

Erklärung zur Rangliste der Substanzen

Details zur Identifikation (Rangliste)

Apo-Ident vergleicht das gemessene Spektrum mit allen in der Substanzklasse hinterlegten Substanzen. Die 20 Ergebnisse mit der höchsten Übereinstimmung können in der Rangliste angezeigt werden. Zum Anzeigen der Rangliste klicken Sie bitte auf den Hyperlink [<Bewertung>](#).

Ergebnis

Name: **Glucose-Monohydrat**

[NIR Ergebnis:](#) **Entspricht**

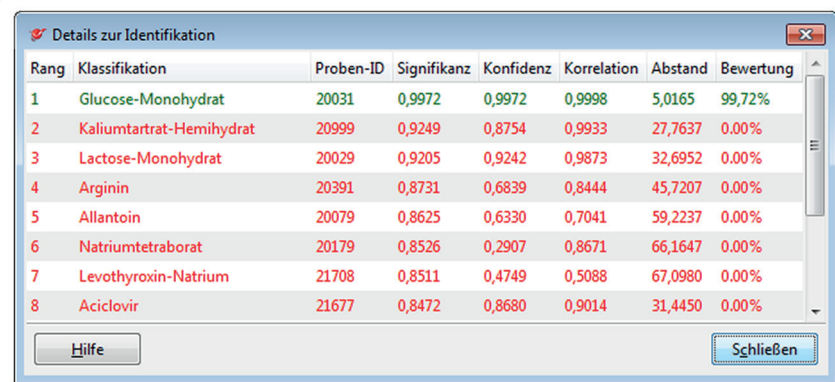
[Bewertung:](#) **99,7 %** (Sollwert 98% bis 100%)

[Validierung:](#) Verfügbar

Danach öffnet sich die Ansicht mit den Details zur Identifikation. An 1. Stelle (Rang 1) wird die Referenzsubstanz angezeigt, welche die **höchste Übereinstimmung mit der Probe** aufweist. Sind die Kriterien für die Identifikation der Substanz erfüllt, wird diese **grün** dargestellt.

Danach folgen **rot** gekennzeichnet die nächstliegenden Referenzsubstanzen, für die jedoch **keine ausreichende Übereinstimmung** durch die Apo-Ident Software festgestellt werden konnte. Da eine Substanz ausgeschlossen wird sobald eine andere Referenz näher liegt, ist maximal eine Substanz grün markiert. Bei Substanzen, welche in Gruppen zusammengefasst werden, wird in der Rangliste für jede Substanz dieser Gruppe nur der Gruppenname angezeigt.

Die Ansicht dient der Nachvollziehbarkeit und Überprüfung des Identifikationsergebnisses durch den Nutzer.



Rang	Klassifikation	Proben-ID	Signifikanz	Konfidenz	Korrelation	Abstand	Bewertung
1	Glucose-Monohydrat	20031	0,9972	0,9972	0,9998	5,0165	99,72%
2	Kaliumtartrat-Hemihydrat	20999	0,9249	0,8754	0,9933	27,7637	0,00%
3	Lactose-Monohydrat	20029	0,9205	0,9242	0,9873	32,6952	0,00%
4	Arginin	20391	0,8731	0,6839	0,8444	45,7207	0,00%
5	Allantoin	20079	0,8625	0,6330	0,7041	59,2237	0,00%
6	Natriumtetraborat	20179	0,8526	0,2907	0,8671	66,1647	0,00%
7	Levothyroxin-Natrium	21708	0,8511	0,4749	0,5088	67,0980	0,00%
8	Aciclovir	21677	0,8472	0,8680	0,9014	31,4450	0,00%

Die Liste zeigt die ermittelten Werte der Prüfparameter des gemessenen Probenspektrums zu den 20 nächstliegenden Referenzsubstanzen an.

Erklärung zur Rangliste der Substanzen

Begriffserklärung

Bezeichnung	Erläuterung	Einschätzung
Rang	ermittelter Rang der Übereinstimmung von Proben- und Referenzspektrum	
Klassifikation	Name der Referenzsubstanz in der Apo-Ident Referenzdatenbank bzw. Name der Gruppe nicht trennbarer Substanzen bei mehrdeutigem Ergebnis	Kennzeichnung grün = identifiziert, rot = nicht identifiziert
Proben ID	interne Identifikationsnummer der Referenzproben aus deren Spektren die Apo-Ident Referenzdatenbank aufgebaut wurde	
Signifikanz	Maß für den Abstand des Wertes im Vertrauensintervall bezogen auf den Mittelwert	Je höher der Wert (Maximum 1), desto näher liegt das Probenspektrum an den hinterlegten Referenzwerten.
Konfidenz	Ausreißerbewertung	Je höher der Wert (Maximum 1), desto näher liegt das Probenspektrum an den hinterlegten Referenzwerten.
Korrelation	statistisches Maß für die Ähnlichkeit der Rückprojektion der hinterlegten Referenzspektren zur Rückprojektion des gemessenen Probenspektrums	Je höher der Wert (Maximum 1), desto näher liegt die Probe an den hinterlegten Referenzwerten.
Abstand	Distanzmaß zwischen dem Mittelwert der hinterlegten Referenzwerte und der gemessenen Probe im mehrdimensionalen Hauptkomponentenraum (Mahalanobis-Distanz).	Je kleiner der Wert, desto näher liegt das Probenspektrum an den hinterlegten Referenzwerten.
Bewertung	gibt die Gesamtbewertung des Spektrums an, wie sie auf dem Bildschirm und dem Protokoll angezeigt wird (bzw. angezeigt würde)	Je höher der Wert (Maximum 100%), desto näher liegt die Probe an den hinterlegten Referenzwerten. Der definierte Mindestwert für eine Identifikation liegt bei 98%.
Spezifität (nur bei Substanzgruppe PhytoComm)	Die Spezifität einer Klassifikation ist die Richtig-Negativ-Rate. Sie bezeichnet den Anteil der während der Validierung richtig als Nicht-Identität klassifizierten Spektren. Dies entspricht einer korrekten Klassifikation.	
Erkennungsrate (nur bei Substanzgruppe PhytoComm)	ist die Richtig-Positiv-Rate. Sie bezeichnet den Anteil der während der Validierung richtig als Identität klassifizierten Spektren. Dies entspricht einer korrekten Klassifikation.	

Bei Fragen können Sie uns gern kontaktieren:



kundenservice@apo-ident.de oder telefonisch unter +49 (0)351 212 496 33