

## Details zur Identifikation (Rangliste)

Apo-Ident vergleicht das gemessene Spektrum mit allen 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:

**Natriumcitrat**

[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. Das bedeutet, Proben ab Rang 2 können zu keinem „Entspricht“ Ergebnis führen, da eine andere Probe näher liegt. 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.

Rang	Klassifikation	Proben-ID	Signifikanz	Konfidenz	Korrelation	Abstand	Bewertung
1	Natriumcitrat	20662	0,9997	0,9997	0,9994	1,6	99,94%
2	Gentamicinsulfat	20661	0,8963	0,8142	0,9743	42,7	0,00%
3	Gentamicinsulfat	20640	0,8647	0,6198	0,9471	58,1	0,00%
4	NO_ID	21186SI	0,8572	0,5635	0,6345	62,9	0,00%
5	Minoxidil	20879	0,8436	0,1809	0,6616	73,5	0,00%
6	NO_ID	21190	0,8254	0,1671	0,7675	95,3	0,00%
7	NO_ID	21190SI	0,8242	0,1283	0,7015	97,2	0,00%
8	Gentamicinsulfat	21081	0,8196	0,1138	0,9367	105,5	0,00%
9	Riboflavin	20925	0,8141	0,0000	0,9301	118,3	0,00%
10	Riboflavin	20825	0,8103	0,0000	0,9497	129,9	0,00%
11	Thiaminchloridhydrochlorid	20566	0,8056	0,0000	0,6987	149,2	0,00%
12	Riboflavin	20914	0,8055	0,0000	0,9502	149,5	0,00%

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

Bezeichnung	Erläuterung	Einschätzung
<b>Rang</b>	ermittelter Rang der Übereinstimmung der zu bewertenden Messung mit den in der Datenbank hinterlegten Referenzproben	
<b>Klassifikation</b>	Von Apo-Ident eindeutig unterscheidbare Substanz oder Substanzgruppe; eine Substanzgruppe repräsentiert mehrere Substanzen, die von Apo-Ident nicht <b>eindeutig</b> trennbar sind, jedoch für die Messung zur Verfügung stehen (z.B. „Triglyceride“).	Diese Klassifikationen sind gelb gekennzeichnet (mehrdeutiges Ergebnis).
<b>Proben-ID</b>	Von der HiperScan GmbH vergebene Identifikationsnummer der Referenzproben, aus deren Spektren die Apo-Ident Referenzdatenbank aufgebaut wurde. Detaillierte Informationen zu allen Referenzproben können der Validierungsdokumentation entnommen werden.	
<b>Signifikanz</b>	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 gemessene Probenspektrum an den hinterlegten Referenzwerten.
<b>Konfidenz</b>	Ausreißerbewertung	Je höher der Wert (Maximum 1), desto besser passt das gemessene Probenspektrum in die Verteilung der hinterlegten Referenzwerte.
<b>Korrelation</b>	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.
<b>Abstand</b>	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.
<b>Bewertung</b>	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 %.
<b>Spezifität</b> (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.	
<b>Erkennungsrate</b> (nur bei Substanzgruppe PhytoComm)	Das ist die Richtig-Positiv-Rate. Sie bezeichnet den Anteil der während der Validierung richtig als Identität klassifizierten Spektren.	