

Erklärung zur Rangliste der Substanzen

Details zur Identifikation (Rangliste)

Apo-Ident vergleicht das gemessene Spektrum mit den in der Referenzdatenbank hinterlegten Proben. Maximal 20 Ergebnisse der höchsten Übereinstimmung können in der Rangliste angezeigt werden. Zum Anzeigen der Rangliste klicken Sie bitte in der Ergebnisanzeige zur Messung auf den Hyperlink **<Bewertung>**.

Ergebnis

Name: **Glucose-Monohydrat**

NIR Ergebnis: **Entspricht**

Bewertung: **99,9%** (Sollwert 98% bis 100%)

Validierung: Verfügbar

Danach öffnet sich die Ansicht mit den Details zur Identifikation. Wenn Sie die Schaltfläche **<Als PDF anzeigen>** auswählen, erhalten Sie die dargestellte Tabelle im PDF-Format und können sie gemeinsam mit dem Protokoll drucken und ablegen.

An 1. Stelle (Rang 1) wird die Referenzprobe angezeigt, welche die **höchste Übereinstimmung mit der aufgestellten Probe** aufweist. Sind die Kriterien für die Identifikation der Substanz erfüllt, wird diese **grün** dargestellt.

Danach folgen **rot** gekennzeichnet die nächstliegenden Referenzproben. Diese werden bei der Bewertung des gemessenen Probenspektrums nicht direkt berücksichtigt. Bei Substanzen, welche in Gruppen zusammengefasst werden, ist zu beachten, dass der in der Rangliste aufgeführte Name (Klassifikation) vom Substanznamen abweichen kann. Es wird dann der Gruppenname angezeigt (z.B. „Triglyceride“).

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

Eine Erläuterung der einzelnen Begriffe finden Sie auf der nachfolgenden Seite.

Details zur Identifikation
✕

Rang	Klassifikation	Proben-ID	Signifikanz	Konfidenz	Korrelation	Abstand	Bewertung
1	Kaliumcitrat	20021	0,9954	0,9929	0,9997	6,5	99,29%
2	Kaliumcitrat	21775	0,9855	0,9808	0,9994	11,8	0,00%
3	Kaliumcitrat	20502	0,9365	0,8425	0,9983	28,3	0,00%
4	Levothyroxin-Natrium	21820SI	0,9049	0,8176	0,4734	34,2	0,00%
5	Neomycinsulfat	21961	0,8770	0,9011	0,9033	30,5	0,00%
6	Levothyroxin-Natrium	21708	0,8764	0,6912	0,5542	49,8	0,00%
7	Ribavirin	22346	0,8714	0,6568	0,9882	52,2	0,00%
8	Gentamicinsulfat	20661	0,8648	0,8016	0,9501	40,0	0,00%
9	Levothyroxin-Natrium	21708SI	0,8576	0,4720	0,4795	53,1	0,00%
10	Neomycinsulfat	21894	0,8571	0,8344	0,9580	32,7	0,00%

Hilfe
Als Pdf anzeigen
Schließen

Die Liste zeigt die ermittelten Prüfparameter des gemessenen Probenspektrums bezüglich der nächstliegenden 20 Referenzproben an.

Erklärung zur Rangliste der Substanzen

Begriffserklärung

Bezeichnung	Erläuterung	Einschätzung
Rang	ermittelter Rang der Übereinstimmung der zu bewertenden Messung mit den in der Datenbank hinterlegten Referenzproben	
Klassifikation	Von <i>Apo-Ident</i> eindeutig unterscheidbare Substanz oder Substanzgruppe; Eine Substanzgruppe repräsentiert mehrere Substanzen, die von <i>Apo-Ident</i> nicht eindeutig trennbar sind, jedoch für die Messung zur Verfügung stehen (z.B. „Triglyceride“). Zur eindeutigen Identifikation sind im Allgemeinen weitere Prüfschritte notwendig.	Kennzeichnung grün = identifiziert, rot = nicht identifiziert
Proben ID	Von der <i>HiperScan GmbH</i> vergebene Identifikationsnummer der Referenzproben, aus deren Spektren die <i>Apo-Ident</i> Referenzdatenbank aufgebaut wurde; Detaillierte Informationen zu allen Referenzproben können der Validierungsdokumentation entnommen werden.	
Signifikanz	Maß für den Abstand des Messergebnisses bezogen auf den Mittelwert der Referenzmessungen einer Probe bzw. Klassifikation	Je höher der Wert (Maximum 1), desto näher liegt das Probenspektrum an den hinterlegten Referenzwerten.
Konfidenz	Ausreißerbewertung	Je höher der Wert (Maximum 1), desto besser passt das gemessene Probenspektrum in die Verteilung der hinterlegten Referenzwerte.
Korrelation	statistisches Maß für die Ähnlichkeit der Rückprojektion des Mittelwerts der hinterlegten Referenzspektren zur Rückprojektion des gemessenen Probenspektrums	Je höher der Wert (Maximum 1), desto höher ist die Übereinstimmung der Rückprojektionen.
Abstand	Distanzmaß zwischen dem Mittelwert der hinterlegten Spektren einer Referenzprobe und dem gemessenen Spektrum im Hauptkomponentenraum (Mahalanobis-Distanz)	Je kleiner der Wert, desto näher liegt das Probenspektrum an den hinterlegten Referenzwerten.
Bewertung	gibt die Gesamtbewertung (bezüglich der oben genannten Kriterien) des gemessenen 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.	
Erkennungsrate (nur bei Substanzgruppe PhytoComm)	Das ist die Richtig-Positiv-Rate. Sie bezeichnet den Anteil der während der Validierung richtig als Identität klassifizierten Spektren.	

Bei Fragen können Sie uns gern kontaktieren:



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