SF	2038178	40	entfällt
Perrigo	Ora-Blend® SF	3112578	40	entfällt
Perrigo	Ora-Plus®	3334081	40	entfällt
Phylak Sachse...	Hautcreme, leich...	zu erfassen	40	entfällt
Phylak Sachse...	Hautcreme, reich...	zu erfassen	40	entfällt
Taoasis	Angelikawurzel E...	21439-67783	40	entfällt
Taoasis	Schwarzkümmelöl	504511-115611	40	entfällt
Taoasis	Vanilleextraktöl	789171-114788	40	entfällt

Anhang C: Zusätzliche Validierproben (Typ C)

In die Validierung mit Spektren aus dem Feld gehen die Spektren von Substanzen ein, die nicht mit diesem Modell identifiziert werden können. Auf diese Weise wird überprüft, dass das Modell auch unbekannte Substanzen abweist. Die Spektren dieser Proben wurden durch *Apo-Ident*-Kunden aufgenommen. Sie gehören zum *Typ C*. Die durch den Kunden gemachten Angaben zu Hersteller und Chargen-Nummer übernimmt die *HiperScan GmbH* weitgehend ungeprüft.

Die Proben stammen aus 30 Chargen. Daran wurden 51 Spektren aufgenommen. Die Validierspektren von unabhängigen Proben aus dem Feld, die von Substanzen stammen, die mit dem Modell identifiziert werden können, sind bei den einzelnen Substanzen jeweils im Abschnitt *Typ C* aufgelistet und tauchen in dieser Liste nicht noch einmal auf.

Lieferant	Substanz	Charge	Spektren
Anzag	Capsaicin Flüssigextrakt 3%	120503801	1
Caelo	Milch Cordes® O/W Emulsion	13D001	2
Caelo	Milch Cordes® O/W Emulsion	13D002	1
Caelo	Vario-Grundlage	13257102	1
Caelo	Vario-Grundlage	12077902	1
Dyckerhoff	Regeneresen	60611dü-2	1
Dyckerhoff	Regeneresen	120053NNr-2	1
Dyckerhoff	Regeneresen	1202920v-2	1
Dyckerhoff	Regeneresen	120313Kn-2	1
Dyckerhoff	Regeneresen	120323Lu-2	1
Dyckerhoff	Regeneresen	120333NN-2	1
Dyckerhoff	Regeneresen	150173th-2	1
Dyckerhoff	Regeneresen	1503839-Na	1
Euro OTC	Capsaicin Flüssigextrakt 3%	6061204	1
Euro OTC	Capsaicin Flüssigextrakt 3%	1205038-02	2
Euro OTC	Capsaicin Flüssigextrakt 3%	12111205	1
Ichthyol - Gesellschaft	Milch Cordes® O/W Emulsion	11D037	1
Ichthyol / Noweda	Milch Cordes® O/W Emulsion	12D008	3
IchthyolGmbH/Anzag	Milch Cordes® O/W Emulsion	12D003	1
Ichthyol, Noweda	Milch Cordes® O/W Emulsion	13d007	1
Pharmapol	Glyceroltrinitrat 5%	221414	3
Pharmapol	Glyceroltrinitrat 5%	25041301	1
Pharmapol	Glyceroltrinitrat 5%	228718	6
Pharmapol	Glyceroltrinitrat 5%	219108	2
Pharmapol	Glyceroltrinitrat 5%	224310	4
Pharmapol	Glyceroltrinitrat 5%	224310(ex)224658(in)	1
Pharmapol	Glyceroltrinitrat 5%	226578	7
Pharmapol Arzneimittel	Glyceroltrinitrat 5%	232961	1
Taoasis	Wildrosen-Öl	99149-99474	1
Taoasis	Wildrosen-Öl	106177-106175	1

Anhang D: Anforderungen an die Validierung

Um eine Einhaltung des gesicherten Standes der Wissenschaft zu gewährleisten, müssen die einzelnen Methoden zur Herstellung und Prüfung unter bestimmten Voraussetzungen validiert werden (vgl. § 34 Abs. 1 Nr. 3, § 35 Abs. 1 Nr. 4 und Abs. 4 Satz 1 Nr. 2 b, Abs. 6 Satz 3 *ApoBetrO*). Die *ApoBetrO* enthält in § 1 a Abs. 16 eine Legaldefinition:

„Validierung ist das Erbringen eines dokumentierten Nachweises, der mit hoher Sicherheit belegt, dass durch einen spezifischen Prozess oder ein Standardarbeitsverfahren ein Arzneimittel hergestellt und geprüft wird, das den vorher festgelegten Qualitätsmerkmalen entspricht.“

Durch eine Validierungsdokumentation lässt sich nachweisen, dass Methoden oder Geräte, welche nicht im Arzneibuch beschrieben sind, i. S. v. § 6 Abs. 1 Satz 3 *ApoBetrO* die gleichen Ergebnisse wie solche aus dem Arzneibuch erzielen. Bei den Anforderungen an die geforderte Validierung ist wiederum zu beachten, ob die jeweilige Prüfmethode bereits im Arzneibuch enthalten ist.

Die NIR-Spektroskopie als Prüfmethode im Allgemeinen muss nach der ausdrücklichen Regelung im *Ph. Eur. Abschnitt 1.1*, nicht validiert werden [3], da sie bereits im *Abschnitt 2.2.40* des *Ph. Eur.* als Anwendungsgebiet für die Identifikation von Ausgangsstoffen beschrieben ist.

Ein spezielles Validierungserfordernis besteht jedoch für die Referenzdatenbank. Mit dem vorliegenden Dokument wird dieser Anforderung entsprochen. Weitere Vorschriften oder Regelungen, wie dieser Nachweis erbracht werden muss, bestehen nicht. Gefordert ist, dass die Verfahren dieselben Ergebnisse wie die Methoden und Geräte des Arzneibuchs gewährleisten [15].

Die Durchführung von Identitätsprüfungen mit *Apo-Ident* ist somit auch dann möglich, wenn das Verfahren der NIR-Spektroskopie in der Arzneibuch-Monographie der Substanz zur Identitätsprüfung nicht angeordnet wird. Jede NIR-Analyse mit *Apo-Ident* weist mehrere, oft alle Molekülgruppen nach und ist daher mit einer Reihe einzelner gezielter chemischer Nachweise vergleichbar [4]. Damit ersetzt der Identitätsnachweis mit *Apo-Ident* die Prüfreihe der Monographie (mit zwei oder mehreren Kombinationen von Prüfungen).

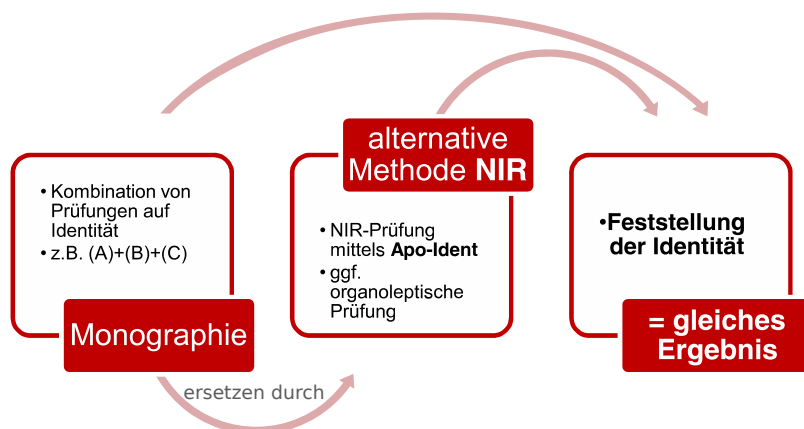


Abbildung 2: Die Kombination von Prüfungen der Monographie wird durch die alternative Methode NIR-Spektroskopie mittels *Apo-Ident* ersetzt. Dies ist zulässig, weil beide Prüfverfahren zur Feststellung der Identität des Ausgangsstoffes führen.

Mit der vorliegenden Validierungsdokumentation wird der Nachweis erbracht, dass mit *Apo-Ident* die gleichen Ergebnisse wie mit den Arzneibuch-Methoden, d.h. die Bestätigung der Identität des Ausgangsstoffes [2], erzielt werden.

Anhang E: Konformität von Apo-Ident mit dem Europäischen Arzneibuch

Laut *Ph. Eur. Abschnitt 2.2.40* ist NIR-Spektroskopie grundsätzlich geeignet für die: „Identifizierung von Wirkstoffen, Hilfsstoffen, Darreichungsformen, Zwischenprodukten der Herstellung, chemischen Ausgangsstoffen und Verpackungsmaterialien“ [3].

Dass *Apo-Ident* den weiteren Kriterien des Europäischen Arzneibuches unter den Überschriften des *Abschnitts 2.2.40*

- Apparatur
- Messmethoden
- Probenvorbereitung und Probenpräsentation
- Überprüfung der Funktionsfähigkeit des Geräts
- Identifizierung und Charakterisierung (qualitative Analyse)
- Quantitative Analyse
- Laufende Modellevaluierung
- Übertragen von Datenbanken
- Datenspeicherung

entspricht, kann anhand der Dokumentation der *HiperScan GmbH* „Erfüllung von *2.2.40 Ph. Eur.* durch *Apo-Ident*“ [4] nachvollzogen werden.

Literatur

- [1] ABDA – BUNDESVEREINIGUNG DEUTSCHER APOTHEKERVERBÄNDE: Verordnung über den Betrieb von Apotheken (Apothekenbetriebsordnung – ApBetrO), 2012
- [2] REIMANN, B. ; REGIERUNGSPRÄSIDIUM DARMSTADT: Hinweise zur ordnungsgemäßen Prüfung von Arzneimitteln und Ausgangsstoffen (§§ 6 und 11 *ApBetrO*), 2007
- [3] *Europäisches Arzneibuch, Grundwerk 2011*. 7. Ausgabe. Deutscher Apotheker Verlag (978-3-7692-5416-7)
- [4] HIPERSCAN GMBH: Erfüllung von 2.2.40 Ph. Eur. durch Apo-Ident, 2013
- [5] ARBEITSGEMEINSCHAFT DER PHARMAZIERÄTE DEUTSCHLANDS (APD): Resolution in Verbindung mit §§ 6 und 11 *ApBetrO* Verwendung eines Nah-Infrarot-Spektrometers (NIR) zur Identitätsprüfung, 16. 10. 2013, DAZ 48, November 2013
- [6] ARBEITSGEMEINSCHAFT DER PHARMAZIERÄTE DEUTSCHLANDS (APD): Resolution 2014, Arbeitsgemeinschaft der Pharmazieräte Deutschlands (APD), Oktober 2014
- [7] *DAC/NRF*. Govi-Verlag (978-3-7741-0044-2)
- [8] KESSLER, W.: *Multivariate Datenanalyse*. WILEY-VCH Verlag, 2007 (978-3-527-31262-7)
- [9] NÆS, T. ; ISAKSSON, T. ; FEARN, T. ; DAVIES, T.: *Multivariate Calibration and Classification*. NIR Publications, 2002 (978 0 9528666 2 6)
- [10] HIPERSCAN GMBH: Identifikationsmethodik Apo-Ident, 2012
- [11] HIPERSCAN GMBH: Datenvorbehandlung des Identifikationssystems Apo-Ident, 2012
- [12] BRONSTEIN, I. N. ; SEMENDJAJEW, K. A. ; MUSIOL, G. ; MÜHLIG, H.: *Taschenbuch der Mathematik*. 5. überarbeitete und erweiterte Auflage. Verlag Harri Deutsch, 2000 (3-8171-2015-2)
- [13] MAHALANOBIS, P.: On the generalized distance in statistics. In: *Proc. Nat. Inst. Sci. India (Calcutta)* 2 (1936), S. 49–55
- [14] YAMBOR, B. ; DRAPER, W. ; BEVERIDGE, R.: Analyzing PCA-based face recognition algorithms: Eigenvector selection and distance measures. In: *Second Workshop Empirical Evaluation in Computer Vision* (2000)
- [15] CYRAN ; ROTTA: Apothekenbetriebsordnung, Kommentar § 6 Rn. 10, 2010

Index

- Abitima® clinic Gesichtscreme, *siehe* [Hydrophile Salben](#)
- Abitima® clinic Körpercreme, *siehe* [Hydrophile Salben](#)
- Acidum salicylicum cum vaselino albo 10 per centum, *siehe* [Salicyl-Vaselin 10%](#)
- Alfason Basis Cresa®, 19
- Alfason® Repair, 23
- Allergika Dermifant® Kindercreme, *siehe* [Dermifant® Kindercreme](#)
- Allergika Dermifant® Kinderlotion, *siehe* [Hydrophile Salben](#)
- Allergika Lipolotio urea 5% F Körperlotion, *siehe* [Lipolotio urea 5% F Körperlotion](#)
- Amciderm® Basiscreme, *siehe* [Liniment-Salben](#)
- Angelica archangelica oleum, *siehe* [Angelikawurzelöl](#)
- Angelikawurzelöl, 27
- Anisöl Bio, 31
- Anthemis nobilis oil, *siehe* [Kamillenöl, röm.](#)
- Asche Basis® Creme, *siehe* [Hydrophile Salben](#)
- Asche Basis® Fettsalbe, *siehe* [Fettsalben](#)
- [Asche Basis / Neribas](#)
- Asche Basis® Lotio, *siehe* [Hydrophile Salben](#)
- Asche Basis® Salbe, *siehe* [Salbe Asche Basis / Neribas®](#)
- Basilikumöl, 35
- Basiscreme Nature, *siehe* [Hydrophile Salben](#)
- Basiscreme Taoasis, *siehe* [Hydrophile Salben](#)
- Beifußöl, 39
- Benzoe Siam, *siehe* [Siam-Benzoe](#)
- Benzoe Siamöl 20%, 43
- Bepanthen® Lösung, 47
- Bepanthen® Wund- und Heilsalbe, 51
- Bergamottöl, 55
- Cajeput, *siehe* [Cajeput / Niaouliöl](#)
- Cajeput / Niaouliöl, 59
- Canangöl, *siehe* [Ylang-Ylangöl](#)
- Caryophylli floris aetheroleum, *siehe* [Nelkenöl](#)
- Citronellöl, 63
- Citronenöl, 67
- Citrus aurantifolia oil, *siehe* [Limettenöl](#)
- Citrus aurantium var. amara oleum, *siehe* [Neroliöl](#)
- Citrus paradisi oleum, *siehe* [Grapefruitöl Bio](#)
- Citrus sinensis oleum, *siehe* [Orangenöl](#)
- Cupressus sempervirens oleum, *siehe* [Zypressenöl](#)
- Cymbopogonis aetheroleum, *siehe* [Lemongrasöl](#)
- Daucus carota oil, *siehe* [Karottensamenöl](#)
- Dermatest Basis Salbe, *siehe* [Wasserhaltige Salben](#)
- Dermatop Basiscreme, *siehe* [Hydrophile Salben](#)
- Dermatop® Basissalbe, 71
- Dermifant® Kindercreme, 75
- Dermifant® Kinderlotion, *siehe* [Hydrophile Salben](#)
- Dexeryl®, 79
- Dimeticoni-Salbe 10% SR, 83
- DMS®-Basiscreme Classic, *siehe* [Hydrophile Salben](#)
- DMS®-Basiscreme High Classic, *siehe* [Hydrophile Salben](#)
- DMS®-Basiscreme High Classic Plus, *siehe* [Hydrophile Salben](#)
- Eucalypti aetheroleum, *siehe* [Eucalyptusöl](#)
- Eucalyptusöl, 87
- Excipial® Hydrocreme, *siehe* [Hydrophile Salben](#)
- Excipial® Lipocreme, *siehe* [Wasserhaltige Salben](#)
- Excipial® Mandelölsalbe, 91
- Excipial® U Hydrolotio, *siehe* [Liniment-Salben](#)
- Excipial® U Lipolotio, *siehe* [Hydrophile Salben](#)
- Excipial® U10 Lipolotio, *siehe* [Hydrophile Salben](#)
- Fabitol® Basis Creme, *siehe* [Wasserhaltige Salben](#)
- Fenchelöl, 95
- Fenistil® Gel, 99
- Fettsalben Asche Basis / Neribas, 103
- Fichtennadelöl, 107
- Fitalite™, 111
- Foeniculum vulgare var. dulce oleum, *siehe* [Fenchelöl](#)
- Gaultheria procumbens oleum, *siehe* [Wintergreenöl](#)
- Gewürznelkenöl, *siehe* [Nelkenöl](#)
- Grapefruitöl Bio, 115
- Helichrysum italicum oleum, *siehe* [Immortelleöl](#)
- Hydrophile Salben, 119
- Hyssopus officinalis oleum, *siehe* [Ysopöl](#)
- Immortelleöl, 125
- Ingweröl, 129
- Japanisches Heilöl, *siehe* [Pfefferminzöl](#)

Juniperi aetheroleum, *siehe* [Wacholderbeeröl](#)

Kamillenöl, marokkanisch, [133](#)

Kamillenöl, röm., [137](#)

Karottensamenöl, [141](#)

Kerasal® Basissalbe, [145](#)

Korianderöl, [149](#)

Kreuzkümmelöl, [153](#)

La Roche-Posay Cold Cream Naturel, [157](#)

La Roche-Posay Toleriane, [161](#)

Latschenkiefernöl, [165](#)

Lavendelöl, [169](#)

Lavendula officinalis oleum, *siehe* [Lavendelöl](#)

Lemongrasöl, [173](#)

Limettenöl, [177](#)

Limonis aetheroleum, *siehe* [Citronenöl](#)

Liniment-Salben, [181](#)

Linola® Ö/W-Creme, *siehe* [Liniment-Salben](#)

Linola® Fett Creme, *siehe* [Linola® Fett](#)

[Creme](#) / [Linola® H Fett N](#)

Linola® Fett Creme / Linola® H Fett N, [185](#)

Linola® H Fett N, *siehe* [Linola® Fett Creme](#)
/ [Linola® H Fett N](#)

Linola® Sept, *siehe* [Liniment-Salben](#)

Linola® Sonnenschutz LSF 50 Lotion, [189](#)

Lipoderm® Lotion, *siehe* [Hydrophile Salben](#)

Lipolotio urea 5% F Körperlotion, [193](#)

Lygal® Kopfsalbe N 3%, [197](#)

Lygal® Salbengrundlage, [201](#)

Majoranöl, [205](#)

Manukaöl, [209](#)

Marokkanisches Kamillenöl, *siehe* [Kamillenöl](#),
[marokkanisch](#)

Melaleuca alternifolia oleum, *siehe* [Teebaumöl](#)

Melissenöl, indisch, *siehe* [Citronellöl](#)

Mentha spicata oleum, *siehe* [Spearmentöl](#)

Menthae piperitae aetheroleum, *siehe*
[Pfefferminzöl](#)

Muskatellersalbeiöl, [213](#)

Myrrhenöl, [217](#)

Nelkenöl, [221](#)

Neribas® Creme, *siehe* [Hydrophile Salben](#)

Neribas® Salbe, *siehe* [Salbe Asche Basis](#) /
[Neribas®](#)

Neribas® Fettsalbe, *siehe* [Fettsalben Asche](#)
[Basis](#) / [Neribas](#)

Neroliöl, [225](#)

Neuroderm® Pflege Lotio, *siehe*

[Neuroderm® Pflege Lotio](#) / [Creme](#)

Neuroderm® Pflege Lotio / Creme, [229](#)

Neuroderm® Pflegecreme, *siehe*

[Neuroderm® Pflege Lotio](#) / [Creme](#)

Neuroderm® Pflegecreme Lipo, [233](#)

Neuroderm® Pflegecreme Lipo, *siehe*

[Neuroderm® Pflegecreme Lipo](#)

Niaouliöl, *siehe* [Cajeput](#) / [Niaouliöl](#)

Nourivan™ Antiox, *siehe* [Liniment-Salben](#)

Ocimum basilicum oleum, *siehe* [Basilikumöl](#)

Oleum Angelicae (e Radice), *siehe*

[Angelikawurzelöl](#)

Oleum Abies alba, *siehe* [Weißtannenöl](#)

Oleum Aniba roseodora, *siehe* [Rosenholzöl](#)

Oleum Artemisia vulgaris, *siehe* [Beifußöl](#)

Oleum Bergamottae, *siehe* [Bergamottöl](#)

Oleum Boswellia serrata, *siehe* [Weihrauchöl](#)

Oleum Caryophylli, *siehe* [Nelkenöl](#)

Oleum Cedrus deodara, *siehe* [Zedernöl](#)

Oleum Cinnamomi ceylanici, *siehe*

[Zimtrindeöl](#)

Oleum Citri, *siehe* [Citronenöl](#)

Oleum Citronellae, *siehe* [Citronellöl](#)

Oleum Citrus aurantium, *siehe* [Petitgrainöl](#)

Oleum Citrus sinensis, *siehe* [Orangenöl](#)

Oleum Coriandri, *siehe* [Korianderöl](#)

Oleum Cuminum cyminum, *siehe*

[Kreuzkümmelöl](#)

Oleum Cymbopogon winterianus, *siehe*
[Citronellöl](#)

Oleum Eucalypti, *siehe* [Eucalyptusöl](#)

Oleum Juniperi e Baccarae, *siehe*

[Wacholderbeeröl](#)

Oleum Lavendula officinalis, *siehe* [Lavendelöl](#)

Oleum Melaleuca alternifolia, *siehe*

[Teebaumöl](#)

Oleum Menthae piperitae dopp. rectific.,
siehe [Pfefferminzöl](#)

Oleum Myrrha, *siehe* [Myrrhenöl](#)

Oleum Niaouli, *siehe* [Cajeput](#) / [Niaouliöl](#)

Oleum ocimum basilicum, *siehe* [Basilikumöl](#)

Oleum Olibanum, *siehe* [Weihrauchöl](#)

Oleum Origanum creticum, *siehe* [Spanischhopfenöl](#)

Oleum ormenis multicaulis, *siehe* [Kamillenöl](#),
[marokkanisch](#)

Oleum Palmarosa Bio, *siehe* [Palmarosaöl Bio](#)

Oleum Patchouli, *siehe* [Patchouli Öl](#)

Oleum Pini Pumilionis, *siehe*

[Latschenkiefernöl](#)

Oleum Pini sibiricum, *siehe* [Fichtennadelöl](#)

Oleum Pinus cembra, *siehe* [Zirbelkieferöl](#)

Oleum Rosmarini, *siehe* [Rosmarinöl](#)

Oleum Salviae, *siehe* [Salbeiöl](#)

Oleum Salviae sclarea, *siehe*

[Muskatellersalbeiöl](#)

Oleum Styrax tonkinensis, *siehe* [Benzoe](#)

[Siamöl 20%](#)

Oleum Ylang-Ylang, *siehe* [Ylang-Ylangöl](#)

Oleum Zingiber officinalis, *siehe* [Ingweröl](#)

Optiderm® Lotion, [237](#)

Ora-Sweet®, [249](#)

Orangen-Aroma, [241](#)

Orangenöl, [245](#)

Oreganoöl, *siehe* [Spanischhopfenöl](#)
Origanum majorana oleum, *siehe* [Majoranöl](#)
Origanumöl, *siehe* [Spanischhopfenöl](#)
Ormenis multicaulis oleum, *siehe* [Kamillenöl](#),
[marokkanisch](#)

Palmarosaöl Bio, [253](#)
Panthenol-Salbe Lichtenstein, [257](#)
Patchouli Öl, [261](#)
Pelargonium graveolens oleum, *siehe*
[Rosen-Geranie-Öl Bio](#)

Petitgrainöl, [265](#)
Pfefferminzöl, [269](#)
Physiogel® Hypoallergen Creme, *siehe*
[Hydrophile Salben](#)
Piceae aetheroleum, *siehe* [Fichtennadelöl](#)
Pini pumilionis aetherolum, *siehe*
[Latschenkiefernöl](#)

Ravensara, [273](#)
Rizol-Rohstoff, [277](#)
Rosen-Geranie-Öl Bio, [281](#)
Rosenholzöl, [285](#)
Rosmarinöl, [289](#)
Rosmarini aetheroleum, *siehe* [Rosmarinöl](#)

Salbe Asche Basis / Neribas®, [293](#)
Salbeiöl, [297](#)
Salicyl-Vaseline 10%, [301](#)
Salvia officinalis oleum, *siehe* [Salbeiöl](#)
Siam-Benzoe, [305](#)
Solutio Cordes / Thrombocid Gel, [309](#)
Solutio Cordes®, *siehe* [Solutio Cordes /](#)
[Thrombocid Gel](#)
Spanischhopfenöl, [313](#)
Spearminöl, [317](#)
Stomahésive® Adhäsivpaste, [321](#)

Teebaumöl, [325](#)

Thrombocid® Gel, *siehe* [Solutio Cordes /](#)
[Thrombocid Gel](#)
Thrombocid® Salbe, *siehe* [Hydrophile Salben](#)
Thymianöl, rot, [329](#)
Thymus vulgaris Thymol oleum, *siehe*
[Thymianöl, rot](#)
Tolu Res. 50% Öl, [333](#)

Unguentum cereum, *siehe* [Wachssalbe](#)
[\(stabilisiert\)](#)
Unguentum Dimeticoni 10% SR, *siehe*
[Dimeticoni-Salbe 10% SR](#)

Vetiver Bourbon Öl, [337](#)
Vetiveria zizanioides oil, *siehe* [Vetiver](#)
[Bourbon Öl](#)

Wacholderöl, *siehe* [Wacholderbeeröl](#)
Wacholderbeeröl, [341](#)
Wachssalbe (stabilisiert), [345](#)
Warzensalbe InfectoPharm® (NRF 11.31),
[349](#)

Wasserhaltige Salben, [353](#)
Weißtannenöl, [361](#)
Weihrauchöl, [357](#)
Weisstanne Öl, *siehe* [Weißtannenöl](#)
Wintergreenöl, [365](#)
Wofacutan Waschlotion, [369](#)

Ylang-Ylangöl, [373](#)
Ysopöl, [377](#)

Zedernöl, [381](#)
Zimtöl (Ceylon), *siehe* [Zimtrindeöl](#)
Zimtrindeöl, [385](#)
Zingiber officinalis oleum, *siehe* [Ingweröl](#)
Zirbelkieferöl, [389](#)
Zypressenöl, [393](#)