



Landwirtschaftskammer  
Rheinland-Pfalz

**Landwirtschaftskammer Rheinland-Pfalz**

**Abteilung Weinbau**

und

**Wissenschaftlicher Arbeitsausschuss**  
FTIR-Kalibrierung für die amtliche Weinuntersuchung

**Laborvergleichsuntersuchung „Wein 2017“**

**Teil 2**  
**Durchführung und Ergebnisse**  
**der Untersuchung eines Weißweines FT17P02**  
**und eines Rotweines FT17P03**

Auswertung: Dr. Reinhard Ristow  
Albert-Schweitzer-Str. 6a  
67346 Speyer

Stand: 22.01.2018



**Inhaltsverzeichnis**

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>7</b>
<b>2</b>	<b>Durchführung der Laborvergleichsuntersuchung</b>	<b>7</b>
2.1	Untersuchungsmaterial	8
2.1.1	Herstellung und Auswahl des Untersuchungsgutes	8
2.1.2	Ergebnisse der Homogenitätsprüfung der Prüfmaterialien FT17P02 und FT17P03	8
2.2	Hinweise auf Informationen zur Durchführung und Ergebnisauswertung	14
<b>3</b>	<b>Gesamtergebnis der Laborvergleichsuntersuchung an den Prüfgütern FT17P02 und FT17P03</b>	<b>15</b>
3.1	Herkömmliche Methoden mit Diskussion einzelner Parameter	15
3.2	Gesamtergebnis der FTIR-Untersuchungen	19
<b>4</b>	<b>Ergebnisse zu den einzelnen Parametern der Probe FT17P02</b>	<b>23</b>
4.1	Relative Dichte 20 °C/20 °C	23
4.1.1	Herkömmliche Laborergebnisse	23
4.1.2	FTIR-Laborergebnisse	24
4.1.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	25
4.1.4	Angaben zu den Analyseverfahren	25
4.2	Vorhandener Alkohol [g/L]	27
4.2.1	Herkömmliche Laborergebnisse (Bewertungsbasis: Destillationsverfahren)	27
4.2.2	FTIR-Laborergebnisse	28
4.2.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	29
4.2.4	Angaben zu den Analyseverfahren	29
4.3	Gesamtextrakt [g/L]	31
4.3.1	Herkömmliche Laborergebnisse	31
4.3.2	FTIR-Laborergebnisse	31
4.3.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	32
4.3.4	Angaben zu den Analyseverfahren	33
4.4	Vergärbare Zucker [g/L]	34
4.4.1	Herkömmliche Laborergebnisse	34
4.4.2	FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker	35
4.4.3	Reduktometrische Laborergebnisse	36
4.4.4	FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker(r)	36
4.4.5	FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker(S)	38
4.4.6	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	39
4.4.7	Angaben zu den Analyseverfahren	39
4.5	Glucose [g/L]	43
4.5.1	Herkömmliche Laborergebnisse	43
4.5.2	FTIR-Laborergebnisse	43
4.5.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	45
4.5.4	Angaben zu den Analyseverfahren	45
4.6	Fructose [g/L]	47
4.6.1	Herkömmliche Laborergebnisse	47
4.6.2	FTIR-Laborergebnisse	47
4.6.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	49
4.6.4	Angaben zu den Analyseverfahren	49

4.7	Glycerin [g/L]	51
4.7.1	Herkömmliche Laborergebnisse	51
4.7.2	FTIR-Laborergebnisse	51
4.7.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	52
4.7.4	Angaben zu den Analyseverfahren	53
4.8	pH-Wert	54
4.8.1	Herkömmliche Laborergebnisse	54
4.8.2	FTIR-Laborergebnisse	54
4.8.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	56
4.8.4	Angaben zu den Analyseverfahren	56
4.9	Gesamtsäure [g/L]	58
4.9.1	Herkömmliche Laborergebnisse	58
4.9.2	FTIR-Laborergebnisse	59
4.9.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	60
4.9.4	Angaben zu den Analyseverfahren	60
4.10	Weinsäure [g/L]	62
4.10.1	Herkömmliche Laborergebnisse	62
4.10.2	FTIR-Laborergebnisse	62
4.10.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	64
4.10.4	Angaben zu den Analyseverfahren	64
4.11	Flüchtige Säure [g/L]	66
4.11.1	Herkömmliche Laborergebnisse	66
4.11.2	FTIR-Laborergebnisse	66
4.11.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Destillationsverfahren	68
4.11.4	Angaben zu den Analyseverfahren	68
4.12	Acetat (als Essigsäure) [g/L]	70
4.12.1	Herkömmliche und FTIR-Laborergebnisse	70
4.12.2	Deskriptive Ergebnisse der enzymatischen und HPLC-Verfahren	70
4.12.3	Angaben zu den Analyseverfahren	71
4.13	Gesamte Äpfelsäure und L-Äpfelsäure [g/L]	72
4.13.1	Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure	72
4.13.2	Laborergebnisse L-Äpfelsäure	72
4.13.3	FTIR-Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure	72
4.13.4	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	74
4.13.5	Angaben zu den Analyseverfahren	74
4.14	Gesamte Milchsäure und L-Milchsäure [g/L]	76
4.14.1	Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Milchsäure	76
4.14.2	Laborergebnisse L-Milchsäure	76
4.14.3	FTIR-Laborergebnisse Gesamte Milchsäure	77
4.14.4	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	78
4.14.5	Angaben zu den Analyseverfahren	78
4.15	Reduktone [mg/L]	80
4.15.1	Laborergebnisse	80
4.15.2	Deskriptive Ergebnisse	81
4.15.3	Angaben zu den Analyseverfahren	81
4.16	Freie Schweflige Säure [mg/L]	82
4.16.1	Laborergebnisse mit Destillations- und photometrischen Verfahren; FTIR	82
4.16.2	Laborergebnisse jodometrisch einschließlich Reduktone	82
4.16.3	Laborergebnisse jodometrische Verfahren ausschließlich Reduktone	83
4.16.4	Deskriptive Ergebnisse	84
4.16.5	Angaben zu den Analyseverfahren	84

4.17	Gesamte Schweflige Säure [mg/L]	87
4.17.1	Laborergebnisse	87
4.17.2	Laborergebnisse: jodometrische Verfahren einschließlich Reduktone	88
4.17.3	Laborergebnisse: jodometrische Verfahren ausschließlich Reduktone	88
4.17.4	Deskriptive Ergebnisse	89
4.17.5	Angaben zu den Analyseverfahren	89
<b>5</b>	<b>Ergebnisse zu den einzelnen Parametern der Probe FT17P03</b>	<b>92</b>
5.1	Relative Dichte 20 °C/20 °C	92
5.1.1	Herkömmliche Laborergebnisse	92
5.1.2	FTIR-Laborergebnisse	93
5.1.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	94
5.1.4	Angaben zu den Analyseverfahren	94
5.2	Vorhandener Alkohol [g/L]	96
5.2.1	Herkömmliche Laborergebnisse	96
5.2.2	FTIR-Laborergebnisse	97
5.2.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	98
5.2.4	Angaben zu den Analyseverfahren	99
5.3	Gesamtextrakt [g/L]	101
5.3.1	Herkömmliche Laborergebnisse	101
5.3.2	FTIR-Laborergebnisse	102
5.3.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	103
5.3.4	Angaben zu den Analyseverfahren	103
5.4	Vergärbare Zucker [g/L]	105
5.4.1	Herkömmliche Laborergebnisse	105
5.4.2	FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker	106
5.4.3	Reduktometrische Laborergebnisse	107
5.4.4	FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker(r)	107
5.4.5	FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker (S)	109
5.4.6	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	110
5.4.7	Angaben zu den Analyseverfahren	110
5.5	Glucose [g/L]	114
5.5.1	Herkömmliche Laborergebnisse	114
5.5.2	FTIR-Laborergebnisse	114
5.5.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	116
5.5.4	Angaben zu den Analyseverfahren	116
5.6	Fructose [g/L]	118
5.6.1	Herkömmliche Laborergebnisse	118
5.6.2	FTIR-Laborergebnisse	118
5.6.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	120
5.6.4	Angaben zu den Analyseverfahren	120
5.7	Glycerin [g/L]	122
5.7.1	Herkömmliche Laborergebnisse	122
5.7.2	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	122
5.7.3	Angaben zu den Analyseverfahren	122
5.7.4	FTIR-Laborergebnisse	123
5.8	pH-Wert	125
5.8.1	Herkömmliche Laborergebnisse	125
5.8.2	Angaben zu den Analyseverfahren	125
5.8.3	FTIR-Laborergebnisse	126
5.8.4	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	127

5.9	Gesamtsäure [g/L]	129
5.9.1	Herkömmliche Laborergebnisse	129
5.9.2	Angaben zu den Analyseverfahren	129
5.9.3	FTIR-Laborergebnisse	130
5.9.4	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	131
5.10	Weinsäure [g/L]	133
5.10.1	Herkömmliche Laborergebnisse	133
5.10.2	FTIR-Laborergebnisse	133
5.10.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	135
5.10.4	Angaben zu den Analyseverfahren	135
5.11	Flüchtige Säure [g/L]	137
5.11.1	Herkömmliche Laborergebnisse	137
5.11.2	FTIR-Laborergebnisse	137
5.11.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Destillationsverfahren	139
5.11.4	Angaben zu den Analyseverfahren	139
5.12	Acetat (als Essigsäure) [g/L]	141
5.12.1	Herkömmliche Laborergebnisse	141
5.12.2	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	141
5.12.3	Angaben zu den Analyseverfahren	142
5.13	Gesamte Äpfelsäure und L-Äpfelsäure [g/L]	143
5.13.1	Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure	143
5.13.2	Laborergebnisse L-Äpfelsäure	143
5.13.3	FTIR-Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure	144
5.13.4	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	145
5.13.5	Angaben zu den Analyseverfahren	145
5.14	Gesamte Milchsäure und L-Milchsäure [g/L]	147
5.14.1	Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Milchsäure	147
5.14.2	Laborergebnisse L-Milchsäure	147
5.14.3	FTIR-Laborergebnisse Gesamte Milchsäure	148
5.14.4	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	149
5.14.5	Angaben zu den Analyseverfahren	149
5.15	Reduktone [mg/L]	151
5.15.1	Laborergebnisse	151
5.15.2	Deskriptive Ergebnisse	152
5.15.3	Angaben zu den Analyseverfahren	152
5.16	Freie Schweflige Säure [mg/L]	153
5.16.1	Laborergebnisse mit Destillations- und photometrischen Verfahren; FTIR	153
5.16.2	Deskriptive Ergebnisse für Destillations-, photometrische und FTIR-Verfahren	153
5.16.3	Laborergebnisse, jodometrisch einschließlich Reduktone	154
5.16.4	Laborergebnisse, jodometrisch ausschließlich Reduktone	154
5.16.5	Deskriptive Ergebnisse jodometrischer Verfahren	155
5.16.6	Angaben zu den Analyseverfahren	156
5.17	Gesamte Schweflige Säure [mg/L]	158
5.17.1	Laborergebnisse (wie mitgeteilt)	158
5.17.2	Laborergebnisse: jodometrisch einschließlich Reduktone	159
5.17.3	Laborergebnisse: jodometrisch ausschließlich Reduktone	160
5.17.4	Deskriptive Ergebnisse	161
5.17.5	Angaben zu den Analyseverfahren	161

## 1 Einleitung

Die jährliche Laborvergleichsuntersuchung der Landwirtschaftskammer Rheinland-Pfalz wurde wiederum in Kooperation mit dem "Wissenschaftlichen Arbeitsausschuss FTIR-Kalibrierung in der amtlichen Weinanalytik" mit einer speziellen FTIR-Laborvergleichsuntersuchung verbunden. In dieser erweiterten Laborvergleichsuntersuchung konnten die beteiligten Laboratorien die Qualität ihrer Messergebnisse für die üblicherweise mit Hilfe des Verfahrens der Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie im mittleren Infrarot (FTIR) bestimmten Parameter überprüfen. Die Bestimmung der Freien und Gesamten Schwefligen Säure mittels Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der Gasphase ist seit 2014 originärer Bestandteil dieser Laborvergleichsuntersuchung.

Grundlage der Bewertung der FTIR-Untersuchungsergebnisse ist für alle Parameter, dass die teilnehmenden Laboratorien entsprechend ihren Möglichkeiten mit herkömmlichen Methoden die mittels FTIR erfassten Parameter auch über den Umfang der amtlichen Qualitätsweinanalyse hinaus bestimmen und so die Ermittlung zuverlässiger Bezugswerte ermöglichen.

Neben einem Deutschen Perlwein, der allen teilnehmenden Laboratorien zur Verfügung stand, waren von den Teilnehmern an der speziellen FTIR-Laborvergleichsuntersuchung ein Weißweine, zwei Rotweine und ein Roséwein sowohl mit den herkömmlichen Verfahren als auch mittels FTIR zu untersuchen.

Die Proben wurden für die Untersuchung und Auswertung in der speziellen FTIR-Laborvergleichsuntersuchung als FT17LnnP01 bis FT17LnnP05 kodiert. Hierbei vertreten die Buchstaben "Lnn" eine Teilnehmer-Nummer, die bereits bei der Anmeldung vergeben wird. Sie dient der eindeutigen Identifizierung von Rohdaten der FTIR-Untersuchung. Bei der Dokumentation und Besprechung der Ergebnisse entfällt dieser Teil der Probenkodierung. Teil 1 der Berichte behandelt neben Aspekten, die für die gesamte Laborvergleichsuntersuchung von Bedeutung sind, die Ergebnisse für das Prüfgut FT17P01. Der vorliegende Teil 2 betrifft die Ergebnisse der Untersuchung der Prüfgüter FT17P02 und FT17P03. Teil 3 dokumentiert die Ergebnisse an den Prüfmaterialien FT17P04 und FT17P05. Die Ausführungen beschränken sich dabei auf Gesichtspunkte und Sachverhalte, die nicht bereits in Teil 1 der Berichte behandelt wurden. In einigen Gliederungspunkten wird daher auf Teil 1 verwiesen.

## 2 Durchführung der Laborvergleichsuntersuchung

Im Folgenden werden die Informationen zur Auswahl bzw. Herstellung der Prüfmaterialien FT17P02 bzw. FT17P03, die Ergebnisse der Homogenitätsprüfung und der Untersuchung dieser Prüfgüter durch die teilnehmenden Laboratorien behandelt.

## 2.1 Untersuchungsmaterial

### 2.1.1 Herstellung und Auswahl des Untersuchungsgutes

Insbesondere für die Durchführung der FTIR-Untersuchungen sollen Weine unterschiedlicher Herkunft und Zusammensetzung verwendet werden, um den Einfluss probenspezifischer Matrixeffekte bzw. Mängel einer eventuellen Slope-Intercept-Korrektur für die Teilnehmer erkennbar zu machen. Die Proben sollen in der Regel den üblichen Konzentrationsbereich der Hauptkomponenten wie Alkohol-, Zucker- und Säuregehalt sowie unterschiedliche Herkunft abdecken. Die Verwendung von Proben unterschiedlicher Weinarten dient insbesondere der Abdeckung der aufgrund der Weinart unterschiedlichen Gehalte an Äpfelsäure und Milchsäure. Weiterhin soll mindestens ein Wein ausländischer Herkunft sein.

Das Prüfgut FT17P02 war ein trockener Müller-Thurgau aus dem Anbaugebiet Saale-Unstrut und dem Jahrgang 2015. Es handelte sich um ein unverändertes Erzeugnis aus einer Winzergenossenschaft.

Das Prüfgut FT17P03 bestand aus einem halbtrockenen Spätburgunder aus dem Anbaugebiet Ahr und dem Jahrgang 2014. Auch bei diesem Prüfgut handelte sich um eine unveränderte Abfüllung aus einer Winzergenossenschaft.

Eine Prüfung auf Homogenität wurde mit beiden Proben durchgeführt.

### 2.1.2 Ergebnisse der Homogenitätsprüfung der Prüfmateriale FT17P02 und FT17P03

Vom Prüfgut **FT17P02** wurden 240 Flaschen à 0,25L in 20 Kartons à 12 Flaschen bezogen. Die Kartons wurden nummeriert und aus 12 durch Zufallsgenerator bestimmten Kartons je eine Flasche als Probe gezogen. Aus jeder Probe wurden 4 Serien von je zwei Messproben erstellt. Jeweils zwei Messproben wurden unter Wiederholbedingungen untersucht. Für jede Wiederholung wurde eine eigene Reihenfolge der Proben ausgelost. An einer Probenserie wurde die Relative Dichte mit elektronischer Densitometrie (Biegeschwinger) und der Vorhandene Alkohol mit Nahinfrarotspektroskopie bestimmt. Die zweite Serie wurde mit Hochleistungsflüssigkeitschromatographie auf Ethanol, Glucose, Fructose und Glycerin untersucht. Eine dritte Serie diente zur Bestimmung des pH-Wertes und der Gesamtsäure, während die vierte Serie zur jodometrischen Bestimmung von Freier und Gesamter Schwefliger Säure sowie der Reduktone herangezogen wurde. Die Untersuchungen wurden an rechnergesteuerten Systemen mit automatischer Probenzuführung durchgeführt, wodurch eine geringe Wiederholstreuung begünstigt wird. Die erhaltenen Daten sind Tabelle 1 aufgeführt.

Die Messergebnisse des Prüfgutes **FT17P02** wurden wie in Teil 1 beschrieben graphisch auf Auffälligkeiten bei einzelnen Messungen und auf eine Abhängigkeit von der Messreihenfolge bzw. Probenfolge geprüft. Die densitometrischen Messergebnisse der Relativen Dichte zeigten bei den laufenden Nummern 1 und 4 deutliche und bei den laufenden Nummer 11 und 12 mäßige Abweichungen von den übrigen Messwerten. Der jeweilige zweite Messwert der entsprechenden Probe liegt jedoch im Streubereich der übrigen Messwerte. Es kann deshalb davon



Tabelle 1: Messergebnisse zur Homogenitätsprüfung des Prüfgutes FT17P02

Lfd. Nr.	Probe-Nr.	Relative Dichte	Vorhand. Alkohol g/L	Ethanol HPLC g/L	Gesamt-extrakt g/L	Glucose g/L	Fructose g/L	Zucker nach Inv. g/L	Glycerin g/L	pH-Wert	Ges. Säure g/L	Reduktone mg/L	Freie SO <sub>2</sub> mg/L	Gesamte SO <sub>2</sub> mg/L
1	8	0,99393	94,66	96,88	25,2	1,46	4,75	6,20	4,69	3,10	6,69	38,5	47,9	141,9
2	14	0,99385	95,29	96,98	25,2	1,48	4,80	6,30	4,68	3,15	6,69	40,1	51,0	145,6
3	18	0,99384	95,21	96,97	25,2	1,39	4,70	6,10	4,67	3,16	6,66	37,3	46,9	140,7
4	12	0,99393	95,13	96,55	25,4	1,37	4,70	6,10	4,66	3,18	6,66	38,0	48,4	140,2
5	3	0,99380	95,52	96,74	25,2	1,35	4,67	6,00	4,65	3,19	6,67	40,0	52,6	145,1
6	7	0,99377	95,44	96,40	25,1	1,36	4,67	6,00	4,66	3,19	6,66	33,3	41,2	133,8
7	9	0,99380	95,37	96,42	25,1	1,38	4,68	6,10	4,66	3,19	6,68	37,0	46,9	140,7
8	13	0,99383	95,44	96,42	25,2	1,36	4,67	6,00	4,64	3,19	6,65	37,9	47,9	141,1
9	4	0,99381	95,37	96,41	25,1	1,37	4,68	6,10	4,67	3,20	6,68	36,5	47,4	141,3
10	15	0,99384	95,37	96,42	25,2	1,34	4,67	6,00	4,62	3,20	6,65	42,7	57,8	153,0
11	1	0,99389	95,29	96,45	25,3	1,35	4,69	6,00	4,68	3,20	6,65	38,5	51,6	145,5
12	20	0,99387	95,13	96,21	25,2	1,37	4,67	6,00	4,65	3,20	6,62	36,5	46,9	139,9
13	12	0,99378	95,37	96,07	25,1	1,35	4,68	6,00	4,62	3,10	6,69	39,6	48,4	139,4
14	13	0,99374	95,44	96,31	25,0	1,36	4,67	6,00	4,63	3,14	6,67	37,5	47,4	138,9
15	20	0,99378	95,29	96,02	25,0	1,40	4,68	6,10	4,63	3,16	6,66	36,8	46,4	140,0
16	3	0,99375	95,37	96,22	25,0	1,36	4,66	6,00	4,65	3,17	6,66	40,1	51,6	143,9
17	14	0,99376	95,29	95,96	25,0	1,32	4,63	6,00	4,59	3,18	6,66	40,1	51,0	143,3
18	4	0,99374	95,29	95,98	24,9	1,33	4,61	5,90	4,61	3,18	6,63	36,3	46,9	140,7
19	1	0,99377	95,29	95,93	25,0	1,36	4,67	6,00	4,63	3,19	6,65	39,6	50,5	143,4
20	15	0,99376	95,21	95,91	25,0	1,36	4,66	6,00	4,62	3,19	6,70	40,6	57,3	155,5
21	9	0,99375	95,37	95,84	25,0	1,33	4,60	5,90	4,58	3,19	6,66	37,0	46,9	142,2
22	18	0,99377	95,37	95,80	25,0	1,34	4,64	6,00	4,63	3,19	6,66	37,0	46,4	140,0
23	8	0,99375	95,29	95,75	25,0	1,37	4,65	6,00	4,62	3,19	6,65	35,9	47,9	144,2
24	7	0,99373	95,29	95,57	24,9	1,34	4,63	6,00	4,59	3,19	6,65	32,3	41,2	133,8
25	21											33,2	39,0	130,0
26	22											37,3	46,0	136,0
27	6											38,0	46,0	139,0
28	16											38,0	46,0	138,0
29	16											37,5	46,0	139,0
30	6											37,0	46,0	139,0
31	22											37,0	46,0	138,0
32	21											32,1	39,0	131,0

ausgegangen werden, dass lediglich zufällig stark abweichende Messwerte vorliegen. Bei dem Parameter Vorhandener Alkohol stellt sich der erste NIR-Messwert als Ausreißer dar. Auch hier liegt der zweite Meßwert im allgemeinen Streubereich. Beide sind der Probennummer 8 zuzuordnen, für die die HPLC-Messergebnisse keinerlei Auffälligkeit zeigen. Weiterhin sind die beiden ersten Messwerte für den Parameter Glucose erhöht, eine Beobachtung, die sich auch für den Parameter Fructose und den Summenparameter Vergärbare Zucker andeutet, aber wegen der größeren Werte weniger deutlich hervortritt. Schließlich fielen auch bei dem Parameter pH-Wert jeweils die ersten Werte der beiden Teilerien als ungewöhnlich niedrig auf und zeigten mit den folgenden Messungen einen aufsteigenden Gang. Sowohl bei den Zuckern als auch bei den pH-Werten ist dies auf Verschleppungen aus den unmittelbar zuvor gemessene Qualitätssicherungsproben zurückzuführen, die deutlich höhere Zuckergehalte bzw. einen deutlich niedrigeren pH-Wert als das geprüfte Material aufwiesen. Eine andere Situation liegt bei dem Parameter Freie Schweflige Säure vor, bei dem jeweils beide Messungen der Probennummern (= Kartonnummern) 7 und 15 auffällig abweichende Ergebnisse zeigen. Für die Probe 7 wurde die Auffälligkeit an einer zweiten Flasche aus demselben Karton, die unter der Probennummer 21 gemessen wurde, bestätigt, während der Messwert einer zweiten Flasche aus Karton 15, gemessen unter der Probennummer 22, graphisch unauffällig war. Dies galt auch für die Messergebnisse an zusätzlichen Proben, die aus den benachbarten, bisher nicht beprobten Kartons mit den Nummern 6 bzw. 16 entnommen und gemeinsam mit den Proben 21 und 22 nachvermessen wurden. Neben den beobachteten auffälligen Einzelwerten und dem systematischen Gang innerhalb der Teilerien der pH-Wert-Messung wiesen die Werte für Ethanol (HPLC) eine straffe und weitere Parameter eine mäßige und schwach signifikante bis signifikante Korrelation zur Messfolge auf. Dies führte jedoch – mit Ausnahme des Parameters Ethanol (HPLC) – nicht dazu, dass bei der anschließenden Varianzanalyse der Wert für  $s_r/s_{Ziel} > 0,5$  wurde und damit die Aussagekraft der Varianzanalyse beeinträchtigt war. Wie die beobachteten Korrelationen wurden auch die weiteren Beobachtungen bei der varianzanalytischen Prüfung berücksichtigt, deren wesentliche Ergebnisse in Tabelle 2 zusammengefasst sind.

Die Varianzanalyse zeigte mit Ausnahme der Parameter Reduktone, Freie und Gesamte Schweflige Säure keine signifikanten Unterschiede zwischen den Proben. Damit ist für die übrigen Parameter die Homogenität nachgewiesen, soweit der Quotient der Wiederholstandardabweichung (Fehler  $s_r$ ) und der Zielstandardabweichung ( $s_z$ ) unter dem möglichst einzuhaltenden Wert von 0,5 liegt. Die Überschreitung dieses Höchstwertes ist für die Parameter Relative Dichte und Glucose eher formal. Wie für die Parameter Glucose und pH-Wert gezeigt, ist auch für den Parameter Relative Dichte davon auszugehen, dass ein Ausschluss der auffälligen Einzelmessungen zur Einhaltung der Forderung  $s_r/s_z < 0,5$  führt und somit Homogenität nachgewiesen ist. Bei dem Parameter Ethanol (HPLC) ist davon auszugehen, dass die starke Abhängigkeit der Messergebnisse von der Messreihenfolge erheblich zur Verletzung der Forderung beiträgt. In Anbetracht der durch Messergebnisse für Vorhandenen Alkohol mittels NIR zweifelsfrei nachgewiesenen Homogenität wurde von einer Korrektur dieser Korrelation abgesehen und auf eine Nutzung dieser Messergebnisse zur Prüfung auf Homogenität verzichtet.

**Tabelle 2: Ergebnisse der Homogenitätsprüfung für das Prüfgut FT17P02**

	Mittelwert	N	F	p	Standardabweichungen			Quotienten		Maximal tolerierter Wert für $s_{Pr}$
					Fehler ( $s_r$ )	Proben ( $s_{Pr}$ )	Ziel ( $s_z$ )	$s_r/s_z$	$s_{Pr}/s_z$	
Rel. Dichte, dens.	0,993802	24	0,4036	0,9281	0,000070		0,000132	<b>0,528</b>		0,000083
Vorh. Alkohol (NIR)	95,295	24	1,2508	0,3521	0,156	0,055	0,535	0,291	0,103	0,2587
Ethanol (HPLC)	96,259	24	0,1872	0,9954	0,499		0,535	<b>0,933</b>		0,5098
Gesamtextrakt	25,096	24	0,3752	0,9424	0,151		0,594	0,255		0,2765
Glucose	1,367	24	0,5241	0,8528	0,0421		0,080	<b>0,528</b>		0,0505
- ohne Lfd.Nr. 1 + 2	1,357	22	0,7327	0,6921	0,0211		0,080	0,265		0,0374
Fructose	4,672	24	0,4150	0,9220	0,0485		0,169	0,287		0,0814
- ohne Lfd.Nr. 2	4,667	23	0,5885	0,8036	0,0354		0,169	0,210		0,0753
Vergärbare Zucker	6,033	24	0,4848	0,8796	0,100		0,206	0,486		0,1241
- ohne Lfd.Nr. 2	6,022	23	0,3217	0,9635	0,0826		0,205	0,402		0,1125
Glycerin	4,639	24	0,2183	0,9915	0,0377		0,208	0,181		0,0906
pH-Wert	3,176	24	0,7833	0,6535	0,0299		0,0476	<b>0,627</b>		0,0336
- ohne Lfd.Nr. 1 + 13	3,183	22	0,6288	0,7711	0,0186		0,0476	0,390		0,0257
Gesamtsäure	6,663	24	0,5455	0,8376	0,0214		0,107	0,200		0,0473
Reduktone	37,47	32	18,71	<b>0,0000</b>	0,768	<b>2,286</b>	3,475	0,221	<b>0,658</b>	1,4867
- ohne Probe 7 + 21	38,15	28	8,067	<b>0,0002</b>	0,772	1,450	3,529	0,219	<b>0,411</b>	1,5415
Freie SO <sub>2</sub>	47,57	32	331,2	<b>0,0000</b>	0,329	<b>4,225</b>	4,256	0,077	<b>0,993</b>	1,6703
- ohne Probe 7 + 21	48,64	28	172,3	<b>0,0000</b>	0,352	<b>3,253</b>	4,337	0,081	<b>0,750</b>	1,7336
- ohne Probe 7, 21 + 15	47,96	26	71,49	<b>0,0000</b>	0,351	<b>2,086</b>	4,285	0,082	<b>0,487</b>	1,7306
Gesamte SO <sub>2</sub>	140,75	32	46,63	<b>0,0000</b>	1,079	<b>5,155</b>	5,357	0,201	<b>0,962</b>	2,2564
- ohne Probe 15	139,85	30	29,43	<b>0,0000</b>	1,017	<b>3,834</b>	5,357	0,190	<b>0,716</b>	2,2596
- ohne Probe 7, 21 + 15	141,04	26	10,20	<b>0,0001</b>	1,075	2,304	5,357	0,201	<b>0,430</b>	2,3348

N = Anzahl der Messwerte

Für die Parameter Reduktone, Freie und Gesamte Schweflige Säure ist bei einem Wert des Quotienten  $s_r/s_z < 0,5$  eine Inhomogenität nachgewiesen. Der Wert des in diesem Falle zu beachtenden Quotient  $s_{Pr}/s_{Ziel}$  liegt auch nach Ausschluss der graphisch auffälligen Proben über dem zulässigen Höchstwert von 0,3. Jedoch liegt nach deren Ausschluss für die Parameter Reduktone und Gesamte Schweflige Säure die Standardabweichung der Proben  $s_{Pr}$  noch unterhalb des nach Fearn und Thompson ermittelten maximal tolerierbaren Wertes, der in der letzten Spalte der Tabelle 2 aufgeführt ist. Für diese beiden Parameter darf also von einer noch für die Laborvergleichsuntersuchung ausreichenden Homogenität ausgegangen werden. Diese Annahme ist jedoch für den Parameter Freie Schweflige Säure auszuschließen. Die Z-Score für diesen Parameter können daher nicht zu Lasten des Labors bewertet werden. Die Packeinheiten, aus denen die auffälligen Proben stammten wurden beim Versand an die Teilnehmer ausgeschlossen. Dennoch ist auch für die Parameter Reduktone und Gesamte Schweflige Säure eine störende Inhomogenität bei dem verbliebenen Prüfgut nicht auszuschließen, da jeweils nur maximal 14 der je 20 Abpackeinheiten überprüft wurden und, wie die unterschiedlichen Ergebnisse für die Proben 15 und 22 zeigen, Unterschiede auch innerhalb der Packeinheiten auftreten können.

Von dem Prüfgut **FT17P03** wurden ebenfalls 240 Flaschen jedoch a 0,375 L in 20 Kartons a 12 Flaschen bezogen. Die Ziehung der Proben zur Homogenitätsprüfung erfolgte wie bei dem Prüfgut FT17P02. Aus jeder Probe wurden 3 Doppelserien von Messproben erstellt. Je eine Doppelserie diente der Bestimmung des pH-Wertes und der Gesamtsäure sowie der jodometrischen Bestimmung der Freien, Gebundenen und Gesamten Schweflige Säure mit elektrometrischer Endpunktbestimmung an einem automatisierten Titrator. Die dritte Doppelserie wurde zur Bestimmung von Relativer Dichte, Vorhandenem Alkohol, Gesamtextrakt, Vergärbare Zucker(r), Glucose, Fructose, Glycerin, pH-Wert, Gesamtsäure, Weinsäure, Äpfelsäure, Milchsäu-

re und Flüchtiger Säure mittels Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie (FTIR) verwendet. Die Messergebnisse sind in Tabelle 3 und Tabelle 4 enthalten.

**Tabelle 3: Messergebnisse zur Homogenitätsprüfung des Prüfgutes FT17P03, Teil 1**

Lfd. Nr.	Probe-Nr	pH-Wert	Gesamtsäure g/L	Reduktone mg/L	Freie SO <sub>2</sub> mg/L	Gebundene SO <sub>2</sub> mg/L	Gesamrte SO <sub>2</sub> mg/L
1	6	3,66	5,41	11,25	31,77	50,00	81,77
2	15	3,64	5,44	12,29	31,77	50,00	81,77
3	5	3,68	5,33	11,56	33,33	50,00	83,33
4	10	3,68	5,40	11,56	31,25	51,04	82,29
5	18	3,68	5,35	11,56	31,77	51,04	82,81
6	19	3,68	5,40	11,88	32,29	52,08	84,37
7	12	3,70	5,33	11,88	31,77	51,04	82,81
8	8	3,71	5,33	11,88	31,25	50,00	81,25
9	17	3,69	5,46	11,56	32,81	53,13	85,94
10	3	3,71	5,34	11,88	32,81	50,00	82,81
11	11	3,72	5,16	11,88	32,81	51,04	83,85
12	9	3,73	5,13	11,88	33,33	50,00	83,33
13	17	3,59	5,43	11,25	32,81	52,08	84,89
14	8	3,64	5,29	12,19	31,77	48,96	80,73
15	6	3,66	5,27	11,88	32,29	50,00	82,29
16	15	3,65	5,37	11,56	30,73	51,04	81,77
17	5	3,67	5,25	11,88	34,38	51,04	85,42
18	19	3,68	5,30	13,23	33,33	51,04	84,37
19	10	3,69	5,31	11,88	33,33	51,04	84,37
20	3	3,70	5,28	12,19	33,85	50,00	83,85
21	12	3,71	5,32	11,88	33,85	50,00	83,85
22	18	3,72	5,35	12,50	33,85	50,00	83,85
23	9	3,72	5,28	12,50	33,85	50,00	83,85
24	11	3,72	5,28	12,50	34,90	50,00	84,90

Mit den Messergebnissen des Prüfgutes **FT17P03** wurde ebenso verfahren wie bei dem Prüfgut FT17P02. Die graphischen Auswertungen zeigten vor allem bei den FTIR-Messergebnissen nahezu durchgängig für die der Probe 17 zuzuordnenden laufenden Messnummern 9 und 15 gleichsinnig deutlich von den übrigen abweichende Messwerte. Dies deutet auf eine Inhomogenität hin. Da auch die Messwerte zur Probe 15 (Laufende Messnummern 2 und 16) zwar in geringerem Ausmaß aber jeweils derselben Richtung von den übrigen Messwerten abwichen wurden bei relativ vielen Parametern signifikante Korrelationen der Messwerte zur Probenummer beobachtet, während eine schwache bis mäßige Korrelation der Messergebnisse zur laufenden Messnummer nur vereinzelt beobachtet wurde. Auffällig abweichende einzelne Messergebnisse bei denen die zweite Messung im zentralen Bereich der Streuung der Messwerte lag wurden nur selten beobachtet.

Wie die Tabelle 5 mit den Ergebnissen der abschließenden Varianzanalyse aufzeigt, ist bei relativ vielen Parametern ein signifikanter Unterschied zwischen den Proben und damit eine Inhomogenität nachweisbar. Diese Ergebnisse der Varianzanalyse sind gültig, soweit der Wert für  $s_r/s_{Ziel}$  nicht über 0,5 liegt. Diese Forderung ist für den Parameter Weinsäure nur formal, für die potentiometrisch gemessenen pH-Werte und die acidimetrisch gemessenen Werte für Gesamtsäure allerdings nicht erfüllt. Die zuletzt angesprochenen Messwerte tragen damit zu einer Entscheidung über eine ausreichende Homogenität nicht bei, widersprechen ihr aber nicht.

**Tabelle 4: Messergebnisse zur Homogenitätsprüfung des Prüfgutes FT17P03, Teil 2 Messergebnisse mit FTIR**

Lfd. Nr.	Probe-Nr.	Dichte	Vorh. Alkohol	Gesamt-extrakt	Vergärb. Zucker	Glucose	Fructose	Glycerin	pH-Wert	Gesamt-säure	Wein-säure	Äpfel-säure	Milch-säure	Flüchtige Säure
		g/L	g/L	g/L	g/L	g/L	g/L	g/L		g/L	g/L	g/L	g/L	g/L
1	6	0,99876	92,55	37,10	13,54	6,57	7,07	6,99	3,66	5,04	2,04	0,81	3,06	0,774
2	15	0,99883	92,52	37,22	13,64	6,42	7,29	6,83	3,65	5,13	1,98	0,94	3,00	0,763
3	5	0,99873	92,83	37,11	13,55	6,61	7,04	6,92	3,66	5,03	2,00	0,79	3,11	0,779
4	10	0,99880	92,71	37,22	13,47	6,45	7,26	6,96	3,65	5,10	2,00	0,89	3,04	0,765
5	18	0,99877	92,96	37,19	13,47	6,44	7,12	6,91	3,65	5,08	2,03	0,83	3,07	0,770
6	19	0,99879	92,80	37,18	13,56	6,52	7,18	6,87	3,65	5,10	1,99	0,88	3,05	0,767
7	12	0,99876	92,99	37,21	13,55	6,54	7,04	6,90	3,66	5,07	2,01	0,82	3,10	0,770
8	8	0,99880	92,78	37,22	13,48	6,57	7,07	6,98	3,66	5,09	2,01	0,84	3,08	0,764
9	17	0,99889	92,17	37,21	13,63	6,22	7,51	6,71	3,64	5,18	1,97	1,07	2,92	0,771
10	3	0,99875	92,83	37,14	13,38	6,39	7,11	6,95	3,65	5,08	2,01	0,85	3,05	0,772
11	11	0,99875	93,08	37,18	13,37	6,57	7,02	7,09	3,66	5,07	2,01	0,81	3,09	0,769
12	9	0,99877	92,94	37,19	13,56	6,61	7,00	6,93	3,66	5,06	2,01	0,81	3,10	0,772
13	17	0,99886	92,07	37,33	13,61	6,22	7,47	6,71	3,64	5,19	2,05	1,03	2,93	0,784
14	8	0,99879	92,66	37,27	13,47	6,38	7,15	6,91	3,65	5,08	2,08	0,89	3,07	0,780
15	6	0,99872	92,90	37,17	13,46	6,50	6,94	6,89	3,66	5,06	2,09	0,81	3,10	0,790
16	15	0,99882	92,42	37,26	13,68	6,35	7,31	6,80	3,64	5,13	2,07	0,95	3,00	0,776
17	5	0,99872	92,92	37,18	13,32	6,50	6,96	7,02	3,65	5,03	2,10	0,78	3,07	0,787
18	19	0,99877	92,70	37,26	13,66	6,44	7,16	6,78	3,65	5,10	2,07	0,90	3,05	0,781
19	10	0,99874	92,70	37,17	13,52	6,38	7,15	6,76	3,65	5,12	2,06	0,89	3,04	0,783
20	3	0,99875	92,82	37,17	13,42	6,42	7,05	6,87	3,65	5,07	2,06	0,86	3,03	0,779
21	12	0,99873	92,71	37,17	13,43	6,50	6,95	6,87	3,66	5,07	2,12	0,82	3,04	0,780
22	18	0,99879	92,49	37,18	13,55	6,44	7,07	6,87	3,65	5,07	2,08	0,84	3,03	0,789
23	9	0,99874	92,87	37,18	13,53	6,41	7,00	6,91	3,66	5,04	2,05	0,82	3,11	0,797
24	11	0,99876	92,90	37,22	13,58	6,53	6,99	6,90	3,66	5,05	2,09	0,82	3,06	0,783

Der Wert des Quotienten  $s_{Pr}/s_{Ziel}$ , der im Fall nachgewiesener Inhomogenität zu beachten ist, liegt für die Parameter Vorhandener Alkohol, Glucose, Fructose, Gesamtsäure, Äpfel- und Milchsäure über 0,3. Daher ist letztlich ausschlaggebend, ob die Streuung zwischen den Proben  $s_{Pr}$  den nach Fearn und Thompson maximal zulässigen Betrag überschreitet. Dies ist für den Parameter Fructose nur ohne Ausschluss der auffälligen Probe, jedoch für den Parameter Äpfelsäure auch nach deren Ausschluss der Fall. Da, wie bei dem Prüfgut FT17P02, die Packeinheit, aus der die auffällige Probe stammte, beim Versand an die Teilnehmer ausgeschlossen wurde, ist nur für den Parameter Äpfelsäure keine ausreichende Homogenität für die Laborvergleichsuntersuchung nachgewiesen.

**Tabelle 5: Ergebnisse der Homogenitätsprüfung für das Prüfgut FT17P03**

	Mittelwert	N	F	p	Standardabweichungen			Quotienten		Maximal tolerierter Wert für $s_{Pr}$
					Fehler ( $s_r$ )	Proben ( $s_{Pr}$ )	Ziel ( $s_z$ )	$s_r/s_z$	$s_{Pr}/s_z$	
Rel. Dichte FTIR	0,99877	24	9,1219	<b>0,0003</b>	0,000019	0,000039	0,000132	0,148	0,297	0,000056
Vorh. Alkohol FTIR	92,722	24	4,9683	<b>0,0051</b>	0,146	0,206	0,535	0,273	<b>0,384</b>	0,2537
Gesamtextrakt FTIR	37,197	24	1,9634	0,1309	0,042	0,029	0,594	0,070	0,049	0,2414
Vergärbare Zucker FTIR	13,518	24	2,0374	0,1185	0,077	0,055	0,408	0,188	0,135	0,1784
Glucose FTIR	6,457	24	3,7739	<b>0,0155</b>	0,069	0,081	0,217	0,316	<b>0,373</b>	0,1080
Fructose FTIR	7,121	24	18,559	<b>0,0000</b>	0,050	<b>0,147</b>	0,235	0,211	<b>0,626</b>	0,1050
- ohne Probe 17	7,088	22	7,9206	<b>0,0010</b>	0,051	0,095	0,234	0,219	<b>0,407</b>	0,1071
Glycerin FTIR	6,889	24	2,4655	0,0681	0,071	0,060	0,291	0,242	0,207	0,1339
pH-Wert FTIR	3,653	24	6,8788	<b>0,0012</b>	0,004	0,006	0,0476	0,074	0,127	0,0194
Gesamtsäure FTIR	5,085	24	42,328	<b>0,0000</b>	0,009	0,041	0,107	0,085	<b>0,388</b>	0,0438
Weinsäure FTIR	2,041	24	0,2046	0,9934	0,053		0,104	<b>0,510</b>		0,0642
Äpfelsäure FTIR	0,865	24	50,758	<b>0,0000</b>	0,015	<b>0,073</b>	0,040	0,366	<b>1,824</b>	0,0209
- ohne Probe17	0,848	22	27,429	<b>0,0000</b>	0,013	<b>0,046</b>	0,039	0,320	<b>1,163</b>	0,0201
Milchsäure FTIR	3,050	24	11,127	<b>0,0001</b>	0,020	0,046	0,146	0,140	<b>0,315</b>	0,0615
Flüchtige Säure FTIR	0,777	24	0,3631	0,9481	0,011		0,046	0,235		0,0208
pH-Wert, potentiometr.	3,685	24	2,1239	0,1057	0,027	0,020	0,0476	<b>0,561</b>	<b>0,420</b>	0,0312
Gesamtsäure acidim.	5,325	24	2,3819	0,0757	0,062	0,051	0,107	<b>0,579</b>	<b>0,481</b>	0,0717
Reduktone	11,94	24	0,9415	0,5363	0,452		1,32	0,344		0,6735
Freie SO2	32,75	23	1,5542	0,2300	0,968	0,510	3,10	0,312	0,164	1,5334
Gebundene SO2	50,61	23	3,7737	<b>0,0155</b>	0,601	0,708	4,49	0,134	0,158	1,8840
Gesamte SO2	83,35	24	5,0399	0,0048	0,789	1,122	5,357	0,147	0,209	2,2704

Zusammenfassend ist festzuhalten, dass die für beide Prüfgüter festgestellten Homogenitätsmängel nach der Erfahrung für ohne besondere Vorkehrungen "vom Lager" entnommene Prüfgüter nicht ungewöhnlich sind. Wird nur bei den angesprochenen Parameter und Prüfgut Kombinationen ein unbefriedigender Z-Score erhalten, ist die Inhomogenität des Prüfgutes bei der Würdigung des probenübergreifenden Gesamtergebnisses zu Gunsten des Labors zu berücksichtigen.

## 2.2 Hinweise auf Informationen zur Durchführung und Ergebnisauswertung

Die Informationen zur Verteilung des Untersuchungsmaterials an die Laboratorien, die zur Bearbeitung gegebenen Erläuterungen hinsichtlich der Durchführung der Untersuchungen, Ergebnisübermittlung und Ergebnisbehandlung können im Wesentlichen Teil 1 des Berichtes entnommen werden.

Wie bereits in Teil 1 der Berichte angemerkt, wurden in Einzelfällen in den TXT-Dateien Alkoholgehalte in der Einheit %vol mitgeteilt. Diese wurden mit dem Faktor 7,8924 in die weit über-

wiegend verwendete Einheit g/L umgerechnet, die in der Ergebnismappe für die Ergebnismitteilung zu diesem Parameter vorgegeben ist.

Zur Verfahrensweise bei der Ergebnisauswertung, insbesondere hinsichtlich der Anwendung Matrixeffekte berücksichtigender Zielstandardabweichungen für die Berechnung der Z-Score und damit für die Bewertung der FTIR-Untersuchungsergebnisse wird auf Abschnitt 2.4 in Teil 1 der Berichte verwiesen.

### 3 Gesamtergebnis der Laborvergleichsuntersuchung an den Prüfgütern FT17P02 und FT17P03

#### 3.1 Herkömmliche Methoden mit Diskussion einzelner Parameter

Das Gesamtergebnis der Laborvergleichsuntersuchung für das Prüfgut FT17P02 wird durch die in Tabelle 6 und für das Prüfgut FT17P03 durch die in Tabelle 7 zusammengestellten deskriptiv-statistischen Ergebnisse für die geprüften Parameter belegt. In beiden Tabellen wird wie in Teil 1 das Gesamtergebnis der Untersuchungen mit herkömmlichen Methoden dargestellt. Auf den Teil 1 wird auch hinsichtlich der Bedeutung der zur Bewertung des Gesamtergebnisses herangezogenen Größen und der Regeln zu ihrer Interpretation Bezug genommen. Eine Betrachtung des Gesamtergebnisses der FTIR-Messungen auf der Basis der Vergleichsstandardabweichungen dieses Verfahrens erfolgt im Abschnitt 3.2.

Für das **Prüfgut FT17P02** kam es bei 15 der 27 Datengruppen zu keinem Ergebnisausschluss, wobei grob fehlerhafte Werte, die bei 13 Datengruppen auftraten, unberücksichtigt blieben. Mit Ausnahme des Parameters Reduktone sowie der Ergebnisse für Freie Schweflige Säure, bei denen drei bis vier um mehr als 50 % vom Median abweichende Werte vorlagen, handelte es sich überwiegend um ein Laborergebnis je Datengruppe. Wegen einer Abweichung um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median wurden nur bei den Parametern Relative Dichte und jodometrisch bestimmter Gesamte Schweflige Säure mehr als ein Laborergebnis ausgeschlossen. Auch die maßgeblichen Quotienten  $s_L/s_{Ziel}$  lagen in der Regel unter dem Richtwert 1,5. Dieser wurde bei den Parametern Vorhandener Alkohol, Gesamtsäure, Weinsäure bei Berücksichtigung aller herkömmlichen Verfahren, jodometrisch bestimmte Freie Schweflige Säure und Gesamte Schweflige Säure (Destillationsverfahren) mit Werten zwischen 1,7 und 1,9 mäßig überschritten. Die Werte dieses Quotienten überschritten den Höchstwert 2,0 eindeutig bei den Parametern **Vergärbare Zucker (reduktometrisch), Flüchtige Säure, Acetat, Gesamte Milchsäure, Freie Schweflige Säure** (bei Berücksichtigung der FTIR-Ergebnisse in der Gruppe der Verfahren, deren Ergebnisse unabhängig vom Gehalt an Reduktonen sind) und **jodometrisch bestimmte Gesamte Schweflige Säure**. Bei diesen Parametern war stets auch die Zuverlässigkeit des Bezugswertes eingeschränkt oder nicht mehr gegeben, wie die auf über 0,4 oder sogar über 0,5 erhöhten Werte des Quotienten  $u_M/s_{Ziel}$  ausweisen. Prüfgutübergreifend wurden die Ergebnisse für die zweite Gruppe der auffälligen Parameter bereits in Teil 1 des Berichtes dargestellt und diskutiert. Für diese Parameter können **keine gültigen Z-Score** ermittelt werden. Für **alle anderen Parameter** sind die erhaltenen **Z-Score aussagekräftig**.

**Tabelle 6: Deskriptiv-statistische Kennzahlen der Ergebnisse mit herkömmlichen Methoden für das Weißweinprüfgut FT17P02**

Parameter	Alle Werte	Gültige Werte	Mittel-Wert	Median-Wert	Labor-Stdbw. SL	Zielstdabw n. Horwitz SH	Zielstdabw exp. herk. S <sub>exp</sub>	Zielstdabw exp. FTIR S <sub>Ü</sub>	sL/SH	Quotienten				
										sL/S <sub>exp</sub>	sL/s <sub>Ü</sub>	u <sub>M</sub> /s <sub>Ziel</sub>	u <sub>M</sub> /s <sub>Ü</sub>	
Relative Dichte 20 °C/20 °C	52	48	0,99373	0,99372	0,000138		0,000132	0,000190		1,04	0,72	0,15	0,10	
Vorhandener Alkohol (g/L)	24	24	94,375	94,485	0,913	2,695	0,535	0,886	0,34	1,71	1,03	0,35	0,21	
Gesamtextrakt (g/L)	40 (1)	40	24,625	24,657	0,632	0,861	0,594	0,594	0,73	1,06	1,06	0,17	0,17	
Vergärbare Zucker (g/L)														
- enzymatisch + HPLC	33	33	5,566	5,540	0,270	0,242	0,192	0,584	1,12	1,40	0,46	0,24	0,08	
- reduktometrisch	11	10	5,739	5,800	0,644	0,252	0,200	0,584	2,56	3,23	1,32	1,02	0,40	
Glucose (g/L)	36	36	1,293	1,300	0,117	0,0707	0,0780	0,408	1,66	1,50	0,29	0,25	0,05	
Fructose (g/L)	36	36	4,239	4,280	0,225	0,195	0,158	0,330	1,16	1,42	0,68	0,24	0,11	
Glycerin (g/L)	22	22	4,705	4,665	0,244	0,209		0,348	1,17		0,70	0,25	0,15	
pH-Wert	41	40	3,266	3,275	0,064		0,0476	0,0493		1,35	1,30	0,21	0,21	
Gesamtsäure (g/L)	46	45	6,718	6,670	0,185	0,284	0,107	0,145	0,65	1,73	1,28	0,26	0,19	
Weinsäure (g/L)														
- alle herk. Verfahren	30 (1)	29	2,692	2,690	0,217	0,131		0,227	1,66		0,96	0,31	0,18	
- nur HPLC	13 (1)	13	2,672	2,670	0,0889	0,130		0,227	0,68		0,39	0,19	0,11	
Flüchtige Säure (g/L)	19	18	0,334	0,325	0,0672	0,0218	0,0286	0,0891	3,09	2,35	0,75	0,55	0,18	
- Z <sub>Max</sub> < 4	19	17	0,326	0,320	0,0612	0,0215	0,0286	0,0891	2,85	2,14	0,69	0,52	0,17	
Acetat als Essigsäure (g/L)	21 (1)	21	0,296	0,300	0,0502	0,0203			2,47			0,54		
Gesamte Äpfelsäure (g/L)	12	12	3,089	3,070	0,148	0,147	0,0959	0,218	1,01	1,54	0,68	0,44	0,20	
L-Äpfelsäure (g/L)	23	22	3,074	3,045	0,150	0,146	0,0952		1,03	1,57		0,34		
Gesamte Milchsäure (g/L)	13 (2)	12	0,178	0,181	0,0346	0,0133		0,209	2,61		0,165	0,75	0,05	
L-Milchsäure (g/L)	17 (1)	17	0,070	0,068	0,0315	0,0057	0,0206		5,49	1,53		0,37		
Reduktone (mg/L)	43 (4)	42	29,56	29,00	4,34	2,80			1,55			0,24		
Freie Schweflige Säure (mg/L)														
- Destillation + Photometrie	14	14	8,33	8,00	1,90	0,936			2,03			0,54		
- wie vorstehend + FTIR	29 (4)	29	10,03	9,80	2,61	1,11			2,35			0,44		
- jodometrisch incl. Reduktone	42 (3)	42	38,55	38,00	6,15	3,52			1,75			0,27		
- jodometrisch excl. Reduktone	42 (3)	42	9,71	9,00	3,83	1,03	3,52		3,71	1,09		0,17		
Gesamte Schweflige Säure (mg/L)														
- Destillationsverfahren	31 (1)	31	91,82	91,50	10,11	7,42	5,36		1,36	1,89		0,34		
- jodometrisch incl. Reduktone	27 (1)	25	118,91	119,60	13,94	9,31	5,36		1,50	2,60		0,52		
- jodometrisch excl. Reduktone	26 (1)	24	89,53	87,00	11,83	7,11	5,36		1,66	2,21		0,45		

**Erläuterungen zu Tabelle 6 und Tabelle 7:**

Bau markierte Daten sind auffällig und werden diskutiert. Rot markierte Daten weisen auf die Überschreitung von Grenzen hin.

In der Spalte "Alle Werte" ist in Klammern die Anzahl weiterer Werte angegeben, die um mehr als 50 % vom Median abweichen und unberücksichtigt blieben.



**Weitere Erläuterungen zur Tabelle 6 und zur Tabelle 7 :**

**Labor-Stdabw. ( $s_L$ )** = Standardabweichung der Ergebniswerte zwischen den Laboratorien

**Zielstdabw. n. Horwitz ( $s_H$ )** = Zielstandardabweichung berechnet nach Horwitz

**Zielstdabw. exp. herk. ( $s_{exp}$ )** = Zielstandardabweichung aus experimentellen Daten für herkömmliche Methoden (in der Regel aus der OIV-Methodensammlung)

**Zielstdabw. exp. FTIR ( $s_{\dot{U}}$ )** = Zielstandardabweichung aus experimentellen Daten für die Bewertung der Ergebnisse des FTIR-Verfahrens unter Berücksichtigung von Matrixeffekten

**Quotient ( $s_L/s_H$ )** = Quotient aus der Standardabweichung zwischen den Laboratorien und der Zielstandardabweichung n. Horwitz

**Quotient ( $s_L/s_{exp}$ )** = Quotient aus der Standardabweichung zwischen den Laboratorien und der Zielstandardabweichung aus experimentellen Daten ( $s_{exp}$ )

**Quotient ( $s_L/s_{\dot{U}}$ )** = Quotient aus der Standardabweichung zwischen den Laboratorien und der Zielstandardabweichung für die Ergebnisse des FTIR-Verfahrens

**Quotient ( $u_M/s_{Ziel}$ )** = Quotient aus dem Standardfehler des Mittelwertes und der Zielstandardabweichung für die Bewertung der Ergebnisse herkömmlicher Methoden

**Quotient ( $u_M/s_{\dot{U}}$ )** = Quotient aus dem Standardfehler des Mittelwertes und der Zielstandardabweichung für die Bewertung der Ergebnisse des FTIR-Verfahrens

Bei dem Prüfgut **FT17P03** war in der Auswertung bei 15 von 28 Wertegruppen kein Laborergebnis auszuschließen, wobei wiederum grob fehlerhafte Werte, die in zehn Gruppen auftraten, unberücksichtigt blieben. Bei weiteren sieben Wertegruppen war aufgrund eines absoluten Z-Score-Betrages über 5 nur jeweils ein Laborergebnis auszuschließen. Lediglich bei den Parametern Relative Dichte und L-Äpfelsäure wurden aus diesem Grund mehr als zwei Laborergebnisse, bei der wiederholten Berechnung ausgeschlossen. Um mehr als 50 % vom Median abweichende Werte traten – für Rotweine typisch – mit rund einem Drittel aller Laborergebnisse bei dem Parameter Reduktone auf. Mit 14 Wertegruppen lag bei nur der Hälfte der Wertegruppen der Quotient  $s_L/s_Z$  im unauffälligen Bereich bis zu 1,5. Bei neun Wertegruppen war der Quotient mäßig auf einen Betrag von rund 1,6 bis 1,9 erhöht, während bei fünf Wertegruppen Vergärbare Zucker (reduktometrisch), Flüchtige Säure (bei Bewertung mit der Vergleichsstandardabweichung des OIV-Verfahrens), Gesamte und L-Äpfelsäure sowie Reduktone der Höchstwert 2,0 überschritten wurde. Da der Median der Ergebnisse für Flüchtige Säure über 0,5 g/L lag, beruht die gültige Bewertung der Laborleistung jedoch auf der Grundlage der nach Horwitz berechneten Zielstandardabweichung. In diesen Fällen ist auch die Zuverlässigkeit des Bezugswertes eingeschränkt und für die Ergebnisse der reduktometrischen Bestimmung der Vergärbaren Zucker und der Gesamten Äpfelsäure nicht gegeben. Eine eingeschränkte Zuverlässigkeit des Bezugswertes in Kombination mit mäßig erhöhten Quotienten  $s_L/s_{Ziel}$  ist auch bei den Parametern Flüchtige Säure (nur  $SO_2$ -korrigierte Werte), Acetat und Freie Schweflige Säure (Destillation + Photometrie) zu beachten. Bei dem Parameter Weinsäure ergibt sich die eingeschränkte Zuverlässigkeit des Bezugswertes für die Gruppe der mit Hochleistungsflüssigkeitschromatographie (HPLC) und Ionenchromatographie (IC) ermittelten Werte vor allem aus der relativ geringen Anzahl gültiger Laborergebnisse. Daher wurden die Laborergebnisse für diesen Parameter unter Einschluss der Ergebnisse photometrischer Verfahren bewertet, zumal letztere, wie die Aufgliederung nach den Untersuchungsmethoden im Abschnitt 5.10.4 zeigt, bei diesem Rotweinprüfgut gegenüber den mittels HPLC erhaltenen Laborergebnissen keine erhöhte Streuung zeigen. Auf alle Parameter, bei denen erhöhte bzw. über dem Höchstwert liegende Quotienten  $s_L/s_{Ziel}$  vorliegen, ist bereits bei der Besprechung der Gesamtergebnisse im Abschnitt 4 des Teiles 1 der Berichte eingegangen worden, worauf verwiesen wird.

Tabelle 7: Deskriptiv-statistische Kennzahlen der Ergebnisse mit herkömmlichen Methoden für das Rotweinprüfgut FT17P03

Parameter	Alle Werte	Gültige Werte	Mittel-Wert	Median-Wert	Labor-Stdabw. S <sub>L</sub>	Zielstdabw n. Horwitz S <sub>H</sub>	Zielstdabw exp. herk. S <sub>exp</sub>	Zielstdabw exp. FTIR S <sub>Ü</sub>	Quotienten				
									S <sub>L</sub> /S <sub>H</sub>	S <sub>L</sub> /S <sub>exp</sub>	S <sub>L</sub> /S <sub>Ü</sub>	u <sub>M</sub> /S <sub>Ziel</sub>	u <sub>M</sub> /S <sub>Ü</sub>
Relative Dichte 20 °C/20 °C	54	50	0,99898	0,99899	0,000130		0,000132	0,000190		0,98	0,68	0,14	0,09
Vorhandener Alkohol (g/L)	26	26	91,297	91,350	0,949	2,619	0,535	0,886	0,36	1,77	1,07	0,35	0,21
Gesamtextrakt (g/L)	42	41	37,086	37,200	0,454	1,221	0,594	0,594	0,37	0,76	0,76	0,12	0,12
Vergärbare Zucker (g/L)													
- enzymatisch + HPLC	34	34	13,684	13,700	0,251	0,523	0,413	0,584	0,48	0,61	0,43	0,10	0,07
- reduktometrisch	12	12	14,711	14,645	0,940	0,553	0,438	0,584	1,70	2,14	1,61	0,62	0,46
Glucose (g/L)	40	40	6,720	6,785	0,216	0,288	0,226	0,408	0,75	0,95	0,53	0,15	0,08
Fructose (g/L)	40	40	6,947	6,850	0,324	0,290	0,228	0,330	1,12	1,42	0,98	0,22	0,16
Glycerin (g/L)	24	24	7,103	7,040	0,340	0,297		0,348	1,15		0,98	0,23	0,20
pH-Wert	47	46	3,663	3,675	0,073		0,0476	0,0493		1,53	1,48	0,23	0,22
Gesamtsäure (g/L)	50	48	5,092	5,084	0,155	0,225	0,1071	0,145	0,69	1,45	1,07	0,21	0,15
Weinsäure (g/L)													
- HPLC + IC	11	11	1,702	1,650	0,122	0,0866		0,227	1,41		0,54	0,42	0,17
- alle herkömmlichen Verfahren	27	27	1,738	1,690	0,132	0,0883		0,227	1,50		0,58	0,29	0,11
Flüchtige Säure (g/L)													
- SO <sub>2</sub> korr. + ausgeschlossen	21	19	0,5895	0,5740	0,0594	0,0353	0,0286	0,0891	1,68	2,08	0,67	0,48	0,15
- nur SO <sub>2</sub> korr.	18	16	0,5765	0,5685	0,0549	0,0350	0,0286	0,0891	1,57	1,92	0,62	0,48	0,15
Acetat als Essigsäure (g/L)	25	24	0,5573	0,5470	0,0645	0,0339			1,90			0,39	
Gesamte Äpfelsäure (g/L)	11 (1)	10	0,6361	0,6300	0,122	0,0382	0,0339	0,22	3,18	3,59	0,56	1,13	0,18
L-Äpfelsäure (g/L)	24 (3)	21	0,5385	0,5350	0,0665	0,0333	0,0315		2,00	2,11		0,46	
Gesamte Milchsäure (g/L)	19	17	3,270	3,302	0,204	0,156	0,2090		1,31		0,98	0,32	0,24
L-Milchsäure (g/L)	25 (1)	24	2,709	2,708	0,206	0,132	0,138		1,56	1,49		0,30	
Reduktone (mg/L)	35 (14)	35	12,63	12,90	3,28	1,40			2,33			0,39	
Freie Schweflige Säure (mg/L)													
- Destillation + Photometrie	16 (1)	16	23,80	23,53	4,33	2,34			1,85			0,46	
- wie vorstehend; z < 4	16 (1)	15	23,06	23,36	3,25	2,33			1,40			0,36	
- wie vorstehend + FTIR	33 (3)	33	24,32	23,80	4,04	2,36			1,71			0,30	
- jodometr. incl. Reduktone	46	45	32,39	31,00	5,20	2,96			1,76			0,26	
- jodometr. excl. Reduktone	45 (1)	45	20,97	20,30	4,79	2,06	2,96		2,32	1,62		0,24	
Gesamte Schweflige Säure (mg/L)													
- Destillationsverfahren	36	36	70,07	68,27	7,69	5,78	5,36		1,33	1,44		0,24	
- jodometr. incl. Reduktone	29 (1)	29	78,69	80,00	9,04	6,62	5,36		1,37	1,69		0,31	
- jodometr. excl. Reduktone	29 (1)	29	68,39	68,00	9,80	5,77	5,36		1,70	1,83		0,34	

Bei zusammenfassender Betrachtung werden – **mit Ausnahme** der Parameter **Vergärbare Zucker (reduktometrisch)**, **Gesamte** und **L-Äpfelsäure** sowie **Reduktone** – **gültige Z-Score** erhalten, wobei für die Parameter Flüchtige Säure (auch bei Bewertung auf Basis der Zielstandardabweichung nach Horwitz), Acetat und mit Verfahren ohne Reduktoneinfluss bestimmte Freie Schweflige Säure die eingeschränkte Zuverlässigkeit des Bezugswertes zu berücksichtigen ist.

### 3.2 Gesamtergebnis der FTIR-Untersuchungen

Wie in Teil 1 im Abschnitt 5.2 begründet, wurden auch für die Prüfgüter FT17P02 und FT17P03 die Ergebnisse der FTIR-Untersuchungen ergänzend einer auf sie beschränkten Gesamtauswertung unter Berechnung von Mittelwert und Standardabweichung der Laborergebnisse durch ein robustes Verfahren unterzogen. Hierbei werden insbesondere die Standardabweichungen der Laborergebnisse mit den Vergleichsstandardabweichungen des FTIR-Verfahrens verglichen. Die Daten sind für das Prüfgut FT17P02 in der Tabelle 8 und für das Prüfgut FT17P03 in der Tabelle 9 zusammengefasst. Wie in Abschnitt 5.2 des Teiles 1 der Berichte für das Prüfgut FT17P01, werden für den Parameter Fructose die Werte der Zielstandardabweichungen ( $s_{\bar{U}} = \pm 0,330$  g/L und  $s_{\text{FTIR}} = \pm 0,222$  g/L) eingesetzt, die für die Basiskalibrierung ermittelt wurden, die in der Produktkalibrierung AP\_2011 enthalten ist.

Wie bereits in Teil 1 der Berichte für das Prüfgut FT17P01 angesprochen, weisen auch bei den Prüfgütern **FT17P02** und **FT17P03** die Messergebnisse für fast alle Parameter bei Gegenüberstellung mit der Vergleichsstandardabweichung des FTIR-Verfahrens **erhöhte Quotienten  $s_L/s_{\text{FTIR}}$**  auf und zeigen damit eine mangelhafte Nutzung der Möglichkeiten des Verfahrens an. Eine durchgehende Ausnahme besteht nur für den Parameter Vorhandener Alkohol.

Bei dem Prüfgut **FT17P02** liegt der Gehalt an **Gesamter Milchsäure** und bei der Prüfgut **FT17P03** der Gehalt an **Gesamter Äpfelsäure** unter der Bestimmungsgrenze des FTIR-Verfahrens. Um zu verdeutlichen, dass mit der **Überschreitung der Bestimmungsgrenze** statistische Bewertungen eingeschränkt sind und insbesondere **keine Ermittlung gültiger Z-Score** verbunden ist, werden die beschreibenden statistischen Kennzahlen für diese Parameter in der Tabelle 8 bzw. der Tabelle 9 in grauer Schriftfarbe dargestellt. Aus diesem Grund sind für die angesprochenen Parameter/Prüfgut-Kombinationen in den Datentabellen der Abschnitte 4.14.3 und 5.13.3 sowie in den Laborergebnismitteilungen keine Z-Score ausgewiesen. Außerdem liegt der Gehalt an **Glucose** bei dem Prüfgut **FT17P02** nahe der Bestimmungsgrenze dieses Verfahrens. Es traten jedoch noch keine negativen Ergebniswerte auf, sodass die **Z-Score** für diesen Parameter sowohl bei Bewertung mit der Übereinstimmungsstandardabweichung  $s_{\bar{U}}$  als auch mit der FTIR-Vergleichsstandardabweichung **gültig** sind. Schließlich liegt bei diesem Prüfgut der Gehalt an **Freier Schwefliger Säure** an der Bestimmungsgrenze, sodass auffällige Z-Score nicht zu Lasten des Labors gewertet werden können. Im Übrigen wird zur Bewertung der Ergebnisse für Freie und Gesamte Schweflige Säure auf die prüfgutübergreifenden Ausführungen im Abschnitt 4.4 des Teiles 1 der Berichte verwiesen.

**Tabelle 8: Deskriptiv-statistische Ergebnisse der FTIR-Untersuchungen für das Weißweinprüfgut FT17P02**

Parameter	Alle Werte	Mittel-Wert	Median Wert	Labor-Stdabw. (S <sub>L</sub> )	Zielstdabw n. Horwitz (S <sub>H</sub> )	Zielstdabw exp. FTIR (S <sub>FTIR</sub> )	Quotient S <sub>L</sub> /S <sub>H</sub>	Quotient S <sub>L</sub> /S <sub>FTIR</sub>	Quotient U <sub>M</sub> /S <sub>FTIR</sub>
Relative Dichte 20 °C/20 °C	85	0,99389	0,993900	0,000266		0,000146		1,82	0,20
Vorhandener Alkohol (g/L)	89	94,267	94,300	0,807	2,691	0,739	0,30	1,09	0,12
Gesamtextrakt (g/L)	55	24,909	25,000	0,656	0,871	0,415	0,75	1,58	0,21
Vergärbare Zucker (r) (g/L)	82	5,409	5,375	0,621	0,236	0,354	2,63	1,76	0,19
Vergärbare Zucker (S) (g/L)	84	5,327	5,290	0,632	0,233	0,354	2,71	1,79	0,19
Glucose (g/L)	83	1,197	1,150	0,519	0,064	0,288	8,15	1,80	0,20
Fructose (g/L)	83	4,141	4,130	0,452	0,189	0,222	2,40	2,04	0,22
Glycerin (g/L)	71	4,576	4,570	0,399	0,206	0,265	1,94	1,51	0,18
pH-Wert	82	3,282	3,280	0,059		0,0188		3,12	0,34
Gesamtsäure (g/L)	88	6,778	6,795	0,152	0,288	0,0816	0,53	1,86	0,20
Weinsäure (g/L)	77	2,631	2,650	0,237	0,129	0,132	1,83	1,80	0,20
Flüchtige Säure (g/L)	79	0,342	0,350	0,085	0,023	0,0427	3,68	2,00	0,23
Gesamte Äpfelsäure (g/L)	77	3,163	3,190	0,317	0,152	0,0975	2,09	3,25	0,37
Gesamte Milchsäure (g/L)	57	0,122	0,120	0,187	0,0093	0,0805	20,00	2,32	0,31
Freie Schweflige Säure (mg/L)	19	13,18	13,00	4,18	1,41	1,41	2,96	2,96	0,22
Gesamte Schweflige Säure (mg/L)	19	87,21	87,00	12,23	7,11	5,36	1,72	2,28	0,52

**Tabelle 9: Deskriptiv-statistische Ergebnisse der FTIR-Untersuchungen für das Rotweinprüfgut FT17P03**

Parameter	Alle Werte	Mittel-Wert	Median Wert	Labor-Stdabw. S <sub>L</sub>	Zielstdabw n. Horwitz S <sub>H</sub>	Zielstdabw exp. FTIR S <sub>FTIR</sub>	Quotient S <sub>L</sub> /S <sub>H</sub>	Quotient S <sub>L</sub> /S <sub>FTIR</sub>	Quotient U <sub>M</sub> /S <sub>FTIR</sub>
Relative Dichte 20 °C/20 °C	85	0,99905	0,999070	0,000252		0,000146		1,73	0,19
Vorhandener Alkohol (g/L)	89	91,542	91,500	0,852	2,623	0,739	0,33	1,15	0,12
Gesamtextrakt (g/L)	55	37,532	37,570	0,661	1,231	0,415	0,54	1,59	0,21
Vergärbare Zucker (r)	82	13,738	13,685	0,807	0,522	0,354	1,55	2,28	0,25
Vergärbare Zucker (S) (g/L)	84	13,412	13,425	0,653	0,514	0,354	1,27	1,84	0,20
Glucose (g/L)	83	6,679	6,660	0,532	0,283	0,288	1,88	1,85	0,20
Fructose (g/L)	83	6,714	6,610	0,473	0,281	0,222	1,68	2,13	0,23
Glycerin (g/L)	71	6,837	6,800	0,516	0,288	0,265	1,79	1,95	0,23
pH-Wert	82	3,653	3,650	0,076		0,0188		4,06	0,45
Gesamtsäure (g/L)	88	5,146	5,120	0,171	0,227	0,0816	0,76	2,10	0,22
Weinsäure (g/L)	77	1,838	1,810	0,212	0,0936	0,132	2,26	1,61	0,18
Flüchtige Säure (g/L)	79	0,603	0,600	0,0869	0,0367	0,0427	2,37	2,04	0,23
Gesamte Äpfelsäure (g/L)	69	0,480	0,480	0,234	0,0303	0,0975	7,72	2,40	0,29
Gesamte Milchsäure (g/L)	77	2,867	2,860	0,370	0,138	0,0805	2,68	4,60	0,52
Freie Schweflige Säure (mg/L)	19	24,63	24,00	4,33	2,38	2,38	1,82	1,82	0,42
Gesamte Schweflige Säure (mg/L)	19	70,60	72,00	9,56	6,05	5,36	1,58	1,78	0,41

**Erläuterungen zu Tabelle 8 und Tabelle 9:****Labor-Stdabw. ( $s_L$ )** = Standardabweichung der Werte zwischen den Laboratorien**Zielstdabw. n. Horwitz ( $s_H$ )** = Zielstandardabweichung berechnet nach Horwitz**Zielstdabw. exp. FTIR ( $s_{FTIR}$ )** = Zielstandardabweichung aus experimentellen Daten  
(Vergleichsstandardabweichung aus der Methodenvalidierung des FTIR-Verfahrens)**Quotient ( $s_L/s_H$ )** = Quotient aus der Standardabweichung zwischen den Laboratorien und der Zielstandardabweichung n. Horwitz**Quotient ( $s_L/s_{FTIR}$ )** = Quotient aus der Standardabweichung zwischen den Laboratorien und der Zielstandardabweichung für die Bewertung der Ergebnisse des FTIR-Verfahrens**Quotient ( $u_M/s_{FTIR}$ )** = Quotient aus dem Standardfehler des Mittelwertes und der Zielstandardabweichung für die Bewertung der Ergebnisse des FTIR-Verfahrens

Schließlich ist auch für diese Prüfgüter von Interesse, inwieweit die Zentralwerte der FTIR-Ergebnisse und der Ergebnisse der herkömmlichen Methoden übereinstimmen bzw. sich unterscheiden. Hierzu sind in Tabelle 10 und Tabelle 11 die Abweichungen der Mediane beider Ergebnisgruppen sowie die Z-Score wiedergegeben, die sich bei Division der Abweichung durch die zur Bewertung der Laborergebnisse verwendete Zielstandardabweichung ergeben.

**Tabelle 10: Differenz herkömmlicher und FTIR-Ergebnisse der Probe FT17P02**

	Median FTIR	Median herk.	Differenz	ZielStdAbw	Z- Score
Relative Dichte 20°C/20°C	0,99390	0,99372	0,000180	0,000190	0,95
Vorhandener Alkohol (g/L)	94,300	94,485	-0,185	0,886	-0,21
Gesamtextrakt(g/L)	25,000	24,657	0,343	0,594	0,58
Vergärbare Zucker (g/L), wie mitgeteilt	5,375	5,540	-0,165	0,584	-0,28
Vergärbare Zucker (g/L), reduktometr.	5,375	5,800	-0,425	0,584	-0,73
Vergärbare Zucker (g/L), Summe	5,290	5,540	-0,250	0,584	-0,43
Glucose (g/L)	6,795	6,670	0,125	0,145	0,86
Fructose (g/L)	1,150	1,300	-0,150	0,408	-0,37
Glycerin (g/L)	4,130	4,280	-0,150	0,330	-0,45
pH-Wert	4,570	4,665	-0,095	0,348	-0,27
Gesamtsäure (g/L)	3,280	3,275	0,005	0,049	0,10
Weinsäure (g/L)	2,650	2,670	-0,020	0,227	-0,09
Flüchtige Säure (g/L)	0,350	0,325	0,025	0,089	0,28
Gesamte Äpfelsäure (g/L)	3,190	3,070	0,120	0,218	0,55
Gesamte Milchsäure (g/L)	0,120	0,182	-0,061	0,209	-0,29
Freie Schweflige Säure (mg/L)	13,00	8,00	5,00	0,936	<b>5,34</b>
Gesamte Schweflige Säure (mg/L)	87,00	91,50	-4,50	5,36	-0,84

Die Z-Score der Mediane zeigen an, in welchem "mittleren" Ausmaß die Z-Score der FTIR-Ergebnisse gegenüber den Z-Score der Ergebnisse herkömmlicher Verfahren verschoben sind. Bei absoluten Beträgen der Z-Score unter eins ist die Bewertung der FTIR-Laborleistung durch die auf den Median der herkömmlichen Laborergebnisse bezogenen Z-Score sinnvoll, während bei absoluten Beträgen der Z-Score über 1,5 von erheblichen Matrixeffekten auszugehen ist.

Ein statistisch erheblicher Unterschied der Medianwerte zeigt sich bei dem Prüfgut **F17P02** nur für den Parameter **Freie Schweflige Säure**, wobei hier die Ursache eher in dem Umstand zu suchen ist, dass sowohl für die herkömmlichen Verfahren als auch für das FTIR-Verfahren wie bereits mehrfach angesprochen der Gehalt an der Bestimmungsgrenze liegt und die Homogenität des Prüfgutes nicht gegeben ist.

Bei dem Prüfgut **FT17P03** werden erheblich erhöhte Z-Score der FTIR-Medianwerte bei den Parametern **Vergärbare Zucker (reduktometrisch)** und **Gesamte Milchsäure** erhalten, für die unterschiedliche Ursachen in Betracht kommen. Bei dem Parameter Vergärbare Zucker ist die erhebliche Abweichung bei den Medianwerten wohl darauf zurückzuführen, dass die ursprünglich für reduktometrisch bestimmten Zucker entwickelten Parameterkalibrierungen durch Slope-Interzept-Korrekturen mit enzymatischen oder HPLC-Ergebnissen so verändert wurden, dass die für Rotweine typischen höheren Werte für reduzierende Zucker weitgehend ausgeglichen werden. Dahingegen bestätigt der erhebliche Matrixeffekt bei dem Parameter **Gesamte Milchsäure**, der ähnlich auch bei anderen Prüfgütern mit bestimmbareren Gehalten, z.B. auch dem Prüfgut FT17P04, gefunden wurde, dass bei diesem Parameter eine generelle Schwäche der überwiegend eingesetzten Parameterkalibrierung vorliegt. Die deutlichen Matrixeffekte bei mehreren Prüfgütern zeigen an, dass die eingesetzten Kalibrierungen materialspezifische Einflüsse nicht genügend ausgleichen und in der Regel zumindest einer Slope-Interzept-Korrektur bedürfen. Auf diese wird jedoch vor allem bei den Säuren, außer Gesamtsäure, wegen des erforderlichen Aufwandes häufig verzichtet. In derartigen Fällen ist eine sorgfältige Interpretation unbefriedigender Z-Score von Laborergebnissen erforderlich. **Erhöhte Beträge der Z-Score können in diesen Fällen nicht zu Lasten der Teilnehmer gewertet werden**, solange nicht nachgewiesen ist, dass der Matrixeffekt durch die Auswahl einer geeigneteren Kalibrierung oder eine Slope-Interzept-Korrektur zu beheben ist.

**Tabelle 11: Differenz herkömmlicher und FTIR-Ergebnisse der Probe FT17P03**

	Median FTIR	Median herk.	Differenz	ZielStdAbw	Z-Score
Relative Dichte 20°C/20°C	0,99907	0,998992	0,000078	0,000190	0,41
Vorhandener Alkohol g/L	91,500	91,350	0,150	0,886	0,17
Gesamtextrakt (g/L)	37,570	37,20	0,370	0,594	0,62
Vergärbare Zucker (g/L), wie mitgeteilt	13,685	13,700	-0,015	0,584	-0,03
Vergärbare Zucker (g/L), reduktometr.	13,685	14,645	-0,960	0,584	<b>-1,64</b>
Vergärbare Zucker (g/L), Summe	13,425	13,700	-0,275	0,584	-0,47
Glucose (g/L)	6,660	6,785	-0,125	0,408	-0,31
Fructose (g/L)	6,610	6,850	-0,240	0,330	-0,73
Glycerin (g/L)	6,800	7,04	-0,240	0,348	-0,69
pH-Wert	3,650	3,675	-0,025	0,049	-0,51
Gesamtsäure (g/L)	5,120	5,084	0,036	0,145	0,25
Weinsäure (g/L)	1,810	1,690	0,120	0,227	0,53
Flüchtige Säure (g/L)	0,600	0,5740	0,026	0,089	0,29
Gesamte Äpfelsäure (g/L)	0,480	0,630	-0,150	0,218	-0,69
Gesamte Milchsäure (g/L)	2,86	3,302	-0,442	0,209	<b>-2,12</b>
Freie Schweflige Säure (mg/L)	24,00	23,36	0,64	2,326	0,28
Gesamte Schweflige Säure (mg/L)	72,00	68,27	3,73	5,36	0,70

## 4 Ergebnisse zu den einzelnen Parametern der Probe FT17P02

### 4.1 Relative Dichte 20 °C/20 °C

#### 4.1.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 8.1	0,99342	-0,000300	-2,27	
02	LwK 8.1	0,99372	0,000000	0,00	
03	LwK 8.1	0,99369	-0,000030	-0,23	
05	LwK 8.4	0,99357	-0,000150	-1,14	
06	LwK 8.4	0,99373	0,000010	0,08	
07	LwK 8.4	0,99368	-0,000040	-0,30	
10	LwK 8.4	0,99366	-0,000060	-0,45	
11	LwK 8.4	0,99370	-0,000020	-0,15	
12	LwK 8.4	0,99380	0,000080	0,61	
14	LwK 8.4	0,99370	-0,000020	-0,15	
15	LwK 8.4	0,99370	-0,000020	-0,15	
17	LwK 8.4	0,99350	-0,000220	-1,67	
18	LwK 8.4	0,99365	-0,000070	-0,53	
20	LwK 8.4	0,99379	0,000070	0,53	
21	LwK 8.4	0,99370	-0,000020	-0,15	
22	LwK 8.4	0,99372	0,000000	0,00	
23	LwK 8.4	1,00361	0,009890	74,92	(**)
25	LwK 8.4	0,99385	0,000130	0,98	
26	LwK 8.4	0,99360	-0,000120	-0,91	
27	LwK 8.4	0,99379	0,000070	0,53	
29	LwK 8.4	0,99373	0,000010	0,08	
31	LwK 8.4	0,99372	0,000000	0,00	
34	LwK 8.4	0,99371	-0,000010	-0,08	
36	LwK 8.4	0,99370	-0,000020	-0,15	
38	LwK 8.4	0,99380	0,000080	0,61	
39	LwK 8.4	0,99377	0,000050	0,38	
40	LwK 8.4	0,99366	-0,000060	-0,45	
41	LwK 8.4	0,99375	0,000030	0,23	
42	LwK 8.4	0,99375	0,000030	0,23	
44	LwK 8.1	0,99369	-0,000030	-0,23	
46	LwK 8.4	0,99375	0,000030	0,23	
48	LwK 8.4	0,99390	0,000180	1,36	
50	LwK 8.4	0,99384	0,000120	0,91	
51	LwK 8.4	0,99370	-0,000020	-0,15	
52	LwK 8.4	0,99374	0,000025	0,19	
53	LwK 8.4	0,99400	0,000280	2,12	
54	LwK 8.4	0,99400	0,000280	2,12	
55	LwK 8.4	0,99378	0,000060	0,45	
56	LwK 8.4	0,99362	-0,000100	-0,76	
60	LwK 8.4	0,99340	-0,000320	-2,42	
61	LwK 8.4	0,99380	0,000080	0,61	
63	LwK 8.4	0,99380	0,000080	0,61	
64	LwK 8.4	0,99370	-0,000020	-0,15	
65	LwK 8.4	0,99370	-0,000020	-0,15	
67	LwK 8.1	0,99390	0,000180	1,36	
69	LwK 8.4	0,98445	-0,009270	-70,23	(**)
75	LwK 8.2	0,99510	0,001380	10,45	(**)
81	LwK 8.1	0,99374	0,000020	0,15	
84	LwK 8.4	0,99903	0,005310	40,23	(**)
96	LwK 8.4	0,99400	0,000280	2,12	
101	LwK 8.4	0,99340	-0,000320	-2,42	
102	LwK 8.4	0,99405	0,000330	2,50	

Mit (\*\*) gekennzeichnete Werte wurden bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

**4.1.2 FTIR-Laboregebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	0,99430	0,000580	3,05	
202	FTIR	0,99400	0,000280	1,47	
203	FTIR	0,99400	0,000280	1,47	
204	FTIR	0,99390	0,000180	0,95	
205	FTIR	0,99370	-0,000020	-0,11	
206	FTIR	0,99390	0,000180	0,95	
207	FTIR	0,99362	-0,000100	-0,53	
208	FTIR	0,99370	-0,000020	-0,11	
209	FTIR	0,99369	-0,000030	-0,16	
210	FTIR	0,99368	-0,000040	-0,21	
211	FTIR	0,99449	0,000770	4,05	
212	FTIR	0,99340	-0,000320	-1,68	
214	FTIR	0,99360	-0,000120	-0,63	
215	FTIR	0,99400	0,000280	1,47	
216	FTIR	0,99390	0,000180	0,95	
217	FTIR	0,99380	0,000080	0,42	
218	FTIR	0,99372	0,000000	0,00	
219	FTIR	0,99370	-0,000020	-0,11	
220	FTIR	0,99360	-0,000120	-0,63	
221	FTIR	0,99388	0,000160	0,84	
222	FTIR	0,99348	-0,000240	-1,26	
223	FTIR	0,99380	0,000080	0,42	
224	FTIR	0,99370	-0,000020	-0,11	
225	FTIR	0,99372	0,000000	0,00	
226	FTIR	0,99360	-0,000120	-0,63	
227	FTIR	0,99420	0,000480	2,53	
228	FTIR	0,99410	0,000380	2,00	
229	FTIR	0,99347	-0,000250	-1,32	
231	FTIR	0,99340	-0,000320	-1,68	
232	FTIR	0,99430	0,000580	3,05	
234	FTIR	0,99382	0,000100	0,53	
235	FTIR	0,99390	0,000180	0,95	
236	FTIR	0,99365	-0,000070	-0,37	
237	FTIR	0,99430	0,000580	3,05	
240	FTIR	0,99401	0,000290	1,53	
241	FTIR	0,99420	0,000480	2,53	
242	FTIR	0,99381	0,000090	0,47	
243	FTIR	0,99430	0,000580	3,05	
244	FTIR	0,99390	0,000180	0,95	
245	FTIR	0,99430	0,000580	3,05	
246	FTIR	0,99370	-0,000020	-0,11	
247	FTIR	0,99410	0,000380	2,00	
248	FTIR	0,99400	0,000280	1,47	
249	FTIR	0,99400	0,000280	1,47	
250	FTIR	0,99390	0,000180	0,95	
251	FTIR	0,99380	0,000080	0,42	
252	FTIR	0,99376	0,000040	0,21	
254	FTIR	0,99400	0,000280	1,47	
255	FTIR	0,99420	0,000480	2,53	
256	FTIR	0,99373	0,000010	0,05	
257	FTIR	0,99370	-0,000020	-0,11	
258	FTIR	0,99400	0,000280	1,47	
259	FTIR	0,99387	0,000150	0,79	
260	FTIR	0,99420	0,000480	2,53	
261	FTIR	0,99410	0,000380	2,00	
262	FTIR	0,99420	0,000480	2,53	
263	FTIR	0,99390	0,000180	0,95	
264	FTIR	0,99380	0,000080	0,42	
265	FTIR	0,99360	-0,000120	-0,63	
266	FTIR	0,99440	0,000680	3,58	
267	FTIR	0,99421	0,000490	2,58	
268	FTIR	0,99400	0,000280	1,47	
269	FTIR	0,99405	0,000330	1,74	
270	FTIR	0,99400	0,000280	1,47	
271	FTIR	0,99400	0,000280	1,47	



**Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse**

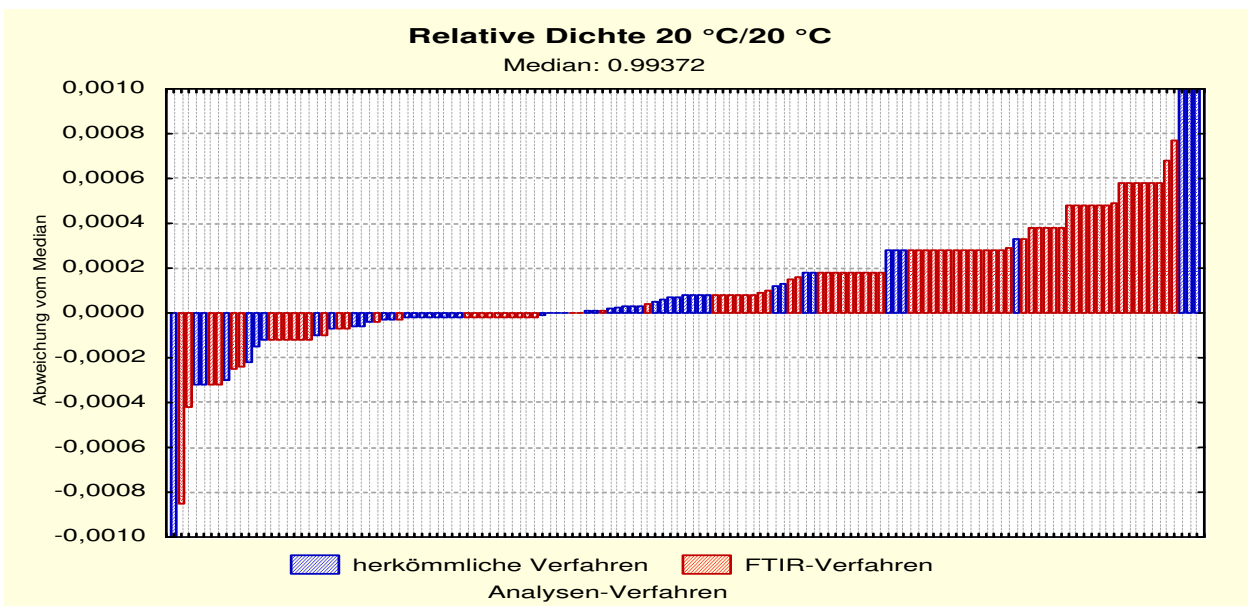
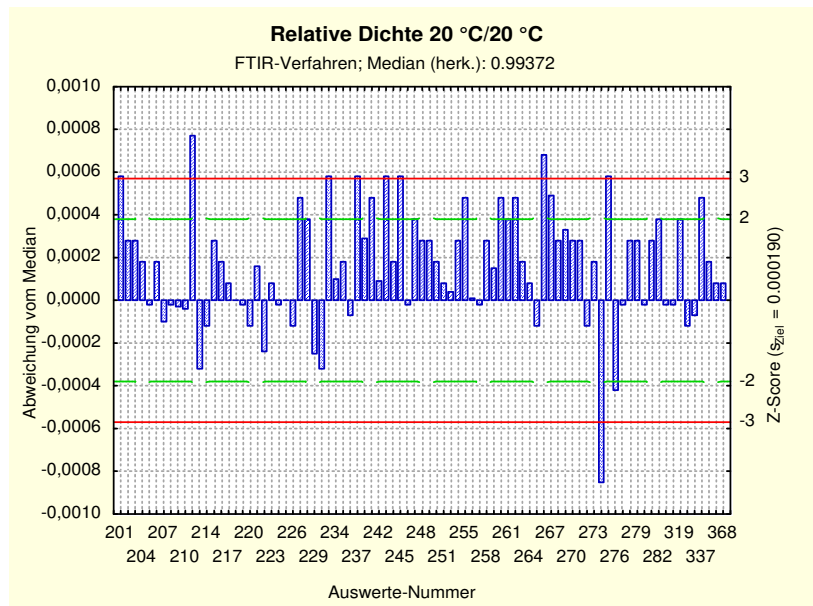
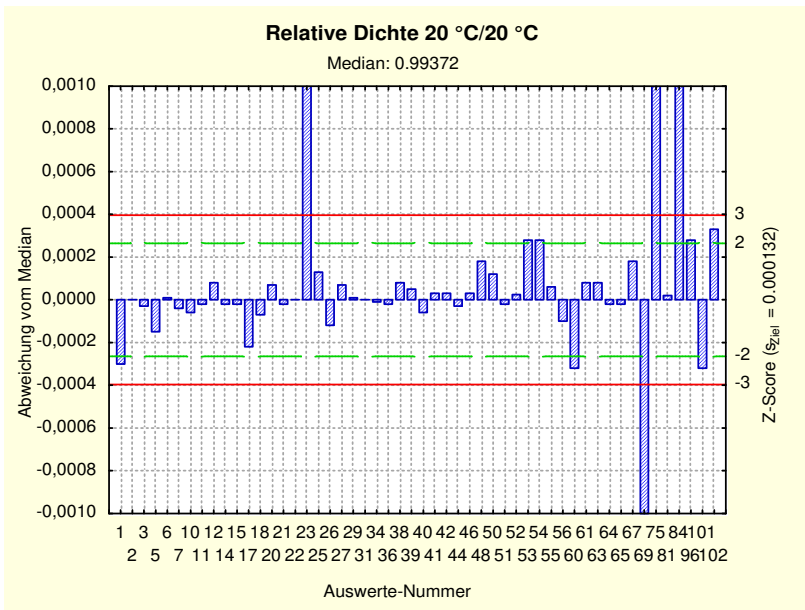
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
272	FTIR	0,99360	-0,000120	-0,63	
273	FTIR	0,99390	0,000180	0,95	
274	FTIR	0,99287	-0,000851	-4,48	
275	FTIR	0,99430	0,000580	3,05	
276	FTIR	0,99330	-0,000420	-2,21	
277	FTIR	0,99370	-0,000020	-0,11	
278	FTIR	0,99400	0,000280	1,47	
279	FTIR	0,99400	0,000280	1,47	
280	FTIR	0,99370	-0,000020	-0,11	
281	FTIR	0,99400	0,000280	1,47	
282	FTIR	0,99410	0,000380	2,00	
283	FTIR	0,99370	-0,000020	-0,11	
284	FTIR	0,99370	-0,000020	-0,11	
319	FTIR	0,99410	0,000380	2,00	
320	FTIR	0,99360	-0,000120	-0,63	
336	FTIR	0,99365	-0,000070	-0,37	
337	FTIR	0,99420	0,000480	2,53	
349	FTIR	0,99390	0,000180	0,95	
364	FTIR	0,99380	0,000080	0,42	
368	FTIR	0,99380	0,000080	0,42	

**4.1.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse für Relative Dichte 20 °C/20 °C	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	52	48
Minimalwert	0,98445	0,99340
Mittelwert	0,993870	0,993731
Median	0,993725	0,993720
Maximalwert	1,00361	0,99405
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,002046	0,000138
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,000284	0,000020
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )		
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,000132	0,000132
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{Ü\ FTIR}$ )	0,000190	0,000190
Horrat-Wert ( $s_L/s_H$ )		
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	15,50	1,04
Quotient ( $s_L/s_{Ü\ FTIR}$ )	10,77	0,72
Quotient ( $u_M/s_H$ )		
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	2,15	0,15
Quotient ( $u_M/s_{Ü\ FTIR}$ )	1,49	0,10

**4.1.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 8.1	Pyknometrische Methode; OIV-MA-AS2-01A, Nr. 2A	6	0,99370	0,000159
LwK 8.2	Bestimmung mit dem Aräometer; OIV-MA-AS2-01B	1	0,99510	
LwK 8.4	Bestimmung mit dem Biegeschwinger	45	0,99374	0,000121
	herkömmliche Verfahren	52	0,99374	0,000125
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	85	0,99389	0,000266



## 4.2 Vorhandener Alkohol [g/L]

### 4.2.1 Herkömmliche Laboregebnisse (Bewertungsbasis: Destillationsverfahren)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 2.1	95,10	0,615	0,23	1,15	
02	LwK 2.1	95,21	0,725	0,27	1,36	
03	LwK 2.4	93,69	-0,795	-0,29	-1,49	
06	LwK 2.4	94,28	-0,205	-0,08	-0,38	
07	LwK 2.4	93,75	-0,735	-0,27	-1,37	
10	LwK 2.1	94,89	0,405	0,15	0,76	
11	LwK 2.4	95,60	1,115	0,41	2,08	
12	LwK 2.1	94,80	0,315	0,12	0,59	
14	LwK 2.9	95,04	0,555	0,21	1,04	
15	LwK 2.1	94,70	0,215	0,08	0,40	
17	LwK 2.9	94,30	-0,185	-0,07	-0,35	
18	LwK 2.7	93,50	-0,985	-0,37	-1,84	
20	LwK 2.7	93,44	-1,045	-0,39	-1,95	
21	LwK 2.7	94,41	-0,075	-0,03	-0,14	
22	LwK 2.9	94,90	0,415	0,15	0,78	
23	LwK 2.5	95,10	0,615	0,23	1,15	
25	LwK 2.1	93,90	-0,585	-0,22	-1,09	
26	LwK 2.4	95,60	1,115	0,41	2,08	
27	LwK 2.5	92,30	-2,185	-0,81	-4,08	
29	LwK 2.1	94,47	-0,015	-0,01	-0,03	
31	LwK 2.9	94,80	0,315	0,12	0,59	
34	LwK 2.8	93,70	-0,785	-0,29	-1,47	
38	LwK 2.9	95,10	0,615	0,23	1,15	
39	LwK 2.9	95,10	0,615	0,23	1,15	
40	LwK 2.4	94,90	0,415	0,15	0,78	
41	LwK 2.5	94,30	-0,185	-0,07	-0,35	
42	LwK 2.4	93,90	-0,585	-0,22	-1,09	
46	LwK 2.5	93,50	-0,985	-0,37	-1,84	
48	LwK 2.5	94,10	-0,385	-0,14	-0,72	
50	LwK 2.9	95,30	0,815	0,30	1,52	
51	LwK 2.9	94,90	0,415	0,15	0,78	
52	LwK 2.9	95,10	0,615	0,23	1,15	
53	LwK 2.9	93,80	-0,685	-0,25	-1,28	
55	LwK 2.1	94,37	-0,115	-0,04	-0,21	
56	LwK 2.9	95,19	0,705	0,26	1,32	
60	LwK 2.1	96,00	1,515	0,56	2,83	
61	LwK 2.7	95,50	1,015	0,38	1,90	
63	LwK 2.1	94,40	-0,085	-0,03	-0,16	
64	LwK 2.5	94,77	0,285	0,11	0,53	
65	LwK 2.5	95,00	0,515	0,19	0,96	
67	LwK 2.1	94,50	0,015	0,01	0,03	
69	LwK 2.4	93,16	-1,325	-0,49	-2,48	
74	LwK 2.4	92,18	-2,302	-0,85	-4,30	
75	LwK 2.3	92,80	-1,685	-0,63	-3,15	
77	LwK 2.4	93,48	-1,008	-0,37	-1,88	
81	LwK 2.1	94,60	0,115	0,04	0,21	
84	LwK 2.4	94,83	0,345	0,13	0,64	
89	LwK 2.9	95,00	0,515	0,19	0,96	
91	LwK 2.9	94,10	-0,385	-0,14	-0,72	
94	LwK 2.5	93,40	-1,085	-0,40	-2,03	
95	LwK 2.9	95,10	0,615	0,23	1,15	
96	LwK 2.9	94,70	0,215	0,08	0,40	
98	LwK 2.9	94,50	0,015	0,01	0,03	
99	LwK 2.4	92,70	-1,785	-0,66	-3,34	
101	LwK 2.5	94,54	0,055	0,02	0,10	
102	LwK 2.9	93,16	-1,325	-0,49	-2,48	
103	NMR	93,70	-0,785	-0,29	-1,47	
104	NMR	91,08	-3,403	-1,26	-6,36	(**)
105	NMR	95,14	0,655	0,24	1,22	
106	NMR	92,62	-1,863	-0,69	-3,48	
107	NMR	95,14	0,658	0,24	1,23	

(\*\*) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der Ergebnisse mit Destillationsverfahren ab.

## 4.2.2 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 2.8	93,36	-1,125	-0,42	-1,27	
202	LwK 2.8	95,00	0,515	0,19	0,58	
203	LwK 2.8	93,60	-0,885	-0,33	-1,00	
204	LwK 2.8	94,10	-0,385	-0,14	-0,43	
205	LwK 2.8	92,89	-1,591	-0,59	-1,80	
206	LwK 2.8	95,67	1,185	0,44	1,34	
207	LwK 2.8	95,25	0,765	0,28	0,86	
208	LwK 2.8	92,80	-1,685	-0,63	-1,90	
209	LwK 2.8	94,65	0,165	0,06	0,19	
210	LwK 2.8	94,93	0,445	0,17	0,50	
211	LwK 2.8	94,70	0,215	0,08	0,24	
212	LwK 2.8	94,30	-0,185	-0,07	-0,21	
214	LwK 2.8	95,10	0,615	0,23	0,69	
215	LwK 2.8	93,40	-1,085	-0,40	-1,22	
216	LwK 2.8	95,30	0,815	0,30	0,92	
217	LwK 2.8	94,90	0,415	0,15	0,47	
218	LwK 2.8	94,90	0,415	0,15	0,47	
219	LwK 2.8	93,90	-0,585	-0,22	-0,66	
220	LwK 2.8	94,10	-0,385	-0,14	-0,43	
221	LwK 2.8	95,20	0,715	0,27	0,81	
222	LwK 2.8	94,70	0,215	0,08	0,24	
223	LwK 2.8	94,00	-0,485	-0,18	-0,55	
224	LwK 2.8	93,90	-0,585	-0,22	-0,66	
225	LwK 2.8	94,25	-0,235	-0,09	-0,27	
226	LwK 2.8	94,00	-0,485	-0,18	-0,55	
227	LwK 2.8	95,00	0,515	0,19	0,58	
228	LwK 2.8	94,40	-0,085	-0,03	-0,10	
229	LwK 2.8	94,34	-0,145	-0,05	-0,16	
231	LwK 2.8	95,00	0,515	0,19	0,58	
232	LwK 2.8	93,90	-0,585	-0,22	-0,66	
234	LwK 2.8	93,70	-0,785	-0,29	-0,89	
235	LwK 2.8	92,90	-1,585	-0,59	-1,79	
236	LwK 2.8	94,80	0,315	0,12	0,36	
237	LwK 2.8	93,70	-0,785	-0,29	-0,89	
240	LwK 2.8	95,10	0,615	0,23	0,69	
241	LwK 2.8	93,70	-0,785	-0,29	-0,89	
242	LwK 2.8	94,98	0,495	0,18	0,56	
243	LwK 2.8	93,40	-1,085	-0,40	-1,22	
244	LwK 2.8	93,59	-0,895	-0,33	-1,01	
245	LwK 2.8	94,30	-0,185	-0,07	-0,21	
246	LwK 2.8	93,70	-0,785	-0,29	-0,89	
247	LwK 2.8	94,16	-0,325	-0,12	-0,37	
248	LwK 2.8	94,99	0,505	0,19	0,57	
249	LwK 2.8	93,80	-0,685	-0,25	-0,77	
250	LwK 2.8	94,61	0,125	0,05	0,14	
251	LwK 2.8	94,30	-0,185	-0,07	-0,21	
252	LwK 2.8	94,50	0,015	0,01	0,02	
254	LwK 2.8	95,20	0,715	0,27	0,81	
255	LwK 2.8	93,80	-0,685	-0,25	-0,77	
256	LwK 2.8	95,80	1,315	0,49	1,48	
257	LwK 2.8	93,30	-1,185	-0,44	-1,34	
258	LwK 2.8	94,30	-0,185	-0,07	-0,21	
259	LwK 2.8	94,73	0,245	0,09	0,28	
260	LwK 2.8	95,00	0,515	0,19	0,58	
261	LwK 2.8	93,10	-1,385	-0,51	-1,56	
262	LwK 2.8	93,20	-1,285	-0,48	-1,45	
263	LwK 2.8	95,10	0,615	0,23	0,69	
264	LwK 2.8	94,90	0,415	0,15	0,47	
265	LwK 2.8	94,34	-0,145	-0,05	-0,16	
266	LwK 2.8	93,90	-0,585	-0,22	-0,66	
267	LwK 2.8	93,69	-0,795	-0,29	-0,90	
268	LwK 2.8	94,80	0,315	0,12	0,36	
269	LwK 2.8	93,40	-1,085	-0,40	-1,22	
270	LwK 2.8	92,61	-1,875	-0,70	-2,12	
271	LwK 2.8	93,98	-0,505	-0,19	-0,57	
272	LwK 2.8	95,10	0,615	0,23	0,69	

**Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
273	LwK 2.8	93,77	-0,715	-0,27	-0,81	
274	LwK 2.8	93,37	-1,118	-0,41	-1,26	
275	LwK 2.8	94,50	0,015	0,01	0,02	
276	LwK 2.8	94,90	0,415	0,15	0,47	
277	LwK 2.8	94,50	0,018	0,01	0,02	
278	LwK 2.8	91,59	-2,895	-1,07	-3,27	
279	LwK 2.8	92,27	-2,215	-0,82	-2,50	
280	LwK 2.8	95,30	0,815	0,30	0,92	
281	LwK 2.8	95,07	0,585	0,22	0,66	
282	LwK 2.8	94,80	0,315	0,12	0,36	
283	LwK 2.8	94,90	0,415	0,15	0,47	
284	LwK 2.8	94,79	0,303	0,11	0,34	
312	LwK 2.8	94,60	0,115	0,04	0,13	
319	LwK 2.8	93,70	-0,785	-0,29	-0,89	
320	LwK 2.8	92,80	-1,685	-0,63	-1,90	
323	LwK 2.8	95,80	1,315	0,49	1,48	
336	LwK 2.8	94,20	-0,285	-0,11	-0,32	
337	LwK 2.8	93,40	-1,085	-0,40	-1,22	
343	LwK 2.8	95,05	0,565	0,21	0,64	
349	LwK 2.8	94,10	-0,385	-0,14	-0,43	
364	LwK 2.8	93,70	-0,785	-0,29	-0,89	
368	LwK 2.8	94,25	-0,235	-0,09	-0,27	

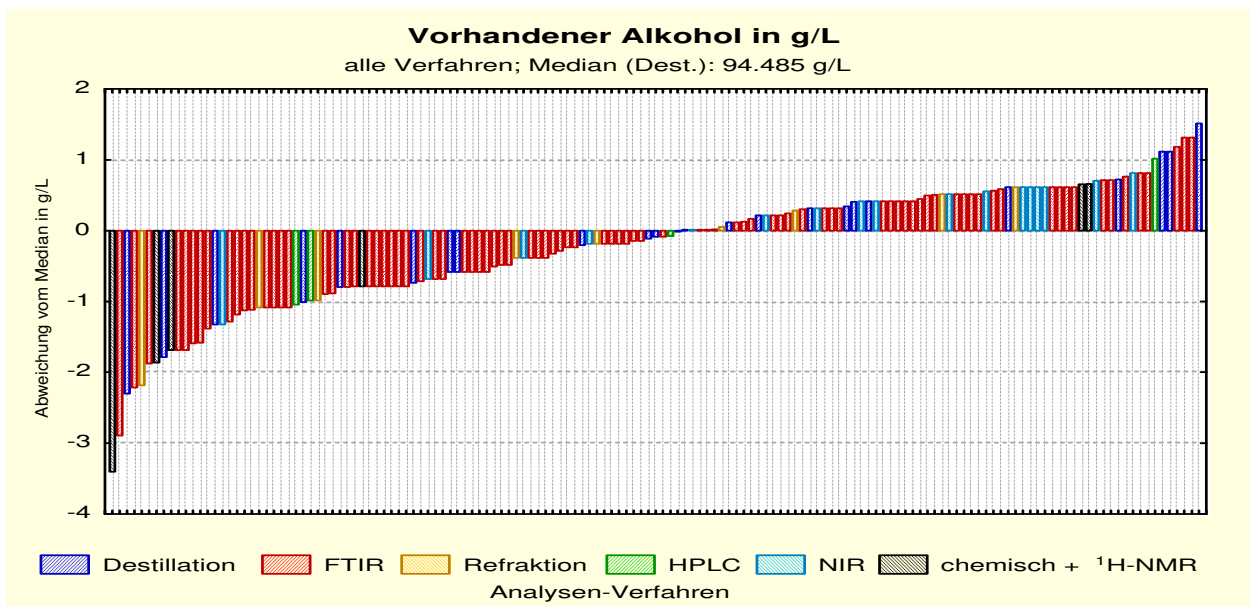
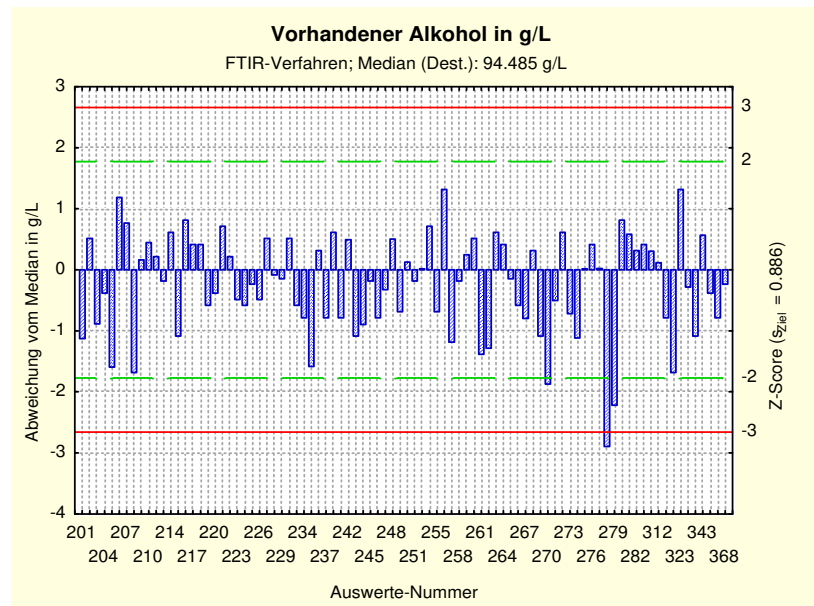
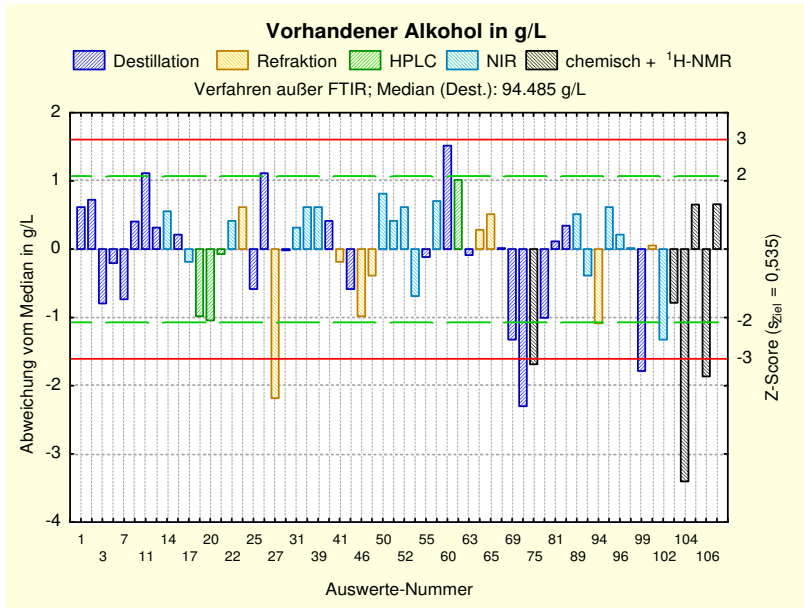
Rot markierte Werte wurden mit dem Faktor 7,8924 von der Einheit %vol in die Einheit g/L umgerechnet

**4.2.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse für Vorhandenen Alkohol [g/L] nur Destillationsverfahren	alle Daten
Gültige Werte	24
Minimalwert	92,18
Mittelwert	94,375
Median	94,485
Maximalwert	96,00
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,913
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,186
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	2,695
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,535
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,886
Horrat-Wert ( $s_L/s_H$ )	0,34
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	1,71
Quotient ( $s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	1,03
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,07
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,35
Quotient ( $u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,21

**4.2.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 2.1	Destillation nach Neutralisation; OIV-MA-AS312-01A Nr. 4A oder Nr. 4B	12	94,703	0,431
LwK 2.4	Einfache direkte Destillation n. AVV V2 Destillationsverfahren	12 24	94,006 94,420	1,225 0,884
LwK 2.3	Chemische Alkoholbestimmung n. Dr. Rebelein	1	92,800	
LwK 2.5	Berechnung aus relativer Dichte und Refraktion	9	94,173	0,885
LwK 2.7	HPLC n. Heidger	4	94,188	1,046
LwK 2.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	89	94,267	0,807
LwK 2.9	Nah-Infrarotspektrometrie	17	94,787	0,462
		5	93,537	1,968



### 4.3 Gesamtextrakt [g/L]

#### 4.3.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 3.2	22,80	-1,86	-2,16	-3,13	
02	spezial_1	23,97	-0,69	-0,80	-1,16	
03	LwK 3.3	24,10	-0,56	-0,65	-0,94	
06	LwK 3.3	24,50	-0,16	-0,18	-0,26	
07	LwK 3.3	24,20	-0,46	-0,53	-0,77	
10	LwK 3.3	24,80	0,14	0,17	0,24	
11	LwK 3.3	25,00	0,34	0,40	0,58	
12	LwK 3.2	24,90	0,24	0,28	0,41	
14	LwK 3.3	24,90	0,24	0,28	0,41	
15	LwK 3.2	24,70	0,04	0,05	0,07	
17	LwK 3.3	24,00	-0,66	-0,76	-1,11	
18	LwK 3.2	23,90	-0,76	-0,88	-1,27	
20	LwK 3.3	24,40	-0,26	-0,30	-0,43	
21	LwK 3.3	24,50	-0,16	-0,18	-0,26	
22	LwK 3.3	24,70	0,04	0,05	0,07	
23	LwK 3.3	24,50	-0,16	-0,18	-0,26	
25	LwK 3.2	24,70	0,04	0,05	0,07	
26	LwK 3.3	24,61	-0,04	-0,05	-0,07	
27	LwK 3.3	24,00	-0,66	-0,76	-1,11	
29	LwK 3.2	24,60	-0,06	-0,07	-0,10	
31	LwK 3.3	24,70	0,04	0,05	0,07	
34	LwK 3.3	24,30	-0,36	-0,41	-0,60	
38	LwK 3.3	24,90	0,24	0,28	0,41	
39	LwK 3.3	24,90	0,24	0,28	0,41	
40	LwK 3.3	24,70	0,04	0,05	0,07	
41	LwK 3.3	24,40	-0,26	-0,30	-0,43	
42	LwK 3.3	24,40	-0,26	-0,30	-0,43	
46	LwK 3.3	24,30	-0,36	-0,41	-0,60	
48	LwK 3.3	24,80	0,14	0,17	0,24	
50	LwK 3.3	25,00	0,34	0,40	0,58	
51	LwK 3.3	24,80	0,14	0,17	0,24	
52	LwK 3.1	24,90	0,24	0,28	0,41	
53	LwK 3.3	25,00	0,34	0,40	0,58	
56	LwK 3.3	24,60	-0,06	-0,07	-0,10	
60	LwK 3.2	24,20	-0,46	-0,53	-0,77	
61	LwK 3.3	25,20	0,54	0,63	0,91	
63	LwK 3.2	24,50	-0,16	-0,18	-0,26	
67	LwK 3.3	24,90	0,24	0,28	0,41	
75	LwK 3.3	27,40	2,74	3,19	4,62	
81	LwK 3.1	24,00	-0,66	-0,76	-1,11	
84	LwK 3.2	38,10	13,44	15,61	22,63	(*)
96	LwK 3.3	25,30	0,64	0,75	1,08	

(\*) Dieser Wert weicht um mehr als 50 % vom Median der herkömmlichen Werte ab und bleibt unberücksichtigt.

#### 4.3.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	24,07	-0,59	-0,68	-0,99	
202	FTIR	25,05	0,39	0,46	0,66	
203	FTIR	24,60	-0,06	-0,07	-0,10	
204	FTIR	25,60	0,94	1,10	1,59	
206	FTIR	24,56	-0,10	-0,11	-0,16	
209	FTIR	24,10	-0,56	-0,65	-0,94	
211	FTIR	25,60	0,94	1,10	1,59	
215	FTIR	24,70	0,04	0,05	0,07	
216	FTIR	25,30	0,64	0,75	1,08	
217	FTIR	24,90	0,24	0,28	0,41	
218	FTIR	24,15	-0,51	-0,59	-0,85	
219	FTIR	25,00	0,34	0,40	0,58	
220	FTIR	24,20	-0,46	-0,53	-0,77	
221	FTIR	27,80	3,14	3,65	5,29	(**)

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
223	FTIR	25,50	0,84	0,98	1,42	
225	FTIR	24,01	-0,65	-0,75	-1,09	
226	FTIR	25,00	0,34	0,40	0,58	
227	FTIR	25,09	0,43	0,50	0,73	
228	FTIR	26,00	1,34	1,56	2,26	
232	FTIR	25,62	0,96	1,12	1,62	
235	FTIR	23,80	-0,86	-0,99	-1,44	
236	FTIR	25,64	0,98	1,14	1,66	
237	FTIR	25,50	0,84	0,98	1,42	
240	FTIR	25,30	0,64	0,75	1,08	
246	FTIR	24,90	0,24	0,28	0,41	
247	FTIR	24,90	0,24	0,28	0,41	
249	FTIR	25,30	0,64	0,75	1,08	
251	FTIR	25,10	0,44	0,51	0,75	
252	FTIR	24,35	-0,31	-0,36	-0,52	
254	FTIR	25,10	0,44	0,51	0,75	
258	FTIR	24,70	0,04	0,05	0,07	
259	FTIR	25,00	0,34	0,40	0,58	
260	LwK 3.2	26,00	1,34	1,56	2,26	
261	FTIR	25,00	0,34	0,40	0,58	
262	FTIR	24,90	0,24	0,28	0,41	
263	FTIR	24,50	-0,16	-0,18	-0,26	
264	FTIR	25,00	0,34	0,40	0,58	
266	FTIR	24,20	-0,46	-0,53	-0,77	
267	FTIR	25,23	0,57	0,67	0,97	
268	FTIR	24,30	-0,36	-0,41	-0,60	
269	FTIR	24,90	0,24	0,28	0,41	
270	FTIR	24,60	-0,06	-0,07	-0,10	
271	FTIR	25,93	1,27	1,48	2,14	
272	FTIR	23,40	-1,26	-1,46	-2,12	
273	FTIR	24,43	-0,23	-0,26	-0,38	
275	FTIR	26,00	1,34	1,56	2,26	
276	FTIR	48,10	23,44	27,23	39,47	(*)
278	FTIR	24,13	-0,53	-0,61	-0,89	
279	FTIR	23,86	-0,80	-0,93	-1,34	
280	FTIR	25,00	0,34	0,40	0,58	
281	FTIR	25,03	0,37	0,43	0,63	
282	FTIR	25,00	0,34	0,40	0,58	
283	FTIR	25,00	0,34	0,40	0,58	
320	FTIR	23,60	-1,06	-1,23	-1,78	
336	FTIR	25,33	0,67	0,78	1,13	
337	FTIR	25,30	0,64	0,75	1,08	

(\*) Dieser Wert weicht um mehr als 50 % vom Median der herkömmlichen Werte ab.

(\*\*) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der herkömmlichen Werte ab.

**4.3.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

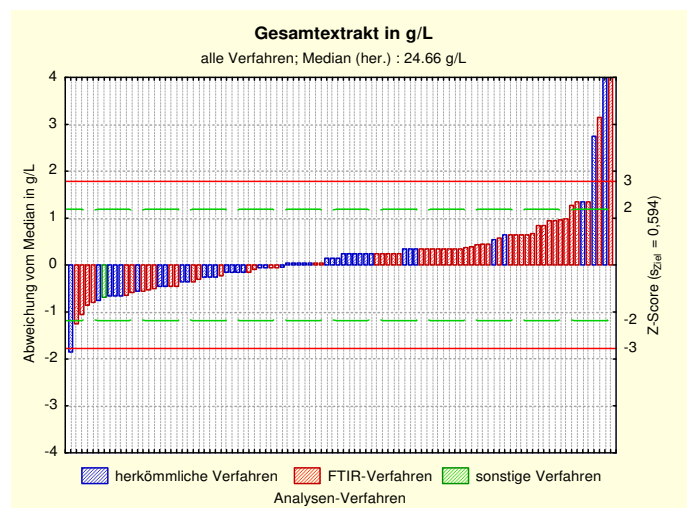
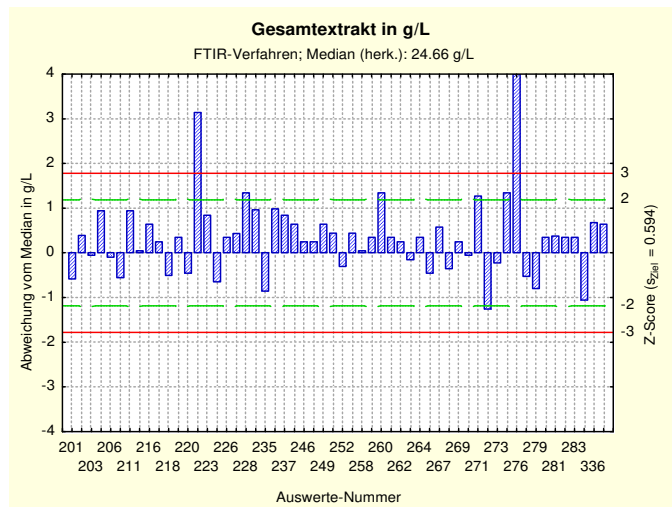
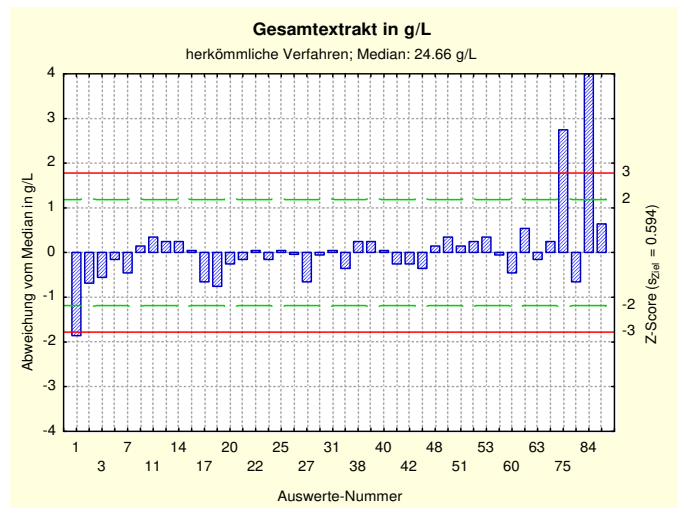
Ergebnisse für Gesamtextrakt [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	40
Minimalwert	22,8
Mittelwert	24,63
Median	24,66
Maximalwert	27,4
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,632
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,100
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,861
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,594
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\bar{U}\ FTIR}$ ) <sup>1)</sup>	(0,565)
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	0,73
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	1,06
Quotient ( $s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	(1,12)
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,12
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,17
Quotient ( $u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	(0,18)

<sup>1)</sup> Die FTIR-Laborergebnisse wurden mit der Zielstandardabweichung  $s_{exp\ herk}$  bewertet.



### 4.3.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 3.1	Indirekt pyknometrisch n. AVV	2	24,450	0,722
LwK 3.2	Berechnung n. Tabarie auf Basis Alkohol nach LwK 2.1; OIV-MA-AS2-03B	10	24,687	1,031
LwK 3.3	Berechnung n. Tabarie auf Basis anderer Alkoholbest. herkömmliche Verfahren	30	24,658	0,384
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	41	24,622	0,414
spezial_1	Berechnung nach Tabarie, Messung mit DR Gerät	55	24,909	0,656
		1	23,970	



## 4.4 Vergärbare Zucker [g/L]

### 4.4.1 Herkömmliche Laborergebnisse

(Bewertungsbasis: Enzymatik und Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; verbindliche Bewertung)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
03	LwK 4.5	5,33	-0,210	-0,87	-1,09	
06	LwK 4.5	5,72	0,180	0,74	0,94	
07	LwK 4.5	5,52	-0,020	-0,08	-0,10	
10	LwK 4.5	5,40	-0,140	-0,58	-0,73	
11	LwK 4.1	4,90	-0,640	-2,64	-3,33	
12	LwK 4.7	5,40	-0,140	-0,58	-0,73	
14	LwK 4.5	5,70	0,160	0,66	0,83	
15	LwK 4.5	5,40	-0,140	-0,58	-0,73	
18	LwK 4.7	6,10	0,560	2,31	2,91	
20	LwK 4.7	5,81	0,270	1,11	1,40	
21	LwK 4.7	5,54	0,000	0,00	0,00	
22	NMR	5,82	0,280	1,16	1,45	
23	LwK 4.4	6,00	0,460	1,90	2,39	
25	LwK 4.5	5,60	0,060	0,25	0,31	
26	LwK 4.7	5,86	0,318	1,31	1,65	
27	LwK 4.4	6,70	1,160	4,79	6,03	(**)
29	LwK 4.5	5,60	0,060	0,25	0,31	
31	LwK 4.5	5,90	0,360	1,49	1,87	
34	LwK 4.8	5,00	-0,540	-2,23	-2,81	
38	LwK 4.5	6,00	0,460	1,90	2,39	
39	LwK 4.7	5,50	-0,040	-0,17	-0,21	
40	LwK 4.5	5,26	-0,280	-1,16	-1,45	
41	LwK 4.5	5,30	-0,240	-0,99	-1,25	
42	LwK 4.7	5,42	-0,116	-0,48	-0,60	
44	LwK 4.5	5,54	0,000	0,00	0,00	
46	LwK 4.5	6,08	0,540	2,23	2,81	
48	LwK 4.5	5,85	0,310	1,28	1,61	
50	LwK 4.7	5,79	0,250	1,03	1,30	
51	LwK 4.4	5,30	-0,240	-0,99	-1,25	
52	LwK 4.5	5,22	-0,320	-1,32	-1,66	
53	LwK 4.5	5,40	-0,140	-0,58	-0,73	
55	LwK 4.5	5,50	-0,040	-0,17	-0,21	
56	LwK 4.5	5,69	0,150	0,62	0,78	
60	LwK 4.4	6,70	1,160	4,79	6,03	(**)
61	LwK 4.7	5,00	-0,540	-2,23	-2,81	
63	LwK 4.5	5,70	0,160	0,66	0,83	
64	LwK 4.4	5,95	0,410	1,69	2,13	
67	LwK 4.4	4,90	-0,640	-2,64	-3,33	
74	LwK 4.4	5,80	0,260	1,07	1,35	
75	LwK 4.4	7,30	1,760	7,27	9,14	(**)
77	LwK 4.4	5,34	-0,200	-0,83	-1,04	
81	LwK 4.5	5,63	0,090	0,37	0,47	
92	LwK 4.5	5,02	-0,520	-2,15	-2,70	
94	LwK 4.7	5,40	-0,140	-0,58	-0,73	
96	LwK 4.7	5,50	-0,040	-0,17	-0,21	
101	LwK 4.4	5,80	0,260	1,07	1,35	
103	NMR	5,10	-0,440	-1,82	-2,29	
104	NMR	5,14	-0,395	-1,63	-2,05	
105	NMR	5,27	-0,270	-1,11	-1,40	
106	NMR	4,91	-0,633	-2,61	-3,29	
107	NMR	5,53	-0,007	-0,03	-0,03	

(\*\*) Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der Ergebnisse mit Enzymatik und HPLC ab.

**4.4.2 FTIR-Laboregebnisse für Vergärbare Zucker**

(Bewertungsbasis: Enzymatik und Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; verbindliche Bewertung)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
202	LwK 4.8	7,11	1,570	6,48	2,69	
203	LwK 4.8	5,89	0,350	1,45	0,60	
204	LwK 4.8	5,21	-0,328	-1,35	-0,56	
206	LwK 4.8	5,10	-0,440	-1,82	-0,75	
207	LwK 4.8	5,60	0,060	0,25	0,10	
208	LwK 4.8	5,70	0,160	0,66	0,27	
209	LwK 4.8	5,44	-0,100	-0,41	-0,17	
210	LwK 4.8	5,20	-0,340	-1,40	-0,58	
211	LwK 4.8	5,01	-0,530	-2,19	-0,91	
212	LwK 4.8	4,93	-0,610	-2,52	-1,04	
214	LwK 4.8	5,00	-0,540	-2,23	-0,92	
215	LwK 4.8	4,81	-0,730	-3,01	-1,25	
216	LwK 4.8	4,88	-0,660	-2,73	-1,13	
217	LwK 4.8	5,01	-0,530	-2,19	-0,91	
218	LwK 4.8	5,27	-0,270	-1,11	-0,46	
220	LwK 4.8	6,76	1,220	5,04	2,09	
221	LwK 4.8	7,26	1,720	7,10	2,95	
222	LwK 4.8	5,87	0,330	1,36	0,57	
223	LwK 4.8	6,40	0,860	3,55	1,47	
224	LwK 4.8	5,65	0,110	0,45	0,19	
225	LwK 4.8	5,50	-0,040	-0,17	-0,07	
226	LwK 4.8	4,80	-0,740	-3,06	-1,27	
227	LwK 4.8	6,42	0,880	3,63	1,51	
228	LwK 4.8	5,63	0,090	0,37	0,15	
229	LwK 4.8	5,17	-0,370	-1,53	-0,63	
232	LwK 4.8	4,34	-1,200	-4,95	-2,05	
234	LwK 4.8	4,99	-0,550	-2,27	-0,94	
235	LwK 4.8	6,30	0,760	3,14	1,30	
236	LwK 4.8	5,17	-0,370	-1,53	-0,63	
237	LwK 4.8	5,60	0,060	0,25	0,10	
240	LwK 4.8	6,48	0,940	3,88	1,61	
241	LwK 4.8	5,90	0,360	1,49	0,62	
242	LwK 4.8	5,58	0,040	0,17	0,07	
243	LwK 4.8	6,60	1,060	4,38	1,82	
244	LwK 4.8	5,75	0,210	0,87	0,36	
245	LwK 4.8	6,03	0,490	2,02	0,84	
246	LwK 4.8	5,90	0,360	1,49	0,62	
247	LwK 4.8	5,70	0,160	0,66	0,27	
248	LwK 4.8	4,64	-0,900	-3,72	-1,54	
249	LwK 4.8	6,60	1,060	4,38	1,82	
250	LwK 4.8	4,74	-0,800	-3,30	-1,37	
251	LwK 4.8	4,95	-0,590	-2,44	-1,01	
252	LwK 4.8	5,59	0,050	0,21	0,09	
254	LwK 4.8	6,10	0,560	2,31	0,96	
255	LwK 4.8	4,60	-0,940	-3,88	-1,61	
256	LwK 4.8	6,20	0,660	2,73	1,13	
257	LwK 4.8	5,66	0,120	0,50	0,21	
258	LwK 4.8	6,00	0,460	1,90	0,79	
259	LwK 4.8	5,58	0,040	0,17	0,07	
260	LwK 4.8	5,30	-0,240	-0,99	-0,41	
261	LwK 4.8	4,90	-0,640	-2,64	-1,10	
262	LwK 4.8	5,80	0,260	1,07	0,45	
263	LwK 4.8	5,40	-0,140	-0,58	-0,24	
264	LwK 4.8	5,20	-0,340	-1,40	-0,58	
265	LwK 4.8	3,26	-2,280	-9,41	-3,90	
266	LwK 4.8	5,72	0,180	0,74	0,31	
267	LwK 4.8	6,00	0,460	1,90	0,79	
268	LwK 4.8	5,45	-0,090	-0,37	-0,15	
269	LwK 4.8	5,17	-0,370	-1,53	-0,63	
270	LwK 4.8	3,50	-2,040	-8,42	-3,49	
271	LwK 4.8	5,33	-0,210	-0,87	-0,36	
272	LwK 4.8	5,80	0,260	1,07	0,45	
273	LwK 4.8	4,93	-0,610	-2,52	-1,04	

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
274	LwK 4.8	6,07	0,530	2,19	0,91	
275	LwK 4.8	6,00	0,460	1,90	0,79	
276	LwK 4.8	5,30	-0,240	-0,99	-0,41	
277	LwK 4.8	5,16	-0,380	-1,57	-0,65	
278	LwK 4.8	4,11	-1,430	-5,90	-2,45	
279	LwK 4.8	4,32	-1,220	-5,04	-2,09	
280	LwK 4.8	5,00	-0,540	-2,23	-0,92	
281	LwK 4.8	4,91	-0,630	-2,60	-1,08	
282	LwK 4.8	4,26	-1,280	-5,28	-2,19	
283	LwK 4.8	5,40	-0,140	-0,58	-0,24	
284	LwK 4.8	5,58	0,040	0,17	0,07	
319	LwK 4.8	4,70	-0,840	-3,47	-1,44	
320	LwK 4.8	4,92	-0,620	-2,56	-1,06	
336	LwK 4.8	5,22	-0,320	-1,32	-0,55	
337	LwK 4.8	5,60	0,060	0,25	0,10	
349	LwK 4.8	5,00	-0,540	-2,23	-0,92	
364	LwK 4.8	5,10	-0,440	-1,82	-0,75	
368	LwK 4.8	5,35	-0,190	-0,78	-0,33	

**4.4.3 Reduktometrische Laborergebnisse**

(Bewertungsbasis: reduktometrische Verfahren; informative Bewertung)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
11	LwK 4.1	4,90	-0,900	-3,57	-4,51	
23	LwK 4.4	6,00	0,200	0,79	1,00	
27	LwK 4.4	6,70	0,900	3,57	4,51	
51	LwK 4.4	5,30	-0,500	-1,99	-2,51	
60	LwK 4.4	6,70	0,900	3,57	4,51	
64	LwK 4.4	5,95	0,150	0,60	0,75	
67	LwK 4.4	4,90	-0,900	-3,57	-4,51	
74	LwK 4.4	5,80	0,000	0,00	0,00	
75	LwK 4.4	7,30	1,500	5,96	7,52	(**)
77	LwK 4.4	5,34	-0,460	-1,83	-2,31	
101	LwK 4.4	5,80	0,000	0,00	0,00	

(\*\*) Dieser Wert wurde bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

**4.4.4 FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker(r)**

(Bewertungsbasis: reduktometrische Verfahren; informative Bewertung)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
202	LwK 4.8	7,11	1,310	5,20	2,24	
203	LwK 4.8	5,89	0,090	0,36	0,15	
204	LwK 4.8	5,21	-0,588	-2,33	-1,01	
206	LwK 4.8	5,10	-0,700	-2,78	-1,20	
207	LwK 4.8	5,60	-0,200	-0,79	-0,34	
208	LwK 4.8	5,70	-0,100	-0,40	-0,17	
209	LwK 4.8	5,44	-0,360	-1,43	-0,62	
210	LwK 4.8	5,20	-0,600	-2,38	-1,03	
211	LwK 4.8	5,01	-0,790	-3,14	-1,35	
212	LwK 4.8	4,93	-0,870	-3,45	-1,49	
214	LwK 4.8	5,00	-0,800	-3,18	-1,37	
215	LwK 4.8	4,81	-0,990	-3,93	-1,70	
216	LwK 4.8	4,88	-0,920	-3,65	-1,58	
217	LwK 4.8	5,01	-0,790	-3,14	-1,35	
218	LwK 4.8	5,27	-0,530	-2,10	-0,91	
220	LwK 4.8	6,76	0,960	3,81	1,64	
221	LwK 4.8	7,26	1,460	5,80	2,50	
222	LwK 4.8	5,87	0,070	0,28	0,12	
223	LwK 4.8	6,40	0,600	2,38	1,03	
224	LwK 4.8	5,65	-0,150	-0,60	-0,26	
226	LwK 4.8	4,80	-1,000	-3,97	-1,71	

**Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse für Vergärbare Zucker(r)**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
225	LwK 4.8	5,50	-0,300	-1,19	-0,51	
227	LwK 4.8	6,42	0,620	2,46	1,06	
228	LwK 4.8	5,63	-0,170	-0,68	-0,29	
229	LwK 4.8	5,17	-0,630	-2,50	-1,08	
232	LwK 4.8	4,34	-1,460	-5,80	-2,50	
234	LwK 4.8	4,99	-0,810	-3,22	-1,39	
235	LwK 4.8	6,30	0,500	1,99	0,86	
236	LwK 4.8	5,17	-0,630	-2,50	-1,08	
237	LwK 4.8	5,60	-0,200	-0,79	-0,34	
240	LwK 4.8	6,48	0,680	2,70	1,16	
241	LwK 4.8	5,90	0,100	0,40	0,17	
242	LwK 4.8	5,58	-0,220	-0,87	-0,38	
243	LwK 4.8	6,60	0,800	3,18	1,37	
244	LwK 4.8	5,75	-0,050	-0,20	-0,09	
245	LwK 4.8	6,03	0,230	0,91	0,39	
246	LwK 4.8	5,90	0,100	0,40	0,17	
247	LwK 4.8	5,70	-0,100	-0,40	-0,17	
248	LwK 4.8	4,64	-1,160	-4,61	-1,99	
249	LwK 4.8	6,60	0,800	3,18	1,37	
250	LwK 4.8	4,74	-1,060	-4,21	-1,82	
251	LwK 4.8	4,95	-0,850	-3,38	-1,46	
252	LwK 4.8	5,59	-0,210	-0,83	-0,36	
254	LwK 4.8	6,10	0,300	1,19	0,51	
255	LwK 4.8	4,60	-1,200	-4,77	-2,05	
256	LwK 4.8	6,20	0,400	1,59	0,68	
257	LwK 4.8	5,66	-0,140	-0,56	-0,24	
258	LwK 4.8	6,00	0,200	0,79	0,34	
259	LwK 4.8	5,58	-0,220	-0,87	-0,38	
260	LwK 4.8	5,30	-0,500	-1,99	-0,86	
261	LwK 4.8	4,90	-0,900	-3,57	-1,54	
262	LwK 4.8	5,80	0,000	0,00	0,00	
263	LwK 4.8	5,40	-0,400	-1,59	-0,68	
264	LwK 4.8	5,20	-0,600	-2,38	-1,03	
265	LwK 4.8	3,26	-2,540	-10,09	-4,35	
266	LwK 4.8	5,72	-0,080	-0,32	-0,14	
267	LwK 4.8	6,00	0,200	0,79	0,34	
268	LwK 4.8	5,45	-0,350	-1,39	-0,60	
269	LwK 4.8	5,17	-0,630	-2,50	-1,08	
270	LwK 4.8	3,50	-2,300	-9,13	-3,94	
271	LwK 4.8	5,33	-0,470	-1,87	-0,80	
272	LwK 4.8	5,80	0,000	0,00	0,00	
273	LwK 4.8	4,93	-0,870	-3,45	-1,49	
274	LwK 4.8	6,07	0,270	1,07	0,46	
275	LwK 4.8	6,00	0,200	0,79	0,34	
276	LwK 4.8	5,30	-0,500	-1,99	-0,86	
277	LwK 4.8	5,16	-0,640	-2,54	-1,10	
278	LwK 4.8	4,11	-1,690	-6,71	-2,89	
279	LwK 4.8	4,32	-1,480	-5,88	-2,53	
280	LwK 4.8	5,00	-0,800	-3,18	-1,37	
281	LwK 4.8	4,91	-0,890	-3,53	-1,52	
282	LwK 4.8	4,26	-1,540	-6,12	-2,64	
283	LwK 4.8	5,40	-0,400	-1,59	-0,68	
284	LwK 4.8	5,58	-0,220	-0,87	-0,38	
319	LwK 4.8	4,70	-1,100	-4,37	-1,88	
320	LwK 4.8	4,92	-0,880	-3,49	-1,51	
336	LwK 4.8	5,22	-0,580	-2,30	-0,99	
337	LwK 4.8	5,60	-0,200	-0,79	-0,34	
349	LwK 4.8	5,00	-0,800	-3,18	-1,37	
364	LwK 4.8	5,10	-0,700	-2,78	-1,20	
368	LwK 4.8	5,35	-0,450	-1,79	-0,77	

**4.4.5 FTIR-Laboreergebnisse für Vergärbare Zucker(S)**

Bewertungsbasis: Enzymatik und Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; informative Bewertung

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 4.8	4,77	-0,770	-3,18	-1,32	
202	LwK 4.8	5,40	-0,140	-0,58	-0,24	
203	LwK 4.8	6,09	0,550	2,27	0,94	
204	LwK 4.8	4,60	-0,941	-3,89	-1,61	
205	LwK 4.8	5,17	-0,370	-1,53	-0,63	
206	LwK 4.8	5,10	-0,440	-1,82	-0,75	
207	LwK 4.8	5,00	-0,540	-2,23	-0,92	
208	LwK 4.8	5,60	0,060	0,25	0,10	
209	LwK 4.8	5,44	-0,100	-0,41	-0,17	
210	LwK 4.8	5,20	-0,340	-1,40	-0,58	
211	LwK 4.8	5,52	-0,020	-0,08	-0,03	
212	LwK 4.8	5,00	-0,540	-2,23	-0,92	
214	LwK 4.8	5,10	-0,440	-1,82	-0,75	
215	LwK 4.8	4,81	-0,730	-3,01	-1,25	
216	LwK 4.8	4,23	-1,310	-5,41	-2,24	
217	LwK 4.8	5,12	-0,420	-1,73	-0,72	
218	LwK 4.8	5,32	-0,220	-0,91	-0,38	
219	LwK 4.8	7,50	1,960	8,09	3,36	
220	LwK 4.8	4,96	-0,580	-2,39	-0,99	
221	LwK 4.8	5,32	-0,220	-0,91	-0,38	
222	LwK 4.8	6,10	0,560	2,31	0,96	
223	LwK 4.8	6,00	0,460	1,90	0,79	
224	LwK 4.8	5,15	-0,390	-1,61	-0,67	
225	LwK 4.8	5,49	-0,050	-0,21	-0,09	
226	LwK 4.8	5,00	-0,540	-2,23	-0,92	
227	LwK 4.8	5,52	-0,020	-0,08	-0,03	
228	LwK 4.8	5,55	0,010	0,04	0,02	
229	LwK 4.8	5,57	0,030	0,12	0,05	
231	LwK 4.8	5,20	-0,340	-1,40	-0,58	
232	LwK 4.8	4,34	-1,200	-4,95	-2,05	
234	LwK 4.8	6,29	0,750	3,10	1,28	
235	LwK 4.8	6,20	0,660	2,73	1,13	
236	LwK 4.8	5,26	-0,280	-1,16	-0,48	
237	LwK 4.8	7,30	1,760	7,27	3,01	
240	LwK 4.8	5,02	-0,520	-2,15	-0,89	
241	LwK 4.8	5,40	-0,140	-0,58	-0,24	
242	LwK 4.8	5,38	-0,160	-0,66	-0,27	
243	LwK 4.8	6,10	0,560	2,31	0,96	
244	LwK 4.8	6,95	1,410	5,82	2,41	
245	LwK 4.8	5,99	0,450	1,86	0,77	
246	LwK 4.8	5,10	-0,440	-1,82	-0,75	
247	LwK 4.8	6,01	0,470	1,94	0,80	
249	LwK 4.8	6,60	1,060	4,38	1,82	
250	LwK 4.8	4,82	-0,720	-2,97	-1,23	
251	LwK 4.8	4,95	-0,590	-2,44	-1,01	
252	LwK 4.8	5,58	0,040	0,17	0,07	
254	LwK 4.8	5,20	-0,340	-1,40	-0,58	
256	LwK 4.8	5,20	-0,340	-1,40	-0,58	
257	LwK 4.8	5,34	-0,200	-0,83	-0,34	
258	LwK 4.8	4,48	-1,060	-4,38	-1,82	
259	LwK 4.8	5,23	-0,310	-1,28	-0,53	
260	LwK 4.8	4,60	-0,940	-3,88	-1,61	
261	LwK 4.8	5,70	0,160	0,66	0,27	
262	LwK 4.8	6,20	0,660	2,73	1,13	
263	LwK 4.8	5,40	-0,140	-0,58	-0,24	
264	LwK 4.8	5,60	0,060	0,25	0,10	
265	LwK 4.8	4,52	-1,020	-4,21	-1,75	
266	LwK 4.8	5,08	-0,460	-1,90	-0,79	
267	LwK 4.8	3,62	-1,920	-7,93	-3,29	
268	LwK 4.8	5,60	0,060	0,25	0,10	
270	LwK 4.8	4,80	-0,740	-3,06	-1,27	
271	LwK 4.8	4,50	-1,040	-4,29	-1,78	
272	LwK 4.8	5,50	-0,040	-0,17	-0,07	
273	LwK 4.8	5,17	-0,370	-1,53	-0,63	

**Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse für Vergärbare Zucker(S)**

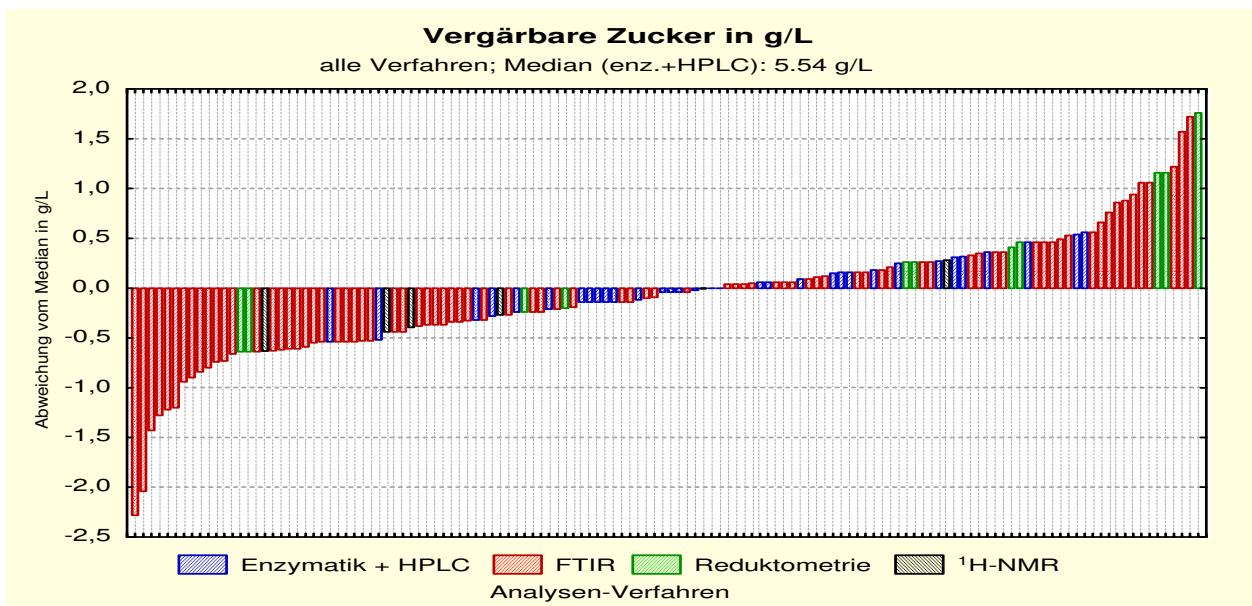
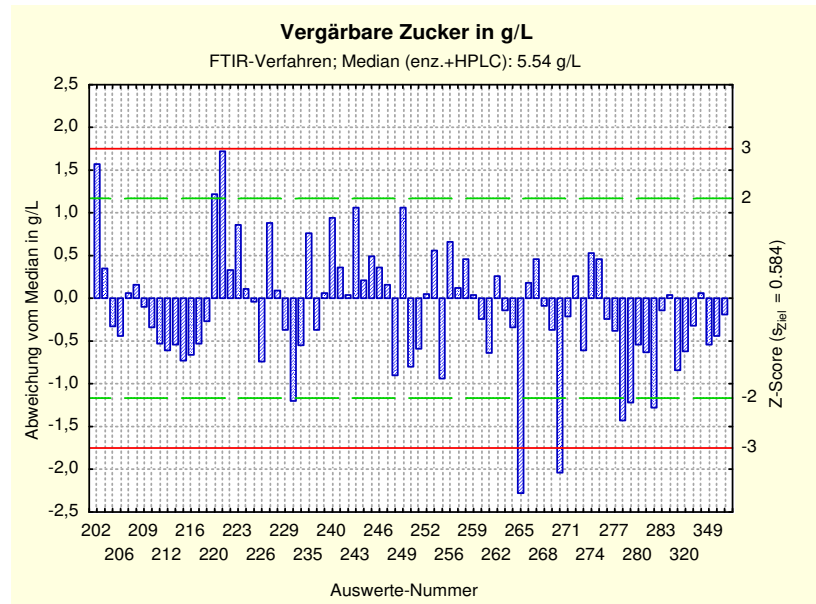
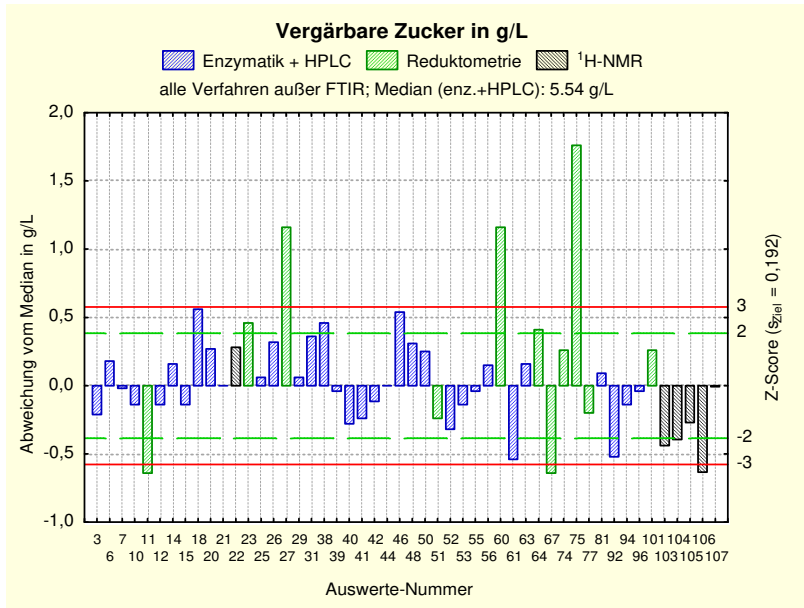
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
275	LwK 4.8	5,50	-0,040	-0,17	-0,07	
276	LwK 4.8	3,80	-1,740	-7,18	-2,98	
277	LwK 4.8	5,16	-0,380	-1,57	-0,65	
278	LwK 4.8	5,57	0,030	0,12	0,05	
279	LwK 4.8	5,51	-0,030	-0,12	-0,05	
280	LwK 4.8	4,40	-1,140	-4,71	-1,95	
281	LwK 4.8	4,91	-0,630	-2,60	-1,08	
282	LwK 4.8	4,36	-1,180	-4,87	-2,02	
283	LwK 4.8	4,60	-0,940	-3,88	-1,61	
284	LwK 4.8	5,58	0,040	0,17	0,07	
312	LwK 4.8	3,73	-1,810	-7,47	-3,10	
319	LwK 4.8	6,10	0,560	2,31	0,96	
320	LwK 4.8	4,95	-0,590	-2,44	-1,01	
323	LwK 4.8	5,60	0,060	0,25	0,10	
336	LwK 4.8	7,20	1,660	6,85	2,84	
337	LwK 4.8	6,50	0,960	3,96	1,64	
343	LwK 4.8	6,28	0,740	3,06	1,27	
349	LwK 4.8	6,60	1,060	4,38	1,82	
364	LwK 4.8	5,20	-0,340	-1,40	-0,58	

**4.4.6 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

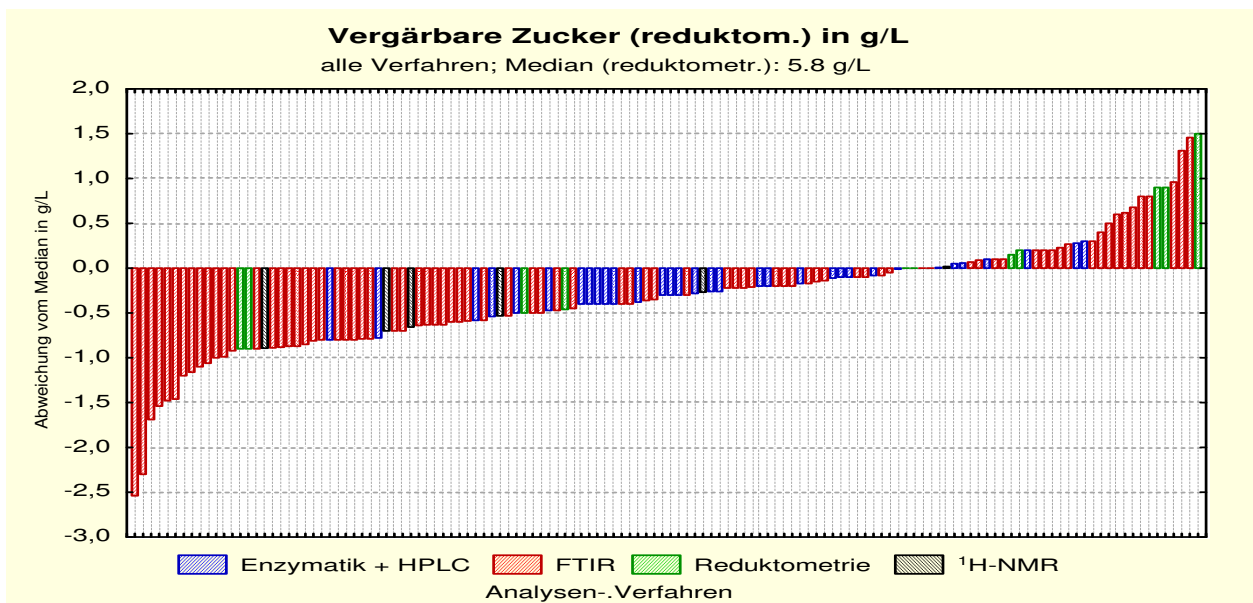
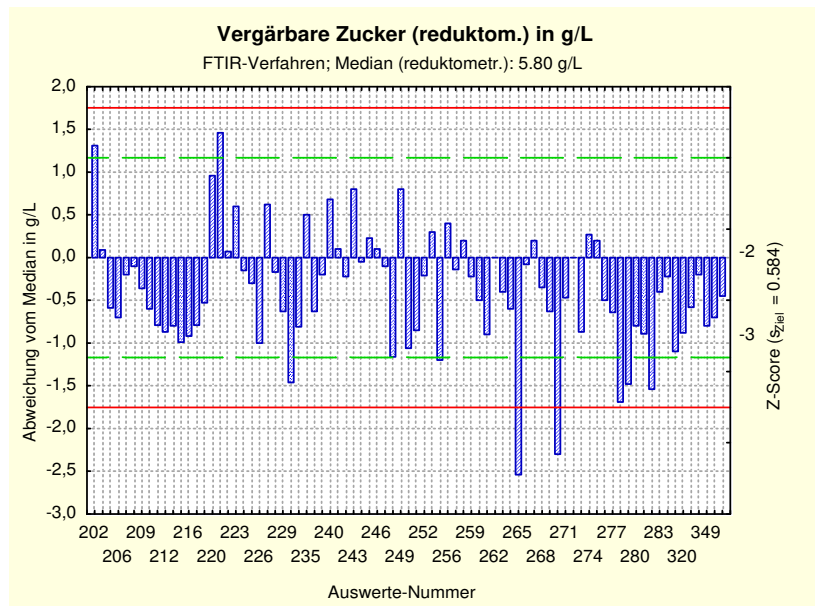
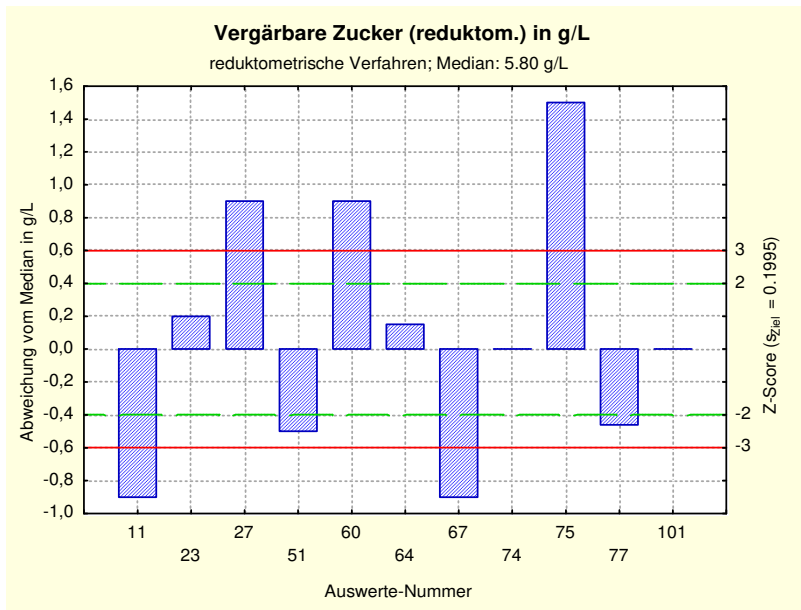
Ergebnisse für Vergärbare Zucker [g/L]	HPLC + enzymatisch		reduktometrisch	
	alle Daten	alle Daten	ber. Daten	
Gültige Werte	33	11	10	
Minimalwert	5,00	4,90	4,90	
Mittelwert	5,566	5,881	5,739	
Median	5,540	5,800	5,800	
Maximalwert	6,10	7,30	6,70	
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,270	0,771	0,644	
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,047	0,232	0,203	
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,242	0,252	0,252	
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp</sub> herk.)	0,192	0,200	0,200	
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>Ü</sub> FTIR)	0,584	0,584	0,584	
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	1,12	3,06	2,56	
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp</sub> herk.)	1,40	3,86	3,23	
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>Ü</sub> FTIR)	0,46	1,32	1,10	
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,19	0,92	0,81	
Quotient (u <sub>M</sub> / s <sub>exp</sub> herk.)	0,24	1,17	1,02	
Quotient (u <sub>M</sub> / s <sub>Ü</sub> FTIR)	0,08	0,40	0,35	

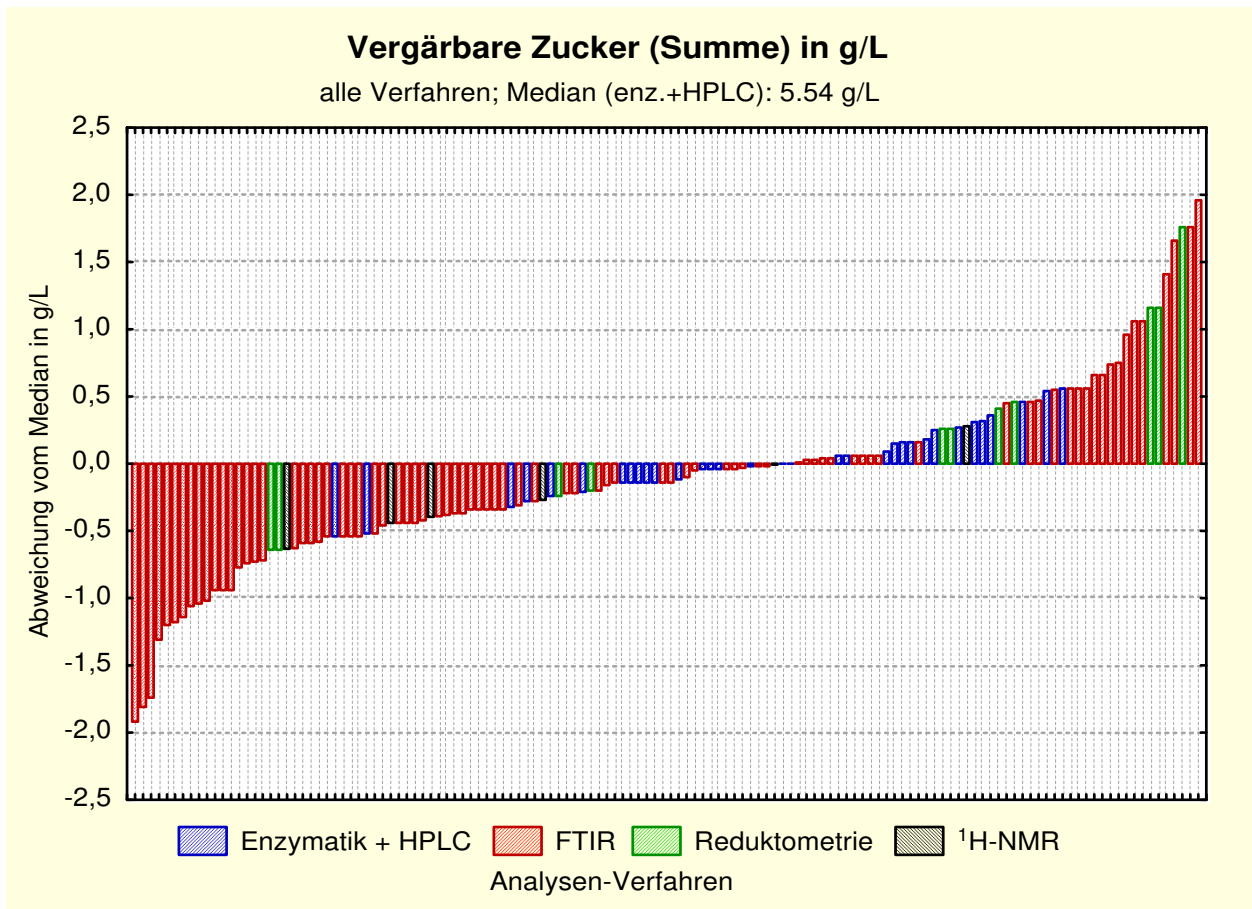
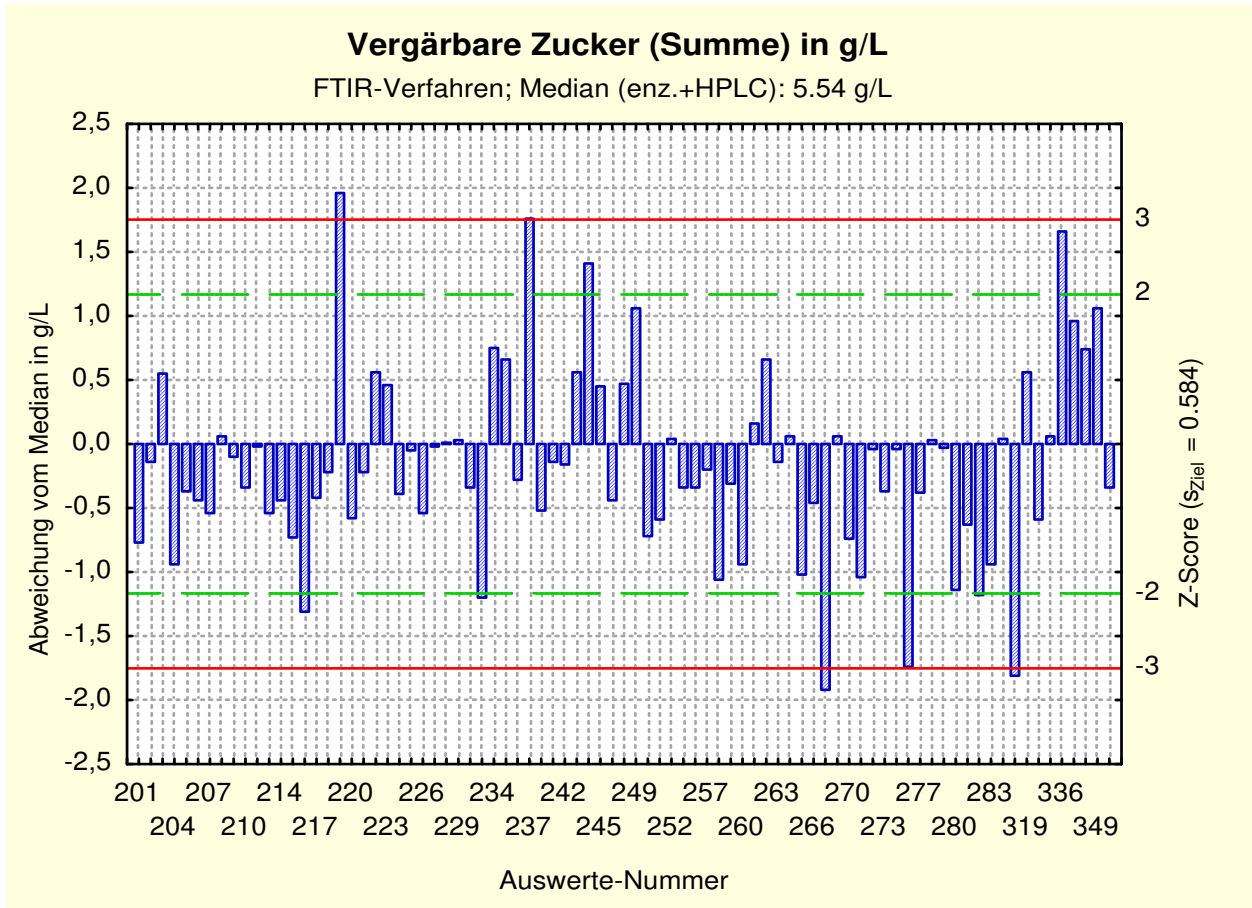
**4.4.7 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 4.1	Bestimmung n. Luff-Schoorl; OIV-MA-AS311-01A	1	4,900	
LwK 4.4	Schnellmethode n. Dr. Rebelein	10	5,967	0,809
	reduktometrische Verfahren	11	5,865	0,838
LwK 4.5	Enzymatische Methode; OIV-MA-AS311-02	22	5,561	0,270
LwK 4.7	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; OIV-MA-AS311-03	11	5,558	0,243
	enzymatische und HPLC-Verfahren	33	5,567	0,268
LwK 4.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie			
	Basis: Vergärbare Zucker(r)	82	5,409	0,621
	Basis: Vergärbare Zucker(S)	84	5,327	0,632
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	6	5,294	0,370









## 4.5 Glucose [g/L]

### 4.5.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enzymat. Hand	n.b. < 1,73				
03	enzymat., autom.	1,29	-0,010	-0,14	-0,13	
06	enzymat., autom.	1,40	0,100	1,41	1,28	
10	enzymat., autom.	1,27	-0,030	-0,42	-0,38	
11	enzymat., autom.	1,53	0,230	3,25	2,95	
12	HPLC	1,10	-0,200	-2,83	-2,56	
14	enzymat., autom.	1,35	0,050	0,71	0,64	
15	enzymat., autom.	1,29	-0,014	-0,20	-0,18	
18	HPLC	1,30	0,000	0,00	0,00	
20	HPLC	1,24	-0,060	-0,85	-0,77	
21	HPLC	1,12	-0,180	-2,55	-2,31	
22	NMR	1,47	0,170	2,40	2,18	
25	enzymat., autom.	1,32	0,020	0,28	0,26	
26	HPLC	1,38	0,075	1,06	0,96	
29	enzymat., autom.	1,35	0,050	0,71	0,64	
31	enzymat., autom.	1,37	0,069	0,98	0,88	
38	enzymat., autom.	1,40	0,100	1,41	1,28	
39	HPLC	1,30	0,000	0,00	0,00	
40	enzymat., autom.	1,23	-0,070	-0,99	-0,90	
41	enzymat., autom.	1,40	0,095	1,34	1,22	
42	HPLC	1,08	-0,217	-3,07	-2,78	
44	enzymat., autom.	1,40	0,100	1,41	1,28	
48	enzymat., autom.	1,30	0,000	0,00	0,00	
50	HPLC	1,21	-0,090	-1,27	-1,15	
52	enzymat., autom.	1,31	0,010	0,14	0,13	
53	enzymat., autom.	1,19	-0,110	-1,56	-1,41	
56	enzymat., autom.	1,36	0,060	0,85	0,77	
61	HPLC	1,00	-0,300	-4,24	-3,85	
63	enzymat., autom.	1,50	0,200	2,83	2,56	
64	enzymat. Hand	1,27	-0,030	-0,42	-0,38	
69	enzymat., autom.	1,41	0,108	1,53	1,38	
84	HPLC	1,30	0,000	0,00	0,00	
85	HPLC	1,42	0,120	1,70	1,54	
88	enzymat., autom.	1,37	0,070	0,99	0,90	
92	enzymat., autom.	1,19	-0,110	-1,56	-1,41	
94	HPLC	1,11	-0,190	-2,69	-2,44	
96	HPLC	1,20	-0,100	-1,41	-1,28	
101	enzymat. Hand	1,30	0,003	0,04	0,04	
103	NMR	1,20	-0,100	-1,41	-1,28	
104	NMR	1,22	-0,079	-1,11	-1,01	
105	NMR	1,28	-0,020	-0,28	-0,26	
106	NMR	1,23	-0,065	-0,92	-0,84	
107	NMR	1,29	-0,007	-0,10	-0,09	

### 4.5.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	1,01	-0,290	-4,10	-0,71	
202	FTIR	1,08	-0,220	-3,11	-0,54	
203	FTIR	1,73	0,430	6,08	1,05	
204	FTIR	0,92	-0,383	-5,42	-0,94	
205	FTIR	1,10	-0,200	-2,83	-0,49	
206	FTIR	1,15	-0,150	-2,12	-0,37	
207	FTIR	1,90	0,600	8,49	1,47	
208	FTIR	1,80	0,500	7,07	1,23	
209	FTIR	1,09	-0,210	-2,97	-0,51	
210	FTIR	1,15	-0,150	-2,12	-0,37	
211	FTIR	0,93	-0,370	-5,23	-0,91	
212	FTIR	1,05	-0,250	-3,54	-0,61	
214	FTIR	1,10	-0,200	-2,83	-0,49	
215	FTIR	0,88	-0,420	-5,94	-1,03	

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
216	FTIR	0,74	-0,560	-7,92	-1,37	
217	FTIR	0,80	-0,500	-7,07	-1,23	
218	FTIR	0,85	-0,450	-6,37	-1,10	
219	FTIR	3,40	2,100	29,71	5,15	(*)
220	FTIR	0,66	-0,640	-9,05	-1,57	
221	FTIR	1,11	-0,190	-2,69	-0,47	
222	FTIR	1,50	0,200	2,83	0,49	
223	FTIR	1,50	0,200	2,83	0,49	
224	FTIR	1,04	-0,260	-3,68	-0,64	
225	FTIR	0,86	-0,440	-6,22	-1,08	
226	FTIR	1,30	0,000	0,00	0,00	
227	FTIR	1,39	0,090	1,27	0,22	
228	FTIR	2,11	0,810	11,46	1,99	
229	FTIR	1,43	0,130	1,84	0,32	
231	FTIR	0,80	-0,500	-7,07	-1,23	
232	FTIR	0,87	-0,430	-6,08	-1,05	
234	FTIR	1,65	0,350	4,95	0,86	
235	FTIR	1,40	0,100	1,41	0,25	
236	FTIR	1,25	-0,050	-0,71	-0,12	
237	FTIR	3,20	1,900	26,88	4,66	
240	FTIR	0,66	-0,640	-9,05	-1,57	
241	FTIR	1,50	0,200	2,83	0,49	
242	FTIR	0,82	-0,480	-6,79	-1,18	
243	FTIR	1,97	0,670	9,48	1,64	
244	FTIR	1,98	0,680	9,62	1,67	
245	FTIR	1,47	0,170	2,40	0,42	
246	FTIR	0,60	-0,700	-9,90	-1,72	
247	FTIR	1,25	-0,050	-0,71	-0,12	
249	FTIR	1,90	0,600	8,49	1,47	
250	FTIR	0,68	-0,620	-8,77	-1,52	
251	FTIR	0,90	-0,400	-5,66	-0,98	
252	FTIR	1,30	0,000	0,00	0,00	
254	FTIR	1,20	-0,100	-1,41	-0,25	
256	FTIR	0,80	-0,500	-7,07	-1,23	
257	FTIR	1,17	-0,130	-1,84	-0,32	
258	FTIR	0,26	-1,040	-14,71	-2,55	
259	FTIR	1,31	0,010	0,14	0,02	
260	FTIR	1,20	-0,100	-1,41	-0,25	
261	FTIR	1,30	0,000	0,00	0,00	
262	FTIR	2,20	0,900	12,73	2,21	
263	FTIR	1,30	0,000	0,00	0,00	
264	FTIR	1,00	-0,300	-4,24	-0,74	
265	FTIR	1,02	-0,280	-3,96	-0,69	
266	FTIR	0,77	-0,530	-7,50	-1,30	
267	FTIR	0,31	-0,990	-14,00	-2,43	
268	FTIR	0,90	-0,400	-5,66	-0,98	
270	FTIR	1,40	0,100	1,41	0,25	
271	FTIR	0,80	-0,500	-7,07	-1,23	
272	FTIR	0,40	-0,900	-12,73	-2,21	
273	FTIR	1,04	-0,260	-3,68	-0,64	
275	FTIR	0,60	-0,700	-9,90	-1,72	
276	FTIR	0,80	-0,500	-7,07	-1,23	
277	FTIR	1,21	-0,090	-1,27	-0,22	
278	FTIR	1,84	0,540	7,64	1,32	
279	FTIR	1,92	0,620	8,77	1,52	
280	FTIR	0,50	-0,800	-11,32	-1,96	
281	FTIR	1,19	-0,110	-1,56	-0,27	
282	FTIR	0,84	-0,460	-6,51	-1,13	
283	FTIR	0,70	-0,600	-8,49	-1,47	
284	FTIR	1,81	0,510	7,21	1,25	
312	FTIR	-0,28	-1,580	-22,35	-3,87	
319	FTIR	1,70	0,400	5,66	0,98	
320	FTIR	0,93	-0,370	-5,23	-0,91	
323	FTIR	1,70	0,400	5,66	0,98	
336	FTIR	2,20	0,900	12,73	2,21	

(\*) Dieser Wert weicht um mehr als 50 % vom Median der herkömmlichen Werte ab.

**Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse**

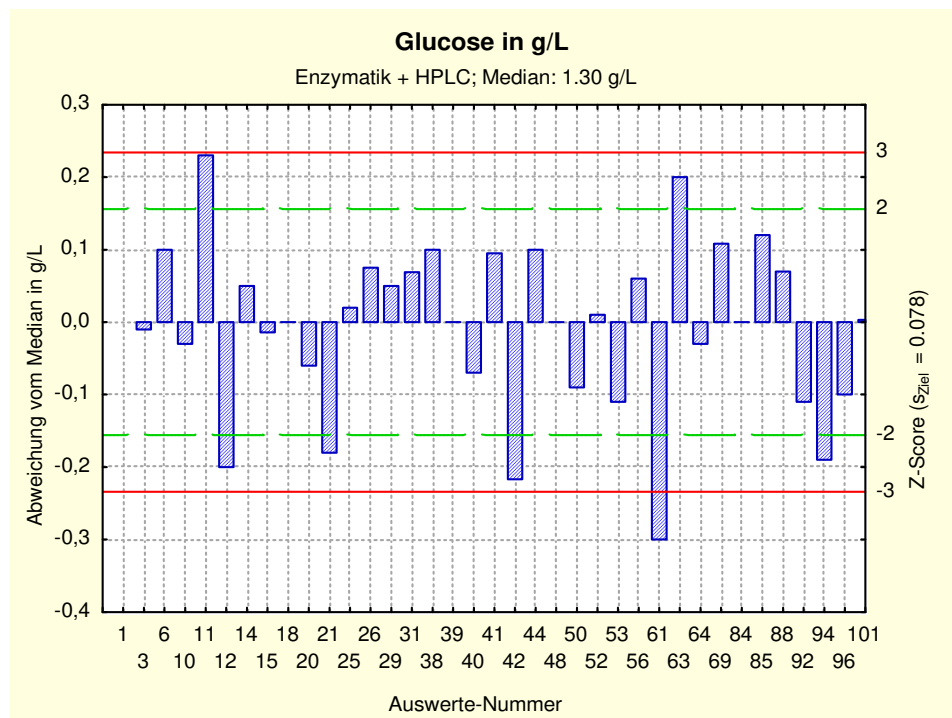
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
337	FTIR	1,30	0,000	0,00	0,00	
343	FTIR	2,08	0,780	11,03	1,91	
349	FTIR	2,00	0,700	9,90	1,72	
364	FTIR	0,60	-0,700	-9,90	-1,72	

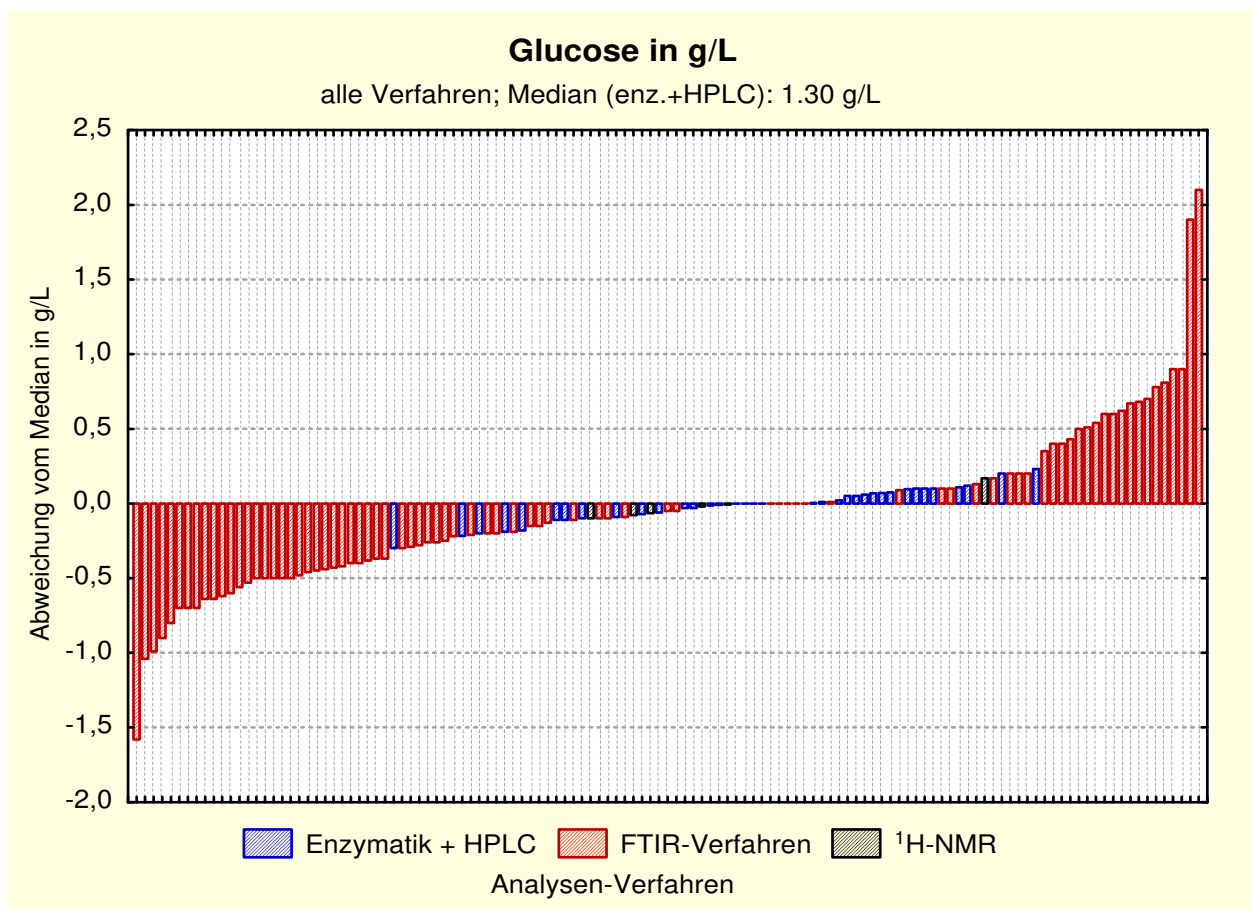
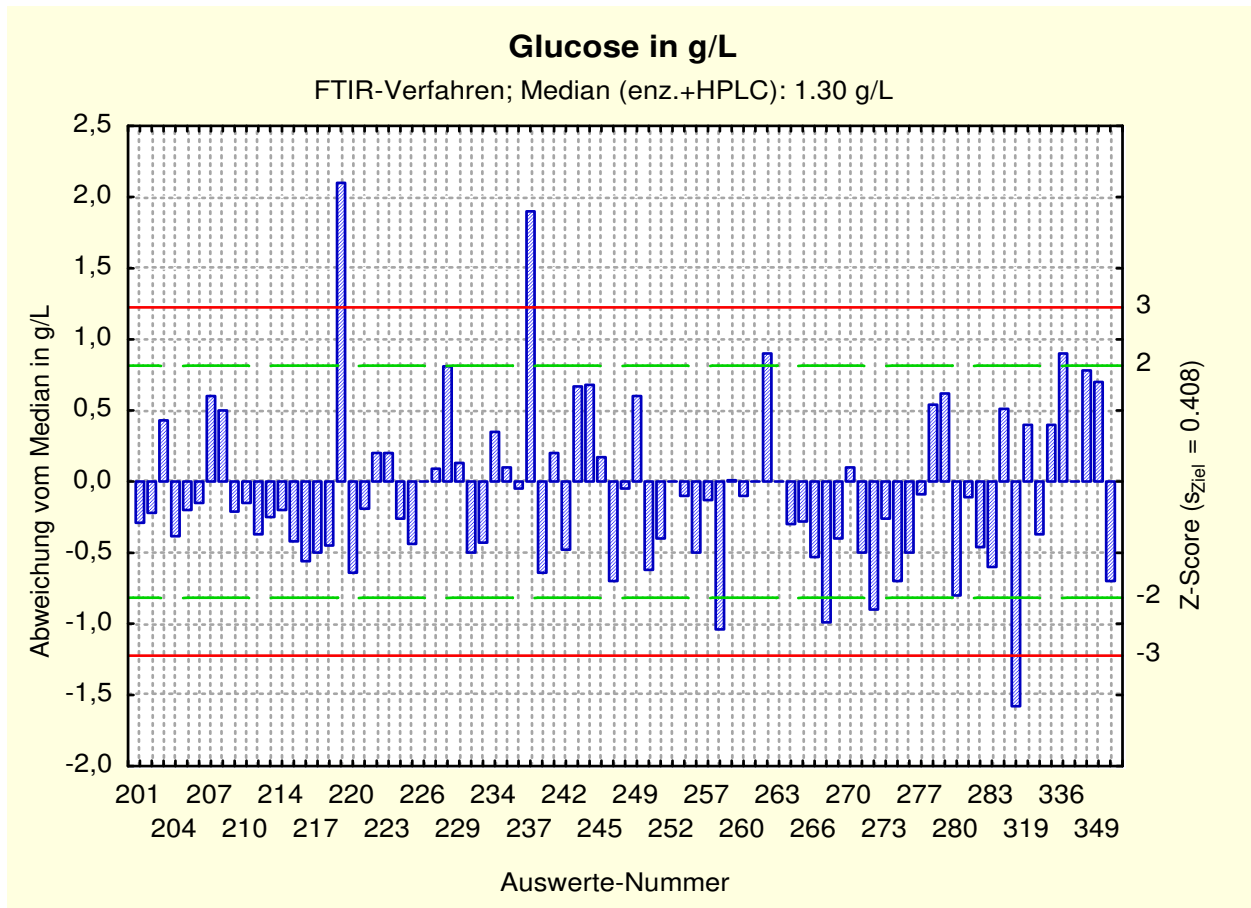
**4.5.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse für Glucose [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	36
Minimalwert	1,00
Mittelwert	1,293
Median	1,300
Maximalwert	1,53
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,117
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,020
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,071
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp herk.</sub> )	0,078
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,408
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	1,66
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	1,50
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,29
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,28
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	0,25
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,05

**4.5.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	OIV-MA-AS311-03; Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	13	1,212	0,1415
enzymat. autom.	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, automatisiert	21	1,342	0,0820
enzymat. Hand	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, manuell	2	1,287	0,0265
	herkömmliche Verfahren	36	1,297	0,1125
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	83	1,197	0,5191
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	6	1,267	0,0719





## 4.6 Fructose [g/L]

### 4.6.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enzymat. Hand	4,32	0,040	0,21	0,25	
03	enzymat., autom.	4,04	-0,240	-1,23	-1,51	
06	enzymat., autom.	4,32	0,040	0,21	0,25	
10	enzymat., autom.	4,13	-0,150	-0,77	-0,95	
11	enzymat., autom.	4,28	0,000	0,00	0,00	
12	HPLC	4,30	0,020	0,10	0,13	
14	enzymat., autom.	4,31	0,030	0,15	0,19	
15	enzymat., autom.	4,08	-0,200	-1,03	-1,26	
18	HPLC	4,80	0,520	2,67	3,28	
20	HPLC	4,57	0,290	1,49	1,83	
21	HPLC	4,42	0,140	0,72	0,88	
22	NMR	4,46	0,180	0,93	1,14	
25	enzymat., autom.	4,28	0,000	0,00	0,00	
26	HPLC	4,48	0,202	1,04	1,28	
29	enzymat., autom.	4,29	0,010	0,05	0,06	
31	enzymat., autom.	4,51	0,232	1,19	1,46	
38	enzymat., autom.	4,61	0,330	1,70	2,08	
39	HPLC	4,20	-0,080	-0,41	-0,50	
40	enzymat., autom.	4,03	-0,250	-1,29	-1,58	
41	enzymat., autom.	3,90	-0,380	-1,95	-2,40	
42	HPLC	4,34	0,062	0,32	0,39	
44	enzymat., autom.	4,14	-0,140	-0,72	-0,88	
48	enzymat., autom.	4,35	0,070	0,36	0,44	
50	HPLC	4,58	0,300	1,54	1,89	
52	enzymat., autom.	3,91	-0,370	-1,90	-2,33	
53	enzymat., autom.	4,10	-0,180	-0,93	-1,14	
56	enzymat., autom.	4,33	0,050	0,26	0,32	
61	HPLC	4,00	-0,280	-1,44	-1,77	
63	enzymat., autom.	4,20	-0,080	-0,41	-0,50	
64	enzymat. Hand	3,95	-0,330	-1,70	-2,08	
69	enzymat., autom.	3,95	-0,329	-1,69	-2,08	
84	HPLC	4,20	-0,080	-0,41	-0,50	
85	HPLC	4,15	-0,130	-0,67	-0,82	
88	enzymat., autom.	4,38	0,100	0,51	0,63	
92	enzymat., autom.	3,83	-0,450	-2,31	-2,84	
94	HPLC	4,33	0,050	0,26	0,32	
101	enzymat. Hand	3,98	-0,302	-1,55	-1,91	
103	NMR	3,90	-0,380	-1,95	-2,40	
104	NMR	3,92	-0,357	-1,83	-2,25	
105	NMR	4,00	-0,280	-1,44	-1,77	
106	NMR	3,67	-0,608	-3,12	-3,83	
107	NMR	4,24	-0,039	-0,20	-0,25	

### 4.6.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	3,76	-0,520	-2,67	-1,58	
202	FTIR	4,32	0,040	0,21	0,12	
203	FTIR	4,36	0,080	0,41	0,24	
204	FTIR	3,68	-0,598	-3,07	-1,81	
205	FTIR	4,07	-0,210	-1,08	-0,64	
206	FTIR	3,95	-0,330	-1,70	-1,00	
207	FTIR	3,10	-1,180	-6,07	-3,58	
208	FTIR	3,80	-0,480	-2,47	-1,45	
209	FTIR	4,35	0,070	0,36	0,21	
210	FTIR	4,05	-0,230	-1,18	-0,70	
211	FTIR	4,59	0,310	1,59	0,94	
212	FTIR	3,95	-0,330	-1,70	-1,00	
214	FTIR	4,00	-0,280	-1,44	-0,85	
215	FTIR	3,93	-0,350	-1,80	-1,06	
217	FTIR	4,32	0,040	0,21	0,12	

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
216	FTIR	3,49	-0,790	-4,06	-2,39	
218	FTIR	4,47	0,190	0,98	0,58	
219	FTIR	4,10	-0,180	-0,93	-0,55	
220	FTIR	4,30	0,020	0,10	0,06	
221	FTIR	4,21	-0,070	-0,36	-0,21	
222	FTIR	4,60	0,320	1,65	0,97	
223	FTIR	4,50	0,220	1,13	0,67	
224	FTIR	4,11	-0,170	-0,87	-0,52	
225	FTIR	4,63	0,350	1,80	1,06	
226	FTIR	3,70	-0,580	-2,98	-1,76	
227	FTIR	4,13	-0,150	-0,77	-0,45	
228	FTIR	3,44	-0,840	-4,32	-2,55	
229	FTIR	4,14	-0,140	-0,72	-0,42	
231	FTIR	4,40	0,120	0,62	0,36	
232	FTIR	3,47	-0,810	-4,16	-2,45	
234	FTIR	4,64	0,360	1,85	1,09	
235	FTIR	4,80	0,520	2,67	1,58	
236	FTIR	4,01	-0,270	-1,39	-0,82	
237	FTIR	4,10	-0,180	-0,93	-0,55	
240	FTIR	4,36	0,080	0,41	0,24	
241	FTIR	3,90	-0,380	-1,95	-1,15	
242	FTIR	4,56	0,280	1,44	0,85	
243	FTIR	4,13	-0,150	-0,77	-0,45	
244	FTIR	4,97	0,690	3,55	2,09	
245	FTIR	4,52	0,240	1,23	0,73	
246	FTIR	4,50	0,220	1,13	0,67	
247	FTIR	4,76	0,480	2,47	1,45	
249	FTIR	4,70	0,420	2,16	1,27	
250	FTIR	4,14	-0,140	-0,72	-0,42	
251	FTIR	4,05	-0,230	-1,18	-0,70	
252	FTIR	4,28	0,000	0,00	0,00	
254	FTIR	4,00	-0,280	-1,44	-0,85	
256	FTIR	4,40	0,120	0,62	0,36	
257	FTIR	4,17	-0,110	-0,57	-0,33	
258	FTIR	4,22	-0,060	-0,31	-0,18	
259	FTIR	3,92	-0,360	-1,85	-1,09	
260	FTIR	3,40	-0,880	-4,52	-2,67	
261	FTIR	4,40	0,120	0,62	0,36	
262	FTIR	4,00	-0,280	-1,44	-0,85	
263	FTIR	4,10	-0,180	-0,93	-0,55	
264	FTIR	4,60	0,320	1,65	0,97	
265	FTIR	3,50	-0,780	-4,01	-2,36	
266	FTIR	4,31	0,030	0,15	0,09	
267	FTIR	3,31	-0,970	-4,99	-2,94	
268	FTIR	4,70	0,420	2,16	1,27	
270	FTIR	3,40	-0,880	-4,52	-2,67	
271	FTIR	3,70	-0,580	-2,98	-1,76	
272	FTIR	5,10	0,820	4,22	2,48	
273	FTIR	4,13	-0,150	-0,77	-0,45	
275	FTIR	4,90	0,620	3,19	1,88	
276	FTIR	3,00	-1,280	-6,58	-3,88	
277	FTIR	3,95	-0,330	-1,70	-1,00	
278	FTIR	3,73	-0,550	-2,83	-1,67	
279	FTIR	3,59	-0,690	-3,55	-2,09	
280	FTIR	3,90	-0,380	-1,95	-1,15	
281	FTIR	3,72	-0,560	-2,88	-1,70	
282	FTIR	3,52	-0,760	-3,91	-2,30	
283	FTIR	3,90	-0,380	-1,95	-1,15	
284	FTIR	3,77	-0,510	-2,62	-1,55	
312	FTIR	4,01	-0,270	-1,39	-0,82	
319	FTIR	4,40	0,120	0,62	0,36	
320	FTIR	4,02	-0,260	-1,34	-0,79	
323	FTIR	3,90	-0,380	-1,95	-1,15	
336	FTIR	5,00	0,720	3,70	2,18	
337	FTIR	5,20	0,920	4,73	2,79	



**Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse**

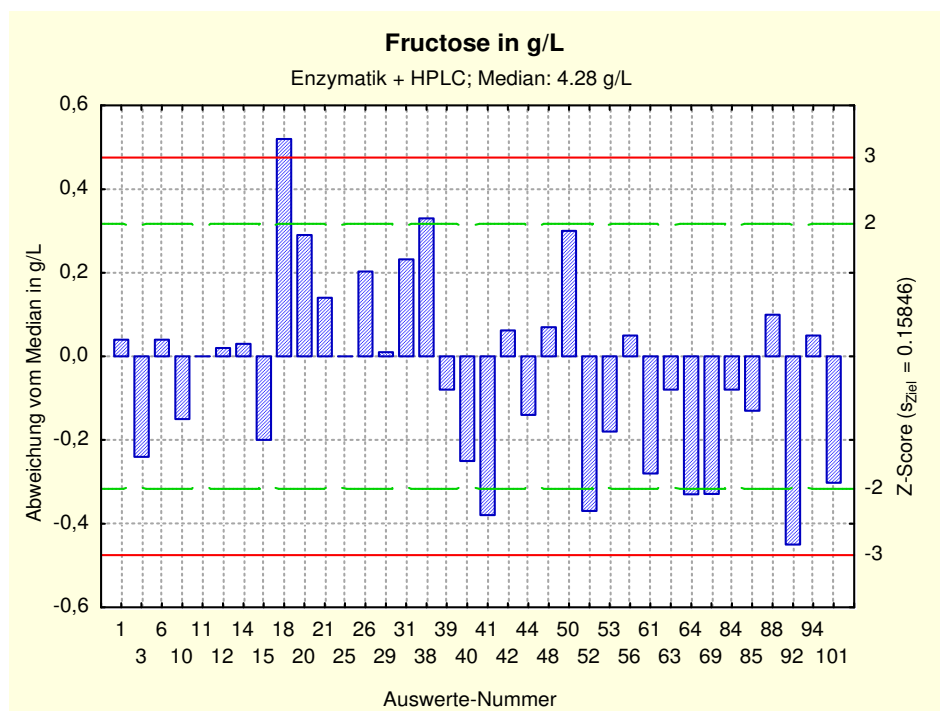
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
343	FTIR	4,20	-0,080	-0,41	-0,24	
349	FTIR	4,60	0,320	1,65	0,97	
364	FTIR	4,60	0,320	1,65	0,97	

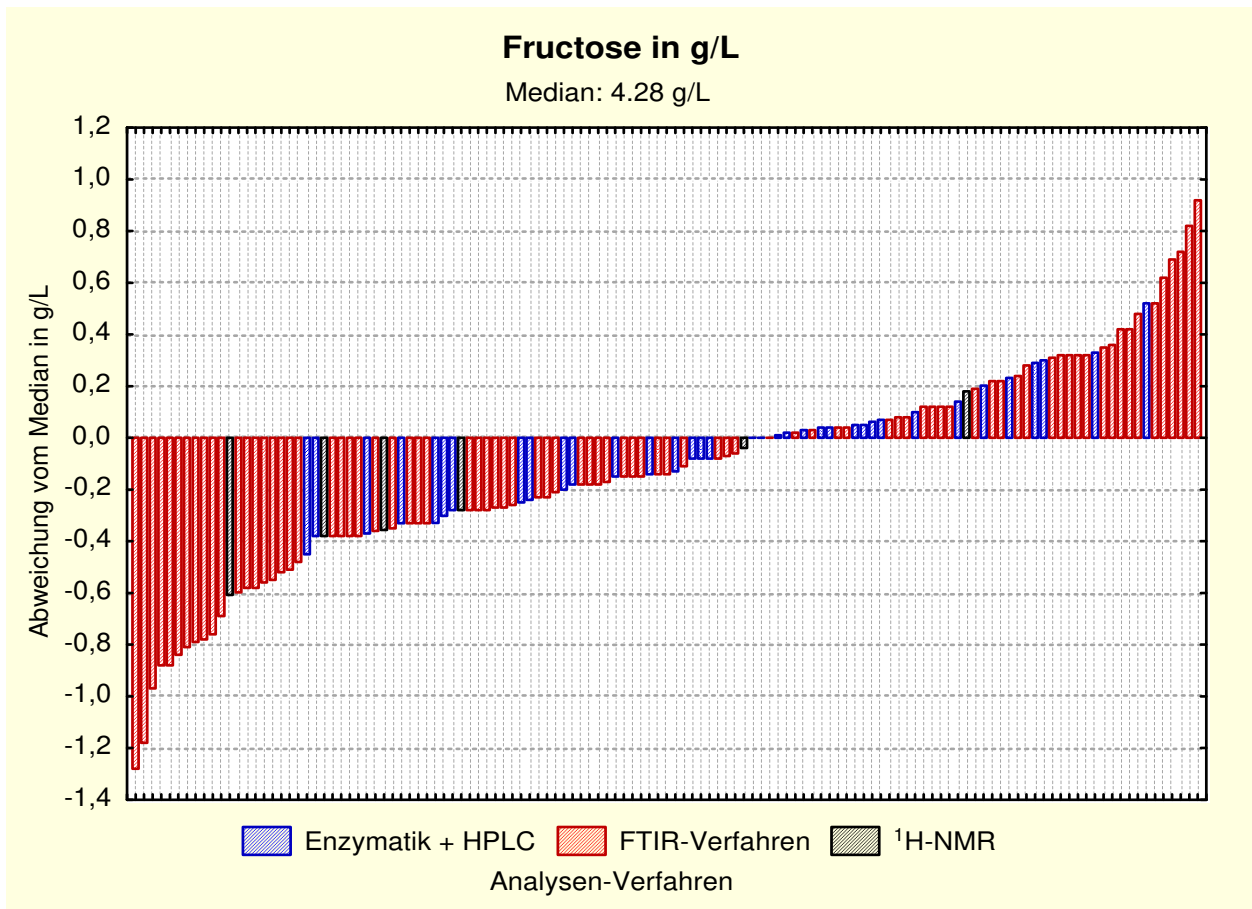
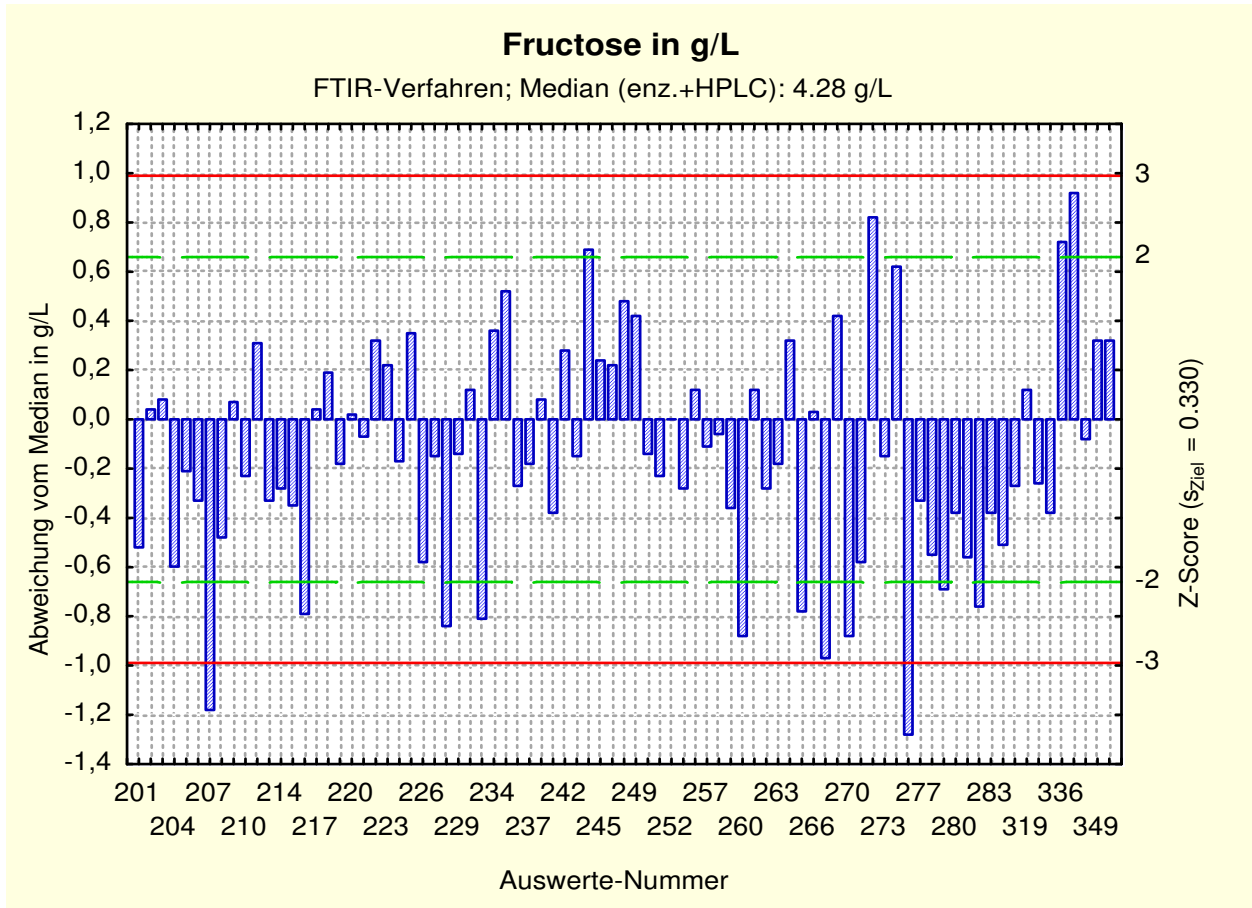
**4.6.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse für Fructose [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	36
Minimalwert	3,83
Mittelwert	4,239
Median	4,280
Maximalwert	4,80
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,225
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,038
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,195
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,158
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,330
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	1,16
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	1,42
Quotient ( $s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,68
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,19
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,24
Quotient ( $u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,11

**4.6.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	OIV-MA-AS311-03; Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	12	4,357	0,228
enzymat. autom.	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, automatisiert	21	4,186	0,218
enzymat. Hand	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, manuell	3	4,071	0,212
	herkömmliche Verfahren	36	4,237	0,230
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	83	4,141	0,452
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	6	4,027	0,304





## 4.7 Glycerin [g/L]

### 4.7.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	4,67	0,00	0,02	
03	enzymat. Hand	4,47	-0,20	-0,93	
06	enzymat. autom.	4,73	0,07	0,31	
07	enzymat. autom.	4,62	-0,04	-0,22	
10	enzymat. autom.	5,54	0,88	4,18	
11	enzymat. Hand	4,97	0,30	1,46	
12	HPLC	4,70	0,04	0,17	
20	HPLC	4,53	-0,13	-0,65	
21	HPLC	4,54	-0,13	-0,60	
22	NMR	4,82	0,16	0,74	
26	HPLC	4,74	0,08	0,37	
39	HPLC	4,50	-0,17	-0,79	
42	HPLC	4,60	-0,06	-0,29	
44	enzymat. autom.	4,57	-0,09	-0,45	
48	HPLC	4,56	-0,11	-0,50	
50	HPLC	4,74	0,08	0,36	
56	enzymat. autom.	4,79	0,13	0,60	
61	HPLC	4,40	-0,26	-1,27	
84	HPLC	4,66	-0,00	-0,02	
85	HPLC	4,72	0,05	0,26	
88	enzymat. autom.	5,11	0,44	2,10	
89	enzymat. Hand	4,70	0,04	0,17	
94	HPLC	4,64	-0,03	-0,12	
103	NMR	5,00	0,33	1,60	
104	NMR	4,56	-0,11	-0,52	
105	NMR	4,62	-0,04	-0,22	
106	NMR	4,55	-0,12	-0,56	
107	NMR	4,83	0,16	0,77	

### 4.7.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	4,57	-0,09	-0,45	-0,27	
202	FTIR	4,07	-0,59	-2,84	-1,71	
203	FTIR	4,74	0,08	0,36	0,22	
204	FTIR	4,70	0,04	0,18	0,11	
206	FTIR	4,34	-0,33	-1,55	-0,93	
207	FTIR	4,82	0,16	0,74	0,45	
208	FTIR	4,50	-0,17	-0,79	-0,47	
209	FTIR	4,82	0,16	0,74	0,45	
211	FTIR	4,97	0,30	1,46	0,88	
212	FTIR	4,70	0,04	0,17	0,10	
214	FTIR	4,40	-0,26	-1,27	-0,76	
215	FTIR	4,55	-0,12	-0,55	-0,33	
216	FTIR	5,00	0,33	1,60	0,96	
217	FTIR	3,30	-1,37	-6,52	-3,92	
218	FTIR	4,45	-0,21	-1,03	-0,62	
219	FTIR	5,30	0,63	3,03	1,82	
220	FTIR	4,83	0,17	0,79	0,47	
221	FTIR	4,47	-0,20	-0,93	-0,56	
222	FTIR	4,80	0,13	0,65	0,39	
223	FTIR	3,90	-0,77	-3,66	-2,20	
224	FTIR	4,63	-0,04	-0,17	-0,10	
225	FTIR	4,57	-0,09	-0,45	-0,27	
226	FTIR	4,80	0,13	0,65	0,39	
227	FTIR	4,57	-0,09	-0,45	-0,27	
228	FTIR	4,15	-0,51	-2,46	-1,48	
229	FTIR	4,57	-0,09	-0,45	-0,27	
231	FTIR	3,90	-0,77	-3,66	-2,20	
232	FTIR	3,59	-1,08	-5,14	-3,09	
234	FTIR	4,36	-0,30	-1,46	-0,88	

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

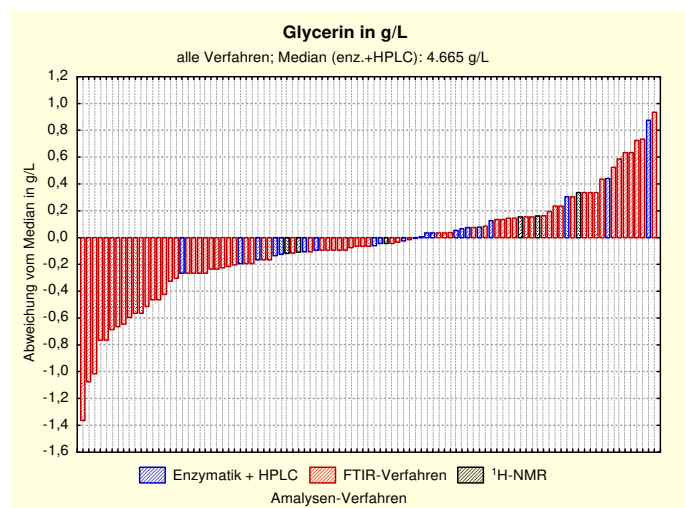
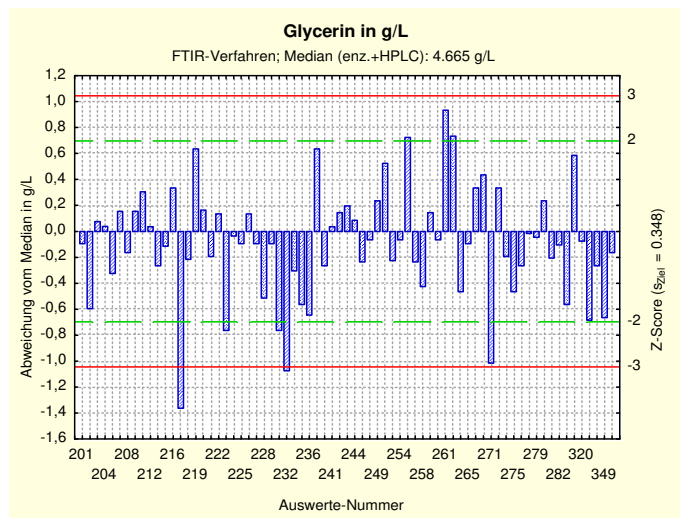
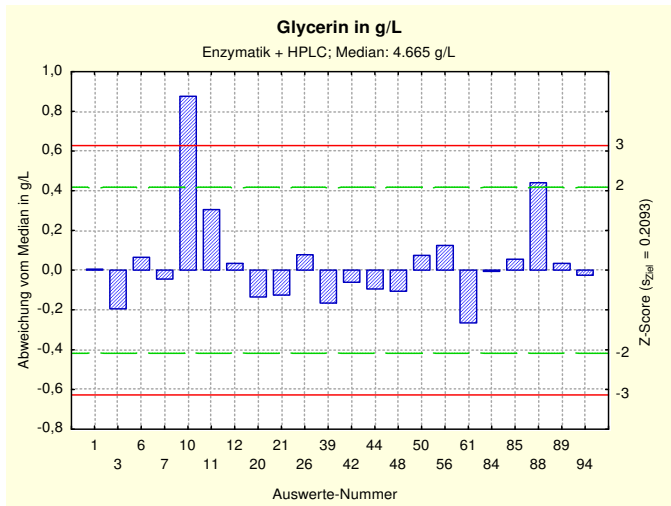
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
235	FTIR	4,10	-0,57	-2,70	-1,62	
236	FTIR	4,02	-0,65	-3,08	-1,85	
237	FTIR	5,30	0,63	3,03	1,82	
240	FTIR	4,40	-0,26	-1,27	-0,76	
241	FTIR	4,70	0,04	0,17	0,10	
242	FTIR	4,81	0,14	0,69	0,42	
243	FTIR	4,86	0,20	0,93	0,56	
244	FTIR	4,75	0,08	0,41	0,24	
245	FTIR	4,43	-0,24	-1,12	-0,68	
246	FTIR	4,60	-0,07	-0,31	-0,19	
249	FTIR	4,90	0,24	1,12	0,68	
250	FTIR	5,19	0,53	2,51	1,51	
252	FTIR	4,44	-0,22	-1,08	-0,65	
254	FTIR	4,60	-0,07	-0,31	-0,19	
256	FTIR	5,39	0,72	3,46	2,08	
257	FTIR	4,43	-0,24	-1,12	-0,68	
258	FTIR	4,24	-0,42	-2,03	-1,22	
259	FTIR	4,81	0,14	0,69	0,42	
260	FTIR	4,60	-0,07	-0,31	-0,19	
261	FTIR	5,60	0,93	4,47	2,69	
262	FTIR	5,40	0,74	3,51	2,11	
263	FTIR	4,20	-0,46	-2,22	-1,34	
265	FTIR	4,57	-0,09	-0,45	-0,27	
266	FTIR	5,00	0,33	1,60	0,96	
267	FTIR	5,10	0,43	2,08	1,25	
271	FTIR	3,65	-1,02	-4,85	-2,92	
272	FTIR	5,00	0,33	1,60	0,96	
273	FTIR	4,47	-0,20	-0,93	-0,56	
275	FTIR	4,20	-0,46	-2,22	-1,34	
276	FTIR	4,40	-0,26	-1,27	-0,76	
278	FTIR	4,65	-0,01	-0,07	-0,04	
279	FTIR	4,62	-0,04	-0,22	-0,13	
280	FTIR	4,90	0,24	1,12	0,68	
281	FTIR	4,46	-0,21	-0,98	-0,59	
282	FTIR	4,56	-0,11	-0,50	-0,30	
283	FTIR	4,10	-0,57	-2,70	-1,62	
284	FTIR	5,25	0,58	2,80	1,68	
320	FTIR	4,59	-0,08	-0,36	-0,22	
336	FTIR	3,98	-0,69	-3,27	-1,97	
337	FTIR	4,40	-0,26	-1,27	-0,76	
349	FTIR	4,00	-0,67	-3,18	-1,91	
368	FTIR	4,50	-0,17	-0,79	-0,47	

**4.7.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse für Glycerin [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	22
Minimalwert	4,4
Mittelwert	4,70
Median	4,67
Maximalwert	5,5
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,244
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,052
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,209
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{Ü\ FTIR}$ )	0,348
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	1,17
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	
Quotient ( $s_L/s_{Ü\ FTIR}$ )	0,70
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,25
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	
Quotient ( $u_M/s_{Ü\ FTIR}$ )	0,15

4.7.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	12	4,615	0,114
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert	6	4,878	0,384
enzymat. Hand	enzymatisch, manuell	4	4,695	0,219
	herkömmliche Verfahren	22	4,663	0,147
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	71	4,576	0,399
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	6	4,728	0,207



## 4.8 pH-Wert

### 4.8.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
01	potentio-	3,26	-0,015	-0,32	
03	potentio-	3,16	-0,115	-2,42	
05	potentio-	3,29	0,015	0,32	
06	potentio-	3,28	0,005	0,11	
07	potentio-	3,28	0,005	0,11	
10	potentio-	3,30	0,025	0,53	
11	potentio-	3,30	0,025	0,53	
12	potentio-	3,35	0,075	1,58	
14	potentio-	3,28	0,005	0,11	
15	potentio-	3,18	-0,095	-2,00	
18	potentio-	3,33	0,056	1,18	
20	potentio-	3,30	0,025	0,53	
21	potentio-	3,21	-0,065	-1,37	
22	potentio-	3,25	-0,025	-0,53	
25	potentio-	3,17	-0,105	-2,21	
26	potentio-	3,25	-0,025	-0,53	
27	potentio-	3,44	0,165	3,47	
29	potentio-	3,27	-0,005	-0,11	
38	potentio-	3,24	-0,035	-0,74	
39	potentio-	3,26	-0,015	-0,32	
40	potentio-	3,27	-0,005	-0,11	
41	potentio-	3,27	-0,005	-0,11	
42	potentio-	3,41	0,135	2,84	
46	potentio-	3,35	0,075	1,58	
48	potentio-	3,21	-0,065	-1,37	
50	potentio-	3,29	0,015	0,32	
53	potentio-	3,28	0,005	0,11	
56	potentio-	3,29	0,015	0,32	
60	potentio-	3,23	-0,045	-0,95	
61	potentio-	3,01	-0,265	-5,57	(**)
63	potentio-	3,30	0,025	0,53	
64	potentio-	3,11	-0,165	-3,47	
67	potentio-	3,20	-0,075	-1,58	
69	potentio-	3,24	-0,035	-0,74	
74	potentio-	3,25	-0,025	-0,53	
75	potentio-	3,25	-0,025	-0,53	
77	potentio-	3,29	0,015	0,32	
84	potentio-	3,29	0,015	0,32	
88	potentio-	3,29	0,015	0,32	
101	potentio-	3,14	-0,135	-2,84	
102	potentio-	3,29	0,015	0,32	

Der mit (\*\*) gekennzeichnete Wert wurde bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

### 4.8.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	3,25	-0,025	-0,51	
202	FTIR	3,36	0,085	1,72	
203	FTIR	3,27	-0,005	-0,10	
204	FTIR	3,24	-0,035	-0,71	
205	FTIR	3,32	0,045	0,91	
206	FTIR	3,35	0,075	1,52	
207	FTIR	3,28	0,005	0,10	
208	FTIR	3,28	0,005	0,10	
209	FTIR	3,26	-0,015	-0,30	
211	FTIR	3,25	-0,025	-0,51	
212	FTIR	3,28	0,005	0,10	
214	FTIR	3,31	0,035	0,71	
215	FTIR	3,25	-0,025	-0,51	
216	FTIR	3,44	0,165	3,35	
217	FTIR	3,22	-0,055	-1,12	
218	FTIR	3,30	0,025	0,51	

**Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse**

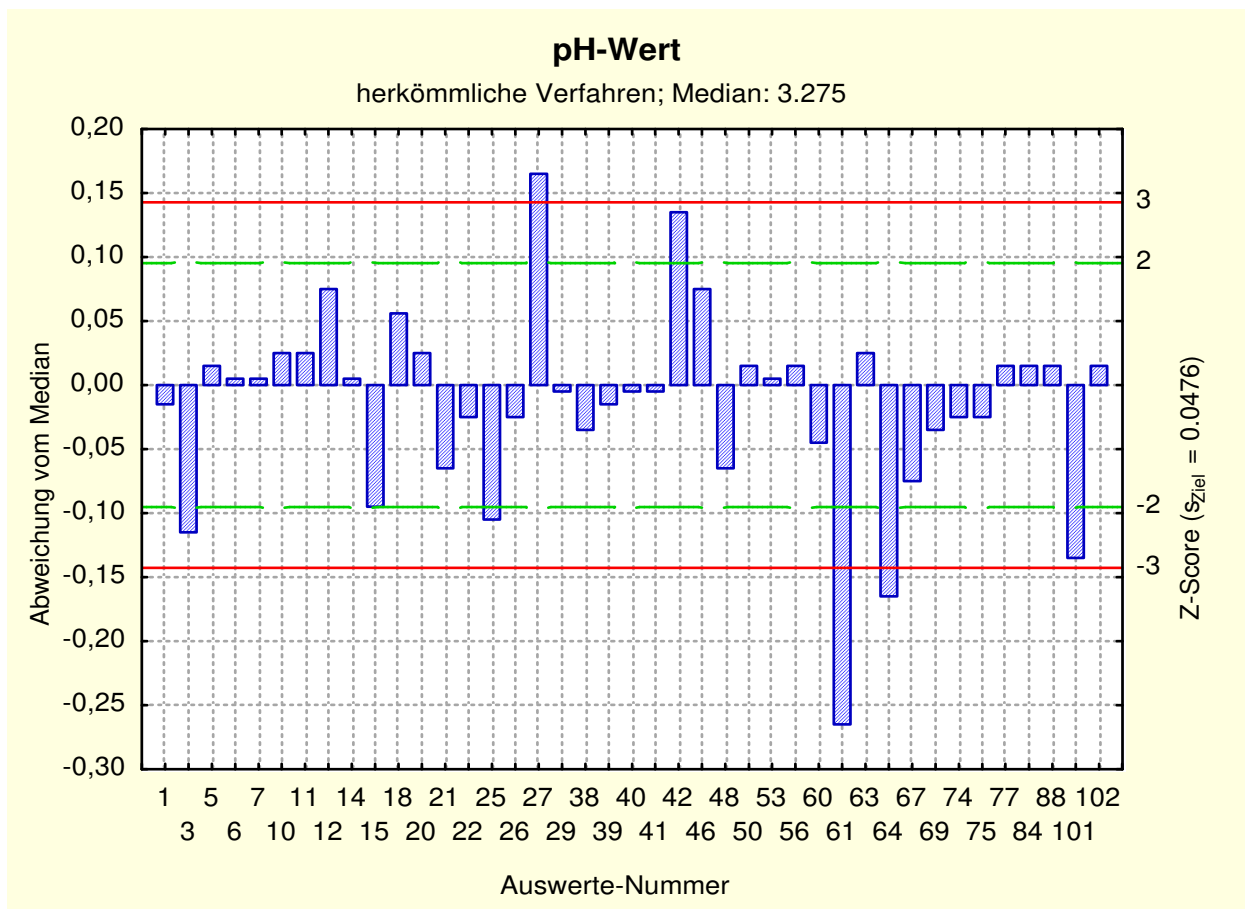
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
219	FTIR	3,44	0,165	3,35	
220	FTIR	3,29	0,015	0,30	
221	FTIR	3,24	-0,035	-0,71	
222	FTIR	3,23	-0,045	-0,91	
223	FTIR	3,24	-0,035	-0,71	
224	FTIR	3,20	-0,075	-1,52	
225	FTIR	3,22	-0,055	-1,12	
226	FTIR	3,22	-0,055	-1,12	
227	FTIR	3,34	0,065	1,32	
228	FTIR	3,29	0,015	0,30	
229	FTIR	3,24	-0,035	-0,71	
231	FTIR	3,28	0,005	0,10	
232	FTIR	3,34	0,065	1,32	
234	FTIR	3,35	0,075	1,52	
235	FTIR	3,23	-0,045	-0,91	
236	FTIR	3,19	-0,085	-1,72	
237	FTIR	3,41	0,135	2,74	
240	FTIR	3,33	0,055	1,12	
241	FTIR	3,34	0,065	1,32	
242	FTIR	3,23	-0,045	-0,91	
243	FTIR	3,28	0,005	0,10	
244	FTIR	3,28	0,005	0,10	
245	FTIR	3,30	0,025	0,51	
246	FTIR	3,33	0,055	1,12	
247	FTIR	3,27	-0,005	-0,10	
248	FTIR	3,21	-0,065	-1,32	
249	FTIR	3,31	0,035	0,71	
250	FTIR	3,33	0,055	1,12	
251	FTIR	3,33	0,055	1,12	
252	FTIR	3,20	-0,075	-1,52	
254	FTIR	3,34	0,065	1,32	
256	FTIR	3,29	0,015	0,30	
257	FTIR	3,35	0,075	1,52	
258	FTIR	3,23	-0,045	-0,91	
259	FTIR	3,30	0,025	0,51	
260	FTIR	3,38	0,105	2,13	
261	FTIR	3,18	-0,095	-1,93	
262	FTIR	3,44	0,165	3,35	
263	FTIR	3,37	0,095	1,93	
264	FTIR	3,26	-0,015	-0,30	
265	FTIR	3,26	-0,015	-0,30	
266	FTIR	3,24	-0,035	-0,71	
267	FTIR	3,28	0,005	0,10	
268	FTIR	3,29	0,015	0,30	
269	FTIR	3,23	-0,045	-0,91	
270	FTIR	3,31	0,035	0,71	
271	FTIR	3,31	0,035	0,71	
272	FTIR	3,11	-0,165	-3,35	
273	FTIR	3,27	-0,005	-0,10	
274	FTIR	3,32	0,045	0,91	
275	FTIR	3,26	-0,015	-0,30	
276	FTIR	3,47	0,195	3,96	
277	FTIR	3,32	0,045	0,91	
278	FTIR	3,29	0,015	0,30	
279	FTIR	3,30	0,025	0,51	
280	FTIR	3,23	-0,045	-0,91	
281	FTIR	3,27	-0,005	-0,10	
282	FTIR	3,25	-0,025	-0,51	
283	FTIR	3,28	0,005	0,10	
284	FTIR	3,23	-0,045	-0,91	
319	FTIR	3,37	0,095	1,93	
320	FTIR	3,23	-0,045	-0,91	
336	FTIR	3,19	-0,085	-1,72	
337	FTIR	3,30	0,025	0,51	
349	FTIR	3,22	-0,055	-1,12	
364	FTIR	3,25	-0,025	-0,51	

**4.8.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

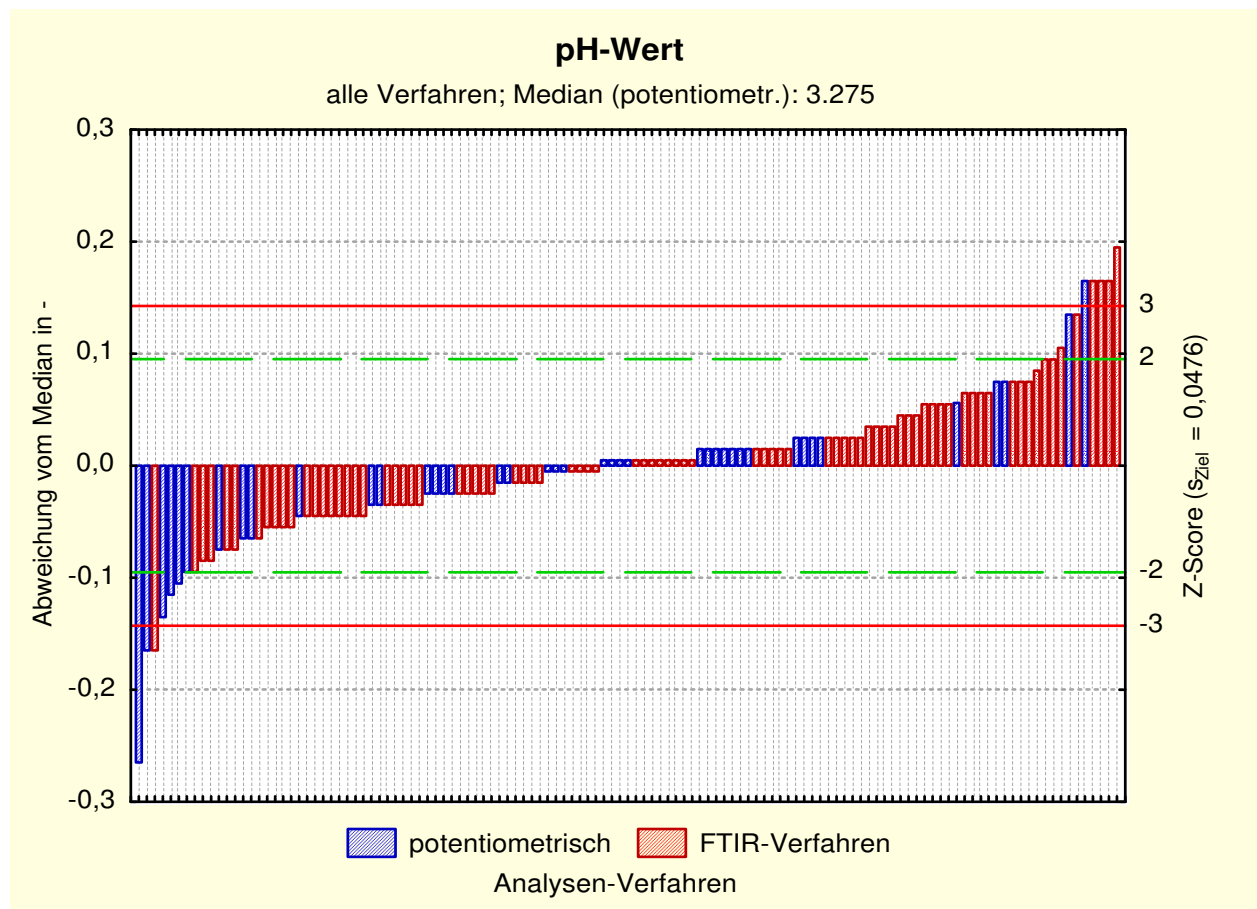
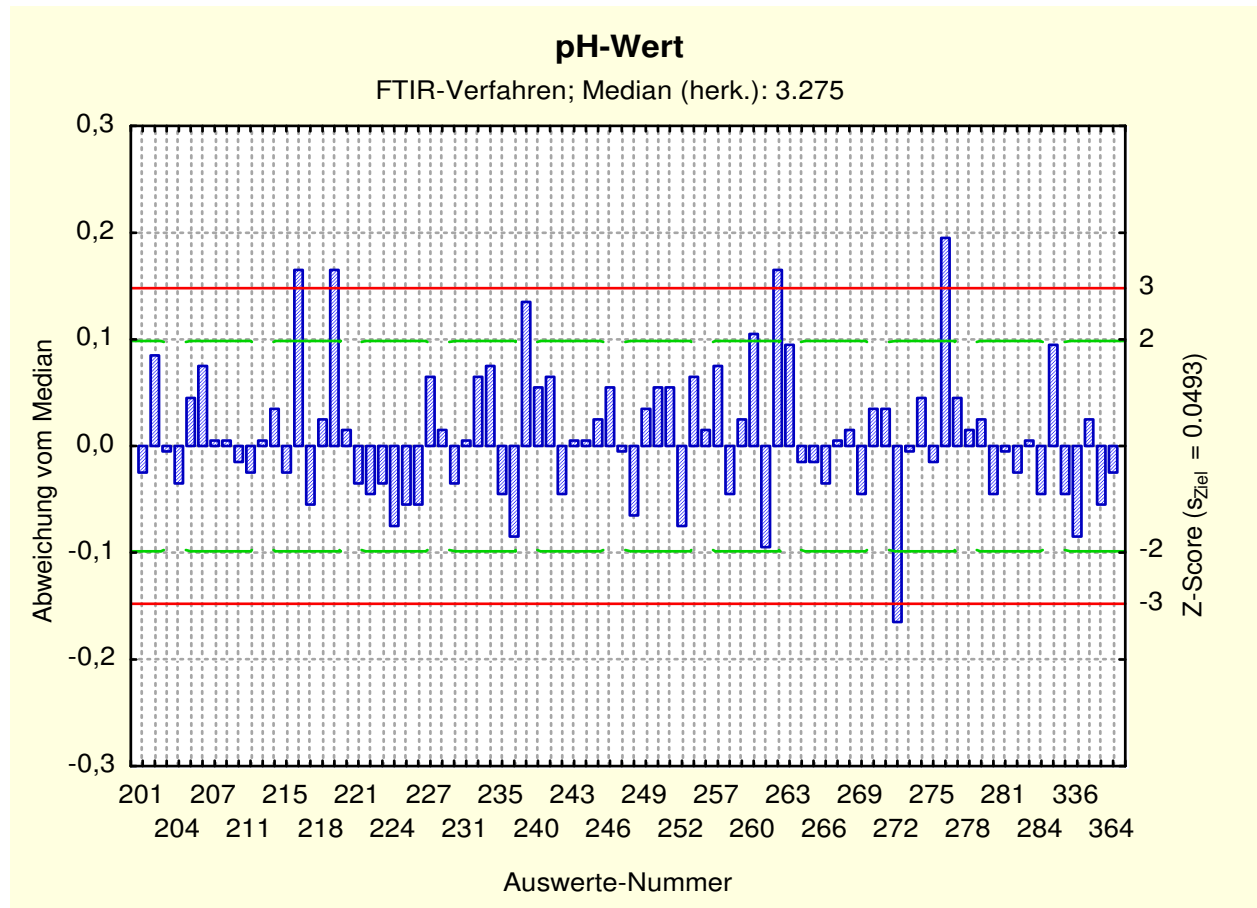
Ergebnisse für pH-Wert	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	41	40
Minimalwert	3,01	3,11
Mittelwert	3,260	3,266
Median	3,270	3,275
Maximalwert	3,44	3,44
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,0751	0,0643
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,0117	0,0102
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )		
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp herk.</sub> )	0,0476	0,0476
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,0493	0,0493
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )		
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	1,58	1,35
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	1,52	1,30
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )		
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	0,25	0,21
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,24	0,21

**4.8.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
potentiometr.	potentiometrisch	41	3,264	0,0568
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	82	3,282	0,0587







## 4.9 Gesamtsäure [g/L]

### 4.9.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 5.2.1	6,57	-0,100	-0,35	-0,93	
03	LwK 5.2.1	6,62	-0,050	-0,18	-0,47	
05	LwK 5.2.1	6,59	-0,080	-0,28	-0,75	
06	LwK 5.1	6,46	-0,210	-0,74	-1,96	
07	LwK 5.2.1	6,57	-0,100	-0,35	-0,93	
10	LwK 5.2.1	6,50	-0,170	-0,60	-1,59	
11	LwK 5.1	6,67	0,000	0,00	0,00	
12	LwK 5.1	6,80	0,130	0,46	1,21	
14	LwK 5.1	6,99	0,320	1,13	2,99	
15	LwK 5.2.1	6,66	-0,010	-0,04	-0,09	
18	LwK 5.2.1	6,86	0,190	0,67	1,77	
20	LwK 5.1	6,80	0,130	0,46	1,21	
21	LwK 5.1	6,52	-0,150	-0,53	-1,40	
22	LwK 5.1	6,60	-0,070	-0,25	-0,65	
23	LwK 5.1	6,80	0,130	0,46	1,21	
25	LwK 5.1	6,68	0,010	0,04	0,09	
26	LwK 5.1	6,60	-0,070	-0,25	-0,65	
27	LwK 5.1	6,65	-0,020	-0,07	-0,19	
29	LwK 5.2.1	6,84	0,170	0,60	1,59	
31	LwK 5.1	6,60	-0,070	-0,25	-0,65	
34	LwK 5.2.1	6,60	-0,070	-0,25	-0,65	
38	LwK 5.1	6,70	0,030	0,11	0,28	
39	LwK 5.2.1	6,67	0,000	0,00	0,00	
40	LwK 5.1	6,48	-0,190	-0,67	-1,77	
41	LwK 5.1	6,70	0,030	0,11	0,28	
42	LwK 5.1	6,59	-0,080	-0,28	-0,75	
46	LwK 5.1	6,80	0,130	0,46	1,21	
48	LwK 5.1	6,70	0,030	0,11	0,28	
50	LwK 5.1	6,59	-0,080	-0,28	-0,75	
51	LwK 5.1	7,00	0,330	1,16	3,08	
52	LwK 5.2.1	6,80	0,130	0,46	1,21	
53	LwK 5.2.1	6,60	-0,070	-0,25	-0,65	
55	LwK 5.2.2	6,99	0,320	1,13	2,99	
56	LwK 5.2.1	6,61	-0,060	-0,21	-0,56	
60	LwK 5.2.1	7,20	0,530	1,87	4,95	
61	LwK 5.1	6,50	-0,170	-0,60	-1,59	
63	LwK 5.2.1	7,20	0,530	1,87	4,95	
64	LwK 5.1	6,83	0,160	0,56	1,49	
67	LwK 5.2.1	6,80	0,130	0,46	1,21	
69	LwK 5.2.1	7,19	0,520	1,83	4,85	
74	LwK 5.1	7,96	1,290	4,55	12,04	(**)
77	LwK 5.2.2	6,60	-0,070	-0,25	-0,65	
84	LwK 5.2.1	6,54	-0,130	-0,46	-1,21	
96	LwK 5.1	6,70	0,030	0,11	0,28	
101	LwK 5.1	6,77	0,100	0,35	0,93	
102	LwK 5.2.1	6,75	0,080	0,28	0,75	

Der mit (\*\*) gekennzeichnete Wert wurde bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

**4.9.2 FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 5.3	6,85	0,180	0,63	1,24	
202	LwK 5.3	6,86	0,190	0,67	1,31	
203	LwK 5.3	6,52	-0,150	-0,53	-1,03	
204	LwK 5.3	7,02	0,347	1,22	2,39	
205	LwK 5.3	6,88	0,210	0,74	1,45	
206	LwK 5.3	6,48	-0,190	-0,67	-1,31	
207	LwK 5.3	6,77	0,100	0,35	0,69	
208	LwK 5.3	6,80	0,130	0,46	0,90	
209	LwK 5.3	6,65	-0,020	-0,07	-0,14	
210	LwK 5.3	6,72	0,050	0,18	0,34	
211	LwK 5.3	6,67	0,000	0,00	0,00	
212	LwK 5.3	6,87	0,200	0,71	1,38	
214	LwK 5.3	7,00	0,330	1,16	2,28	
215	LwK 5.3	6,91	0,240	0,85	1,66	
216	LwK 5.3	6,37	-0,300	-1,06	-2,07	
217	LwK 5.3	6,76	0,090	0,32	0,62	
218	LwK 5.3	6,70	0,030	0,11	0,21	
219	LwK 5.3	6,90	0,230	0,81	1,59	
220	LwK 5.3	6,67	0,000	0,00	0,00	
221	LwK 5.3	6,62	-0,050	-0,18	-0,34	
222	LwK 5.3	6,60	-0,070	-0,25	-0,48	
223	LwK 5.3	6,70	0,030	0,11	0,21	
224	LwK 5.3	7,03	0,360	1,27	2,48	
225	LwK 5.3	6,68	0,010	0,04	0,07	
226	LwK 5.3	6,80	0,130	0,46	0,90	
227	LwK 5.3	6,79	0,120	0,42	0,83	
228	LwK 5.3	6,72	0,050	0,18	0,34	
229	LwK 5.3	6,79	0,120	0,42	0,83	
231	LwK 5.3	6,65	-0,020	-0,07	-0,14	
232	LwK 5.3	6,90	0,230	0,81	1,59	
234	LwK 5.3	6,65	-0,020	-0,07	-0,14	
235	LwK 5.3	6,50	-0,170	-0,60	-1,17	
236	LwK 5.3	6,95	0,280	0,99	1,93	
237	LwK 5.3	6,80	0,130	0,46	0,90	
240	LwK 5.3	6,84	0,170	0,60	1,17	
241	LwK 5.3	6,90	0,230	0,81	1,59	
242	LwK 5.3	6,73	0,060	0,21	0,41	
243	LwK 5.3	6,70	0,030	0,11	0,21	
244	LwK 5.3	6,73	0,060	0,21	0,41	
245	LwK 5.3	6,86	0,190	0,67	1,31	
246	LwK 5.3	6,70	0,030	0,11	0,21	
247	LwK 5.3	6,70	0,030	0,11	0,21	
248	LwK 5.3	7,21	0,540	1,90	3,72	
249	LwK 5.3	6,80	0,130	0,46	0,90	
250	LwK 5.3	6,68	0,010	0,04	0,07	
251	LwK 5.3	6,86	0,190	0,67	1,31	
252	LwK 5.3	6,84	0,170	0,60	1,17	
254	LwK 5.3	6,90	0,230	0,81	1,59	
255	LwK 5.3	7,00	0,330	1,16	2,28	
256	LwK 5.3	6,85	0,180	0,63	1,24	
257	LwK 5.3	6,83	0,160	0,56	1,10	
258	LwK 5.3	6,97	0,300	1,06	2,07	
259	LwK 5.3	6,88	0,210	0,74	1,45	
260	LwK 5.3	6,70	0,030	0,11	0,21	
261	LwK 5.3	6,70	0,030	0,11	0,21	
262	LwK 5.3	6,60	-0,070	-0,25	-0,48	
263	LwK 5.3	6,80	0,130	0,46	0,90	
264	LwK 5.3	6,70	0,030	0,11	0,21	
265	LwK 5.3	6,75	0,080	0,28	0,55	
266	LwK 5.3	6,63	-0,040	-0,14	-0,28	
267	LwK 5.3	6,91	0,240	0,85	1,66	
268	LwK 5.3	6,57	-0,100	-0,35	-0,69	
269	LwK 5.3	6,84	0,170	0,60	1,17	
270	LwK 5.3	6,80	0,130	0,46	0,90	
271	LwK 5.3	6,99	0,320	1,13	2,21	
272	LwK 5.3	6,80	0,130	0,46	0,90	

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

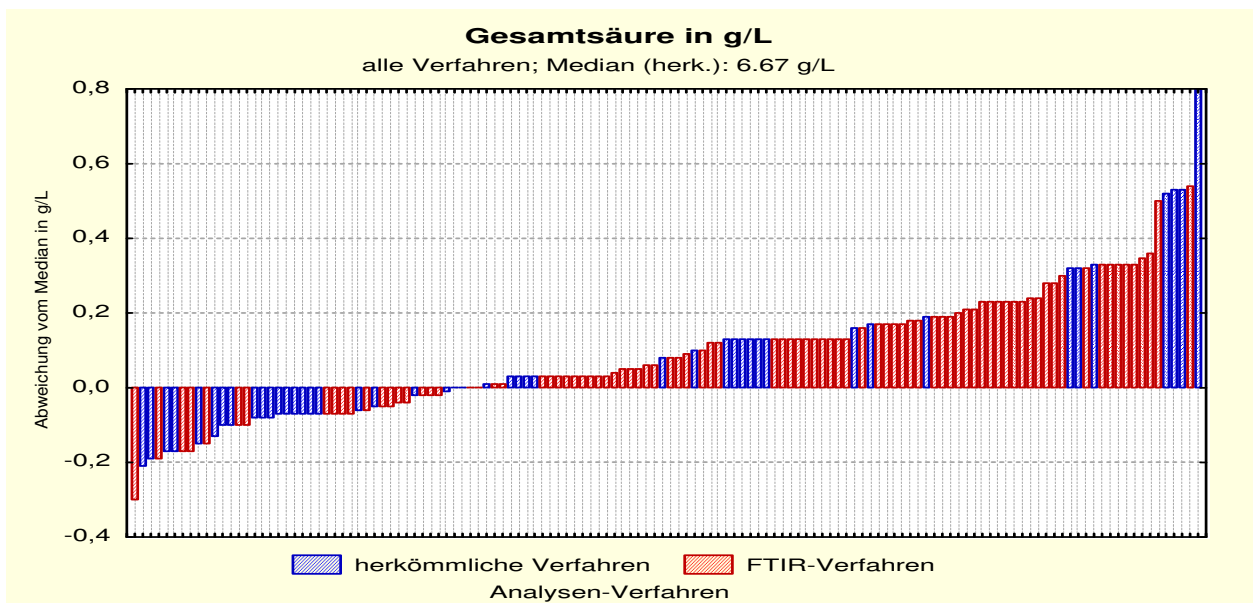
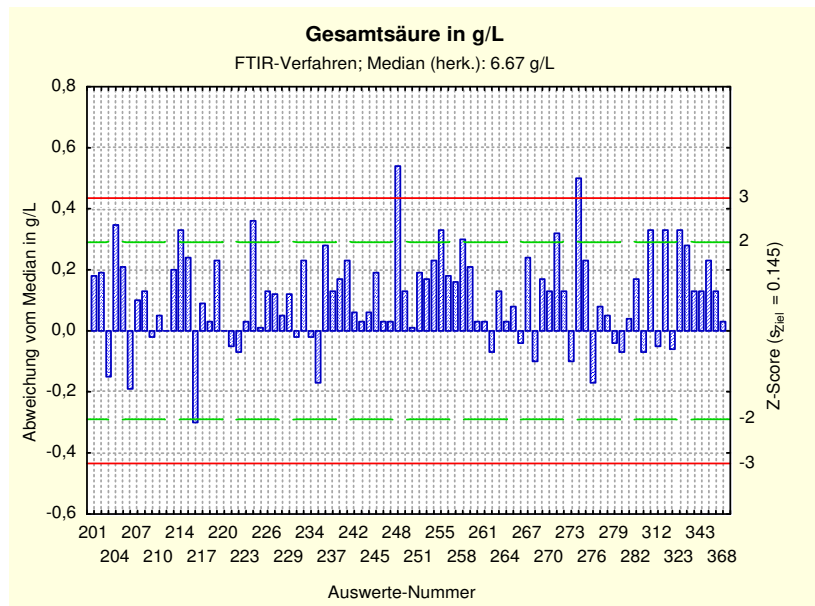
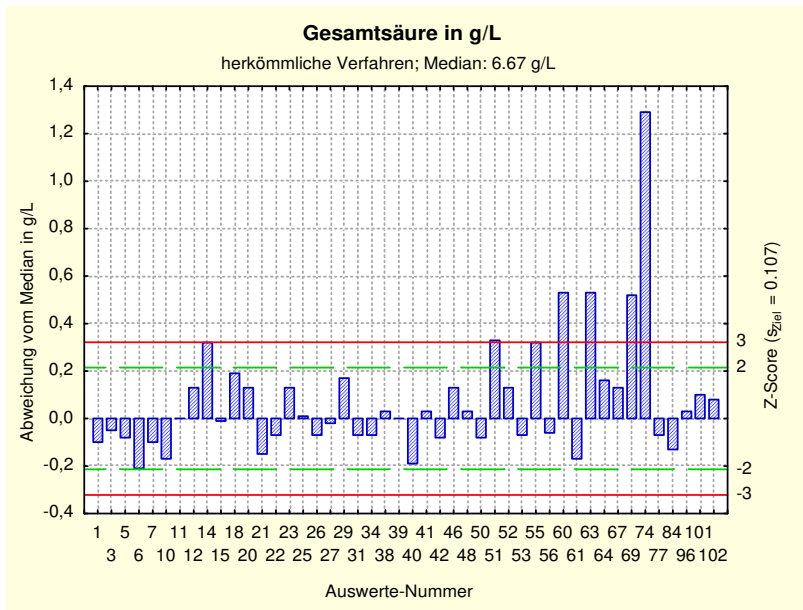
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
273	LwK 5.3	6,57	-0,100	-0,35	-0,69	
274	LwK 5.3	7,17	0,500	1,76	3,45	
275	LwK 5.3	6,90	0,230	0,81	1,59	
276	LwK 5.3	6,50	-0,170	-0,60	-1,17	
277	LwK 5.3	6,75	0,080	0,28	0,55	
278	LwK 5.3	6,72	0,050	0,18	0,34	
279	LwK 5.3	6,63	-0,040	-0,14	-0,28	
280	LwK 5.3	6,60	-0,070	-0,25	-0,48	
281	LwK 5.3	6,71	0,040	0,14	0,28	
282	LwK 5.3	6,84	0,170	0,60	1,17	
283	LwK 5.3	6,60	-0,070	-0,25	-0,48	
284	LwK 5.3	7,00	0,330	1,16	2,28	
312	LwK 5.3	6,62	-0,050	-0,18	-0,34	
319	LwK 5.3	7,00	0,330	1,16	2,28	
320	LwK 5.3	6,61	-0,060	-0,21	-0,41	
323	LwK 5.3	7,00	0,330	1,16	2,28	
336	LwK 5.3	6,95	0,280	0,99	1,93	
337	LwK 5.3	6,80	0,130	0,46	0,90	
343	LwK 5.3	6,80	0,130	0,46	0,90	
349	LwK 5.3	6,90	0,230	0,81	1,59	
364	LwK 5.3	6,80	0,130	0,46	0,90	
368	LwK 5.3	6,70	0,030	0,11	0,21	

**4.9.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse für Gesamtsäure [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	46	45
Minimalwert	6,46	6,46
Mittelwert	6,745	6,718
Median	6,675	6,670
Maximalwert	7,96	7,20
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,259	0,185
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,038	0,028
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,284	0,284
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,107	0,107
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\hat{U}\ FTIR}$ )	0,145	0,145
Horrat-Wert ( $s_L/s_H$ )	0,91	0,65
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	2,42	1,73
Quotient ( $s_L/s_{\hat{U}\ FTIR}$ )	1,79	1,28
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,13	0,10
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,36	0,26
Quotient ( $u_M/s_{\hat{U}\ FTIR}$ )	0,26	0,19

**4.9.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 5.1	Potentiometrische Bestimmung n. AVV	25	6,693	0,155
LwK 5.2.1	OIV-MA-AS-313-01; - Nr. 5.2, Potentiometrische Bestimmung	19	6,712	0,179
LwK 5.2.2	- Nr. 5.3, Endpunktbestimmung mit Indikator herkömmliche Verfahren	2	6,795	0,313
LwK 5.3	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	46	6,704	0,167
		88	6,778	0,152



## 4.10 Weinsäure [g/L]

### 4.10.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Bewertungsbasis: Hochleistungsflüssigkeitschromatographie (HPLC) und Ionenchromatographie (IC)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	HPLC	2,67	0,000	0,00	
02	IC	2,60	-0,070	-0,54	
03	IC	2,67	0,000	0,00	
05	photometr.	2,55	-0,120	-0,92	
06	HPLC	2,59	-0,080	-0,61	
07	HPLC	2,63	-0,040	-0,31	
08	HPLC	2,59	-0,080	-0,61	
10	photometr., autom.	2,64	-0,030	-0,23	
11	photometr.	2,87	0,200	1,54	
15	photometr., autom.	2,80	0,130	1,00	
21	HPLC	2,76	0,090	0,69	
22	NMR	2,83	0,160	1,23	
25	photometr., autom.	2,58	-0,090	-0,69	
26	HPLC	2,70	0,030	0,23	
29	photometr., autom.	1,90	-0,770	-5,91	(**)
31	photometr., autom.	3,04	0,370	2,84	
38	photometr., autom.	3,06	0,390	2,99	
39	HPLC	2,69	0,020	0,15	
40	photometr., autom.	2,91	0,240	1,84	
41	photometr., autom.	2,71	0,040	0,31	
44	photometr., autom.	2,79	0,120	0,92	
48	photometr., autom.	2,20	-0,470	-3,61	
50	HPLC	2,63	-0,040	-0,31	
56	photometr., autom.	2,90	0,230	1,77	
61	photometr., autom.	2,13	-0,540	-4,14	
63	HPLC	2,90	0,230	1,77	
69	photometr., autom.	2,90	0,230	1,77	
84	HPLC	2,73	0,060	0,46	
92	photometr., autom.	2,92	0,250	1,92	
94	HPLC	2,58	-0,090	-0,69	
97	photometr.	2,33	-0,345	-2,65	
103	NMR	2,90	0,230	1,77	
104	NMR	2,75	0,079	0,60	
105	NMR	2,71	0,040	0,31	
106	NMR	2,46	-0,213	-1,63	
107	NMR	2,50	-0,167	-1,28	

(\*\*) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der Bewertungsbasis ab.

### 4.10.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	2,57	-0,100	-0,77	-0,44	
202	FTIR	2,70	0,030	0,23	0,13	
203	FTIR	2,54	-0,130	-1,00	-0,57	
204	FTIR	2,75	0,076	0,58	0,33	
205	FTIR	2,62	-0,050	-0,38	-0,22	
206	FTIR	2,78	0,110	0,84	0,48	
208	FTIR	2,50	-0,170	-1,30	-0,75	
209	FTIR	2,60	-0,070	-0,54	-0,31	
211	FTIR	2,48	-0,190	-1,46	-0,84	
212	FTIR	2,18	-0,490	-3,76	-2,16	
214	FTIR	2,40	-0,270	-2,07	-1,19	
215	FTIR	2,51	-0,160	-1,23	-0,70	
216	FTIR	6,73	4,060	31,16	17,89	(*)
217	FTIR	2,61	-0,060	-0,46	-0,26	
218	FTIR	2,58	-0,090	-0,69	-0,40	
219	FTIR	2,70	0,030	0,23	0,13	
220	FTIR	2,28	-0,390	-2,99	-1,72	

(\*) Dieser Wert weicht um mehr als 50 % vom Median der Bewertungsbasis ab.

**Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse**

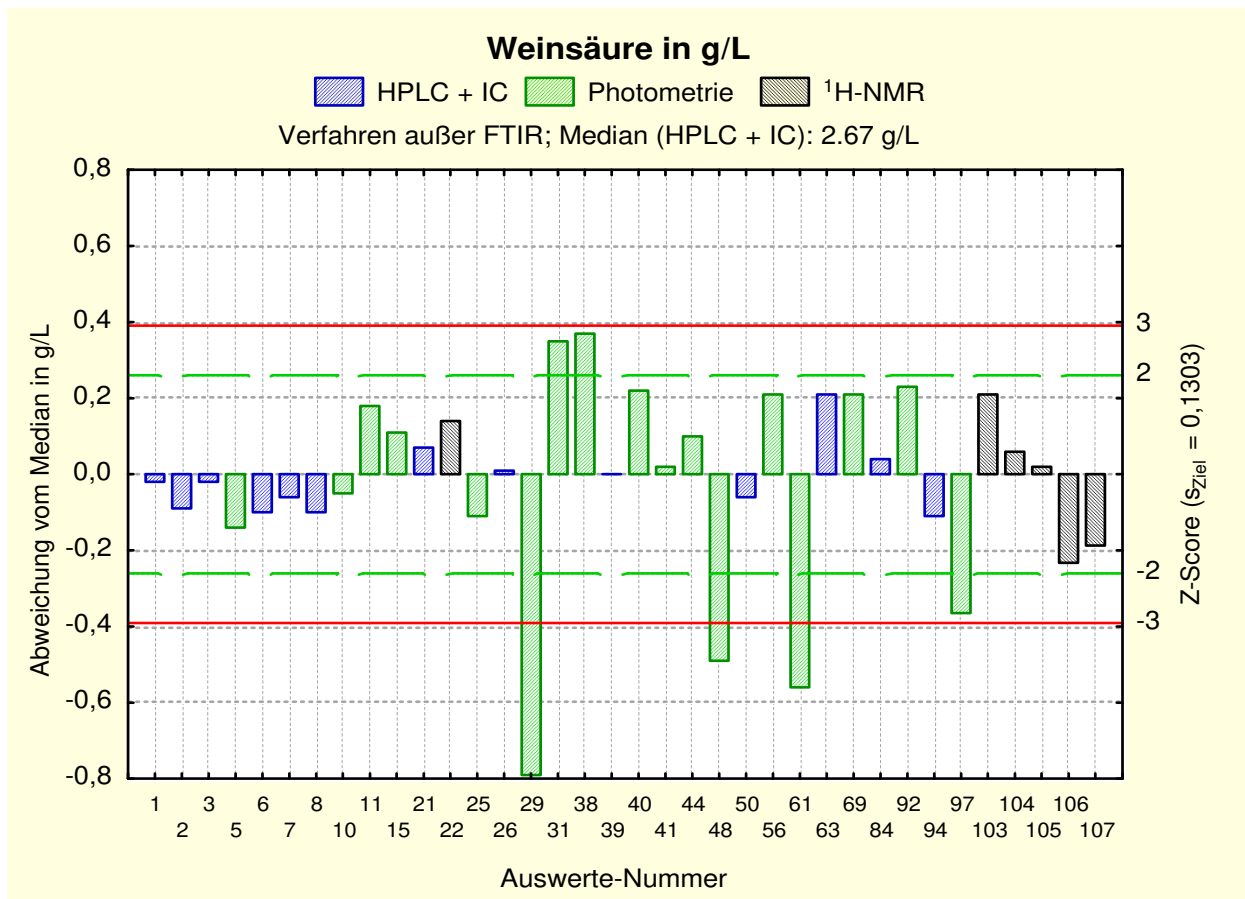
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
221	FTIR	2,27	-0,400	-3,07	-1,76	
222	FTIR	2,87	0,200	1,54	0,88	
223	FTIR	2,50	-0,170	-1,30	-0,75	
224	FTIR	2,88	0,210	1,61	0,93	
225	FTIR	2,34	-0,330	-2,53	-1,45	
226	FTIR	2,90	0,230	1,77	1,01	
227	FTIR	2,61	-0,060	-0,46	-0,26	
228	FTIR	2,71	0,040	0,31	0,18	
229	FTIR	2,71	0,040	0,31	0,18	
231	FTIR	2,69	0,020	0,15	0,09	
232	FTIR	2,67	0,000	0,00	0,00	
234	FTIR	2,94	0,270	2,07	1,19	
235	FTIR	1,70	-0,970	-7,45	-4,27	
236	FTIR	2,58	-0,090	-0,69	-0,40	
237	FTIR	2,70	0,030	0,23	0,13	
240	FTIR	2,68	0,010	0,08	0,04	
241	FTIR	2,70	0,030	0,23	0,13	
242	FTIR	2,94	0,270	2,07	1,19	
243	FTIR	2,15	-0,520	-3,99	-2,29	
244	FTIR	2,72	0,050	0,38	0,22	
245	FTIR	2,37	-0,300	-2,30	-1,32	
246	FTIR	2,70	0,030	0,23	0,13	
247	FTIR	2,53	-0,140	-1,07	-0,62	
249	FTIR	2,70	0,030	0,23	0,13	
250	FTIR	2,45	-0,220	-1,69	-0,97	
252	FTIR	2,91	0,240	1,84	1,06	
254	FTIR	2,50	-0,170	-1,30	-0,75	
256	FTIR	2,80	0,130	1,00	0,57	
257	FTIR	1,91	-0,760	-5,83	-3,35	
258	FTIR	2,95	0,280	2,15	1,23	
259	FTIR	2,65	-0,020	-0,15	-0,09	
260	FTIR	2,70	0,030	0,23	0,13	
261	FTIR	2,60	-0,070	-0,54	-0,31	
262	FTIR	2,70	0,030	0,23	0,13	
264	FTIR	2,30	-0,370	-2,84	-1,63	
265	FTIR	3,02	0,350	2,69	1,54	
266	FTIR	2,56	-0,110	-0,84	-0,48	
267	FTIR	2,46	-0,210	-1,61	-0,93	
268	FTIR	2,70	0,030	0,23	0,13	
269	FTIR	2,13	-0,540	-4,14	-2,38	
270	FTIR	2,50	-0,170	-1,30	-0,75	
271	FTIR	2,50	-0,170	-1,30	-0,75	
272	FTIR	2,70	0,030	0,23	0,13	
273	FTIR	2,65	-0,020	-0,15	-0,09	
274	FTIR	2,59	-0,080	-0,61	-0,35	
275	FTIR	2,50	-0,170	-1,30	-0,75	
276	FTIR	2,80	0,130	1,00	0,57	
277	FTIR	2,68	0,010	0,08	0,04	
278	FTIR	2,89	0,220	1,69	0,97	
279	FTIR	2,56	-0,110	-0,84	-0,48	
280	FTIR	2,40	-0,270	-2,07	-1,19	
282	FTIR	2,75	0,080	0,61	0,35	
283	FTIR	2,90	0,230	1,77	1,01	
284	FTIR	3,00	0,330	2,53	1,45	
319	FTIR	3,00	0,330	2,53	1,45	
320	FTIR	3,02	0,350	2,69	1,54	
336	FTIR	2,61	-0,060	-0,46	-0,26	
337	FTIR	2,30	-0,370	-2,84	-1,63	
349	FTIR	3,30	0,630	4,84	2,78	
364	FTIR	2,30	-0,370	-2,84	-1,63	

**4.10.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

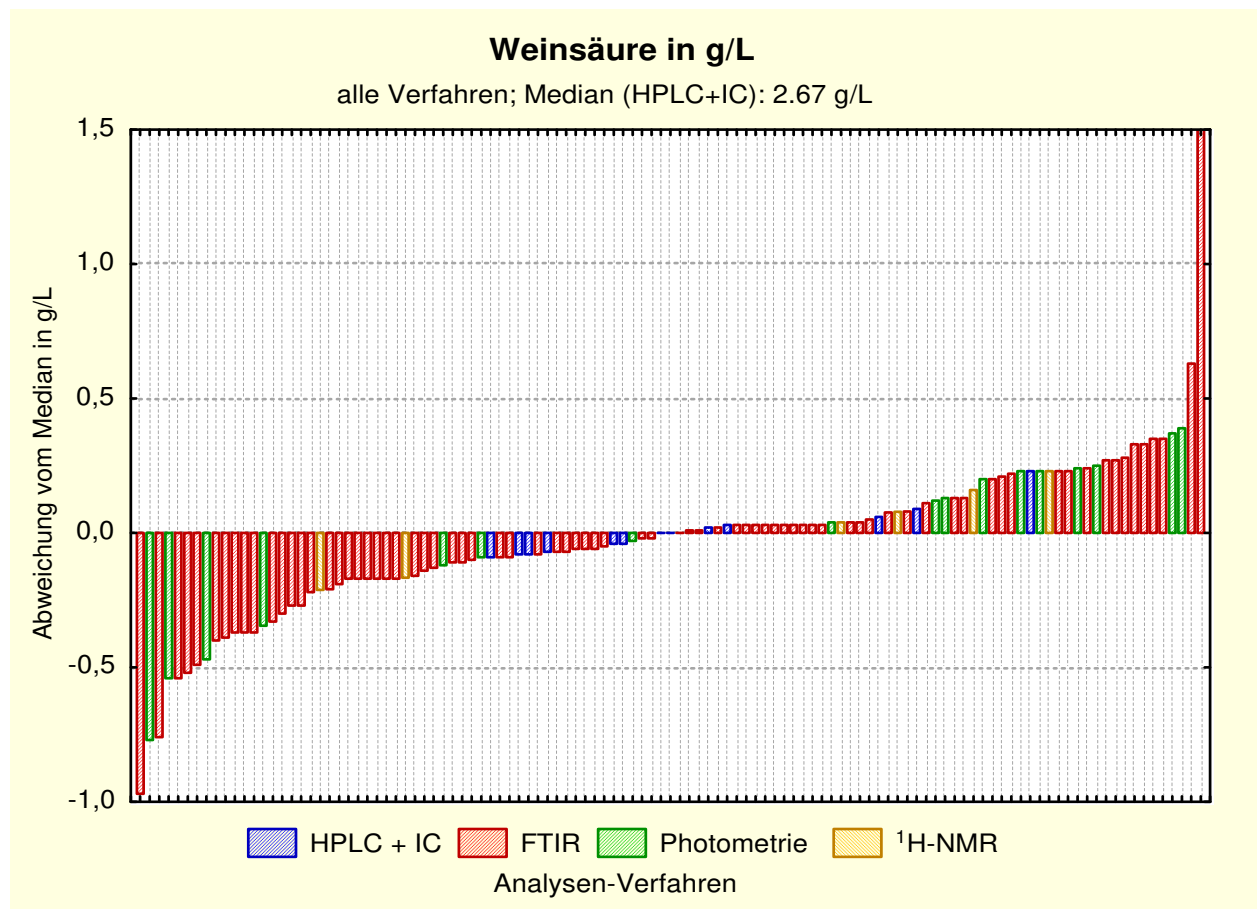
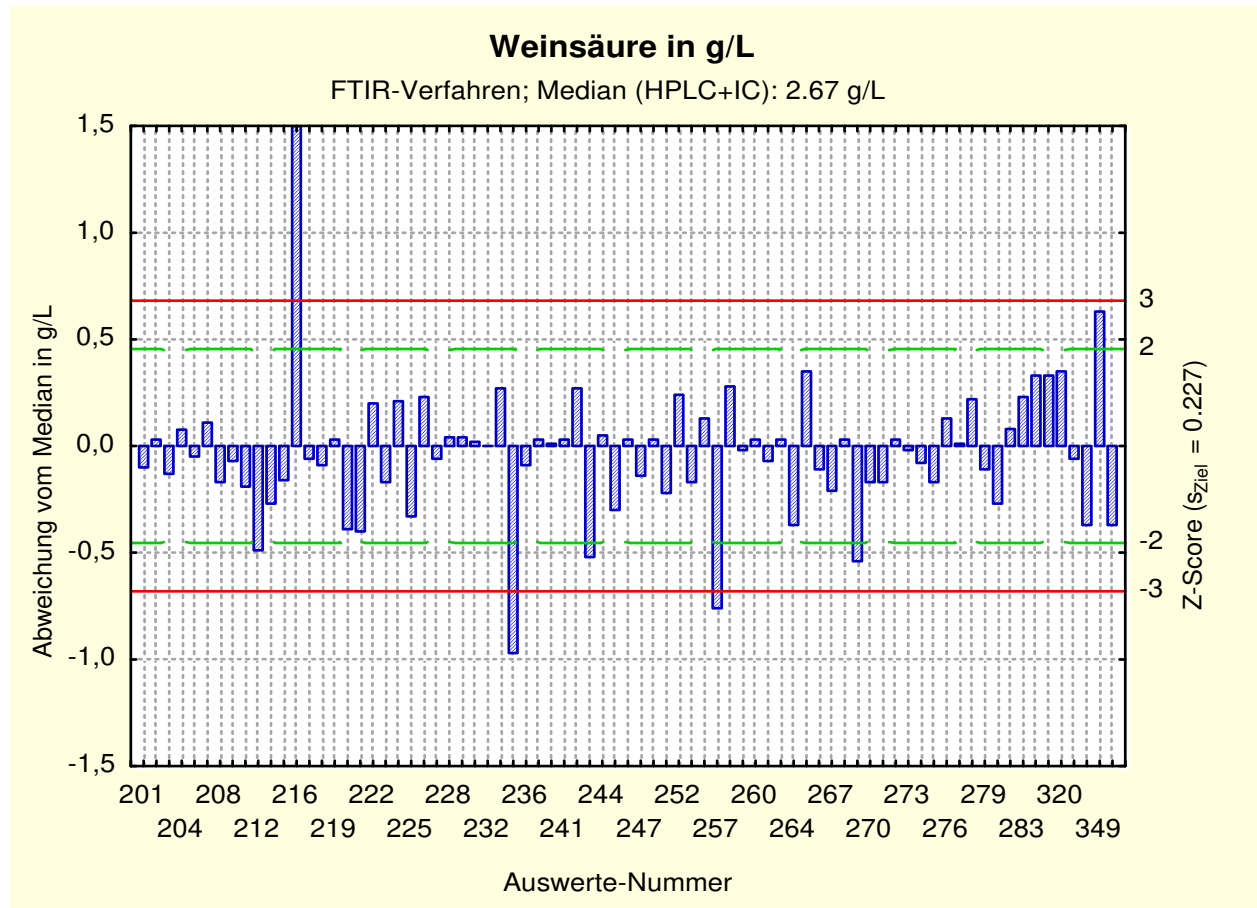
Ergebnisse für Weinsäure [g/L]	HPLC + IC	herkömmliche Verfahren	
	alle Daten	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	13	30	29
Minimalwert	2,58	1,90	2,13
Mittelwert	2,672	2,666	2,692
Median	2,670	2,680	2,690
Maximalwert	2,90	3,06	3,06
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,089	0,258	0,217
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,025	0,047	0,040
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,130	0,131	0,131
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )			
Zielstandardabweichung, experimentell ( $S_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,227	0,227	0,227
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	0,68	1,97	1,66
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )			
Quotient ( $s_L/S_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,39	1,14	0,96
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,19	0,36	0,31
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )			
Quotient ( $u_M/S_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,11	0,21	0,18

**4.10.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	11	2,669	0,0818
IC	Ionenchromatographie	2	2,635	0,0561
	HPLC und IC	13	2,663	0,0749
photometr.	photometr. n. Rebelein	3	2,582	0,3106
phot.autom.	photometr., automatisiert	14	2,700	0,3525
	herkömmliche Verfahren	30	2,696	0,2010
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	77	2,631	0,2374
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	6	2,692	0,2007







## 4.11 Flüchtige Säure [g/L]

### 4.11.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Bewertungsbasis: Werte mit SO<sub>2</sub>-Korrektur und experimentelle Zielstandardabweichung

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
03	OIV SO <sub>2</sub> -korr.	0,341	0,0160	0,73	0,56	
06	Gerhardt SO <sub>2</sub> korr.	0,320	-0,0050	-0,23	-0,18	
07	Halbmikro SO <sub>2</sub> korr.	0,339	0,0140	0,64	0,49	
10	Halbmikro SO <sub>2</sub> korr.	0,304	-0,0210	-0,96	-0,74	
12	Gerhardt SO <sub>2</sub> ausg.	0,250	-0,0750	-3,44	-2,63	
20	Gerhardt SO <sub>2</sub> korr.	0,330	0,0050	0,23	0,18	
21	Halbmikro SO <sub>2</sub> unber.	0,440	0,1150	5,28	4,02	
25	Gerhardt SO <sub>2</sub> korr.	0,290	-0,0350	-1,61	-1,23	
26	Gerhardt SO <sub>2</sub> ausg.	0,410	0,0850	3,90	2,97	
29	Gerhardt SO <sub>2</sub> korr.	0,420	0,0950	4,36	3,32	
31	Halbmikro SO <sub>2</sub> korr.	0,388	0,0630	2,89	2,20	
38	Gerhardt SO <sub>2</sub> korr.	0,271	-0,0540	-2,48	-1,89	
39	Gerhardt SO <sub>2</sub> korr.	0,269	-0,0560	-2,57	-1,96	
40	Gerhardt SO <sub>2</sub> ausg.	0,480	0,1550	7,12	5,42	(**)
41	Gerhardt SO <sub>2</sub> ausg.	0,399	0,0740	3,40	2,59	
42	Halbmikro SO <sub>2</sub> unber.	0,380	0,0550	2,53	1,92	
50	Halbmikro SO <sub>2</sub> korr.	0,234	-0,0910	-4,18	-3,18	
56	Rentschler mod. korr.	0,273	-0,0520	-2,39	-1,82	
60	Wädenswil SO <sub>2</sub> unber.	0,440	0,1150	5,28	4,02	
63	Gerhardt SO <sub>2</sub> korr.	0,460	0,1350	6,20	4,72	(***)
64	Halbmikro SO <sub>2</sub> unber.	0,570	0,2450	11,25	8,57	(*)
66	Wädenswil SO <sub>2</sub> unber.	0,380	0,0550	2,53	1,92	
67	Halbmikro SO <sub>2</sub> unber.	0,360	0,0350	1,61	1,22	
68	Wädenswil SO <sub>2</sub> unber.	0,350	0,0250	1,15	0,87	
88	OIV SO <sub>2</sub> -korr.	0,416	0,0910	4,18	3,18	
89	Halbmikro SO <sub>2</sub> korr.	0,291	-0,0340	-1,56	-1,19	
101	Halbmikro SO <sub>2</sub> unber.	0,540	0,2150	9,87	7,53	(*)

(\*) Dieser Wert weicht um mehr als 50 % vom Median der Bewertungsbasis ab und bleibt unberücksichtigt.

(\*\*) Dieser Wert wurde bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

(\*\*\*) Dieser Werte wurde zusätzlich bei der wiederholten Berechnung mit zMax = |4,5| nicht berücksichtigt.

### 4.11.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	0,420	0,1000	4,65	1,12	
202	FTIR	0,360	0,0400	1,86	0,45	
203	FTIR	0,370	0,0500	2,33	0,56	
204	FTIR	0,399	0,0790	3,68	0,89	
205	FTIR	0,280	-0,0400	-1,86	-0,45	
206	FTIR	0,360	0,0400	1,86	0,45	
208	FTIR	0,200	-0,1200	-5,58	-1,35	
209	FTIR	0,210	-0,1100	-5,12	-1,23	
210	FTIR	0,240	-0,0800	-3,72	-0,90	
211	FTIR	0,430	0,1100	5,12	1,23	
214	FTIR	0,300	-0,0200	-0,93	-0,22	
215	FTIR	0,299	-0,0210	-0,98	-0,24	
216	FTIR	0,320	0,0000	0,00	0,00	
217	FTIR	0,360	0,0400	1,86	0,45	
218	FTIR	0,300	-0,0200	-0,93	-0,22	
219	FTIR	0,590	0,2700	12,56	3,03	
220	FTIR	0,350	0,0300	1,40	0,34	
221	FTIR	0,370	0,0500	2,33	0,56	
223	FTIR	0,430	0,1100	5,12	1,23	
224	FTIR	0,190	-0,1300	-6,05	-1,46	
225	FTIR	0,307	-0,0130	-0,60	-0,15	
226	FTIR	0,200	-0,1200	-5,58	-1,35	
227	FTIR	0,490	0,1700	7,91	1,91	
228	FTIR	0,260	-0,0600	-2,79	-0,67	

**Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse**

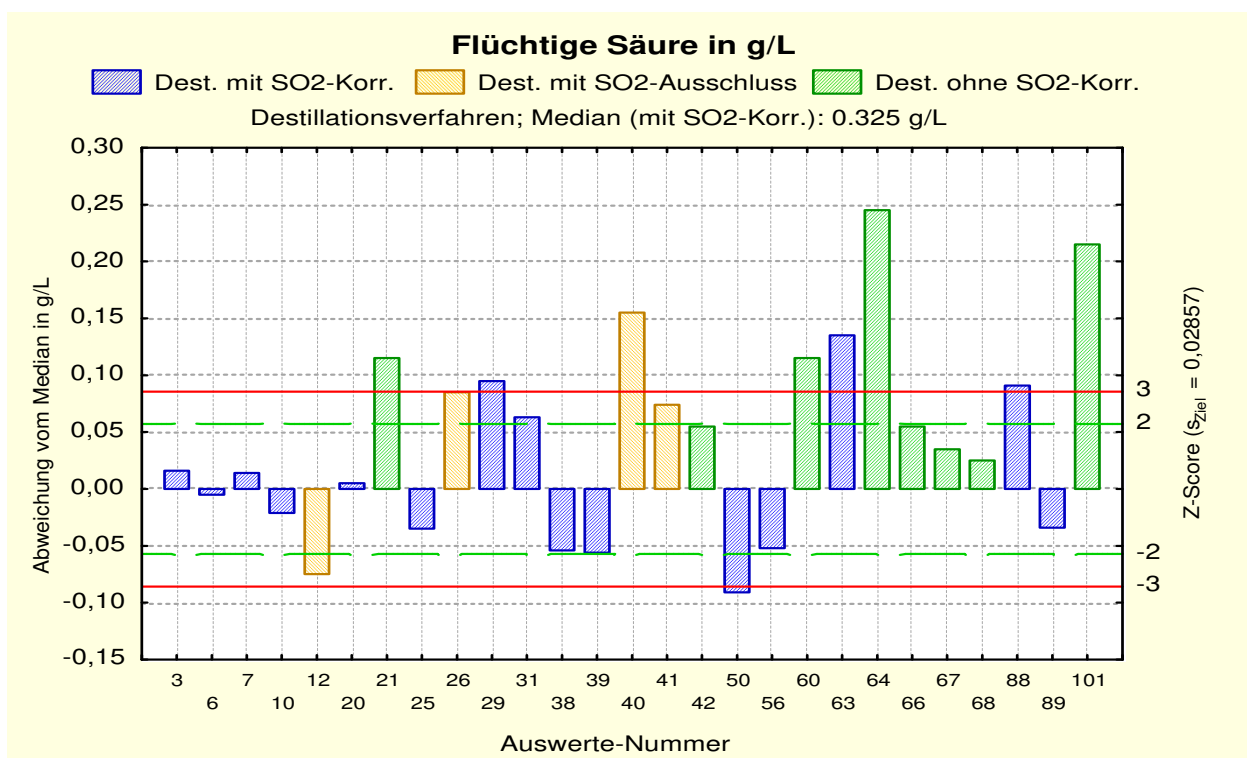
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
229	FTIR	0,372	0,0520	2,42	0,58	
231	FTIR	0,330	0,0100	0,47	0,11	
232	FTIR	0,390	0,0700	3,26	0,79	
234	FTIR	0,290	-0,0300	-1,40	-0,34	
235	FTIR	0,480	0,1600	7,45	1,80	
236	FTIR	0,330	0,0100	0,47	0,11	
237	FTIR	0,520	0,2000	9,31	2,24	
240	FTIR	0,420	0,1000	4,65	1,12	
241	FTIR	0,330	0,0100	0,47	0,11	
242	FTIR	0,380	0,0600	2,79	0,67	
243	FTIR	0,350	0,0300	1,40	0,34	
244	FTIR	0,470	0,1500	6,98	1,68	
245	FTIR	0,500	0,1800	8,38	2,02	
246	FTIR	0,420	0,1000	4,65	1,12	
247	FTIR	0,400	0,0800	3,72	0,90	
249	FTIR	0,480	0,1600	7,45	1,80	
250	FTIR	0,130	-0,1900	-8,84	-2,13	
251	FTIR	0,410	0,0900	4,19	1,01	
252	FTIR	0,240	-0,0800	-3,72	-0,90	
254	FTIR	0,400	0,0800	3,72	0,90	
256	FTIR	0,250	-0,0700	-3,26	-0,79	
257	FTIR	0,470	0,1500	6,98	1,68	
258	FTIR	0,340	0,0200	0,93	0,22	
260	FTIR	0,380	0,0600	2,79	0,67	
261	FTIR	0,270	-0,0500	-2,33	-0,56	
262	FTIR	0,250	-0,0700	-3,26	-0,79	
263	FTIR	0,370	0,0500	2,33	0,56	
264	FTIR	0,320	0,0000	0,00	0,00	
265	FTIR	0,360	0,0400	1,86	0,45	
266	FTIR	0,340	0,0200	0,93	0,22	
267	FTIR	0,360	0,0400	1,86	0,45	
268	FTIR	0,265	-0,0550	-2,56	-0,62	
269	FTIR	0,380	0,0600	2,79	0,67	
270	FTIR	0,400	0,0800	3,72	0,90	
271	FTIR	0,380	0,0600	2,79	0,67	
272	FTIR	0,280	-0,0400	-1,86	-0,45	
273	FTIR	0,370	0,0500	2,33	0,56	
274	FTIR	0,470	0,1500	6,98	1,68	
275	FTIR	0,300	-0,0200	-0,93	-0,22	
276	FTIR	0,300	-0,0200	-0,93	-0,22	
277	FTIR	0,310	-0,0100	-0,47	-0,11	
278	FTIR	0,360	0,0400	1,86	0,45	
279	FTIR	0,350	0,0300	1,40	0,34	
280	FTIR	0,260	-0,0600	-2,79	-0,67	
281	FTIR	0,410	0,0900	4,19	1,01	
282	FTIR	0,390	0,0700	3,26	0,79	
283	FTIR	0,230	-0,0900	-4,19	-1,01	
284	FTIR	0,180	-0,1400	-6,52	-1,57	
319	FTIR	0,240	-0,0800	-3,72	-0,90	
320	FTIR	0,270	-0,0500	-2,33	-0,56	
336	FTIR	0,320	0,0000	0,00	0,00	
337	FTIR	0,290	-0,0300	-1,40	-0,34	
349	FTIR	0,360	0,0400	1,86	0,45	
364	FTIR	0,320	0,0000	0,00	0,00	
368	FTIR	0,250	-0,0700	-3,26	-0,79	

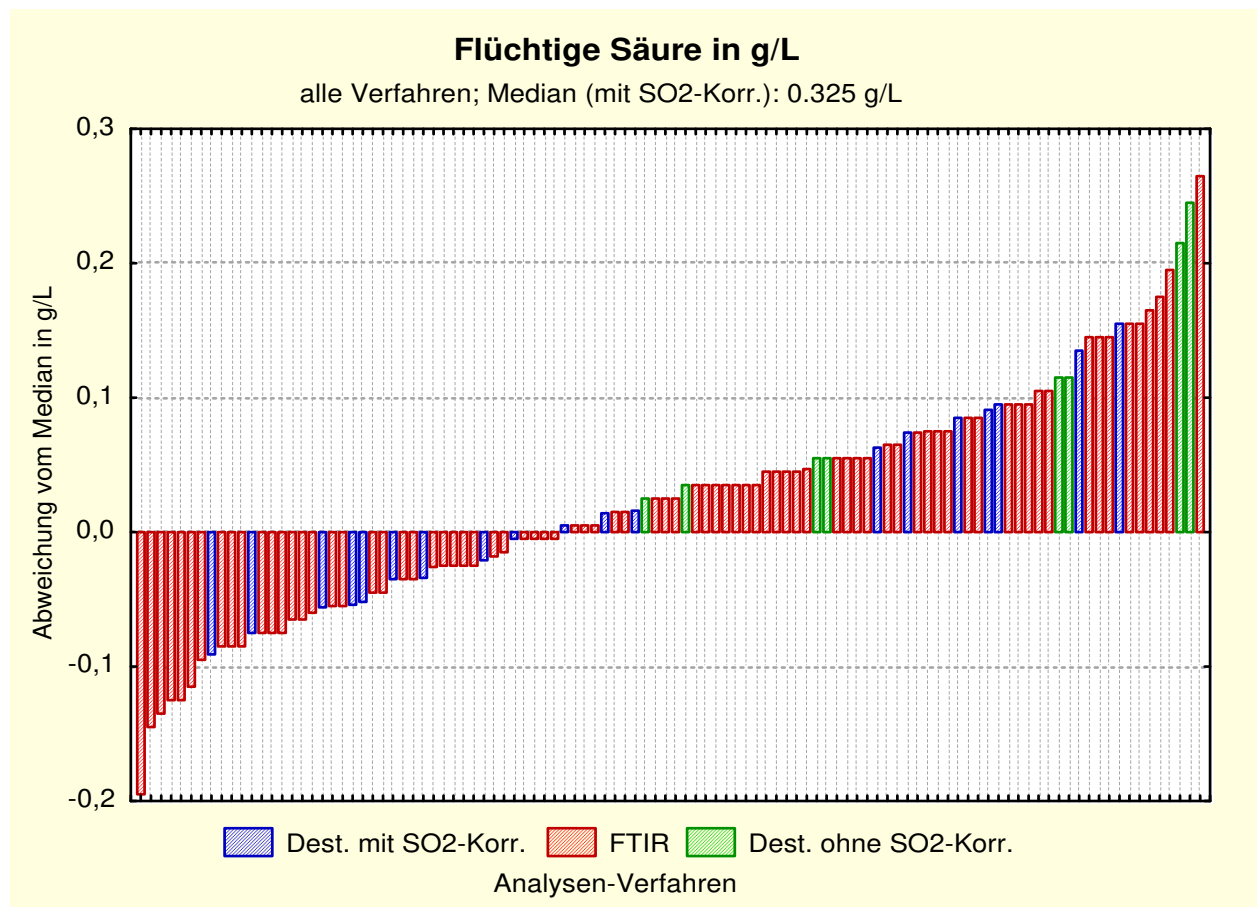
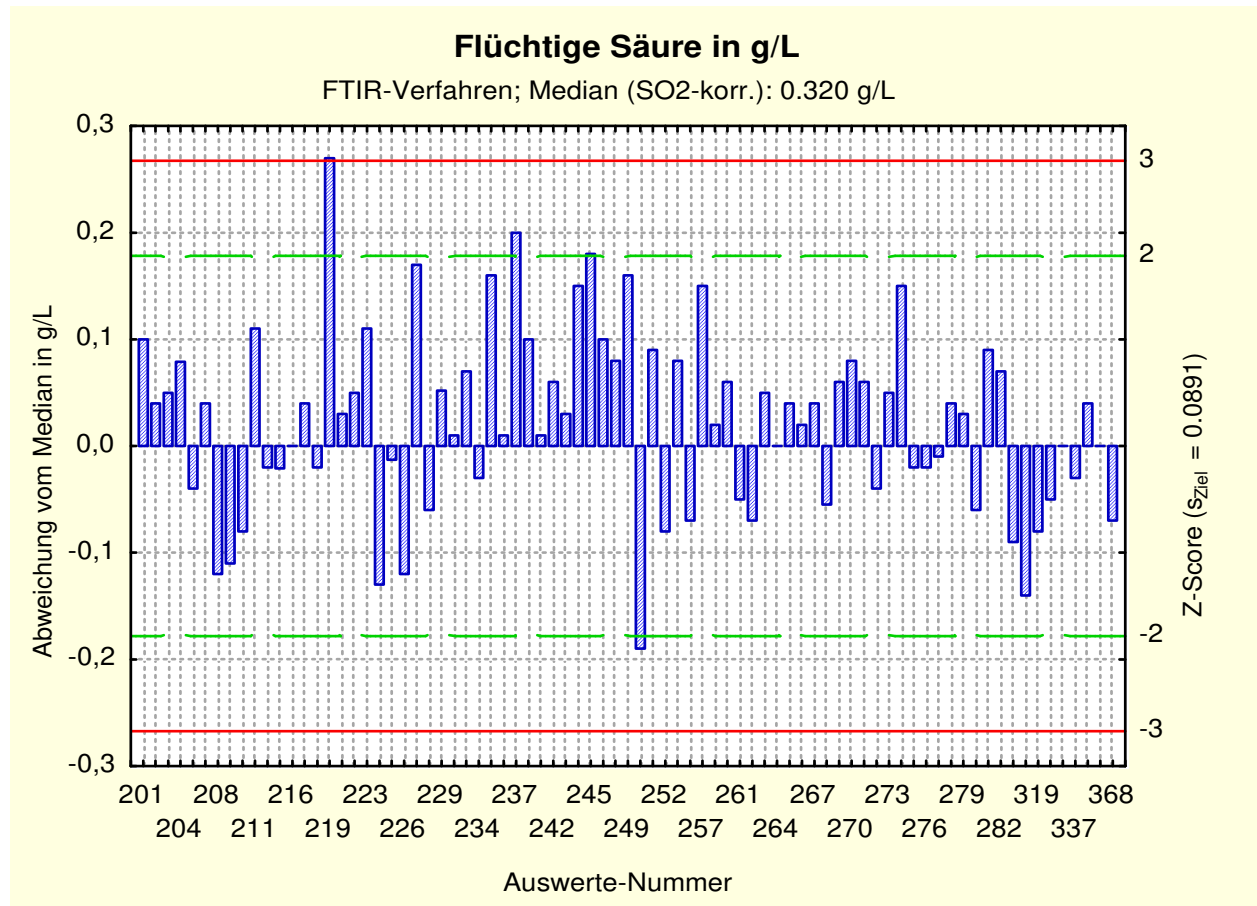
### 4.11.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Destillationsverfahren

Ergebnisse für Flüchtige Säure [g/L] nur Destillationsverfahren mit SO <sub>2</sub> -Korrektur	alle Daten	ber. Daten	ber. Daten
	Z <sub>Max</sub>  5	Z <sub>Max</sub>  5	Z <sub>Max</sub>  4,5
Gültige Werte	19	18	17
Minimalwert	0,234	0,234	0,234
Mittelwert	0,3413	0,3336	0,3262
Median	0,3300	0,3250	0,3200
Maximalwert	0,480	0,460	0,420
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,073	0,067	0,061
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,017	0,016	0,015
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,022	0,022	0,021
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp</sub> herk.)	0,029	0,029	0,029
Zielstandardabweichung, experimentell (S <sub>Ü</sub> FTIR)	0,089	0,089	0,089
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	3,33	3,09	2,85
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp</sub> herk.)	2,57	2,35	2,14
Quotient (s <sub>L</sub> /S <sub>Ü</sub> FTIR)	0,82	0,75	0,69
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,76	0,73	0,69
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp</sub> herk.)	0,59	0,55	0,52
Quotient (u <sub>M</sub> /S <sub>Ü</sub> FTIR)	0,19	0,19	0,17

### 4.11.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
Halbmikro	Halbmikrodestillation n. AVV			
SO <sub>2</sub> unber.	SO <sub>2</sub> -Einfluss nicht berücksichtigt	5	0,4580	0,1065
SO <sub>2</sub> korr.	SO <sub>2</sub> -Einfluss korrigiert	5	0,3100	0,0626
Wädenswil	Wädenswil-Verfahren			
SO <sub>2</sub> unber.	SO <sub>2</sub> -Einfluss nicht berücksichtigt	3	0,3900	0,0520
Gerhardt	Destillationsapparat Gerhardt			
SO <sub>2</sub> ausg.	SO <sub>2</sub> -Einfluss ausgeschlossen, z.B. mit H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	4	0,3864	0,1063
SO <sub>2</sub> korr.	SO <sub>2</sub> -Einfluss korrigiert	7	0,3366	0,0836
OIV SO <sub>2</sub> -korr.	OIV-MA-AS-313-02 einschl. SO <sub>2</sub> -Korrektur	2	0,3785	0,0601
Rentschler mod korr.	Verfahren n. Rentschler mod. Dr. Nilles, SO <sub>2</sub> -Einfluss korrigiert	1	0,2730	
	Destillationsverfahren mit SO <sub>2</sub> -Korrektur	19	0,3404	0,0813
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	79	0,3419	0,0854





## 4.12 Acetat (als Essigsäure) [g/L]

### 4.12.1 Herkömmliche und FTIR-Laborergebnisse

Bewertungsbasis: HPLC + Enzymatik)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	0,239	-0,061	-3,00	
06	enzymat. autom.	0,308	0,008	0,39	
07	enzymat. autom.	0,260	-0,040	-1,97	
11	enzymat. autom.	0,330	0,030	1,47	
14	enzymat. autom.	0,350	0,050	2,46	
15	enzymat. autom.	0,280	-0,020	-0,98	
22	NMR	0,210	-0,090	-4,42	
25	enzymat. autom.	0,300	0,000	0,00	
26	HPLC	0,480	0,180	8,85	(*)
29	enzymat. autom.	0,330	0,030	1,47	
31	enzymat. autom.	0,310	0,010	0,49	
38	enzymat. autom.	0,270	-0,030	-1,47	
39	HPLC	<0,3			
41	enzymat. autom.	0,270	-0,030	-1,47	
44	enzymat. autom.	0,340	0,040	1,97	
48	enzymat. autom.	0,310	0,010	0,49	
50	enzymat. Hand	0,204	-0,096	-4,72	
53	enzymat. autom.	0,380	0,080	3,93	
56	enzymat. autom.	0,256	-0,044	-2,16	
61	enzymat. autom.	0,400	0,100	4,92	
69	enzymat. autom.	0,320	0,020	0,98	
84	HPLC	0,250	-0,050	-2,46	
89	NMR	0,242	-0,058	-2,85	
92	enzymat. autom.	0,290	-0,010	-0,49	
94	HPLC	0,220	-0,080	-3,93	
103	NMR	0,227	-0,073	-3,59	
104	NMR	0,224	-0,076	-3,74	
105	NMR	0,251	-0,049	-2,41	
106	NMR	0,216	-0,084	-4,11	
107	NMR	0,252	-0,048	-2,38	
209	FTIR	0,400	0,100	4,92	
212	FTIR	0,350	0,050	2,46	
222	FTIR	0,240	-0,060	-2,95	
241	FTIR	0,290	-0,010	-0,49	
259	FTIR	0,340	0,040	1,97	
260	FTIR	0,460	0,160	7,87	(*)
284	FTIR	40,000	39,700	1951,61	(*)

Mit (\*) gekennzeichnete Werte weichen um mehr als 50 % vom Median der herkömmlichen Werte ab.

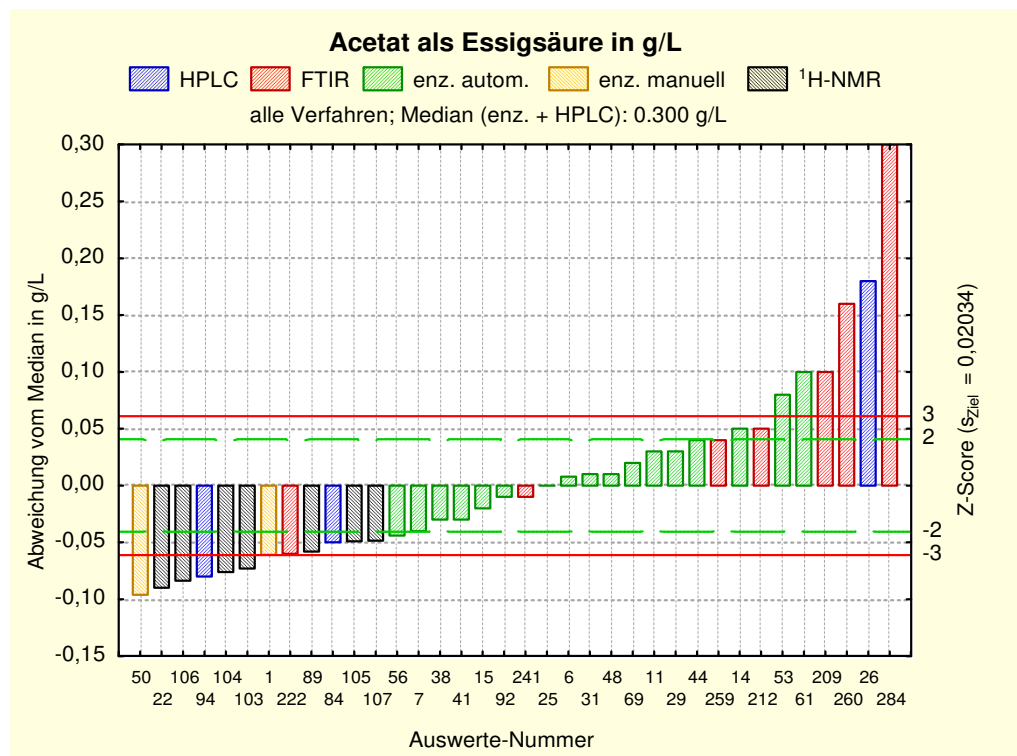
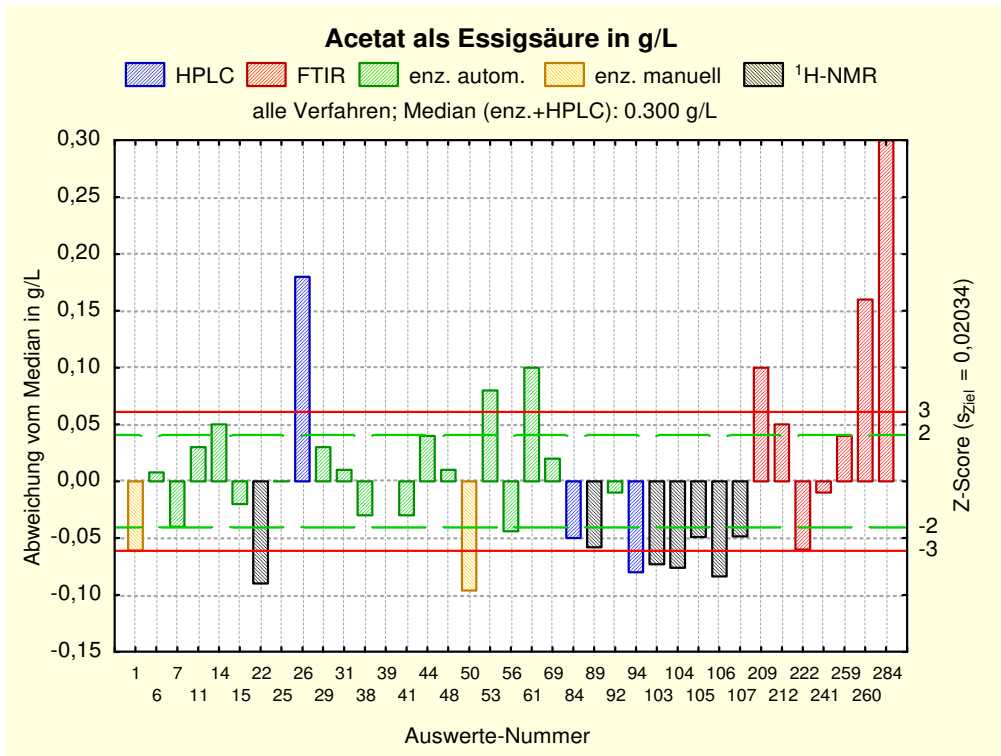
**Hinweis:** Alle Laborergebnisse wurden mit der Zielstandardabweichung nach Horwitz bewertet.

### 4.12.2 Deskriptive Ergebnisse der enzymatischen und HPLC-Verfahren

Ergebnisse für Acetat (als Essigsäure) [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	21
Minimalwert	0,204
Mittelwert	0,296
Median	0,300
Maximalwert	0,400
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,050
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,011
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,020
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	2,47
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	
Quotient ( $s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,54
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	
Quotient ( $u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	

4.12.3 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	3	0,3013	0,1314
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert	17	0,3098	0,0411
enzymat. Hand	enzymatisch, manuell	2	0,2215	0,0281
	Enzymatische + HPLC-Verfahren	22	0,3002	0,0564
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	6	0,3467	0,0883
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	7	0,2317	0,0189



### 4.13 Gesamte Äpfelsäure und L-Äpfelsäure [g/L]

#### 4.13.1 Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enzymat. Hand	3,00	-0,070	-0,48	-0,73	
02	IC	2,85	-0,220	-1,50	-2,29	
06	HPLC	3,08	0,010	0,07	0,10	
07	HPLC	3,04	-0,030	-0,20	-0,31	
08	HPLC	2,98	-0,090	-0,61	-0,94	
21	HPLC	3,12	0,050	0,34	0,52	
22	NMR	3,42	0,350	2,39	3,65	
26	HPLC	3,06	-0,010	-0,07	-0,10	
39	IC	3,09	0,020	0,14	0,21	
50	HPLC	3,23	0,160	1,09	1,67	
63	enzymat. autom.	3,06	-0,010	-0,07	-0,10	
84	HPLC	3,10	0,030	0,20	0,31	
94	HPLC	3,46	0,390	2,66	4,07	
103	NMR	2,90	-0,170	-1,16	-1,77	
104	NMR	2,99	-0,085	-0,58	-0,88	
105	NMR	3,16	0,090	0,61	0,94	
106	NMR	2,81	-0,260	-1,77	-2,71	
107	NMR	3,18	0,113	0,77	1,18	

#### 4.13.2 Laborergebnisse L-Äpfelsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enz.(L-) Hand	3,00	-0,045	-0,31	-0,47	
06	enz.(L-), autom.	3,05	0,005	0,03	0,05	
07	enz.(L-), autom.	3,07	0,025	0,17	0,26	
10	enz.(L-), autom.	2,95	-0,095	-0,65	-1,00	
11	enz.(L-), autom.	3,20	0,155	1,06	1,63	
15	enz.(L-), autom.	2,80	-0,245	-1,68	-2,57	
25	enz.(L-), autom.	2,93	-0,115	-0,79	-1,21	
29	enz.(L-), autom.	3,50	0,455	3,12	4,78	
31	enz.(L-), autom.	3,24	0,195	1,34	2,05	
38	enz.(L-), autom.	3,24	0,195	1,34	2,05	
40	enz.(L-), autom.	3,08	0,035	0,24	0,37	
41	enz.(L-), autom.	2,94	-0,105	-0,72	-1,10	
42	enz.(L-), autom.	2,94	-0,105	-0,72	-1,10	
44	enz.(L-), autom.	2,98	-0,065	-0,45	-0,68	
48	enz.(L-), autom.	3,20	0,155	1,06	1,63	
56	enz.(L-), autom.	3,07	0,025	0,17	0,26	
61	enz.(L-), autom.	3,70	0,655	4,50	6,88	(**)
63	enz.(L-), autom.	3,00	-0,045	-0,31	-0,47	
64	enz.(L-) Hand	3,04	-0,005	-0,03	-0,05	
69	enz.(L-), autom.	3,20	0,155	1,06	1,63	
88	enz.(L-), autom.	3,03	-0,011	-0,08	-0,12	
92	enz.(L-), autom.	3,17	0,125	0,86	1,31	
101	enz.(L-) Hand	2,99	-0,057	-0,39	-0,60	

Der mit (\*\*) gekennzeichnete Wert wurde bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

#### 4.13.3 FTIR-Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	3,19	0,120	0,82	0,55	
202	FTIR	2,75	-0,320	-2,18	-1,47	
203	FTIR	2,62	-0,450	-3,07	-2,06	
204	FTIR	3,44	0,370	2,52	1,70	
205	FTIR	2,77	-0,300	-2,05	-1,38	
206	FTIR	3,07	-0,000	-0,00	-0,00	
208	FTIR	2,70	-0,370	-2,52	-1,70	
209	FTIR	3,16	0,090	0,61	0,41	
211	FTIR	3,23	0,160	1,09	0,73	
212	FTIR	3,41	0,340	2,32	1,56	
214	FTIR	4,80	1,730	11,79	7,94	(*)

Der mit (\*) gekennzeichnete Wert weicht um mehr als 50 % vom Median der herkömmlichen Werte ab.



**Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse**

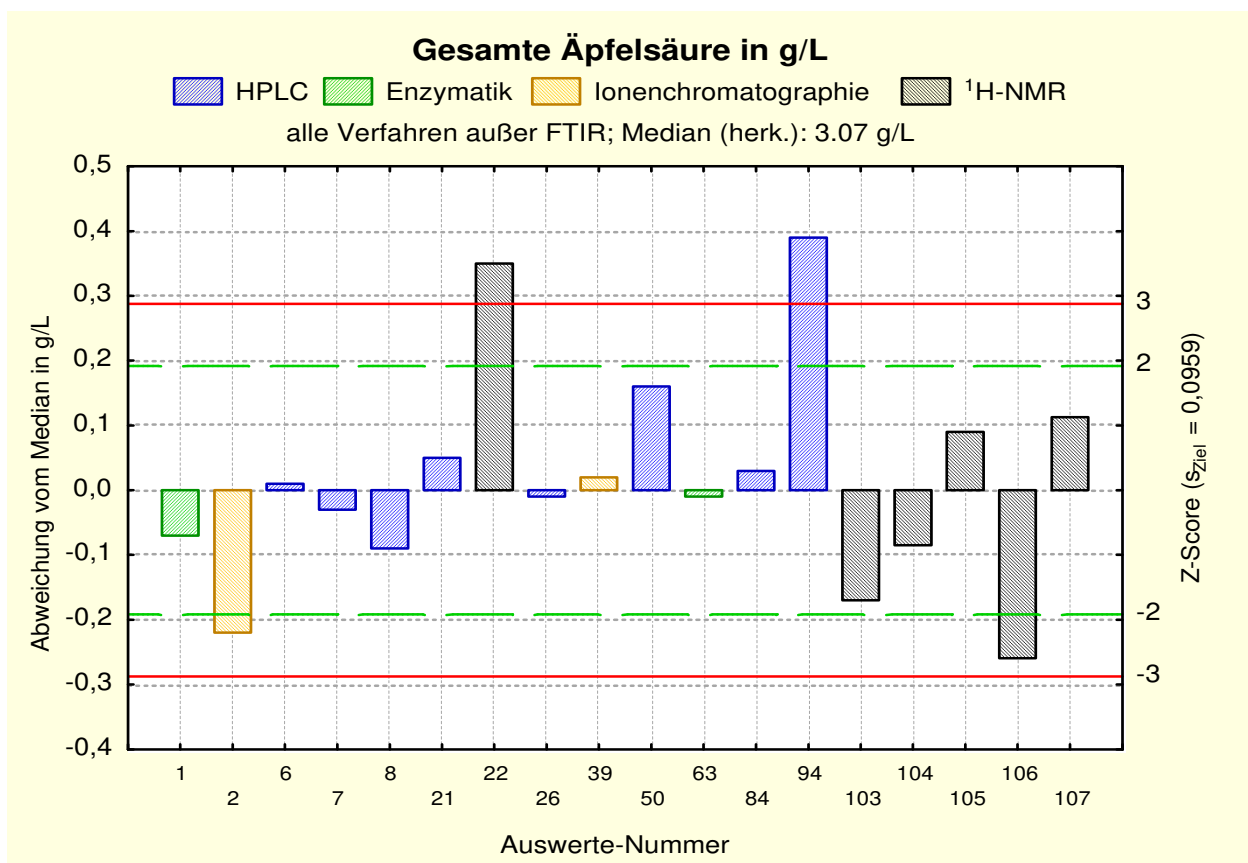
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
215	FTIR	3,22	0,150	1,02	0,69	
216	FTIR	3,09	0,020	0,14	0,09	
217	FTIR	3,48	0,410	2,80	1,88	
218	FTIR	3,28	0,210	1,43	0,96	
219	FTIR	3,30	0,230	1,57	1,06	
220	FTIR	3,00	-0,070	-0,48	-0,32	
221	FTIR	3,35	0,280	1,91	1,28	
222	FTIR	3,33	0,255	1,74	1,17	
223	FTIR	3,10	0,030	0,20	0,14	
224	FTIR	2,94	-0,130	-0,89	-0,60	
225	FTIR	3,35	0,280	1,91	1,28	
226	FTIR	3,80	0,730	4,98	3,35	
227	FTIR	3,18	0,110	0,75	0,50	
228	FTIR	3,46	0,390	2,66	1,79	
229	FTIR	3,01	-0,060	-0,41	-0,28	
231	FTIR	3,63	0,560	3,82	2,57	
232	FTIR	3,12	0,050	0,34	0,23	
234	FTIR	3,13	0,060	0,41	0,28	
236	FTIR	3,38	0,310	2,11	1,42	
237	FTIR	3,40	0,330	2,25	1,51	
240	FTIR	3,21	0,140	0,95	0,64	
241	FTIR	2,90	-0,170	-1,16	-0,78	
242	FTIR	4,18	1,110	7,57	5,09	(**)
243	FTIR	2,88	-0,190	-1,30	-0,87	
244	FTIR	2,90	-0,170	-1,16	-0,78	
245	FTIR	3,54	0,470	3,20	2,16	
246	FTIR	3,20	0,130	0,89	0,60	
247	FTIR	3,36	0,290	1,98	1,33	
249	FTIR	2,60	-0,470	-3,20	-2,16	
250	FTIR	2,83	-0,240	-1,64	-1,10	
252	FTIR	2,94	-0,130	-0,89	-0,60	
254	FTIR	3,20	0,130	0,89	0,60	
256	FTIR	3,53	0,460	3,14	2,11	
257	FTIR	3,15	0,080	0,55	0,37	
258	FTIR	3,24	0,170	1,16	0,78	
259	FTIR	3,43	0,360	2,45	1,65	
260	FTIR	3,10	0,030	0,20	0,14	
261	FTIR	3,20	0,130	0,89	0,60	
262	FTIR	3,40	0,330	2,25	1,51	
264	FTIR	3,00	-0,070	-0,48	-0,32	
265	FTIR	3,70	0,630	4,29	2,89	
266	FTIR	2,52	-0,550	-3,75	-2,52	
267	FTIR	3,60	0,530	3,61	2,43	
268	FTIR	3,15	0,080	0,55	0,37	
269	FTIR	2,20	-0,870	-5,93	-3,99	
270	FTIR	3,30	0,230	1,57	1,06	
271	FTIR	2,70	-0,370	-2,52	-1,70	
272	FTIR	3,50	0,430	2,93	1,97	
273	FTIR	2,94	-0,130	-0,89	-0,60	
274	FTIR	3,11	0,040	0,27	0,18	
275	FTIR	3,20	0,130	0,89	0,60	
276	FTIR	3,30	0,230	1,57	1,06	
277	FTIR	3,00	-0,070	-0,48	-0,32	
278	FTIR	3,09	0,020	0,14	0,09	
279	FTIR	3,19	0,120	0,82	0,55	
280	FTIR	3,50	0,430	2,93	1,97	
281	FTIR	2,84	-0,230	-1,57	-1,06	
282	FTIR	3,55	0,480	3,27	2,20	
283	FTIR	3,40	0,330	2,25	1,51	
284	FTIR	2,80	-0,270	-1,84	-1,24	
319	FTIR	2,80	-0,270	-1,84	-1,24	
320	FTIR	2,95	-0,120	-0,82	-0,55	
336	FTIR	3,36	0,290	1,98	1,33	
337	FTIR	3,10	0,030	0,20	0,14	
349	FTIR	2,10	-0,970	-6,61	-4,45	
364	FTIR	2,60	-0,470	-3,20	-2,16	

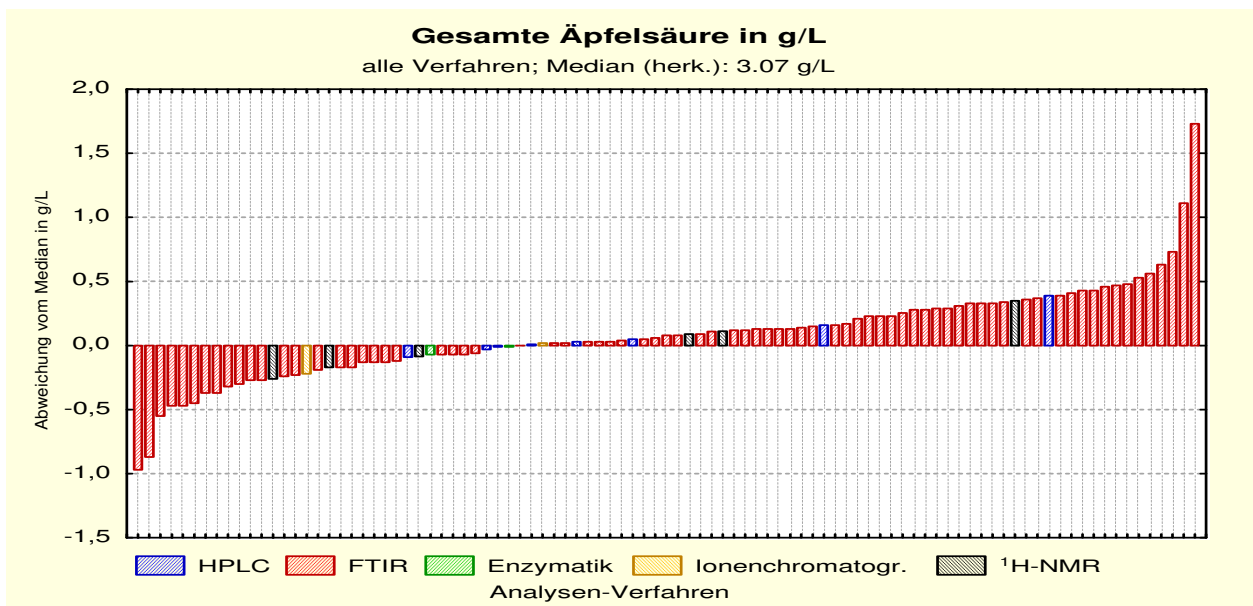
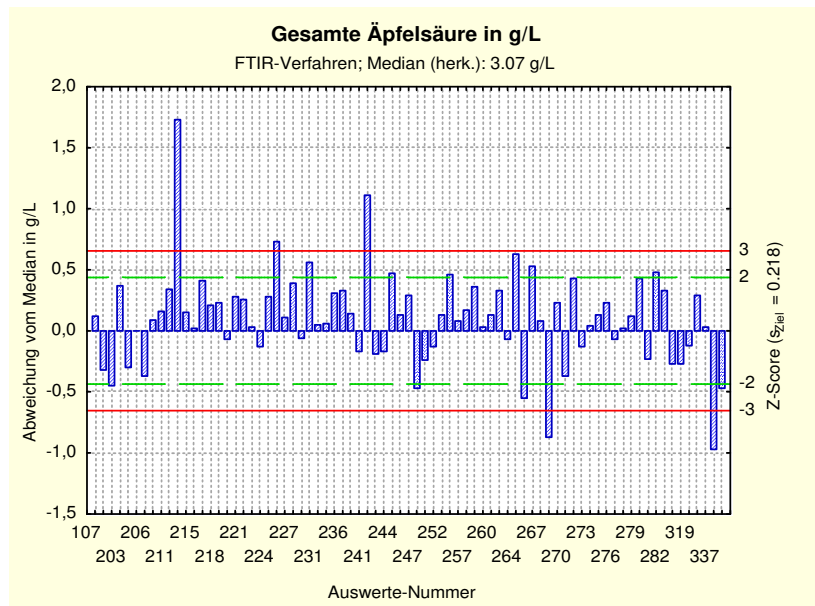
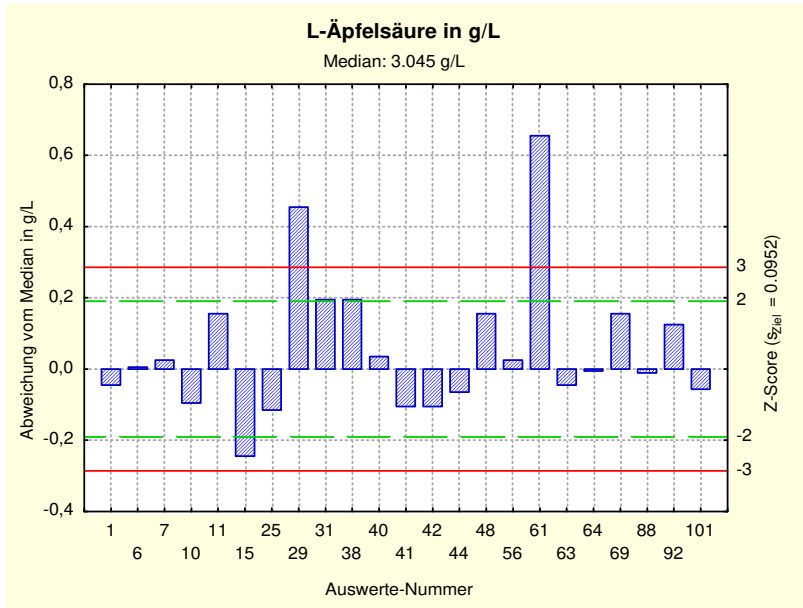
**4.13.4 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse [g/L] für:	Gesamte Äpfelsäure		L-Äpfelsäure	
	alle Daten		alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	12		23	22
Minimalwert	2,85		2,80	2,80
Mittelwert	3,089		3,101	3,074
Median	3,070		3,050	3,045
Maximalwert	3,46		3,70	3,50
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,148		0,196	0,150
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,043		0,041	0,032
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,147		0,146	0,146
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp</sub> )	0,096		0,095	0,095
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,218			
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	1,01		1,34	1,03
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp</sub> )	1,54		2,06	1,57
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,68			
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,29		0,28	0,22
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	0,44		0,43	0,34
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,20			

**4.13.5 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	8	3,111	0,109
enzymat. autom.	D- und L-Äpfelsäure, enzymatisch, automatisiert	1	3,060	
enzymat. Hand	D- und L-Äpfelsäure, enzymatisch, manuell	1	3,000	
IC	Ionenchromatographie	2	2,970	0,192
	herkömml. Verfahren Gesamte Äpfelsäure o. IC	12	3,076	0,103
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	77	3,163	0,317
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	6	3,071	0,240
enz.(L-), autom.	enzymatisch nur L-Form, automatisiert	20	3,090	0,160
enz.(L-) Hand	enzymatisch nur L-Form, manuell	3	3,009	0,030
	alle Verfahren L-Äpfelsäure	23	3,077	0,144





## 4.14 Gesamte Milchsäure und L-Milchsäure [g/L]

### 4.14.1 Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Milchsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	0,185	0,004	0,26	
03	enzymat. Hand	0,167	-0,014	-1,09	
06	enzymat. autom.	0,183	0,002	0,11	
07	HPLC	0,153	-0,028	-2,15	
10	enzymat. autom.	0,161	-0,020	-1,54	
21	HPLC	0,100	-0,081	-6,14	(**)
22	NMR	0,160	-0,021	-1,62	
26	HPLC	<= 0			
39	HPLC	<0,2			
50	HPLC	0,080	-0,101	-7,65	(*)
63	enzymat. autom.	0,273	0,092	6,89	(*)
64	enzymat. Hand	0,235	0,053	4,03	
69	enzymat. autom.	0,120	-0,061	-4,63	
84	HPLC	0,240	0,058	4,41	
88	enzymat. autom.	0,188	0,007	0,49	
92	enzymat. autom.	0,140	-0,041	-3,13	
94	HPLC	0,180	-0,002	-0,11	
101	enzymat. Hand	0,185	0,003	0,23	
103	NMR	<0,2			
104	NMR	<0,2			
105	NMR	<0,2			
106	NMR	<0,2			
107	NMR	<0,2			

(\*) Diese Werte weichen um mehr als 50 % vom Median ab und bleiben unberücksichtigt..

(\*\*) Dieser Wert wurde bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

<=0: Fehlerhafte Angaben von Ergebnissen unter Bestimmungsgrenze als "0" wurden vom Auswerter ersetzt.

### 4.14.2 Laborergebnisse L-Milchsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enz.(L-) Hand	0,069	0,002	0,26	0,07	
03	enz.(L-) Hand	0,054	-0,014	-2,36	-0,66	
06	enz.(L-) autom.	0,062	-0,006	-0,96	-0,27	
10	enz.(L-) autom.	0,059	-0,009	-1,48	-0,41	
11	enz.(L-) autom.	0,150	0,082	14,40	4,00	
15	enz.(L-) autom.	<= 0				
25	enz.(L-) autom.	0,070	0,003	0,44	0,12	
29	enz.(L-) autom.	0,100	0,033	5,67	1,58	
31	enz.(L-) autom.	0,010	-0,058	-10,04	-2,79	
38	enz.(L-) autom.	<= 0				
40	enz.(L-) autom.	0,270	0,203	35,35	9,83	(*)
41	enz.(L-) autom.	0,065	-0,003	-0,44	-0,12	
42	enz.(L-) autom.	<= 0				
44	enz.(L-) autom.	<0,2				
48	enz.(L-) autom.	<= 0				
56	enz.(L-) autom.	0,070	0,003	0,44	0,12	
61	enz.(L-) autom.	0,100	0,033	5,67	1,58	
63	enz.(L-) autom.	0,058	-0,010	-1,66	-0,46	
64	enz.(L-) Hand	0,101	0,034	5,89	1,64	
69	enz.(L-) autom.	0,022	-0,046	-8,00	-2,22	
88	enz.(L-) autom.	0,071	0,003	0,61	0,17	
92	enz.(L-) autom.	0,060	-0,008	-1,31	-0,36	
101	enz.(L-) Hand	0,068	0,000	0,00	0,00	

(\*) Dieser Wert weicht um mehr als 50 % vom Median der Werte ab und bleibt unberücksichtigt.

<=0: Fehlerhafte Angaben von Ergebnissen unter Bestimmungsgrenze als "0" wurden vom Auswerter ersetzt.

### 4.14.3 FTIR-Laborergebnisse Gesamte Milchsäure

#### Hinweis:

Der Gehalt an Gesamter Milchsäure liegt unterhalb der Bestimmungsgrenze des FTIR-Verfahrens. Daher werden keine Z-Score ausgewiesen.

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	0,150	-0,032			
202	FTIR	-0,100	-0,281			(*)
203	FTIR	0,090	-0,091			
204	FTIR	-0,065	-0,247			(*)
205	FTIR	0,080	-0,101			(*)
206	FTIR	0,220	0,039			
208	FTIR	0,100	-0,081			
209	FTIR	0,010	-0,171			(*)
211	FTIR	<= 0				
212	FTIR	0,190	0,009			
214	FTIR	0,100	-0,081			
215	FTIR	0,290	0,108			(*)
216	FTIR	<= 0				
217	FTIR	0,120	-0,061			
218	FTIR	0,060	-0,122			(*)
219	FTIR	<= 0				
220	FTIR	0,290	0,108			(*)
221	FTIR	0,120	-0,061			
222	FTIR	0,300	0,118			(*)
223	FTIR	<= 0				
224	FTIR	0,030	-0,152			(*)
225	FTIR	0,350	0,168			(*)
226	FTIR	0,100	-0,081			
227	FTIR	-0,250	-0,431			(*)
228	FTIR	0,090	-0,091			
229	FTIR	0,120	-0,061			
231	FTIR	0,210	0,028			
232	FTIR	-0,220	-0,401			(*)
234	FTIR	<= 0				
236	FTIR	<= 0				
237	FTIR	<= 0				
240	FTIR	-0,070	-0,252			(*)
241	FTIR	-0,100	-0,281			(*)
242	FTIR	0,540	0,359			(*)
243	FTIR	<= 0				
244	FTIR	0,020	-0,162			(*)
245	FTIR	0,290	0,108			(*)
246	FTIR	<= 0				
247	FTIR	0,280	0,099			(*)
249	FTIR	<= 0				
250	FTIR	0,430	0,249			(*)
252	FTIR	0,010	-0,171			(*)
254	FTIR	-0,200	-0,382			(*)
256	FTIR	0,230	0,049			
257	FTIR	-0,200	-0,382			(*)
258	FTIR	<= 0				
259	FTIR	0,170	-0,011			
260	FTIR	<= 0				
261	FTIR	0,300	0,119			(*)
262	FTIR	<= 0				
264	FTIR	<= 0				
265	FTIR	0,030	-0,152			(*)
266	FTIR	0,220	0,039			
267	FTIR	0,060	-0,122			(*)
268	FTIR	0,250	0,069			
269	FTIR	<= 0				
270	FTIR	0,100	-0,081			
271	FTIR	0,200	0,019			
272	FTIR	0,300	0,118			(*)
273	FTIR	-0,060	-0,241			(*)

(\*) Diese Werte weichen um mehr als 50 % vom Median der herkömmlichen Werte ab.

<=0: Fehlerhafte Angaben von Ergebnissen unter Bestimmungsgrenze als "0" wurden vom Auswerter ersetzt.

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
274	FTIR	0,630	0,449			(*)
275	FTIR	<= 0				
276	FTIR	-0,200	-0,382			(*)
277	FTIR	<= 0				
278	FTIR	-0,080	-0,262			(*)
279	FTIR	0,010	-0,171			(*)
280	FTIR	0,500	0,319			(*)
281	FTIR	0,190	0,009			
282	FTIR	0,060	-0,122			(*)
283	FTIR	-0,100	-0,281			(*)
284	FTIR	0,130	-0,051			
319	FTIR	<= 0				
320	FTIR	0,290	0,108			(*)
336	FTIR	0,160	-0,021			
337	FTIR	<= 0				
349	FTIR	0,600	0,418			(*)
364	FTIR	<= 0				

(\*) Diese Werte weichen um mehr als 50 % vom Median der herkömmlichen Werte ab.

<=0: Fehlerhafte Angaben von Ergebnissen unter Bestimmungsgrenze als "0" wurden vom Auswerter ersetzt.

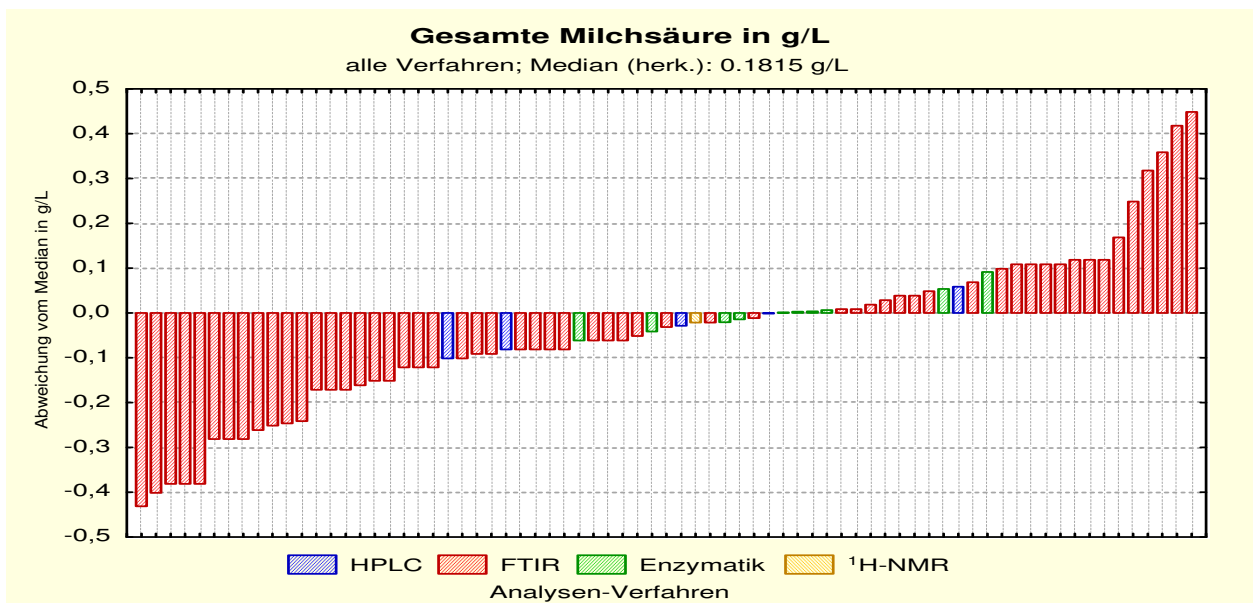
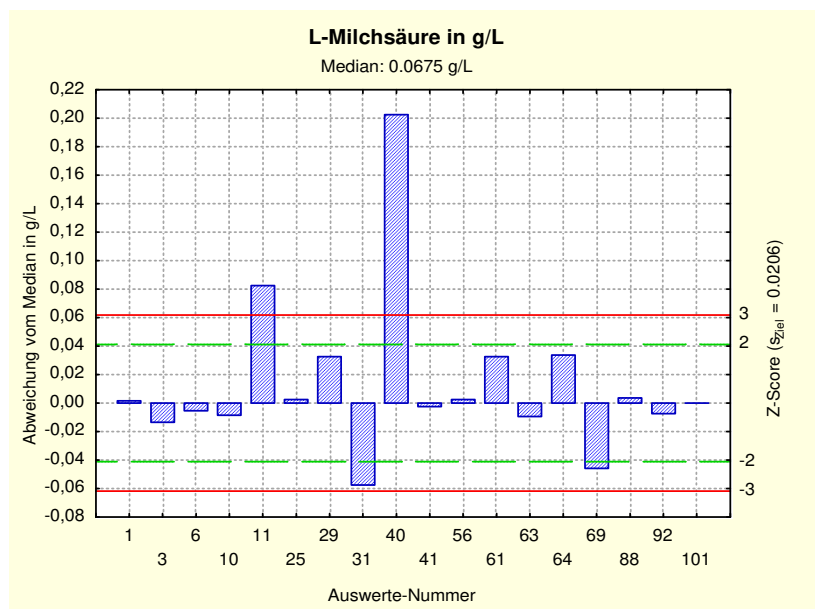
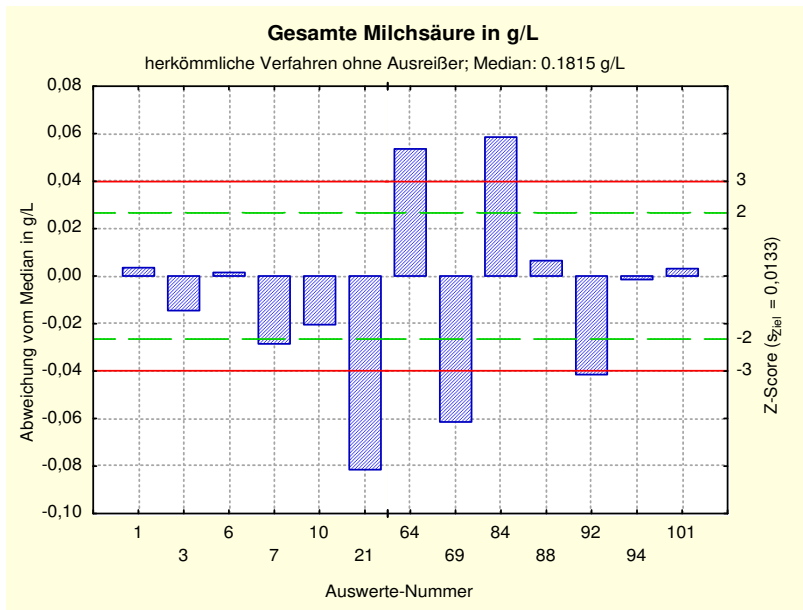
**4.14.4 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse [g/L]	Gesamte Milchsäure		L- Milchsäure
	alle Daten	ber. Daten	alle Daten
Gültige Werte	13	12	17
Minimalwert	0,10	0,12	0,01
Mittelwert	0,172	0,178	0,070
Median	0,180	0,181	0,068
Maximalwert	0,24	0,24	0,15
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,040	0,035	0,031
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,011	0,010	0,008
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,013	0,013	0,006
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp</sub> )			0,021
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,209	0,209	
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	3,00	2,61	5,49
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp</sub> )			1,53
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,19	0,17	
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,83	0,75	1,33
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )			0,37
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )			

**Anmerkung:** Der Median des Gehaltes an L-Milchsäure liegt beim dreifachen Betrag der Zielstandardabweichung und damit im Bereich der Bestimmungsgrenze des Verfahrens

**4.14.5 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	5	0,1506	0,0726
enzymat. autom.	D- und L-Milchsäure, enzymatisch, automatisiert	6	0,1741	0,0526
enzymat. Hand	D- und L-Milchsäure, enzymatisch, manuell	4	0,1923	0,0318
	herkömmliche Verfahren Ges. Milchsäure	15	0,1724	0,0532
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	57	0,1222	0,1868
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	1	0,1600	
enz.(L-) autom.	enzymatisch nur L-Form, automatisiert	14	0,0719	0,0368
enz.(L-) Hand	enzymatisch nur L-Form, manuell	4	0,0716	0,0199
	alle Verfahren L-Milchsäure	18	0,0718	0,0282



## 4.15 Reduktone [mg/L]

### 4.15.1 Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	Glyoxal/Stärke	24,0	-5,00	-1,79	
06	Acetaldehyd/potent.	26,0	-3,00	-1,07	
12	Glyoxal/potentiometr.	30,0	1,00	0,36	
14	Glyoxal/potentiometr.	28,0	-1,00	-0,36	
15	Glyoxal/Stärke	31,0	2,00	0,72	
16	Propionaldehyd/Stärke	30,0	1,00	0,36	
17	Glyoxal/Stärke	29,0	0,00	0,00	
18	Glyoxal/potentiometr.	26,8	-2,20	-0,79	
20	Glyoxal/Stärke	30,0	1,00	0,36	
21	Glyoxal/potentiometr.	42,0	13,00	4,65	
22	Glyoxal/Stärke	30,0	1,00	0,36	
23	Glyoxal/Stärke	23,0	-6,00	-2,15	
25	Glyoxal/potentiometr.	35,4	6,42	2,30	
26	Propionaldehyd/Stärke	32,0	3,00	1,07	
28	Glyoxal/Stärke	30,0	1,00	0,36	
29	Glyoxal/Stärke	28,0	-1,00	-0,36	
31	Glyoxal/Stärke	41,0	12,00	4,29	
34	Glyoxal/Stärke	23,0	-6,00	-2,15	
36	Glyoxal/Stärke	35,0	6,00	2,15	
38	Glyoxal/Stärke	34,0	5,00	1,79	
39	Glyoxal/potentiometr.	26,4	-2,60	-0,93	
40	Glyoxal/Stärke	26,0	-3,00	-1,07	
41	Glyoxal/Stärke	26,0	-3,00	-1,07	
42	Glyoxal/Stärke	23,0	-6,00	-2,15	
46	Glyoxal/Stärke	28,0	-1,00	-0,36	
48	Glyoxal/Stärke	29,0	0,00	0,00	
50	Glyoxal/potentiometr.	31,0	2,00	0,72	
51	Glyoxal/Stärke	15,0	-14,00	-5,01	(**)
56	Glyoxal/MTT	26,3	-2,70	-0,97	
60	Glyoxal/potentiometr.	28,0	-1,00	-0,36	
61	Glyoxal/Stärke	27,0	-2,00	-0,72	
64	Glyoxal/Stärke	26,0	-3,00	-1,07	
65	Glyoxal/Stärke	107,0	78,00	27,91	(*)
66	Glyoxal/potentiometr.	25,0	-4,00	-1,43	
67	Glyoxal/Stärke	28,0	-1,00	-0,36	
68	Glyoxal/potentiometr.	34,0	5,00	1,79	
69	Glyoxal/potentiometr.	32,1	3,08	1,10	
72	Glyoxal/potentiometr.	32,0	3,00	1,07	
74	Glyoxal/potentiometr.	32,0	3,00	1,07	
75	Glyoxal/Stärke	6,0	-23,00	-8,23	(*)
77	Propionaldehyd/Stärke	36,0	7,00	2,50	
79	Glyoxal/potentiometr.	27,0	-2,00	-0,72	
80	Glyoxal/potentiometr.	11,0	-18,00	-6,44	(*)
81	Glyoxal/Stärke	32,8	3,80	1,36	
83	Glyoxal/potentiometr.	50,0	21,00	7,51	(*)
94	Glyoxal/potentiometr.	31,6	2,61	0,93	
101	Glyoxal/Stärke	26,0	-3,00	-1,07	

(\*) Diese Werte weichen mehr als 50 % vom Median und bleiben unberücksichtigt.

(\*\*) Dieser Wert bleibt bei der wiederholten Berechnung unberücksichtigt.

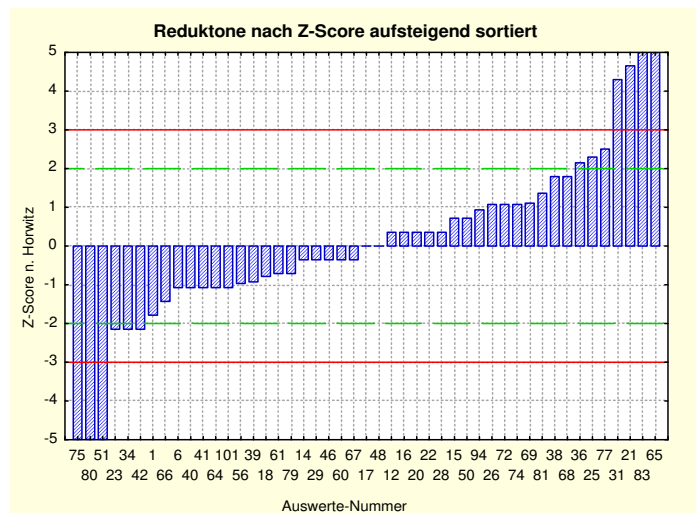
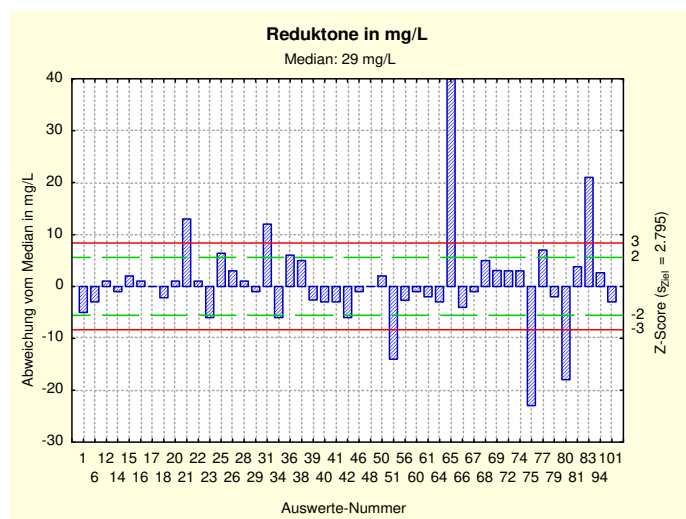


### 4.15.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Reduktone [mg/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	43	42
Minimalwert	15,0	23,0
Mittelwert	29,22	29,56
Median	29,00	29,00
Maximalwert	42,0	42,0
Standardabweichung ( $s_L$ )	4,830	4,342
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,737	0,670
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	2,795	2,795
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp}$ )		
Horrat-Wert ( $s_L/s_H$ )	1,73	1,55
Quotient ( $s_L/s_{exp}$ )		
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,26	0,24
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )		

### 4.15.3 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
Acetaldehyd/potent.	SO <sub>2</sub> -Bindung mit Acetaldehyd; Platinelektrode	1	26,00	
Propionaldehyd/Stärke	SO <sub>2</sub> -Bindung mit Propionaldehyd; Stärke als Indikator	3	32,67	3,46
Glyoxal/Stärke	SO <sub>2</sub> -Bindung mit Glyoxal; Stärke als Indikator	25	28,07	4,69
Glyoxal/potent.	SO <sub>2</sub> -Bindung mit Glyoxal; Platinelektrode	17	30,46	4,78
Glyoxal/MTT	SO <sub>2</sub> -Bindung mit Glyoxal; automat. phot. mit MTT	1	26,30	
	alle Verfahren	47	29,13	4,84



## 4.16 Freie Schweflige Säure [mg/L]

### 4.16.1 Laborergebnisse mit Destillations- und photometrischen Verfahren; FTIR

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse aus Destillations- und photometrischen Verfahren

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
05	LwK 6.3	9,0	1,00	1,07	
06	LwK 6.2	6,7	-1,30	-1,39	
07	LwK 6.2	6,9	-1,12	-1,20	
10	LwK 6.2	8,0	0,00	0,00	
11	LwK 6.3	7,5	-0,50	-0,53	
27	LwK 6.2	8,8	0,80	0,85	
44	LwK 6.3	7,0	-1,00	-1,07	
48	LwK 6.3	8,0	0,00	0,00	
53	LwK 6.3	8,0	0,00	0,00	
55	LwK 6.4	12,0	4,00	4,27	
56	LwK 6.4	5,8	-2,20	-2,35	
88	LwK 6.2	12,0	4,00	4,27	
92	LwK 6.2	10,1	2,10	2,24	
100	LwK 6.2	6,9	-1,10	-1,18	
206	LwK 6.5	7,0	-1,00	-1,07	
207	LwK 6.5	9,8	1,80	1,92	
209	LwK 6.5	8,8	0,80	0,85	
210	LwK 6.5	12,0	4,00	4,27	
211	LwK 6.5	15,0	7,00	7,48	(*)
218	LwK 6.5	9,5	1,50	1,60	
224	LwK 6.5	13,0	5,00	5,34	(*)
237	LwK 6.5	11,0	3,00	3,21	
251	LwK 6.5	22,0	14,00	14,96	(*)
252	LwK 6.5	18,0	10,00	10,68	(*)
258	LwK 6.5	24,0	16,00	17,09	(*)
262	LwK 6.5	14,0	6,00	6,41	(*)
263	LwK 6.5	11,0	3,00	3,21	
270	LwK 6.5	13,0	5,00	5,34	(*)
284	LwK 6.5	12,0	4,00	4,27	
319	LwK 6.5	13,0	5,00	5,34	(*)
336	LwK 6.5	14,0	6,00	6,41	(*)
337	LwK 6.5	11,0	3,00	3,21	
364	LwK 6.5	33,0	25,00	26,71	(*)

(\*) Diese Werte weichen mehr als 50 % vom Median ab und bleiben unberücksichtigt.

### 4.16.2 Laborergebnisse jodometrisch einschließlich Reduktone

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmung einschließlich Reduktone

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	LwK 6.1(incl.Red.)	36,0	-2,00	-0,57	
12	LwK 6.1(incl.Red.)	39,0	1,00	0,28	
14	LwK 6.1(incl.Red.)	38,0	0,00	0,00	
15	LwK 6.1(incl.Red.)	37,0	-1,00	-0,28	
16	LwK 6.1(incl.Red.)	35,0	-3,00	-0,85	
17	LwK 6.1(incl.Red.)	38,0	0,00	0,00	
18	LwK 6.1(incl.Red.)	39,7	1,70	0,48	
20	LwK 6.1(incl.Red.)	64,0	26,00	7,39	(*)
21	LwK 6.1(incl.Red.)	51,0	13,00	3,70	
22	LwK 6.1(incl.Red.)	50,0	12,00	3,41	
23	LwK 6.1(incl.Red.)	38,0	0,00	0,00	
25	LwK 6.1(incl.Red.)	45,3	7,31	2,08	
26	LwK 6.1(incl.Red.)	37,0	-1,00	-0,28	
28	LwK 6.1(incl.Red.)	41,0	3,00	0,85	
29	LwK 6.1(incl.Red.)	45,0	7,00	1,99	
31	LwK 6.1(incl.Red.)	43,0	5,00	1,42	
34	LwK 6.1(incl.Red.)	30,0	-8,00	-2,27	
36	LwK 6.1(incl.Red.)	44,0	6,00	1,71	

(\*) Diese Werte weichen mehr als 50 % vom Median ab und bleiben unberücksichtigt.

**Fortsetzung: Laborergebnisse jodometrische Verfahren einschließlich Reduktone**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
38	LwK 6.1 (incl.Red.)	43,0	5,00	1,42	
39	LwK 6.1 (incl.Red.)	38,9	0,90	0,26	
40	LwK 6.1 (incl.Red.)	37,0	-1,00	-0,28	
41	LwK 6.1 (incl.Red.)	38,0	0,00	0,00	
42	LwK 6.1 (incl.Red.)	35,0	-3,00	-0,85	
46	LwK 6.1 (incl.Red.)	36,0	-2,00	-0,57	
50	LwK 6.1 (incl.Red.)	39,0	1,00	0,28	
51	LwK 6.1 (incl.Red.)	35,0	-3,00	-0,85	
52	LwK 6.1 (incl.Red.)	24,0	-14,00	-3,98	
60	LwK 6.1 (incl.Red.)	37,0	-1,00	-0,28	
61	LwK 6.1 (incl.Red.)	33,0	-5,00	-1,42	
64	LwK 6.1 (incl.Red.)	36,0	-2,00	-0,57	
65	LwK 6.1 (incl.Red.)	32,0	-6,00	-1,71	
66	LwK 6.1 (incl.Red.)	33,0	-5,00	-1,42	
67	LwK 6.1 (incl.Red.)	64,0	26,00	7,39	(*)
68	LwK 6.1 (incl.Red.)	45,0	7,00	1,99	
69	LwK 6.1 (incl.Red.)	40,4	2,36	0,67	
72	LwK 6.1 (incl.Red.)	40,0	2,00	0,57	
74	LwK 6.1 (incl.Red.)	43,0	5,00	1,42	
75	LwK 6.1 (incl.Red.)	15,0	-23,00	-6,54	(*)
77	LwK 6.1 (incl.Red.)	45,0	7,00	1,99	
79	Redox incl.	33,0	-5,00	-1,42	
80	LwK 6.1 (incl.Red.)	21,0	-17,00	-4,83	
81	LwK 6.1 (incl.Red.)	44,0	6,00	1,71	
83	LwK 6.1 (incl.Red.)	51,0	13,00	3,70	
96	LwK 6.1 (incl.Red.)	36,0	-2,00	-0,57	
101	LwK 6.1 (incl.Red.)	37,0	-1,00	-0,28	

(\*) Diese Werte weichen mehr als 50 % vom Median ab und bleiben unberücksichtigt.

**4.16.3 Laborergebnisse jodometrische Verfahren ausschließlich Reduktone**

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmung ausschließlich Reduktone.

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score SH incl. Red.	Hinweis
01	LwK 6.1 (excl.Red.)	12,0	3,00	2,90	0,85	
12	LwK 6.1 (excl.Red.)	9,0	0,00	0,00	0,00	
14	LwK 6.1 (excl.Red.)	10,0	1,00	0,97	0,28	
15	LwK 6.1 (excl.Red.)	6,0	-3,00	-2,90	-0,85	
16	LwK 6.1 (excl.Red.)	5,0	-4,00	-3,87	-1,14	
17	LwK 6.1 (excl.Red.)	9,0	0,00	0,00	0,00	
18	LwK 6.1 (excl.Red.)	12,9	3,90	3,77	1,11	
20	LwK 6.1 (excl.Red.)	34,0	25,00	24,17	7,11	(*)
21	LwK 6.1 (excl.Red.)	9,0	0,00	0,00	0,00	
22	LwK 6.1 (excl.Red.)	20,0	11,00	10,63	3,13	
23	LwK 6.1 (excl.Red.)	15,0	6,00	5,80	1,71	
25	LwK 6.1 (excl.Red.)	9,9	0,89	0,86	0,25	
26	LwK 6.1 (excl.Red.)	5,0	-4,00	-3,87	-1,14	
28	LwK 6.1 (excl.Red.)	11,0	2,00	1,93	0,57	
29	LwK 6.1 (excl.Red.)	17,0	8,00	7,73	2,27	
31	LwK 6.1 (excl.Red.)	2,0	-7,00	-6,77	-1,99	
34	LwK 6.1 (excl.Red.)	7,0	-2,00	-1,93	-0,57	
36	LwK 6.1 (excl.Red.)	9,0	0,00	0,00	0,00	
38	LwK 6.1 (excl.Red.)	9,0	0,00	0,00	0,00	
39	LwK 6.1 (excl.Red.)	12,5	3,50	3,38	1,00	
40	LwK 6.1 (excl.Red.)	11,0	2,00	1,93	0,57	
41	LwK 6.1 (excl.Red.)	12,0	3,00	2,90	0,85	
42	LwK 6.1 (excl.Red.)	12,0	3,00	2,90	0,85	
46	LwK 6.1 (excl.Red.)	8,0	-1,00	-0,97	-0,28	
50	LwK 6.1 (excl.Red.)	8,0	-1,00	-0,97	-0,28	
51	LwK 6.1 (excl.Red.)	20,0	11,00	10,63	3,13	
60	LwK 6.1 (excl.Red.)	9,0	0,00	0,00	0,00	
61	LwK 6.1 (excl.Red.)	6,0	-3,00	-2,90	-0,85	

(\*) Diese Werte weichen mehr als 50 % vom Median ab und bleiben unberücksichtigt.

SH incl. Red.: Zielstandardabweichung berechnet nach Horwitz aus Median der Werte inklusive Reduktone

**Fortsetzung: Laborergebnisse jodometrische Verfahren ausschließlich Reduktone**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score S <sub>H</sub> incl. Red.	Hinweis
63	LwK 6.1(excl.Red.)	6,0	-3,00	-2,90	-0,85	
64	LwK 6.1(excl.Red.)	10,0	1,00	0,97	0,28	
65	LwK 6.1(excl.Red.)	-75,0	-84,00	-81,20	-23,89	(*)
66	LwK 6.1(excl.Red.)	8,0	-1,00	-0,97	-0,28	
67	LwK 6.1(excl.Red.)	36,0	27,00	26,10	7,68	(*)
68	LwK 6.1(excl.Red.)	11,0	2,00	1,93	0,57	
69	LwK 6.1(excl.Red.)	8,3	-0,72	-0,70	-0,20	
72	LwK 6.1(excl.Red.)	8,0	-1,00	-0,97	-0,28	
73	LwK 6.1(excl.Red.)	12,0	3,00	2,90	0,85	
74	LwK 6.1(excl.Red.)	11,0	2,00	1,93	0,57	
75	LwK 6.1(excl.Red.)	9,0	0,00	0,00	0,00	
77	LwK 6.1(excl.Red.)	9,0	0,00	0,00	0,00	
79	Redox excl.	6,0	-3,00	-2,90	-0,85	
80	LwK 6.1(excl.Red.)	10,0	1,00	0,97	0,28	
81	LwK 6.1(excl.Red.)	11,2	2,20	2,13	0,63	
83	LwK 6.1(excl.Red.)	1,0	-8,00	-7,73	-2,27	
101	LwK 6.1(excl.Red.)	11,0	2,00	1,93	0,57	

(\*) Diese Werte weichen mehr als 50 % vom Median ab und bleiben unberücksichtigt.

S<sub>H</sub> incl. Red.: Zielstandardabweichung berechnet nach Horwitz aus Median der Werte inclusive Reduktone

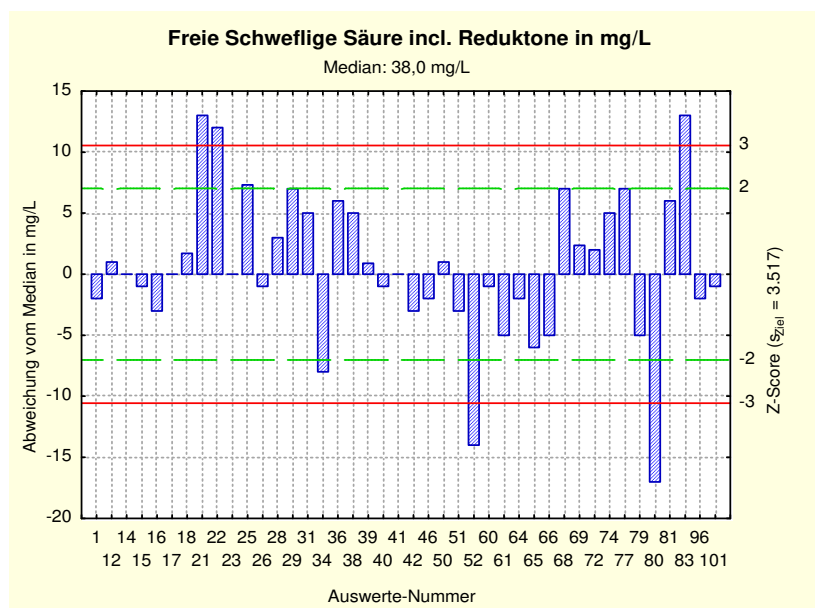
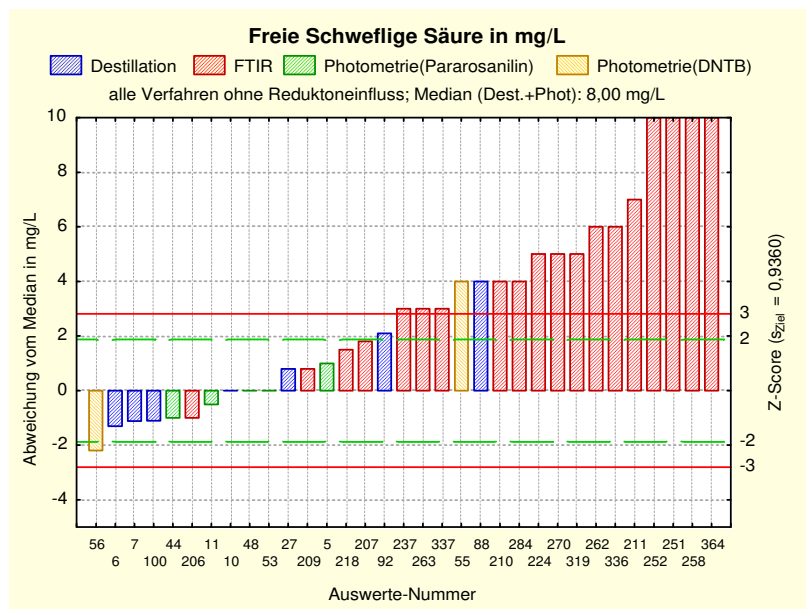
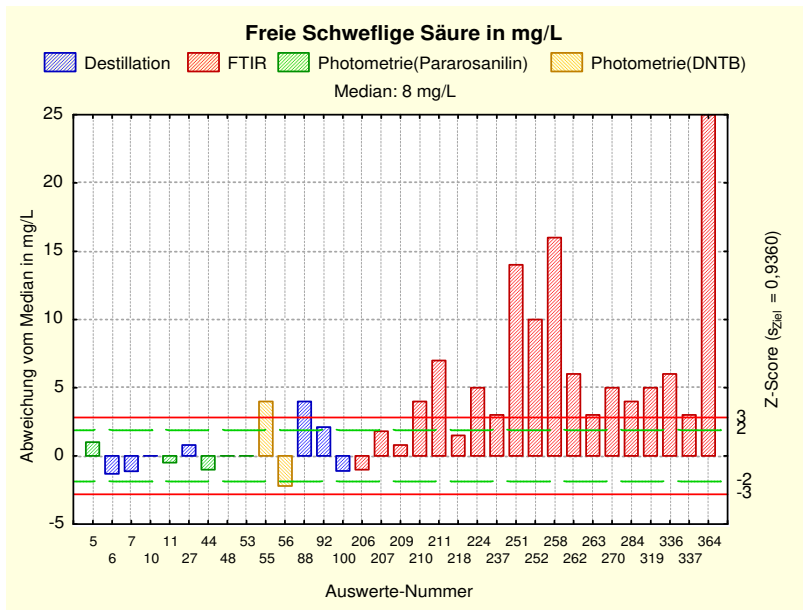
**4.16.4 Deskriptive Ergebnisse**

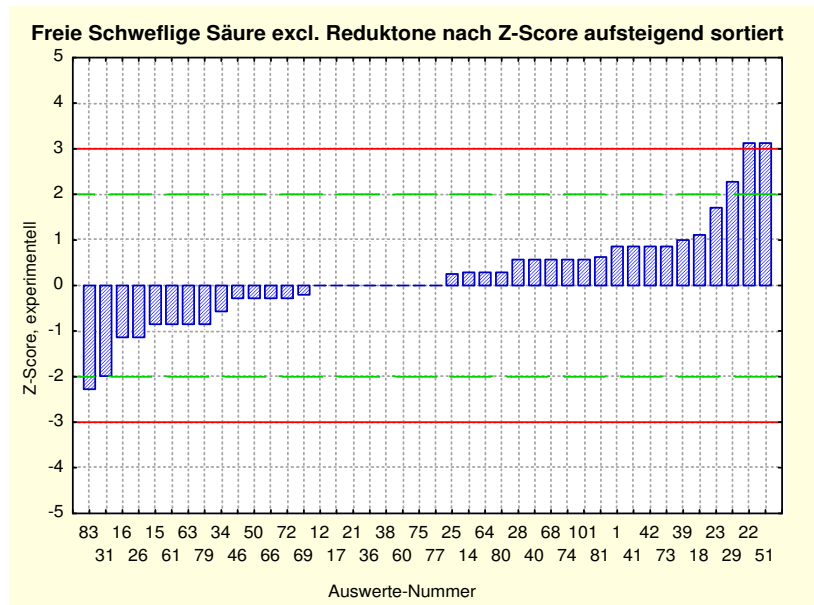
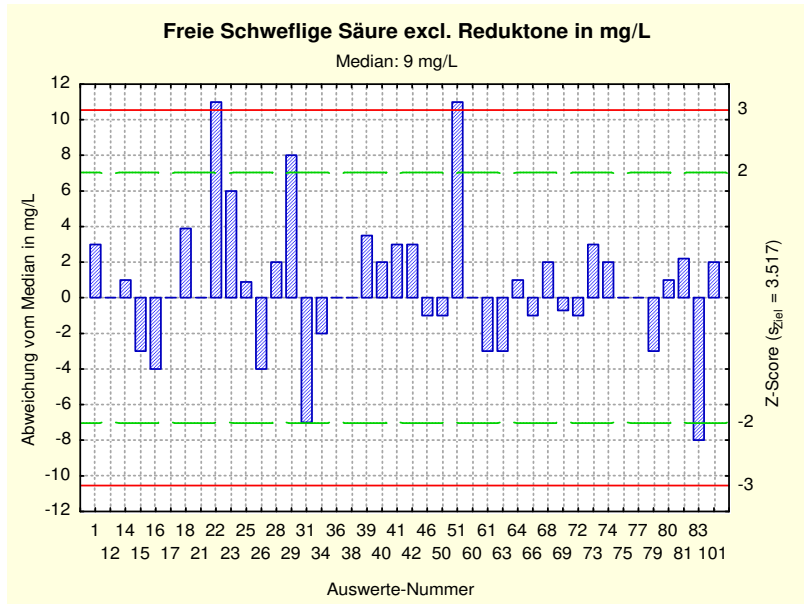
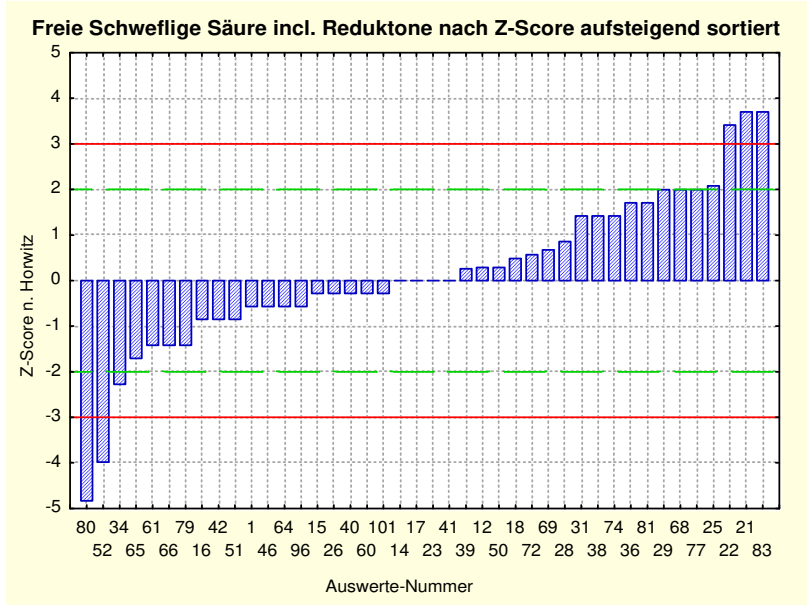
Ergebnisse für Freie Schweflige Säure in mg/L	Destillation, Photometrie	Destillation, Photometrie + FTIR	jodometrisch Reduktone	
	alle Daten	alle Daten	inclusive alle Daten	exclusive alle Daten
Gültige Werte	14	29	42	42
Minimalwert	5,8	5,8	21,0	1,0
Mittelwert	8,33	10,03	38,55	9,71
Median	8,00	9,80	38,00	9,00
Maximalwert	12,0	15,0	51,0	20,0
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	1,896	2,614	6,146	3,833
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,507	0,485	0,948	0,592
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,936	1,112	3,517	1,035
- n. Horwitz incl. Reduktone <sup>*)</sup> (S <sub>H</sub> incl. Red.)				3,517
Horvat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	2,03	2,35	1,75	3,71
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp</sub> )				1,09
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,54	0,44	0,27	0,57
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp</sub> herk.)				0,17

<sup>\*)</sup> Zielstandardabweichung berechnet nach Horwitz aus Median der Werte inclusive Reduktone (S<sub>H</sub> incl. Red.)

**4.16.5 Angaben zu den Analyseverfahren**

Code	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 6.1	Direkte jodometrische Titration OIV-MA-AS323-04B			
(incl.Red.)	- ohne Abzug der Reduktone	44	39,04	5,92
(excl.Red.)	- mit Abzug der Reduktone	44	9,79	3,48
Redox incl.	elektrometrische Bestimmung mit pH-Meter im mV-Modus und der Redoxelektrode ORP inclusive Reduktone	1	33,00	
Redox excl.	wie vorstehend nach Abzug der Reduktone	1	6,00	
LwK 6.2	Methode n. Paul bzw. OIV-MA-AS323-04A	7	8,42	2,11
LwK 6.3	Pararosanilinmethode	5	7,90	0,84
LwK 6.4	DNTB-Verfahren	2	8,90	4,97
	Destillations- und photometrische Verfahren	14	8,17	1,78
LwK 6.5	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der Gasphase	19	13,18	4,18
	Destillations-, photometrische + FTIR-Verfahren	33	10,78	3,62





## 4.17 Gesamte Schweflige Säure [mg/L]

### 4.17.1 Laborergebnisse

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse aus Destillationsverfahren

Jodometrisch bestimmte Ergebnisse sind nur berücksichtigt, wenn exclusive Reduktone mitgeteilt.

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 7.4.2	114,0	22,50	3,03	4,20	
03	LwK 7.3	96,1	4,60	0,62	0,86	
05	LwK 7.7	106,0	14,50	1,95	2,71	
06	LwK 7.3	90,0	-1,50	-0,20	-0,28	
07	LwK 7.3	94,4	2,90	0,39	0,54	
10	LwK 7.3	85,9	-5,60	-0,75	-1,05	
11	LwK 7.4.2	92,0	0,50	0,07	0,09	
12	LwK 7.3	83,0	-8,50	-1,15	-1,59	
14	LwK 7.5.1(excl. Red.)	102,0	10,50	1,42	1,96	
18	LwK 7.5.1(excl. Red.)	92,8	1,30	0,18	0,24	
20	LwK 7.4.2	100,0	8,50	1,15	1,59	
22	LwK 7.4.2m	104,0	12,50	1,68	2,33	
25	LwK 7.4.2	98,0	6,50	0,88	1,21	
27	LwK 7.3	97,9	6,40	0,86	1,19	
31	LwK 7.4.1	79,0	-12,50	-1,68	-2,33	
38	LwK 7.7	95,0	3,50	0,47	0,65	
39	LwK 7.5.1(excl. Red.)	94,3	2,80	0,38	0,52	
40	LwK 7.4.1	91,0	-0,50	-0,07	-0,09	
41	LwK 7.4.1	91,5	0,00	0,00	0,00	
42	LwK 7.4.2	94,0	2,50	0,34	0,47	
44	LwK 7.4.2	86,0	-5,50	-0,74	-1,03	
46	LwK 7.3	71,5	-20,00	-2,70	-3,73	
48	LwK 7.7	92,0	0,50	0,07	0,09	
50	LwK 7.4.2	85,5	-6,00	-0,81	-1,12	
53	LwK 7.7	97,0	5,50	0,74	1,03	
55	LwK 7.7	92,0	0,50	0,07	0,09	
56	LwK 7.7	91,6	0,10	0,01	0,02	
63	LwK 7.2	96,0	4,50	0,61	0,84	
64	LwK 7.4.2	82,0	-9,50	-1,28	-1,77	
67	LwK 7.4.2	83,0	-8,50	-1,15	-1,59	
68	LwK 7.5.1(excl. Red.)	101,0	9,50	1,28	1,77	
72	LwK 7.5.1(excl. Red.)	94,0	2,50	0,34	0,47	
74	LwK 7.2	111,1	19,60	2,64	3,66	
75	LwK 7.4.2	79,0	-12,50	-1,68	-2,33	
77	LwK 7.5.1(excl. Red.)	82,0	-9,50	-1,28	-1,77	
79	LwK 7.5.1(excl. Red.)	80,0	-11,50	-1,55	-2,15	
80	LwK 7.5.1(excl. Red.)	116,0	24,50	3,30	4,57	
81	LwK 7.3	113,1	21,60	2,91	4,03	
88	LwK 7.3	11,0	-80,50	-10,85	-15,03	(*)
89	LwK 7.4.2	94,3	2,75	0,37	0,51	
91	LwK 7.5.2(excl. Red.)	77,0	-14,50	-1,95	-2,71	
92	LwK 7.3	78,3	-13,20	-1,78	-2,46	
93	LwK 7.4.2	96,0	4,50	0,61	0,84	
95	LwK 7.4.1	90,0	-1,50	-0,20	-0,28	
97	LwK 7.7	94,8	3,25	0,44	0,61	
99	LwK 7.4.1	96,0	4,50	0,61	0,84	
100	LwK 7.3	90,8	-0,70	-0,09	-0,13	
101	LwK 7.4.2	83,0	-8,50	-1,15	-1,59	
206	LwK 7.8	85,0	-6,50	-0,88	-1,21	
207	LwK 7.8	89,1	-2,40	-0,32	-0,45	
208	FTIR(direkt)	136,0	44,50	6,00	8,31	(**)
209	LwK 7.8	99,7	8,20	1,11	1,53	
210	LwK 7.8	95,5	4,00	0,54	0,75	
211	LwK 7.8	109,0	17,50	2,36	3,27	
218	LwK 7.8	90,0	-1,50	-0,20	-0,28	
224	LwK 7.8	105,0	13,50	1,82	2,52	
237	LwK 7.8	82,0	-9,50	-1,28	-1,77	
251	LwK 7.8	85,0	-6,50	-0,88	-1,21	
252	LwK 7.8	92,0	0,50	0,07	0,09	

(\*) Dieser Wert weicht um mehr als 50 % der Werte aus Destillationsverfahren ab und bleibt unberücksichtigt.

(\*\*) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Bezugswert aus Destillationsverfahren ab.

**Fortsetzung Laborergebnisse**

(Bewertungsbasis sind die Werte aus Destillationsverfahren)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
258	LwK 7.8	87,0	-4,50	-0,61	-0,84	
262	LwK 7.8	61,0	-30,50	-4,11	-5,69	(**)
263	LwK 7.8	87,0	-4,50	-0,61	-0,84	
270	LwK 7.8	74,0	-17,50	-2,36	-3,27	
284	LwK 7.8	59,0	-32,50	-4,38	-6,07	(**)
319	LwK 7.8	84,0	-7,50	-1,01	-1,40	
336	LwK 7.8	101,0	9,50	1,28	1,77	
337	LwK 7.8	84,0	-7,50	-1,01	-1,40	
364	LwK 7.8	73,0	-18,50	-2,49	-3,45	

(\*\*) Diese Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Bezugswert aus Destillationsverfahren ab.

Mittels Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie erhaltene Werte wurden mit derselben Zielstandardabweichung bewertet wie die Ergebnisse herkömmlicher Analysen-Methoden (Vergleichsstandardabweichung OIV-MA-323-04A). (Beachte auch Anmerkung in Teil 1, Abschnitt 5.1.2, Seite 38)

**4.17.2 Laborergebnisse: jodometrische Verfahren einschließlich Reduktone**

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmungen einschließlich Reduktone

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
14	LwK 7.5.1(incl. Red.)	130,0	10,40	1,12	1,94	
15	LwK 7.5.1(incl. Red.)	99,0	-20,60	-2,21	-3,85	
16	LwK 7.5.1(incl. Red.)	90,0	-29,60	-3,18	-5,53	(**)
17	LwK 7.5.1(incl. Red.)	110,0	-9,60	-1,03	-1,79	
18	LwK 7.5.1(incl. Red.)	119,6	0,00	0,00	0,00	
21	LwK 7.5.1(incl. Red.)	152,0	32,40	3,48	6,05	(**)
23	LwK 7.5.1(incl. Red.)	109,0	-10,60	-1,14	-1,98	
26	LwK 7.5.1(incl. Red.)	105,0	-14,60	-1,57	-2,73	
28	LwK 7.5.1(incl. Red.)	126,0	6,40	0,69	1,19	
29	LwK 7.5.1(incl. Red.)	114,0	-5,60	-0,60	-1,05	
34	LwK 7.5.1(incl. Red.)	111,0	-8,60	-0,92	-1,61	
36	LwK 7.5.1(incl. Red.)	144,0	24,40	2,62	4,55	
39	LwK 7.5.1(incl. Red.)	120,7	1,10	0,12	0,21	
51	LwK 7.5.1(incl. Red.)	99,0	-20,60	-2,21	-3,85	
52	LwK 7.5.2(incl. Red.)	100,0	-19,60	-2,10	-3,66	
60	LwK 7.5.2(incl. Red.)	120,0	0,40	0,04	0,07	
61	LwK 7.5.1(incl. Red.)	109,0	-10,60	-1,14	-1,98	
65	LwK 7.5.3(incl. Red.)	25,0	-94,60	-10,16	-17,66	(*)
66	LwK 7.5.1(incl. Red.)	99,0	-20,60	-2,21	-3,85	
68	LwK 7.5.1(incl. Red.)	135,0	15,40	1,65	2,87	
69	LwK 7.5.1(incl. Red.)	132,4	12,76	1,37	2,38	
72	LwK 7.5.1(incl. Red.)	126,0	6,40	0,69	1,19	
77	LwK 7.5.1(incl. Red.)	118,0	-1,60	-0,17	-0,30	
79	LwK 7.5.1(incl. Red.)	107,0	-12,60	-1,35	-2,35	
80	LwK 7.5.1(incl. Red.)	127,0	7,40	0,79	1,38	
83	LwK 7.5.1(incl. Red.)	136,0	16,40	1,76	3,06	
94	LwK 7.5.1(incl. Red.)	142,0	22,40	2,41	4,18	
96	LwK 7.5.1(incl. Red.)	134,0	14,40	1,55	2,69	

(\*) Dieser Wert weicht um mehr als 50 % vom Bezugswert ab und bleibt unberücksichtigt.

(\*\*) Diese Werte werden bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

**4.17.3 Laborergebnisse: jodometrische Verfahren ausschließlich Reduktone**

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmungen ausschließlich Reduktone

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
14	LwK 7.5.1(excl. Red.)	102,0	15,00	2,11	2,80	
15	LwK 7.5.1(excl. Red.)	68,0	-19,00	-2,67	-3,55	
16	LwK 7.5.1(excl. Red.)	60,0	-27,00	-3,80	-5,04	(**)
17	LwK 7.5.1(excl. Red.)	81,0	-6,00	-0,84	-1,12	
18	LwK 7.5.1(excl. Red.)	92,8	5,80	0,82	1,08	

(\*\*) Dieser Wert wird bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.



**Fortsetzung Laborergebnisse: jodometrische Verfahren ausschließlich Reduktone**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
21	LwK 7.5.1(excl. Red.)	110,0	23,00	3,24	4,29	
23	LwK 7.5.1(excl. Red.)	86,0	-1,00	-0,14	-0,19	
26	LwK 7.5.1(excl. Red.)	73,0	-14,00	-1,97	-2,61	
28	LwK 7.5.1(excl. Red.)	96,0	9,00	1,27	1,68	
29	LwK 7.5.1(excl. Red.)	86,0	-1,00	-0,14	-0,19	
34	LwK 7.5.1(excl. Red.)	88,0	1,00	0,14	0,19	
36	LwK 7.5.1(excl. Red.)	109,0	22,00	3,10	4,11	
39	LwK 7.5.1(excl. Red.)	94,3	7,30	1,03	1,36	
51	LwK 7.5.1(excl. Red.)	84,0	-3,00	-0,42	-0,56	
60	LwK 7.5.2(excl. Red.)	92,0	5,00	0,70	0,93	
61	LwK 7.5.1(excl. Red.)	82,0	-5,00	-0,70	-0,93	
65	LwK 7.5.3(excl. Red.)	-82,0	-169,00	-23,78	-31,55	(*)
66	LwK 7.5.1(excl. Red.)	74,0	-13,00	-1,83	-2,43	
68	LwK 7.5.1(excl. Red.)	101,0	14,00	1,97	2,61	
69	LwK 7.5.1(excl. Red.)	100,3	13,28	1,87	2,48	
72	LwK 7.5.1(excl. Red.)	94,0	7,00	0,98	1,31	
77	LwK 7.5.1(excl. Red.)	82,0	-5,00	-0,70	-0,93	
79	LwK 7.5.1(excl. Red.)	80,0	-7,00	-0,98	-1,31	
80	LwK 7.5.1(excl. Red.)	116,0	29,00	4,08	5,41	(**)
83	LwK 7.5.1(excl. Red.)	86,0	-1,00	-0,14	-0,19	
91	LwK 7.5.2(excl. Red.)	77,0	-10,00	-1,41	-1,87	
94	LwK 7.5.1(excl. Red.)	110,4	23,39	3,29	4,37	

(\*) Dieser Wert weicht um mehr als 50 % vom Bezugswert ab und bleibt unberücksichtigt.

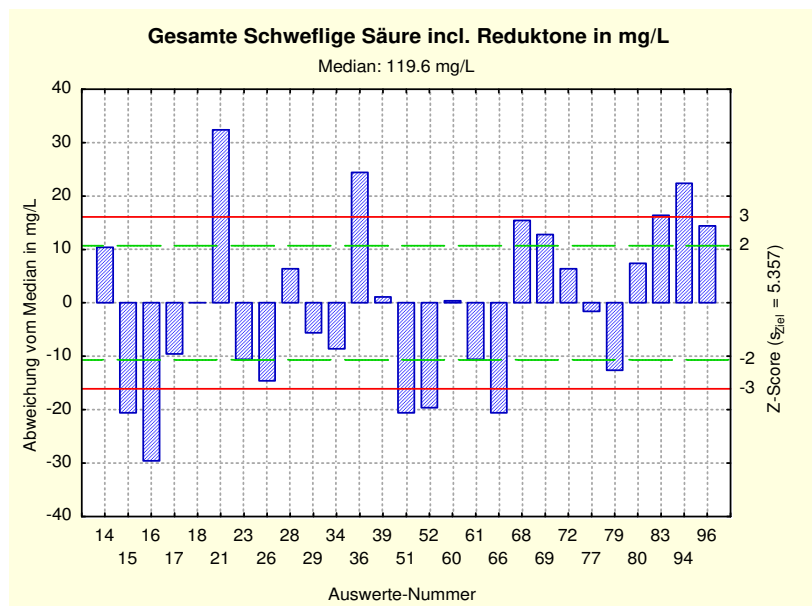
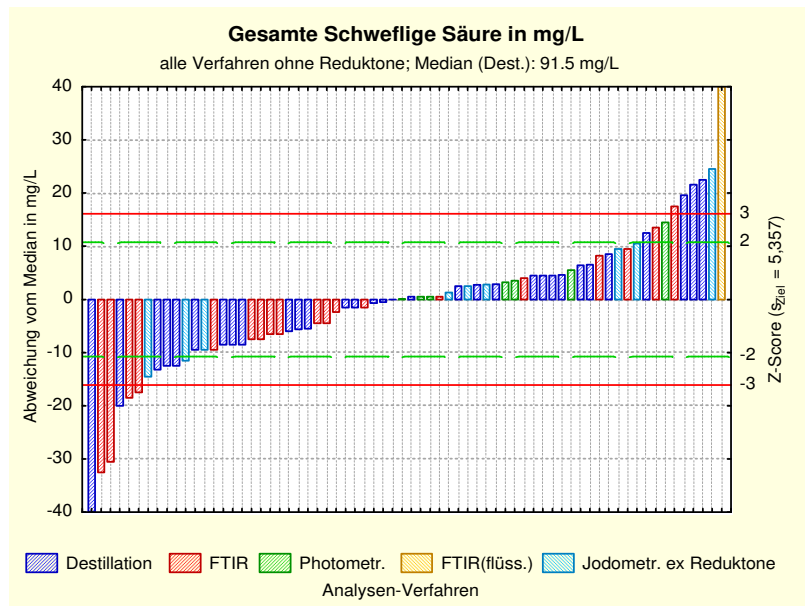
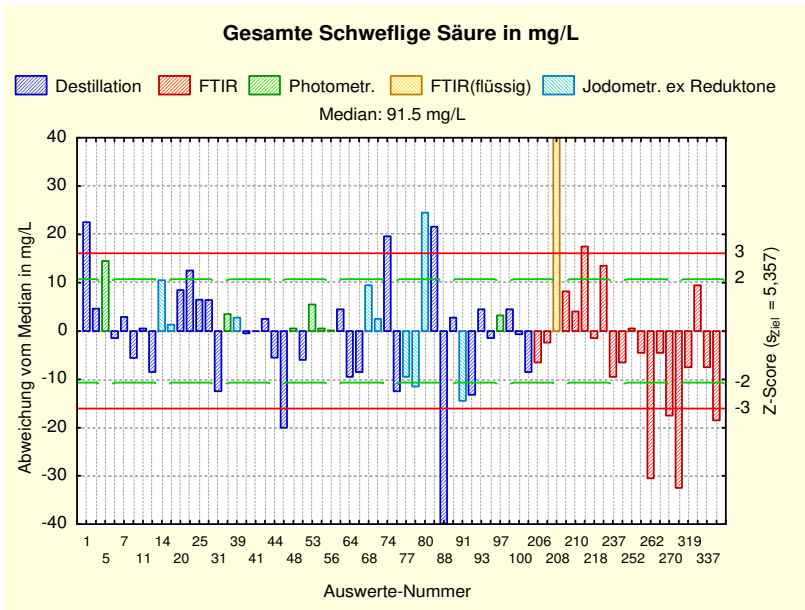
(\*\*) Dieser Wert wird bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

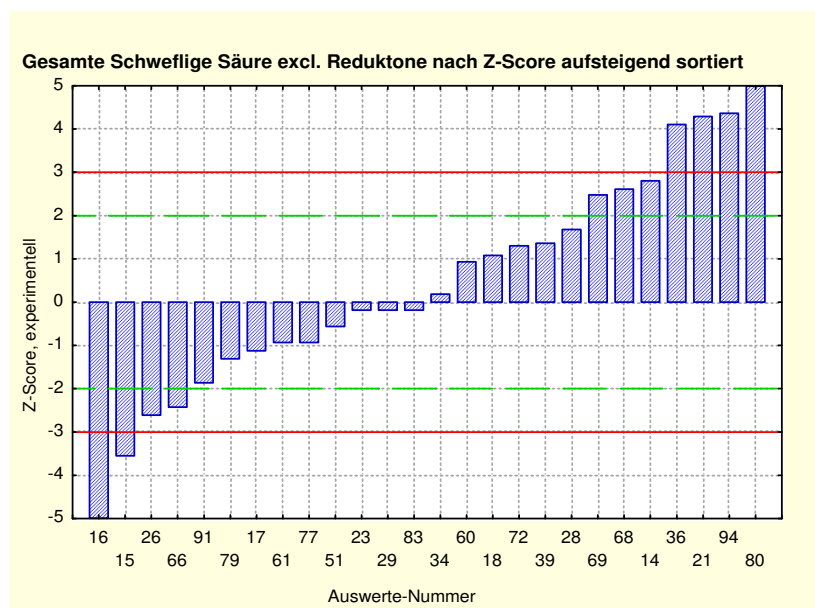
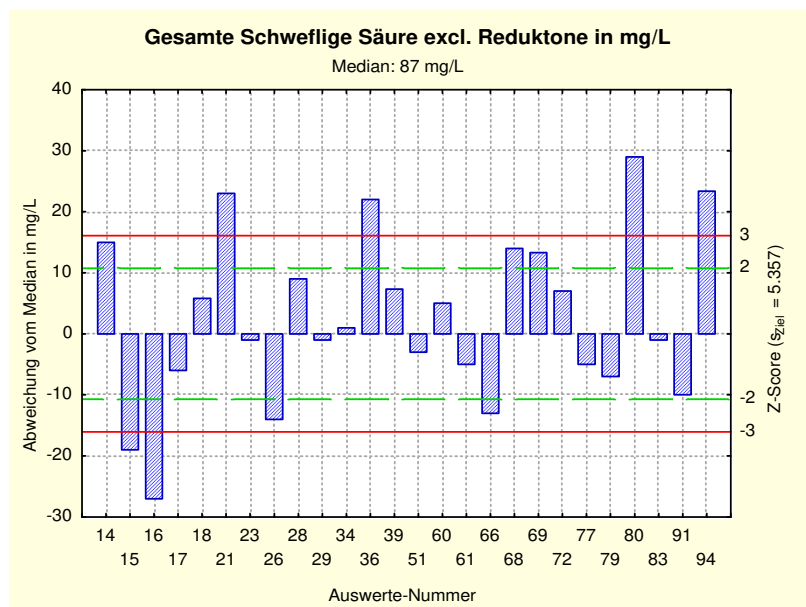
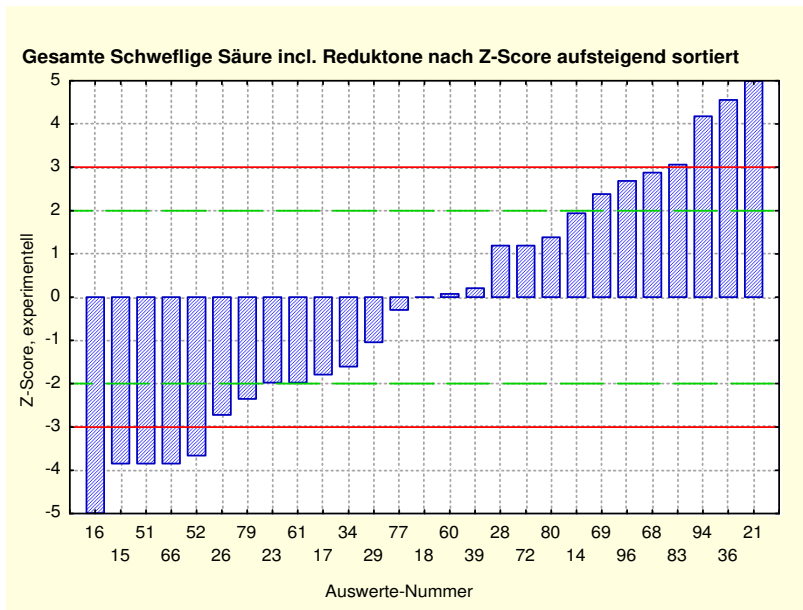
**4.17.4 Deskriptive Ergebnisse**

Ergebnisse für Gesamte Schweflige Säure [mg/L]	Destillation alle Daten	incl. Reduktone		excl. Reduktone	
		alle Daten	ber. Daten	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	31	27	25	26	24
Minimalwert	71,5	90,0	99,0	60,0	68,0
Mittelwert	91,82	119,06	118,91	89,41	89,53
Median	91,50	119,60	119,60	87,00	87,00
Maximalwert	114,0	152,0	144,0	116,0	110,4
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	10,110	15,922	13,937	13,845	11,831
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	1,816	3,064	2,787	2,715	2,415
Zielstandardabweichung					
- n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	7,419	9,314	9,314	7,107	7,107
- experimentell (s <sub>exp</sub> )	5,357	5,357	5,357	5,357	5,357
Horvat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	1,36	1,71	1,50	1,95	1,66
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp</sub> herk.)	1,89	2,97	2,60	2,58	2,21
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,24	0,33	0,30	0,38	0,34
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp</sub> herk.)	0,34	0,57	0,52	0,51	0,45

**4.17.5 Angaben zu den Analyseverfahren**

Code	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 7.2	Methode n. Tanner	2	103,55	12,11
LwK 7.3	Methode n. Paul bzw. OIV-MA-AS323-04A	11	87,87	12,63
LwK 7.4.1	Destillationsmethode n. Dr. Jakob	5	89,34	6,91
LwK 7.4.2	Destillationsmethode n. Dr. Rebelein	13	90,52	8,96
LwK 7.4.2m	Destillationsmethode n. Dr. Rebelein, modifiziert	1	104,00	
	alle Destillationsverfahren	32	90,80	9,96
LwK 7.5.1 (incl. Red.)	jodometrisch n. einf. Hydrolyse ohne Reduktonabzug	25	119,68	17,41
LwK 7.5.2 (incl. Red.)	jodometrisch n. dopp. Hydrolyse ohne Reduktonabzug	2	110,00	16,04
LwK 7.5.3 (incl. Red.)	Jodometrisch mit Hydrolyse n. Rebelein ohne Abzug	1	25,00	
	alle jodometrischen Verfahren ohne Reduktonabzug	28	117,82	18,15
LwK 7.5.1(excl. Red.)	jodometrisch n. einf. Hydrolyse ohne Reduktonabzug	24	89,73	14,55
LwK 7.5.2(excl. Red.)	jodometrisch n. einf. Hydrolyse unter Reduktonabzug	2	84,50	12,03
LwK 7.5.3(excl. Red.)	Jodometrisch mit Hydrolyse n. Rebelein mit Abzug	1	-82,00	
	alle jodometrischen Verfahren mit Reduktonabzug	27	88,40	15,09
LwK 7.7	DNTB-Verfahren	7	94,58	3,42
LwK 7.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der Gasphase	19	87,21	12,23
FTIR(direkt)	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der flüss. Phase	1	136,00	





## 5 Ergebnisse zu den einzelnen Parametern der Probe FT17P03

### 5.1 Relative Dichte 20 °C/20 °C

#### 5.1.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 8.1	0,99877	-0,000222	-1,69	
02	LwK 8.1	0,99899	-0,000007	-0,06	
05	LwK 8.4	0,99881	-0,000182	-1,38	
06	LwK 8.4	0,99904	0,000048	0,36	
07	LwK 8.4	0,99898	-0,000012	-0,09	
08	LwK 8.1	0,99872	-0,000272	-2,06	
09	LwK 8.1	0,99891	-0,000082	-0,62	
10	LwK 8.4	0,99897	-0,000022	-0,17	
11	LwK 8.4	0,99917	0,000178	1,34	
13	LwK 8.4	0,99902	0,000028	0,21	
14	LwK 8.4	0,99890	-0,000092	-0,70	
15	LwK 8.4	0,99900	0,000008	0,06	
17	LwK 8.4	0,99894	-0,000052	-0,40	
18	LwK 8.4	0,99890	-0,000092	-0,70	
20	LwK 8.4	0,99909	0,000098	0,74	
21	LwK 8.4	0,99920	0,000208	1,57	
22	LwK 8.4	0,99892	-0,000072	-0,55	
23	LwK 8.4	0,99881	-0,000182	-1,38	
25	LwK 8.4	0,99912	0,000128	0,97	
26	LwK 8.4	0,99890	-0,000092	-0,70	
27	LwK 8.4	0,99897	-0,000022	-0,17	
29	LwK 8.4	0,99896	-0,000032	-0,25	
31	LwK 8.4	0,99892	-0,000072	-0,55	
34	LwK 8.4	0,99897	-0,000022	-0,17	
36	LwK 8.4	0,99900	0,000008	0,06	
37	LwK 8.3	0,99896	-0,000032	-0,25	
38	LwK 8.4	0,99920	0,000208	1,57	
39	LwK 8.4	0,99919	0,000198	1,50	
40	LwK 8.4	0,99895	-0,000042	-0,32	
41	LwK 8.4	0,99900	0,000008	0,06	
42	LwK 8.4	0,99902	0,000028	0,21	
43	LwK 8.4	0,99892	-0,000072	-0,55	
44	LwK 8.1	0,99910	0,000108	0,81	
46	LwK 8.4	0,99900	0,000008	0,06	
47	LwK 8.4	0,99900	0,000008	0,06	
48	LwK 8.4	0,99920	0,000208	1,57	
50	LwK 8.4	0,99913	0,000138	1,04	
52	LwK 8.4	0,99894	-0,000050	-0,38	
53	LwK 8.4	0,99910	0,000108	0,81	
54	LwK 8.4	0,99910	0,000108	0,81	
55	LwK 8.4	0,99904	0,000048	0,36	
56	LwK 8.4	0,99881	-0,000182	-1,38	
57	LwK 8.4	0,99900	0,000008	0,06	
60	LwK 8.4	0,99860	-0,000392	-2,97	
61	LwK 8.4	0,99910	0,000108	0,81	
64	LwK 8.4	0,99900	0,000008	0,06	
65	LwK 8.4	0,99910	0,000108	0,81	
67	LwK 8.1	0,99900	0,000008	0,06	
69	LwK 8.4	0,98503	-0,013962	-105,78	(**)
75	LwK 8.2	0,99990	0,000908	6,88	(**)
81	LwK 8.1	0,99882	-0,000172	-1,31	
84	LwK 8.4	0,99376	-0,005232	-39,64	(**)
101	LwK 8.4	0,99720	-0,001792	-13,58	(**)
102	LwK 8.4	0,99875	-0,000242	-1,84	

Der mit (\*\*) gekennzeichnete Wert wurde bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

**5.1.2 FTIR-Laboregebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	0,99960	0,000600	3,16	
202	FTIR	0,99918	0,000180	0,95	
203	FTIR	0,99910	0,000100	0,53	
204	FTIR	0,99912	0,000120	0,63	
205	FTIR	0,99880	-0,000200	-1,05	
206	FTIR	0,99890	-0,000100	-0,53	
207	FTIR	0,99895	-0,000050	-0,26	
208	FTIR	0,99880	-0,000200	-1,05	
209	FTIR	0,99892	-0,000080	-0,42	
210	FTIR	0,99857	-0,000430	-2,26	
211	FTIR	0,99929	0,000290	1,53	
212	FTIR	0,99870	-0,000300	-1,58	
214	FTIR	0,99870	-0,000300	-1,58	
215	FTIR	0,99910	0,000100	0,53	
216	FTIR	0,99890	-0,000100	-0,53	
217	FTIR	0,99880	-0,000200	-1,05	
218	FTIR	0,99891	-0,000090	-0,47	
219	FTIR	0,99890	-0,000100	-0,53	
220	FTIR	0,99900	0,000000	0,00	
221	FTIR	0,99939	0,000390	2,05	
222	FTIR	0,99914	0,000140	0,74	
223	FTIR	0,99940	0,000400	2,11	
224	FTIR	0,99910	0,000100	0,53	
225	FTIR	0,99908	0,000080	0,42	
226	FTIR	0,99890	-0,000100	-0,53	
227	FTIR	0,99930	0,000300	1,58	
228	FTIR	0,99890	-0,000100	-0,53	
229	FTIR	0,99863	-0,000370	-1,95	
231	FTIR	0,99880	-0,000200	-1,05	
232	FTIR	0,99940	0,000400	2,11	
234	FTIR	0,99896	-0,000040	-0,21	
235	FTIR	0,99910	0,000100	0,53	
236	FTIR	0,99907	0,000070	0,37	
237	FTIR	0,99940	0,000400	2,11	
240	FTIR	0,99919	0,000190	1,00	
241	FTIR	0,99930	0,000300	1,58	
242	FTIR	0,99892	-0,000080	-0,42	
243	FTIR	0,99920	0,000200	1,05	
244	FTIR	0,99910	0,000100	0,53	
245	FTIR	0,99940	0,000400	2,11	
246	FTIR	0,99880	-0,000200	-1,05	
247	FTIR	0,99930	0,000300	1,58	
248	FTIR	0,99930	0,000300	1,58	
249	FTIR	0,99910	0,000100	0,53	
250	FTIR	0,99910	0,000100	0,53	
251	FTIR	0,99900	0,000000	0,00	
252	FTIR	0,99909	0,000090	0,47	
254	FTIR	0,99920	0,000200	1,05	
255	FTIR	0,99940	0,000400	2,11	
256	FTIR	0,99850	-0,000500	-2,63	
257	FTIR	0,99900	0,000000	0,00	
258	FTIR	0,99950	0,000500	2,63	
259	FTIR	0,99901	0,000010	0,05	
260	FTIR	0,99930	0,000300	1,58	
261	FTIR	0,99940	0,000400	2,11	
262	FTIR	0,99890	-0,000100	-0,53	
263	FTIR	0,99900	0,000000	0,00	
264	FTIR	0,99890	-0,000100	-0,53	
265	FTIR	0,99850	-0,000500	-2,63	
266	FTIR	0,99920	0,000200	1,05	
267	FTIR	0,99942	0,000420	2,21	
268	FTIR	0,99895	-0,000050	-0,26	
269	FTIR	0,99875	-0,000250	-1,32	
270	FTIR	0,99900	0,000000	0,00	
271	FTIR	0,99880	-0,000200	-1,05	
272	FTIR	0,99900	0,000000	0,00	

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

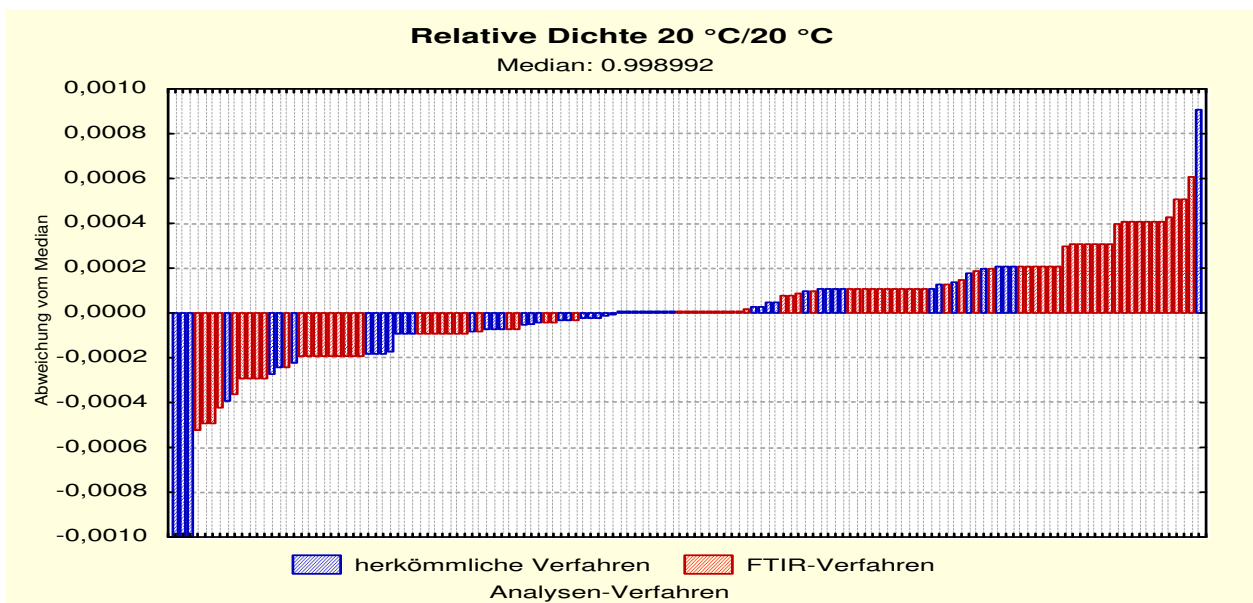
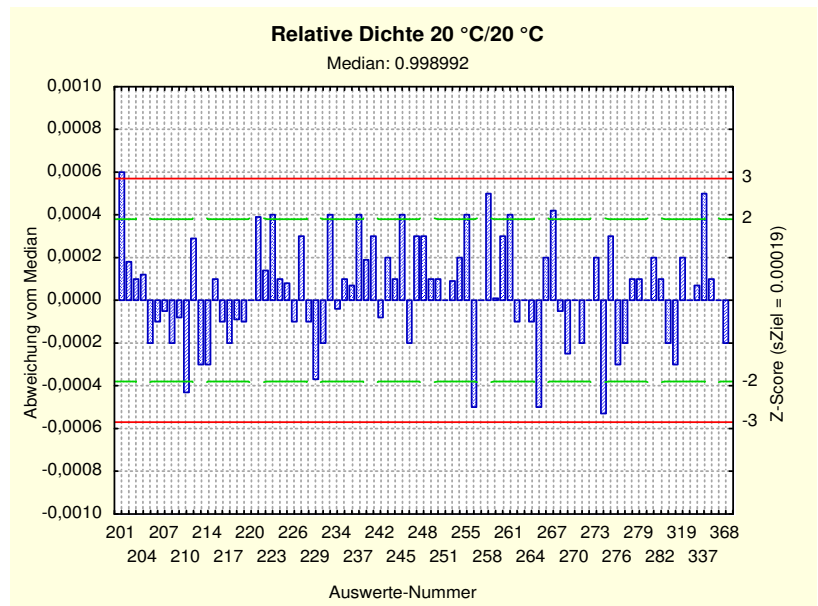
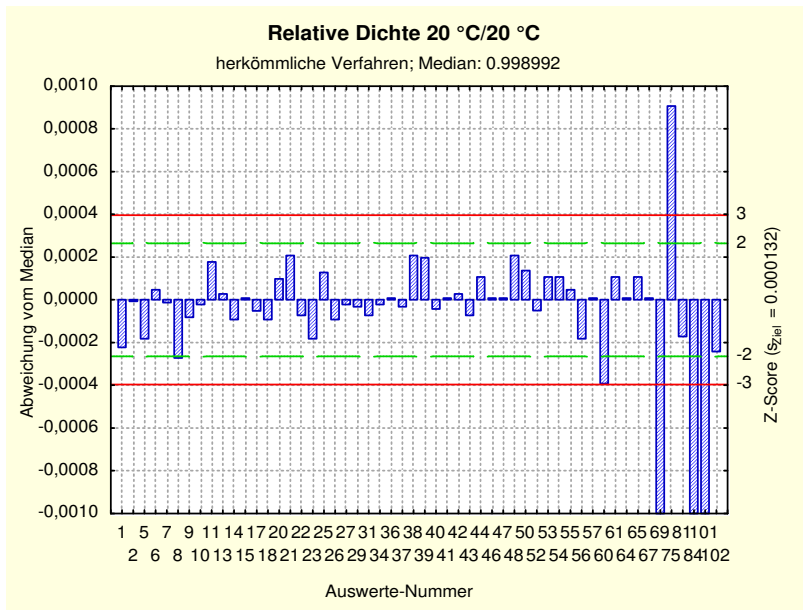
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
273	FTIR	0,99920	0,000200	1,05	
274	FTIR	0,99847	-0,000530	-2,79	
275	FTIR	0,99930	0,000300	1,58	
276	FTIR	0,99870	-0,000300	-1,58	
277	FTIR	0,99880	-0,000200	-1,05	
278	FTIR	0,99910	0,000100	0,53	
279	FTIR	0,99910	0,000100	0,53	
280	FTIR	0,99900	0,000000	0,00	
281	FTIR	0,99920	0,000200	1,05	
282	FTIR	0,99910	0,000100	0,53	
283	FTIR	0,99880	-0,000200	-1,05	
284	FTIR	0,99870	-0,000300	-1,58	
319	FTIR	0,99920	0,000200	1,05	
320	FTIR	0,99900	0,000000	0,00	
336	FTIR	0,99907	0,000070	0,37	
337	FTIR	0,99950	0,000500	2,63	
349	FTIR	0,99910	0,000100	0,53	
364	FTIR	0,99900	0,000000	0,00	
368	FTIR	0,99880	-0,000200	-1,05	

**5.1.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse für Relative Dichte 20 °C/20 °C	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	54	50
Minimalwert	0,98503	0,99860
Mittelwert	0,998609	0,998980
Median	0,998983	0,998992
Maximalwert	0,99990	0,99920
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,002034	0,000130
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,000277	0,000018
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )		
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,000132	0,000132
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\hat{U}\ FTIR}$ )	0,000190	0,000190
Horrat-Wert ( $s_L/s_H$ )		
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	15,41	0,98
Quotient ( $s_L/s_{\hat{U}\ FTIR}$ )	10,71	0,68
Quotient ( $u_M/s_H$ )		
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	2,10	0,14
Quotient ( $u_M/s_{\hat{U}\ FTIR}$ )	1,46	0,13

**5.1.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 8.1	Pyknometrische Methode; OIV-MA-AS2-01A, Nr. 2A	7	0,99890	0,000156
LwK 8.2	Bestimmung mit dem Aräometer; OIV-MA-AS2-01B	1	0,99990	
LwK 8.3	Hydrostatische Waage; OIV-MA-AS2-01A, Nr. 2C	1	0,99896	
LwK 8.4	Bestimmung mit dem Biegeschwinger	45	0,99898	0,000141
	herkömmliche Verfahren	54	0,99897	0,000148
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	85	0,99905	0,000252



## 5.2 Vorhandener Alkohol [g/L]

### 5.2.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Bewertungsbasis: Laborergebnisse aus Destillationsverfahren

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 2.1	92,40	1,050	0,40	1,96	
02	LwK 2.1	92,43	1,080	0,41	2,02	
05	LwK 2.1	90,84	-0,508	-0,19	-0,95	
06	LwK 2.4	91,41	0,060	0,02	0,11	
07	LwK 2.4	90,57	-0,780	-0,30	-1,46	
08	LwK 2.1	91,88	0,530	0,20	0,99	
09	LwK 2.4	92,39	1,040	0,40	1,94	
10	LwK 2.1	91,84	0,490	0,19	0,92	
11	LwK 2.4	91,40	0,050	0,02	0,09	
13	LwK 2.1	91,62	0,270	0,10	0,50	
14	LwK 2.9	92,27	0,920	0,35	1,72	
15	LwK 2.1	91,10	-0,250	-0,10	-0,47	
17	LwK 2.9	93,00	1,650	0,63	3,08	
18	LwK 2.7	88,90	-2,450	-0,94	-4,58	
20	LwK 2.7	90,56	-0,790	-0,30	-1,48	
21	LwK 2.7	90,93	-0,420	-0,16	-0,79	
22	LwK 2.9	92,40	1,050	0,40	1,96	
23	LwK 2.5	93,30	1,950	0,74	3,64	
25	LwK 2.1	90,70	-0,650	-0,25	-1,21	
26	LwK 2.4	91,60	0,250	0,10	0,47	
27	LwK 2.5	92,40	1,050	0,40	1,96	
29	LwK 2.1	90,90	-0,450	-0,17	-0,84	
31	LwK 2.9	92,20	0,850	0,32	1,59	
34	LwK 2.8	90,80	-0,550	-0,21	-1,03	
37	LwK 2.2	92,00	0,650	0,25	1,21	
38	LwK 2.9	91,63	0,281	0,11	0,52	
39	LwK 2.7	90,40	-0,950	-0,36	-1,78	
40	LwK 2.4	91,25	-0,100	-0,04	-0,19	
41	LwK 2.5	91,50	0,150	0,06	0,28	
42	LwK 2.4	91,10	-0,250	-0,10	-0,47	
43	LwK 2.9	92,40	1,050	0,40	1,96	
46	LwK 2.5	91,50	0,150	0,06	0,28	
47	LwK 2.1	91,30	-0,050	-0,02	-0,09	
48	LwK 2.5	91,20	-0,150	-0,06	-0,28	
50	LwK 2.9	91,95	0,600	0,23	1,12	
52	LwK 2.9	92,40	1,050	0,40	1,96	
53	LwK 2.9	91,80	0,450	0,17	0,84	
55	LwK 2.1	90,90	-0,450	-0,17	-0,84	
56	LwK 2.9	92,66	1,310	0,50	2,45	
57	LwK 2.5	92,80	1,450	0,55	2,71	
60	LwK 2.1	93,30	1,950	0,74	3,64	
61	LwK 2.7	92,60	1,250	0,48	2,34	
64	LwK 2.5	91,99	0,640	0,24	1,20	
65	LwK 2.5	92,30	0,950	0,36	1,78	
67	LwK 2.1	92,20	0,850	0,32	1,59	
69	LwK 2.4	89,37	-1,980	-0,76	-3,70	
74	LwK 2.4	88,71	-2,639	-1,01	-4,93	
75	LwK 2.3	91,20	-0,150	-0,06	-0,28	
77	LwK 2.4	90,32	-1,031	-0,39	-1,93	
81	LwK 2.1	91,70	0,350	0,13	0,65	
84	LwK 2.4	91,50	0,150	0,06	0,28	
89	LwK 2.9	92,25	0,900	0,34	1,68	
90	LwK 2.5	92,78	1,430	0,55	2,67	
91	LwK 2.9	91,70	0,350	0,13	0,65	
94	LwK 2.5	91,70	0,350	0,13	0,65	
95	LwK 2.9	92,20	0,850	0,32	1,59	
98	LwK 2.9	90,80	-0,550	-0,21	-1,03	
99	LwK 2.4	91,00	-0,350	-0,13	-0,65	
101	LwK 2.5	91,76	0,410	0,16	0,77	
102	LwK 2.9	89,37	-1,980	-0,76	-3,70	
103	NMR	88,70	-2,650	-1,01	-4,95	
104	NMR	87,20	-4,145	-1,58	-7,75	(**)



**Fortsetzung: herkömmlich Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
105	NMR	90,34	-1,010	-0,39	-1,89	
106	NMR	88,37	-2,982	-1,14	-5,57	(**)
107	NMR	83,41	-7,935	-3,03	-14,83	(**)

(\*\*) Diese Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der herkömmlichen Werte ab.

**5.2.2 FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 2.8	89,25	-2,100	-0,80	-2,37	
202	LwK 2.8	92,07	0,720	0,27	0,81	
203	LwK 2.8	91,80	0,450	0,17	0,51	
204	LwK 2.8	91,20	-0,150	-0,06	-0,17	
205	LwK 2.8	91,16	-0,193	-0,07	-0,22	
206	LwK 2.8	91,89	0,540	0,21	0,61	
207	LwK 2.8	92,83	1,480	0,57	1,67	
208	LwK 2.8	91,10	-0,250	-0,10	-0,28	
209	LwK 2.8	92,37	1,020	0,39	1,15	
210	LwK 2.8	91,85	0,500	0,19	0,56	
211	LwK 2.8	92,20	0,850	0,32	0,96	
212	LwK 2.8	91,40	0,050	0,02	0,06	
214	LwK 2.8	92,30	0,950	0,36	1,07	
215	LwK 2.8	91,00	-0,350	-0,13	-0,40	
216	LwK 2.8	91,70	0,350	0,13	0,40	
217	LwK 2.8	92,00	0,650	0,25	0,73	
218	LwK 2.8	92,25	0,900	0,34	1,02	
219	LwK 2.8	90,90	-0,450	-0,17	-0,51	
220	LwK 2.8	90,50	-0,850	-0,32	-0,96	
221	LwK 2.8	91,30	-0,050	-0,02	-0,06	
222	LwK 2.8	93,40	2,050	0,78	2,31	
223	LwK 2.8	92,50	1,150	0,44	1,30	
224	LwK 2.8	90,80	-0,550	-0,21	-0,62	
225	LwK 2.8	90,98	-0,370	-0,14	-0,42	
226	LwK 2.8	90,80	-0,550	-0,21	-0,62	
227	LwK 2.8	92,10	0,750	0,29	0,85	
228	LwK 2.8	92,10	0,750	0,29	0,85	
229	LwK 2.8	91,65	0,300	0,11	0,34	
231	LwK 2.8	93,40	2,050	0,78	2,31	
232	LwK 2.8	91,10	-0,250	-0,10	-0,28	
234	LwK 2.8	90,80	-0,550	-0,21	-0,62	
235	LwK 2.8	92,40	1,050	0,40	1,19	
236	LwK 2.8	91,40	0,050	0,02	0,06	
237	LwK 2.8	90,50	-0,850	-0,32	-0,96	
240	LwK 2.8	92,40	1,050	0,40	1,19	
241	LwK 2.8	91,50	0,150	0,06	0,17	
242	LwK 2.8	92,13	0,780	0,30	0,88	
243	LwK 2.8	92,40	1,050	0,40	1,19	
244	LwK 2.8	90,21	-1,140	-0,44	-1,29	
245	LwK 2.8	91,10	-0,250	-0,10	-0,28	
246	LwK 2.8	90,80	-0,550	-0,21	-0,62	
247	LwK 2.8	90,95	-0,400	-0,15	-0,45	
248	LwK 2.8	92,19	0,840	0,32	0,95	
249	LwK 2.8	90,80	-0,550	-0,21	-0,62	
250	LwK 2.8	91,22	-0,130	-0,05	-0,15	
251	LwK 2.8	90,90	-0,450	-0,17	-0,51	
252	LwK 2.8	91,85	0,500	0,19	0,56	
254	LwK 2.8	92,40	1,050	0,40	1,19	
255	LwK 2.8	90,90	-0,450	-0,17	-0,51	
256	LwK 2.8	93,10	1,750	0,67	1,98	
257	LwK 2.8	92,40	1,050	0,40	1,19	
258	LwK 2.8	91,00	-0,350	-0,13	-0,40	
259	LwK 2.8	91,58	0,230	0,09	0,26	
260	LwK 2.8	91,40	0,050	0,02	0,06	
261	LwK 2.8	92,00	0,650	0,25	0,73	

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

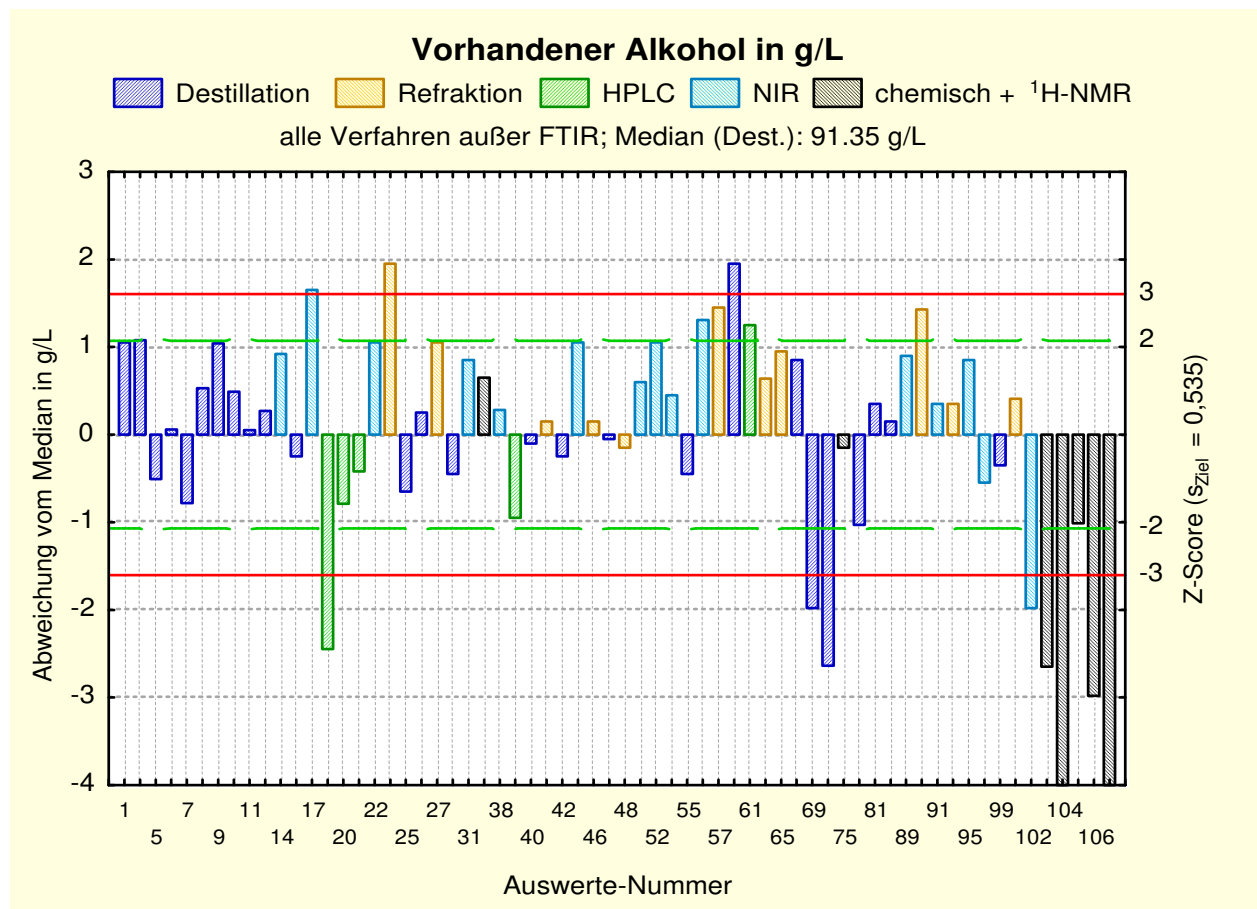
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
262	LwK 2.8	90,40	-0,950	-0,36	-1,07	
263	LwK 2.8	91,10	-0,250	-0,10	-0,28	
264	LwK 2.8	92,70	1,350	0,52	1,52	
265	LwK 2.8	91,28	-0,070	-0,03	-0,08	
266	LwK 2.8	91,73	0,380	0,15	0,43	
267	LwK 2.8	91,38	0,030	0,01	0,03	
268	LwK 2.8	91,50	0,150	0,06	0,17	
269	LwK 2.8	91,80	0,450	0,17	0,51	
270	LwK 2.8	89,70	-1,650	-0,63	-1,86	
271	LwK 2.8	93,42	2,070	0,79	2,34	
272	LwK 2.8	90,00	-1,350	-0,52	-1,52	
273	LwK 2.8	90,60	-0,750	-0,29	-0,85	
274	LwK 2.8	90,68	-0,666	-0,25	-0,75	
275	LwK 2.8	92,70	1,350	0,52	1,52	
276	LwK 2.8	91,70	0,350	0,13	0,40	
277	LwK 2.8	91,19	-0,163	-0,06	-0,18	
278	LwK 2.8	88,85	-2,500	-0,95	-2,82	
279	LwK 2.8	89,69	-1,660	-0,63	-1,87	
280	LwK 2.8	90,80	-0,550	-0,21	-0,62	
281	LwK 2.8	91,42	0,070	0,03	0,08	
282	LwK 2.8	92,00	0,650	0,25	0,73	
283	LwK 2.8	92,20	0,850	0,32	0,96	
284	LwK 2.8	91,63	0,281	0,11	0,32	
312	LwK 2.8	91,80	0,450	0,17	0,51	
319	LwK 2.8	93,10	1,750	0,67	1,98	
320	LwK 2.8	91,10	-0,250	-0,10	-0,28	
323	LwK 2.8	92,60	1,250	0,48	1,41	
336	LwK 2.8	91,30	-0,050	-0,02	-0,06	
337	LwK 2.8	90,50	-0,850	-0,32	-0,96	
343	LwK 2.8	91,97	0,620	0,24	0,70	
349	LwK 2.8	93,20	1,850	0,71	2,09	
364	LwK 2.8	91,40	0,050	0,02	0,06	
368	LwK 2.8	91,60	0,250	0,10	0,28	

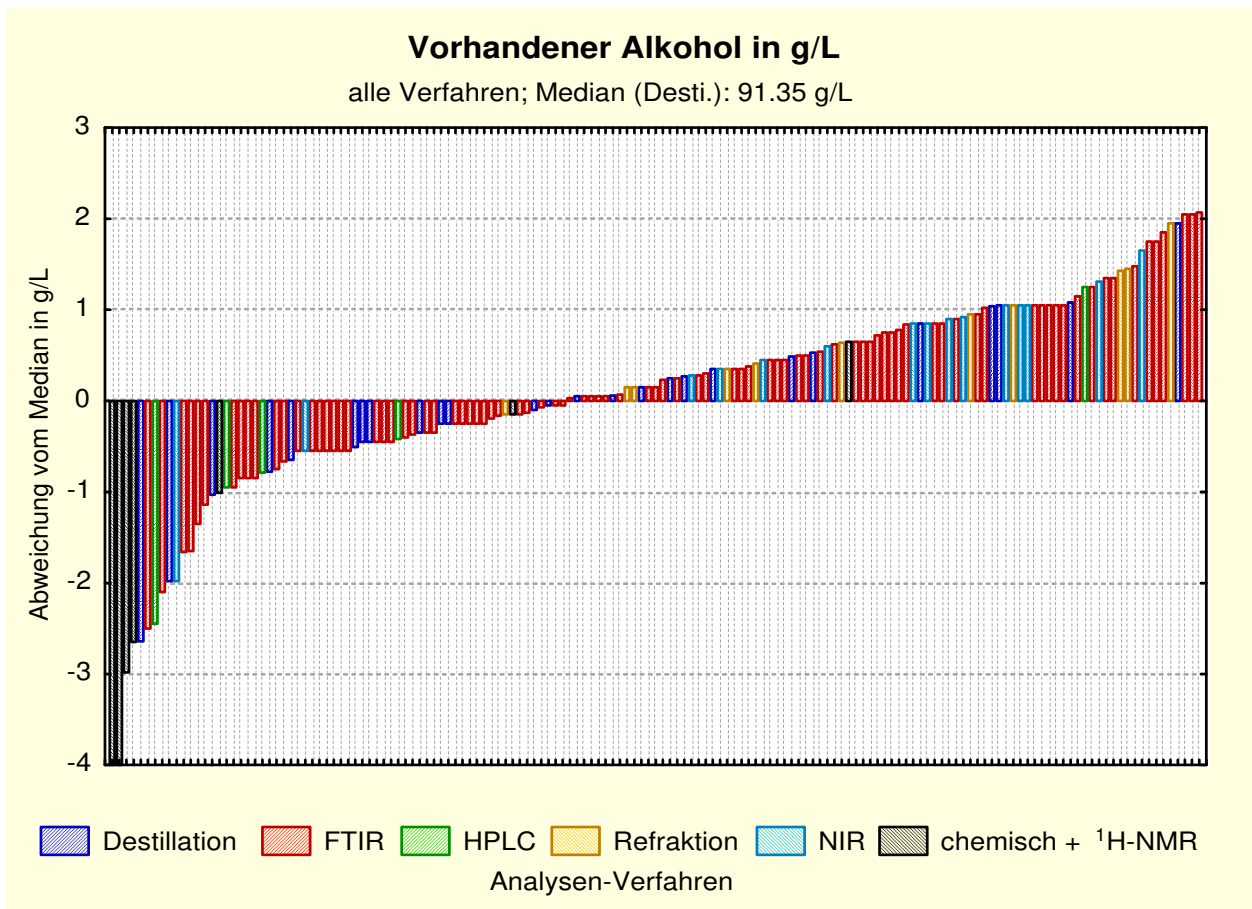
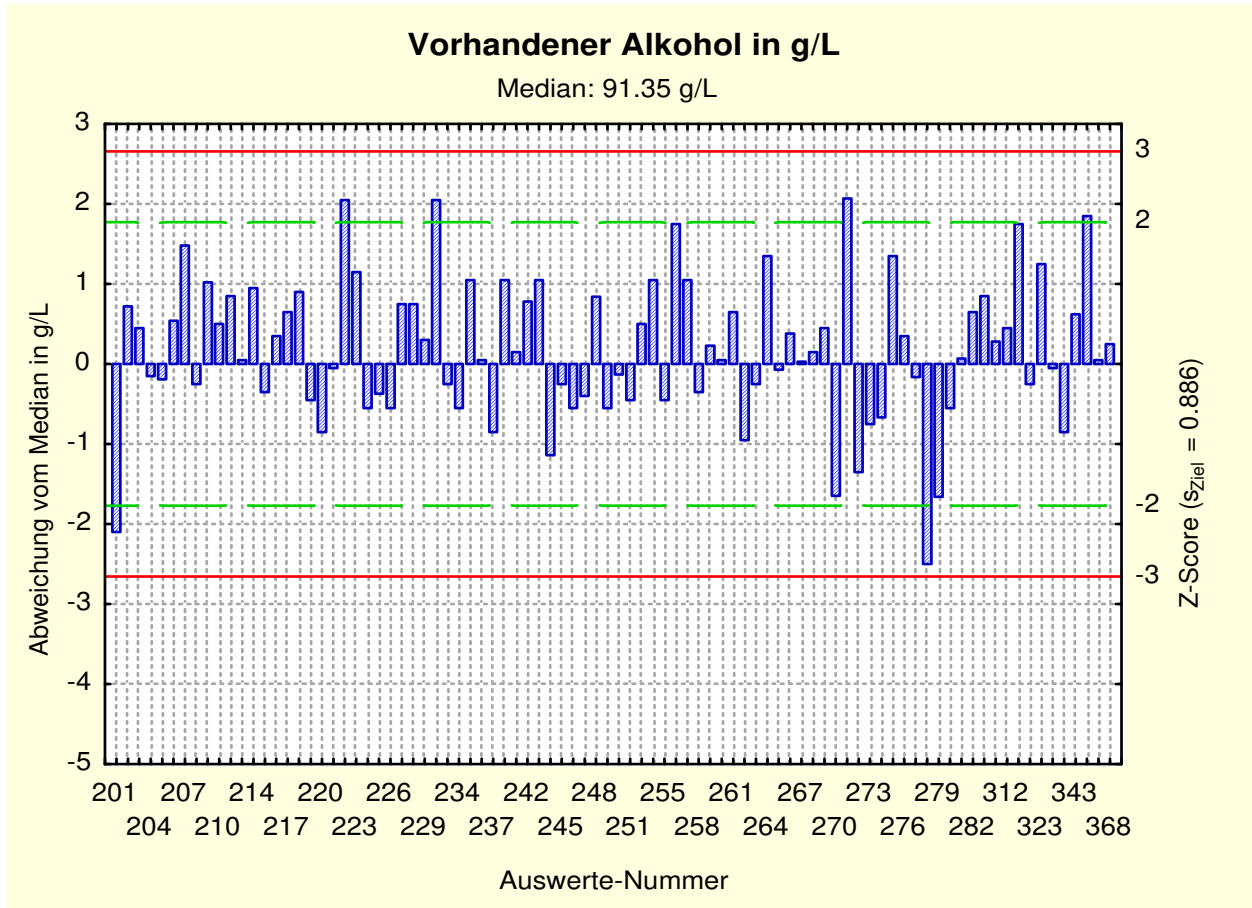
**5.2.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse für Vorhandenen Alkohol [g/L] nur Destillationsverfahren	alle Daten
Gültige Werte	26
Minimalwert	88,71
Mittelwert	91,297
Median	91,350
Maximalwert	93,30
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,949
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,186
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	2,619
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,535
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,886
Horrat-Wert ( $s_L/s_H$ )	0,36
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	1,77
Quotient ( $s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	1,07
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,07
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,35
Quotient ( $u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,21

5.2.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 2.1	Destillation nach Neutralisation; OIV-MA-AS312-01A Nr. 4A oder Nr. 4B	14	91,612	0,762
LwK 2.4	Einfache direkte Destillation n. AVV V2 Destillationsverfahren	12 26	90,969 91,354	0,956 0,784
LwK 2.2	Chemische Alkoholbestimmung n. Dr. Jakob	1	92,000	
LwK 2.3	Chemische Alkoholbestimmung n. Dr. Rebelein	1	91,200	
LwK 2.5	Berechnung aus relativer Dichte und Refraktion	11	92,102	0,724
LwK 2.7	HPLC z.B. nach Heidger	5	90,699	1,442
LwK 2.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	89	91,542	0,852
LwK 2.9	Nah-Infrarotspektrometrie	15	92,090	0,526
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	5	87,656	2,830





### 5.3 Gesamtextrakt [g/L]

#### 5.3.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 3.2	35,50	-1,70	-1,39	-2,86	
02	spezial_1	37,62	0,42	0,34	0,71	
06	LwK 3.3	37,20	0,00	0,00	0,00	
07	LwK 3.3	36,71	-0,49	-0,40	-0,82	
08	LwK 3.2	36,60	-0,60	-0,49	-1,01	
09	LwK 3.1	37,20	0,00	0,00	0,00	
10	LwK 3.3	37,20	0,00	0,00	0,00	
11	LwK 3.3	37,50	0,30	0,25	0,51	
14	LwK 3.3	37,40	0,20	0,16	0,34	
15	LwK 3.2	37,00	-0,20	-0,16	-0,34	
17	LwK 3.3	37,40	0,20	0,16	0,34	
18	LwK 3.2	35,90	-1,30	-1,06	-2,19	
20	LwK 3.3	37,00	-0,20	-0,16	-0,34	
21	LwK 3.3	37,50	0,30	0,25	0,51	
22	LwK 3.3	37,20	0,00	0,00	0,00	
23	LwK 3.3	37,50	0,30	0,25	0,51	
25	LwK 3.2	36,80	-0,40	-0,33	-0,67	
26	LwK 3.3	36,82	-0,38	-0,31	-0,64	
27	LwK 3.3	37,50	0,30	0,25	0,51	
29	LwK 3.2	36,70	-0,50	-0,41	-0,84	
31	LwK 3.3	37,20	0,00	0,00	0,00	
34	LwK 3.3	36,80	-0,40	-0,33	-0,67	
37	LwK 3.3	37,20	0,00	0,00	0,00	
38	LwK 3.3	37,60	0,40	0,33	0,67	
39	LwK 3.3	37,20	0,00	0,00	0,00	
40	LwK 3.3	37,00	-0,20	-0,16	-0,34	
41	LwK 3.3	37,00	-0,20	-0,16	-0,34	
42	LwK 3.3	37,00	-0,20	-0,16	-0,34	
43	LwK 3.2	37,30	0,10	0,08	0,17	
46	LwK 3.3	37,10	-0,10	-0,08	-0,17	
47	LwK 3.3	37,00	-0,20	-0,16	-0,34	
48	LwK 3.3	37,50	0,30	0,25	0,51	
50	LwK 3.3	37,50	0,30	0,25	0,51	
52	LwK 3.1	37,30	0,10	0,08	0,17	
53	LwK 3.3	37,50	0,30	0,25	0,51	
56	LwK 3.3	37,10	-0,10	-0,08	-0,17	
57	LwK 3.3	37,60	0,40	0,33	0,67	
60	LwK 3.2	36,80	-0,40	-0,33	-0,67	
61	LwK 3.3	37,80	0,60	0,49	1,01	
67	LwK 3.3	37,20	0,00	0,00	0,00	
75	LwK 3.3	37,00	-0,20	-0,16	-0,34	
81	LwK 3.1	36,20	-1,00	-0,82	-1,68	
84	LwK 3.2	23,10	-14,10	-11,55	-23,74	(**)

(\*\*) Dieser Wert wurde bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

## 5.3.2 FTIR-Laboreergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	36,90	-0,30	-0,25	-0,51	
202	FTIR	37,87	0,67	0,55	1,13	
203	FTIR	37,10	-0,10	-0,08	-0,17	
204	FTIR	38,40	1,20	0,98	2,02	
206	FTIR	37,51	0,31	0,25	0,52	
209	FTIR	37,40	0,20	0,16	0,34	
211	FTIR	37,40	0,20	0,16	0,34	
215	FTIR	37,00	-0,20	-0,16	-0,34	
216	FTIR	36,85	-0,35	-0,29	-0,59	
217	FTIR	37,50	0,30	0,25	0,51	
218	FTIR	36,40	-0,80	-0,66	-1,35	
219	FTIR	37,80	0,60	0,49	1,01	
220	FTIR	37,00	-0,20	-0,16	-0,34	
221	FTIR	37,70	0,50	0,41	0,84	
223	FTIR	38,20	1,00	0,82	1,68	
225	FTIR	37,08	-0,12	-0,10	-0,20	
226	FTIR	37,90	0,70	0,57	1,18	
227	FTIR	37,77	0,57	0,47	0,96	
228	FTIR	38,70	1,50	1,23	2,53	
232	FTIR	38,23	1,03	0,84	1,73	
235	FTIR	36,90	-0,30	-0,25	-0,51	
236	FTIR	38,20	1,00	0,82	1,68	
237	FTIR	38,30	1,10	0,90	1,85	
240	FTIR	38,10	0,90	0,74	1,52	
246	FTIR	37,60	0,40	0,33	0,67	
247	FTIR	37,46	0,26	0,21	0,44	
249	FTIR	38,00	0,80	0,66	1,35	
251	FTIR	38,00	0,80	0,66	1,35	
252	FTIR	37,60	0,40	0,33	0,67	
254	FTIR	37,90	0,70	0,57	1,18	
258	FTIR	37,50	0,30	0,25	0,51	
259	FTIR	37,00	-0,20	-0,16	-0,34	
260	LwK 3.2	37,80	0,60	0,49	1,01	
261	FTIR	36,80	-0,40	-0,33	-0,67	
262	FTIR	37,70	0,50	0,41	0,84	
263	FTIR	37,30	0,10	0,08	0,17	
264	FTIR	37,70	0,50	0,41	0,84	
266	FTIR	36,30	-0,90	-0,74	-1,52	
267	FTIR	37,57	0,37	0,30	0,62	
268	FTIR	36,95	-0,25	-0,20	-0,42	
269	FTIR	35,70	-1,50	-1,23	-2,53	
270	FTIR	37,40	0,20	0,16	0,34	
271	FTIR	37,53	0,33	0,27	0,56	
272	FTIR	36,90	-0,30	-0,25	-0,51	
273	FTIR	37,14	-0,06	-0,05	-0,10	
275	FTIR	39,10	1,90	1,56	3,20	
276	FTIR	58,30	21,10	17,28	35,52	(*)
278	FTIR	36,74	-0,46	-0,38	-0,77	
279	FTIR	36,59	-0,61	-0,50	-1,03	
280	FTIR	36,50	-0,70	-0,57	-1,18	
281	FTIR	37,70	0,50	0,41	0,84	
282	FTIR	38,00	0,80	0,66	1,35	
283	FTIR	37,60	0,40	0,33	0,67	
320	FTIR	38,10	0,90	0,74	1,52	
336	FTIR	38,33	1,13	0,93	1,90	
337	FTIR	38,30	1,10	0,90	1,85	

(\*) Dieser Wert weicht um mehr als 50 % vom Median der herkömmlichen Werte ab.

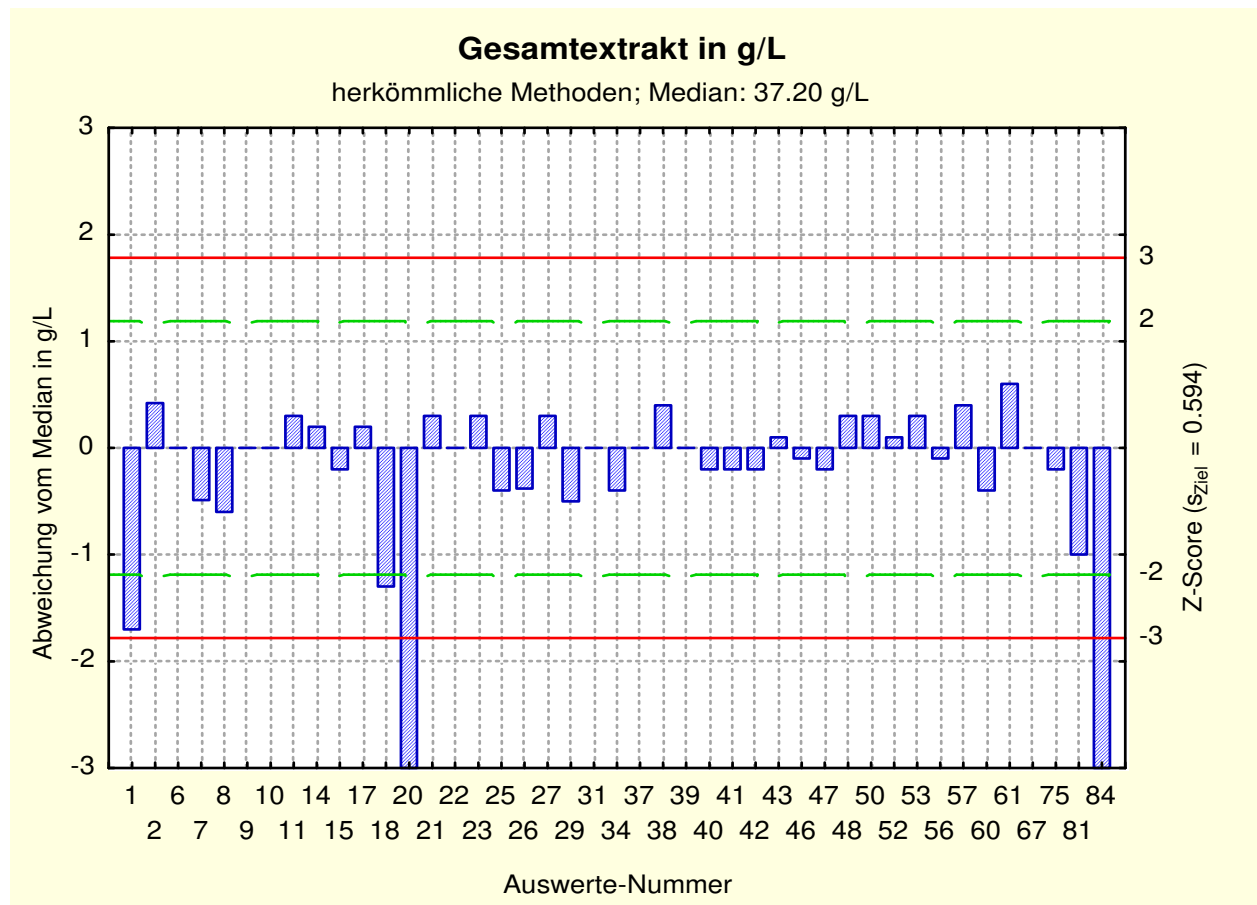
### 5.3.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

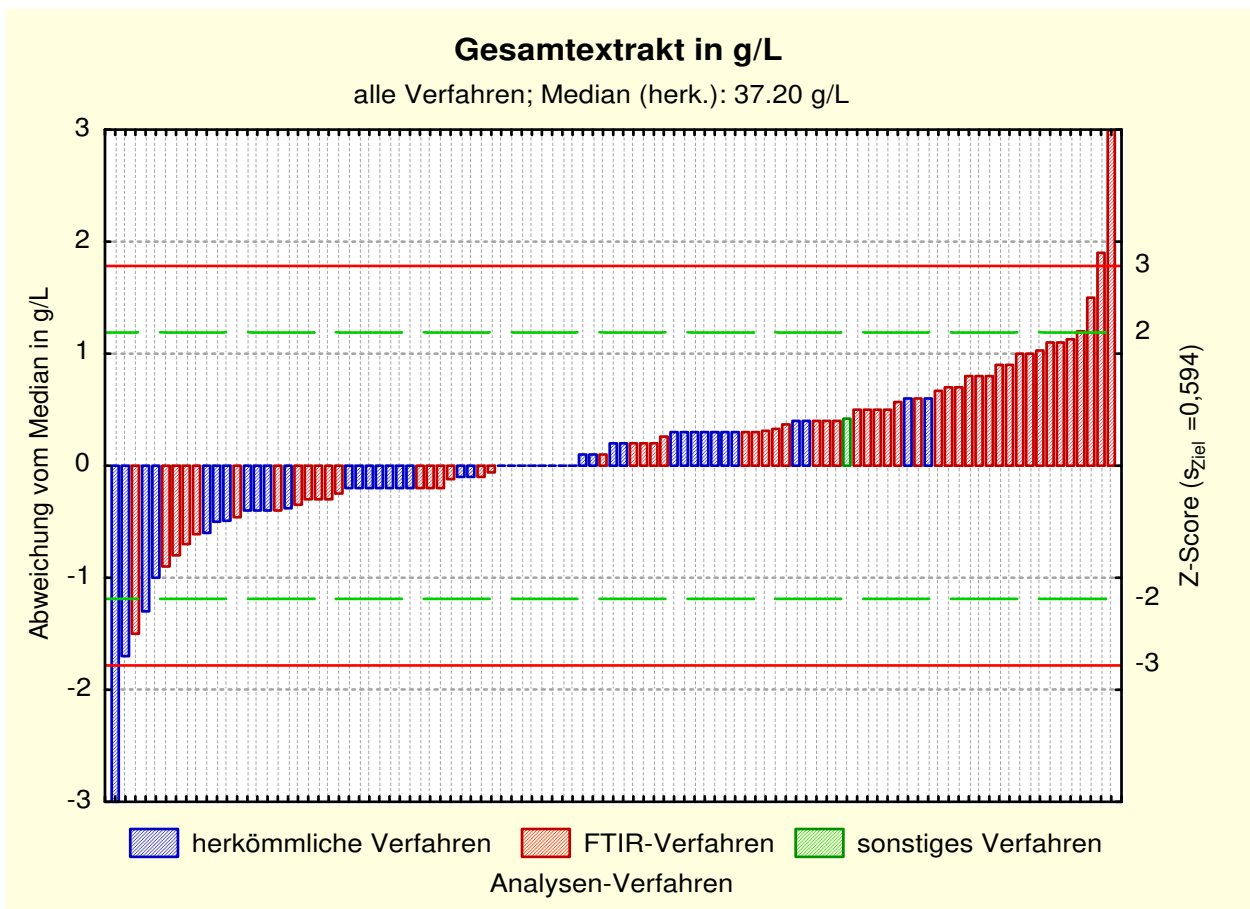
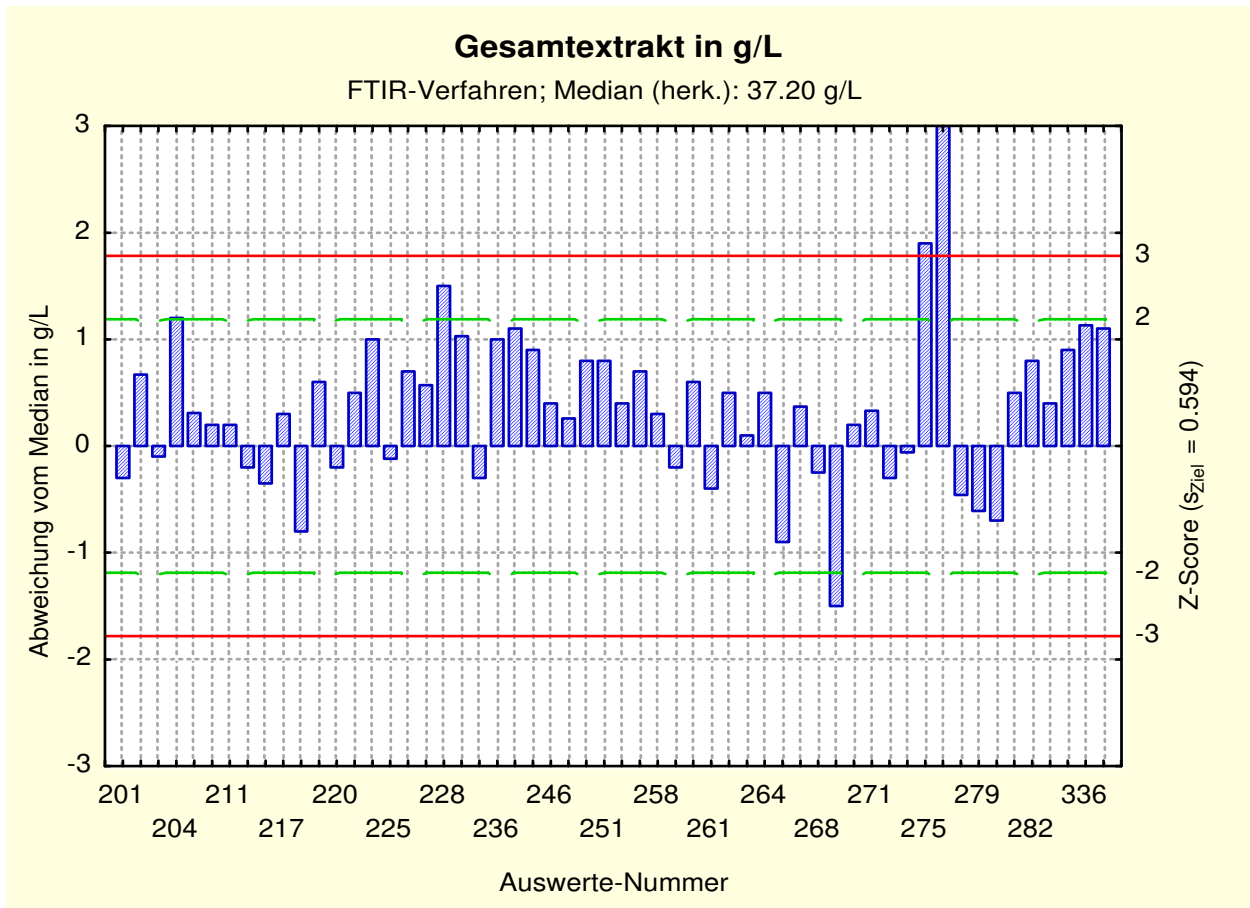
Ergebnisse für Gesamtextrakt [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	42	41
Minimalwert	23,1	35,5
Mittelwert	36,75	37,09
Median	37,20	37,20
Maximalwert	37,8	37,8
Standardabweichung ( $s_L$ )	2,204	0,454
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,340	0,071
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	1,221	1,221
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,594	0,594
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{Ü\ FTIR}$ ) <sup>*)</sup>	(0,565)	(0,565)
Horrat-Wert ( $s_L/s_H$ )	1,81	0,37
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	3,71	0,76
Quotient ( $s_L/s_{Ü\ FTIR}$ )	(3,90)	(0,80)
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,28	0,06
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,57	0,12
Quotient ( $u_M/s_{Ü\ FTIR}$ )	(0,60)	(0,13)

<sup>\*)</sup> Die FTIR-Laboregebnisse wurden mit der Zielstandardabweichung  $s_{exp\ herk}$  bewertet.

### 5.3.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 3.1	Indirekt pyknometrisch n. AVV	3	36,957	0,578
LwK 3.2	Berechnung n. Tabarie auf Basis Alkohol nach LwK 2.1; OIV-MA-AS2-03B	9	36,469	0,737
LwK 3.3	Berechnung n. Tabarie auf Basis anderer Alkoholbest. herkömmliche Verfahren	30	37,240	0,293
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	55	37,532	0,661
spezial_1	Berechnung nach Tabarie, Messung mit DR Gerät	1	37,620	







## 5.4 Vergärbare Zucker [g/L]

### 5.4.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Bewertungsbasis: Enzymatik und Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; verbindliche Bewertung

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
06	LwK 4.5	13,70	0,000	0,00	0,00	
07	LwK 4.5	13,40	-0,300	-0,57	-0,73	
08	LwK 4.5	13,66	-0,040	-0,08	-0,10	
09	LwK 4.5	13,53	-0,170	-0,33	-0,41	
10	LwK 4.5	13,17	-0,530	-1,01	-1,28	
11	LwK 4.1	14,10	0,400	0,77	0,97	
13	LwK 4.7	13,73	0,026	0,05	0,06	
14	LwK 4.5	14,00	0,300	0,57	0,73	
15	LwK 4.5	13,70	0,000	0,00	0,00	
18	LwK 4.7	13,80	0,100	0,19	0,24	
20	LwK 4.7	14,08	0,380	0,73	0,92	
21	LwK 4.7	13,71	0,010	0,02	0,02	
22	NMR	13,37	-0,330	-0,63	-0,80	
23	LwK 4.4	14,20	0,500	0,96	1,21	
25	LwK 4.5	13,78	0,080	0,15	0,19	
26	LwK 4.7	13,98	0,285	0,55	0,69	
27	LwK 4.4	14,80	1,100	2,10	2,66	
29	LwK 4.5	13,80	0,100	0,19	0,24	
31	LwK 4.5	13,80	0,100	0,19	0,24	
34	LwK 4.8	13,70	0,000	0,00	0,00	
37	LwK 4.3	13,29	-0,410	-0,78	-0,99	
38	LwK 4.5	14,20	0,500	0,96	1,21	
39	LwK 4.7	13,64	-0,060	-0,11	-0,15	
40	LwK 4.5	13,47	-0,230	-0,44	-0,56	
41	LwK 4.5	13,54	-0,160	-0,31	-0,39	
42	LwK 4.7	13,70	0,000	0,00	0,00	
43	LwK 4.4	14,70	1,000	1,91	2,42	
44	LwK 4.5	13,70	0,000	0,00	0,00	
46	LwK 4.5	14,00	0,300	0,57	0,73	
47	LwK 4.5	13,66	-0,040	-0,08	-0,10	
48	LwK 4.5	14,10	0,400	0,77	0,97	
50	LwK 4.7	13,86	0,160	0,31	0,39	
52	LwK 4.5	13,57	-0,130	-0,25	-0,31	
53	LwK 4.5	13,40	-0,300	-0,57	-0,73	
55	LwK 4.5	13,70	0,000	0,00	0,00	
56	LwK 4.5	13,53	-0,170	-0,33	-0,41	
57	LwK 4.5	13,60	-0,100	-0,19	-0,24	
60	LwK 4.4	16,50	2,800	5,36	6,78	(**)
61	LwK 4.7	13,50	-0,200	-0,38	-0,48	
64	LwK 4.4	13,95	0,250	0,48	0,61	
67	LwK 4.4	13,90	0,200	0,38	0,48	
74	LwK 4.4	15,20	1,500	2,87	3,63	
75	LwK 4.4	16,20	2,500	4,78	6,06	(**)
77	LwK 4.4	14,59	0,890	1,70	2,16	
81	LwK 4.5	13,40	-0,300	-0,57	-0,73	
92	LwK 4.5	13,04	-0,660	-1,26	-1,60	
94	LwK 4.7	13,80	0,100	0,19	0,24	
101	LwK 4.4	15,10	1,400	2,68	3,39	
103	NMR	12,50	-1,200	-2,30	-2,91	
104	NMR	13,21	-0,487	-0,93	-1,18	
105	NMR	13,66	-0,040	-0,08	-0,10	
106	NMR	11,93	-1,765	-3,38	-4,28	
107	NMR	14,32	0,620	1,19	1,50	

(\*\*) Diese Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der enzymatischen und HPLC-Werte ab.

**5.4.2 FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker**

Bewertungsbasis: Enzymatik und Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; verbindliche Bewertung

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
202	LwK 4.8	16,07	2,370	4,53	4,06	
203	LwK 4.8	14,27	0,570	1,09	0,98	
204	LwK 4.8	13,60	-0,101	-0,19	-0,17	
206	LwK 4.8	13,05	-0,650	-1,24	-1,11	
207	LwK 4.8	13,40	-0,300	-0,57	-0,51	
208	LwK 4.8	13,50	-0,200	-0,38	-0,34	
209	LwK 4.8	13,14	-0,560	-1,07	-0,96	
210	LwK 4.8	13,30	-0,400	-0,77	-0,68	
211	LwK 4.8	13,43	-0,270	-0,52	-0,46	
212	LwK 4.8	13,56	-0,140	-0,27	-0,24	
214	LwK 4.8	13,50	-0,200	-0,38	-0,34	
215	LwK 4.8	11,92	-1,780	-3,41	-3,05	
216	LwK 4.8	11,45	-2,250	-4,31	-3,85	
217	LwK 4.8	13,27	-0,430	-0,82	-0,74	
218	LwK 4.8	13,43	-0,270	-0,52	-0,46	
220	LwK 4.8	15,59	1,890	3,62	3,24	
221	LwK 4.8	14,38	0,680	1,30	1,16	
222	LwK 4.8	13,08	-0,620	-1,19	-1,06	
223	LwK 4.8	15,00	1,300	2,49	2,23	
224	LwK 4.8	13,81	0,110	0,21	0,19	
225	LwK 4.8	14,09	0,390	0,75	0,67	
226	LwK 4.8	12,70	-1,000	-1,91	-1,71	
227	LwK 4.8	14,75	1,050	2,01	1,80	
228	LwK 4.8	13,83	0,130	0,25	0,22	
229	LwK 4.8	13,06	-0,640	-1,22	-1,10	
232	LwK 4.8	12,71	-0,990	-1,89	-1,70	
234	LwK 4.8	13,70	0,000	0,00	0,00	
235	LwK 4.8	15,60	1,900	3,64	3,25	
236	LwK 4.8	13,54	-0,160	-0,31	-0,27	
237	LwK 4.8	14,10	0,400	0,77	0,68	
240	LwK 4.8	14,98	1,280	2,45	2,19	
241	LwK 4.8	15,10	1,400	2,68	2,40	
242	LwK 4.8	14,61	0,910	1,74	1,56	
243	LwK 4.8	14,20	0,500	0,96	0,86	
244	LwK 4.8	14,09	0,390	0,75	0,67	
245	LwK 4.8	14,13	0,430	0,82	0,74	
246	LwK 4.8	14,40	0,700	1,34	1,20	
247	LwK 4.8	13,31	-0,390	-0,75	-0,67	
248	LwK 4.8	13,43	-0,270	-0,52	-0,46	
249	LwK 4.8	14,20	0,500	0,96	0,86	
250	LwK 4.8	13,39	-0,310	-0,59	-0,53	
251	LwK 4.8	12,61	-1,090	-2,09	-1,87	
252	LwK 4.8	13,83	0,130	0,25	0,22	
254	LwK 4.8	14,60	0,900	1,72	1,54	
255	LwK 4.8	13,00	-0,700	-1,34	-1,20	
256	LwK 4.8	13,10	-0,600	-1,15	-1,03	
257	LwK 4.8	13,58	-0,120	-0,23	-0,21	
258	LwK 4.8	13,77	0,070	0,13	0,12	
259	LwK 4.8	14,43	0,730	1,40	1,25	
260	LwK 4.8	14,40	0,700	1,34	1,20	
261	LwK 4.8	13,70	0,000	0,00	0,00	
262	LwK 4.8	13,50	-0,200	-0,38	-0,34	
263	LwK 4.8	13,30	-0,400	-0,77	-0,68	
264	LwK 4.8	14,80	1,100	2,10	1,88	
265	LwK 4.8	12,78	-0,920	-1,76	-1,58	
266	LwK 4.8	13,84	0,140	0,27	0,24	
267	LwK 4.8	13,92	0,220	0,42	0,38	
268	LwK 4.8	13,50	-0,200	-0,38	-0,34	
269	LwK 4.8	14,50	0,800	1,53	1,37	
270	LwK 4.8	12,60	-1,100	-2,10	-1,88	
271	LwK 4.8	15,30	1,600	3,06	2,74	
272	LwK 4.8	14,80	1,100	2,10	1,88	
273	LwK 4.8	13,51	-0,190	-0,36	-0,33	
274	LwK 4.8	13,72	0,020	0,04	0,03	

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
275	LwK 4.8	14,90	1,200	2,30	2,05	
276	LwK 4.8	13,80	0,100	0,19	0,17	
277	LwK 4.8	12,60	-1,100	-2,10	-1,88	
278	LwK 4.8	12,80	-0,900	-1,72	-1,54	
279	LwK 4.8	13,34	-0,360	-0,69	-0,62	
280	LwK 4.8	12,00	-1,700	-3,25	-2,91	
281	LwK 4.8	12,66	-1,040	-1,99	-1,78	
282	LwK 4.8	13,85	0,150	0,29	0,26	
283	LwK 4.8	13,60	-0,100	-0,19	-0,17	
284	LwK 4.8	9,68	-4,020	-7,69	-6,88	(**)
319	LwK 4.8	13,40	-0,300	-0,57	-0,51	
320	LwK 4.8	14,29	0,590	1,13	1,01	
336	LwK 4.8	13,67	-0,030	-0,06	-0,05	
337	LwK 4.8	14,00	0,300	0,57	0,51	
349	LwK 4.8	13,90	0,200	0,38	0,34	
364	LwK 4.8	15,00	1,300	2,49	2,23	
368	LwK 4.8	13,65	-0,050	-0,10	-0,09	

(\*\*) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom maßgeblichen Median ab.

**5.4.3 Reduktometrische Laborergebnisse**

(Bewertungsbasis: reduktometrische Verfahren; informative Bewertung)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
11	LwK 4.1	14,10	-0,545	-0,99	-1,24	
23	LwK 4.4	14,20	-0,445	-0,80	-1,02	
27	LwK 4.4	14,80	0,155	0,28	0,35	
37	LwK 4.3	13,29	-1,355	-2,45	-3,09	
43	LwK 4.4	14,70	0,055	0,10	0,13	
60	LwK 4.4	16,50	1,855	3,35	4,23	
64	LwK 4.4	13,95	-0,695	-1,26	-1,59	
67	LwK 4.4	13,90	-0,745	-1,35	-1,70	
74	LwK 4.4	15,20	0,555	1,00	1,27	
75	LwK 4.4	16,20	1,555	2,81	3,55	
77	LwK 4.4	14,59	-0,055	-0,10	-0,13	
101	LwK 4.4	15,10	0,455	0,82	1,04	

**5.4.4 FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker(r)**

(Bewertungsbasis: reduktometrische Verfahren; informative Bewertung)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
202	LwK 4.8	16,07	1,425	2,58	2,44	
203	LwK 4.8	14,27	-0,375	-0,68	-0,64	
204	LwK 4.8	13,60	-1,046	-1,89	-1,79	
206	LwK 4.8	13,05	-1,595	-2,88	-2,73	
207	LwK 4.8	13,40	-1,245	-2,25	-2,13	
208	LwK 4.8	13,50	-1,145	-2,07	-1,96	
209	LwK 4.8	13,14	-1,505	-2,72	-2,58	
210	LwK 4.8	13,30	-1,345	-2,43	-2,30	
211	LwK 4.8	13,43	-1,215	-2,20	-2,08	
212	LwK 4.8	13,56	-1,085	-1,96	-1,86	
214	LwK 4.8	13,50	-1,145	-2,07	-1,96	
215	LwK 4.8	11,92	-2,725	-4,93	-4,67	
216	LwK 4.8	11,45	-3,195	-5,78	-5,47	(**)
217	LwK 4.8	13,27	-1,375	-2,49	-2,35	
218	LwK 4.8	13,43	-1,215	-2,20	-2,08	
220	LwK 4.8	15,59	0,945	1,71	1,62	
221	LwK 4.8	14,38	-0,265	-0,48	-0,45	
222	LwK 4.8	13,08	-1,565	-2,83	-2,68	

(\*\*) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom maßgeblichen Median ab.

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker(r)**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
223	LwK 4.8	15,00	0,355	0,64	0,61	
224	LwK 4.8	13,81	-0,835	-1,51	-1,43	
225	LwK 4.8	14,09	-0,555	-1,00	-0,95	
226	LwK 4.8	12,70	-1,945	-3,52	-3,33	
227	LwK 4.8	14,75	0,105	0,19	0,18	
228	LwK 4.8	13,83	-0,815	-1,47	-1,40	
229	LwK 4.8	13,06	-1,585	-2,87	-2,71	
232	LwK 4.8	12,71	-1,935	-3,50	-3,31	
234	LwK 4.8	13,70	-0,945	-1,71	-1,62	
235	LwK 4.8	15,60	0,955	1,73	1,64	
236	LwK 4.8	13,54	-1,105	-2,00	-1,89	
237	LwK 4.8	14,10	-0,545	-0,99	-0,93	
240	LwK 4.8	14,98	0,335	0,61	0,57	
241	LwK 4.8	15,10	0,455	0,82	0,78	
242	LwK 4.8	14,61	-0,035	-0,06	-0,06	
243	LwK 4.8	14,20	-0,445	-0,80	-0,76	
244	LwK 4.8	14,09	-0,555	-1,00	-0,95	
245	LwK 4.8	14,13	-0,515	-0,93	-0,88	
246	LwK 4.8	14,40	-0,245	-0,44	-0,42	
247	LwK 4.8	13,31	-1,335	-2,41	-2,29	
248	LwK 4.8	13,43	-1,215	-2,20	-2,08	
249	LwK 4.8	14,20	-0,445	-0,80	-0,76	
250	LwK 4.8	13,39	-1,255	-2,27	-2,15	
251	LwK 4.8	12,61	-2,035	-3,68	-3,48	
252	LwK 4.8	13,83	-0,815	-1,47	-1,40	
254	LwK 4.8	14,60	-0,045	-0,08	-0,08	
255	LwK 4.8	13,00	-1,645	-2,97	-2,82	
256	LwK 4.8	13,10	-1,545	-2,79	-2,65	
257	LwK 4.8	13,58	-1,065	-1,93	-1,82	
258	LwK 4.8	13,77	-0,875	-1,58	-1,50	
259	LwK 4.8	14,43	-0,215	-0,39	-0,37	
260	LwK 4.8	14,40	-0,245	-0,44	-0,42	
261	LwK 4.8	13,70	-0,945	-1,71	-1,62	
262	LwK 4.8	13,50	-1,145	-2,07	-1,96	
263	LwK 4.8	13,30	-1,345	-2,43	-2,30	
264	LwK 4.8	14,80	0,155	0,28	0,27	
265	LwK 4.8	12,78	-1,865	-3,37	-3,19	
266	LwK 4.8	13,84	-0,805	-1,46	-1,38	
267	LwK 4.8	13,92	-0,725	-1,31	-1,24	
268	LwK 4.8	13,50	-1,145	-2,07	-1,96	
269	LwK 4.8	14,50	-0,145	-0,26	-0,25	
270	LwK 4.8	12,60	-2,045	-3,70	-3,50	
271	LwK 4.8	15,30	0,655	1,18	1,12	
272	LwK 4.8	14,80	0,155	0,28	0,27	
273	LwK 4.8	13,51	-1,135	-2,05	-1,94	
274	LwK 4.8	13,72	-0,925	-1,67	-1,58	
275	LwK 4.8	14,90	0,255	0,46	0,44	
276	LwK 4.8	13,80	-0,845	-1,53	-1,45	
277	LwK 4.8	12,60	-2,045	-3,70	-3,50	
278	LwK 4.8	12,80	-1,845	-3,34	-3,16	
279	LwK 4.8	13,34	-1,305	-2,36	-2,23	
280	LwK 4.8	12,00	-2,645	-4,78	-4,53	
281	LwK 4.8	12,66	-1,985	-3,59	-3,40	
282	LwK 4.8	13,85	-0,795	-1,44	-1,36	
283	LwK 4.8	13,60	-1,045	-1,89	-1,79	
284	LwK 4.8	9,68	-4,965	-8,98	-8,50	(**)
319	LwK 4.8	13,40	-1,245	-2,25	-2,13	
320	LwK 4.8	14,29	-0,355	-0,64	-0,61	
336	LwK 4.8	13,67	-0,975	-1,76	-1,67	
337	LwK 4.8	14,00	-0,645	-1,17	-1,10	
349	LwK 4.8	13,90	-0,745	-1,35	-1,28	
364	LwK 4.8	15,00	0,355	0,64	0,61	
368	LwK 4.8	13,65	-0,995	-1,80	-1,70	

(\*\*) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom maßgeblichen Median ab.

**5.4.5 FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker (S)**

Bewertungsbasis: Enzymatik und Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; informative Bewertung

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 4.8	13,32	-0,380	-0,73	-0,65	
202	LwK 4.8	13,46	-0,240	-0,46	-0,41	
203	LwK 4.8	14,48	0,780	1,49	1,34	
204	LwK 4.8	13,23	-0,473	-0,91	-0,81	
205	LwK 4.8	13,60	-0,100	-0,19	-0,17	
206	LwK 4.8	13,06	-0,640	-1,22	-1,10	
207	LwK 4.8	12,30	-1,400	-2,68	-2,40	
208	LwK 4.8	13,50	-0,200	-0,38	-0,34	
209	LwK 4.8	13,14	-0,560	-1,07	-0,96	
210	LwK 4.8	13,30	-0,400	-0,77	-0,68	
211	LwK 4.8	12,41	-1,290	-2,47	-2,21	
212	LwK 4.8	13,28	-0,420	-0,80	-0,72	
214	LwK 4.8	13,30	-0,400	-0,77	-0,68	
215	LwK 4.8	13,43	-0,270	-0,52	-0,46	
216	LwK 4.8	12,85	-0,850	-1,63	-1,46	
217	LwK 4.8	12,51	-1,190	-2,28	-2,04	
218	LwK 4.8	13,17	-0,530	-1,01	-0,91	
219	LwK 4.8	15,20	1,500	2,87	2,57	
220	LwK 4.8	13,42	-0,280	-0,54	-0,48	
221	LwK 4.8	13,74	0,040	0,08	0,07	
222	LwK 4.8	14,30	0,600	1,15	1,03	
223	LwK 4.8	14,20	0,500	0,96	0,86	
224	LwK 4.8	13,40	-0,300	-0,57	-0,51	
225	LwK 4.8	13,78	0,080	0,15	0,14	
226	LwK 4.8	13,40	-0,300	-0,57	-0,51	
227	LwK 4.8	13,23	-0,470	-0,90	-0,80	
228	LwK 4.8	13,72	0,020	0,04	0,03	
229	LwK 4.8	13,51	-0,190	-0,36	-0,33	
231	LwK 4.8	13,40	-0,300	-0,57	-0,51	
232	LwK 4.8	12,71	-0,990	-1,89	-1,70	
234	LwK 4.8	13,97	0,270	0,52	0,46	
235	LwK 4.8	14,00	0,300	0,57	0,51	
236	LwK 4.8	13,12	-0,580	-1,11	-0,99	
237	LwK 4.8	14,80	1,100	2,10	1,88	
240	LwK 4.8	13,33	-0,370	-0,71	-0,63	
241	LwK 4.8	12,70	-1,000	-1,91	-1,71	
242	LwK 4.8	13,46	-0,240	-0,46	-0,41	
243	LwK 4.8	14,30	0,600	1,15	1,03	
244	LwK 4.8	15,20	1,500	2,87	2,57	
245	LwK 4.8	13,44	-0,260	-0,50	-0,45	
246	LwK 4.8	13,20	-0,500	-0,96	-0,86	
247	LwK 4.8	13,77	0,070	0,13	0,12	
249	LwK 4.8	14,20	0,500	0,96	0,86	
250	LwK 4.8	13,26	-0,440	-0,84	-0,75	
251	LwK 4.8	12,61	-1,090	-2,09	-1,87	
252	LwK 4.8	13,80	0,100	0,19	0,17	
254	LwK 4.8	13,20	-0,500	-0,96	-0,86	
256	LwK 4.8	12,70	-1,000	-1,91	-1,71	
257	LwK 4.8	13,59	-0,110	-0,21	-0,19	
258	LwK 4.8	11,89	-1,810	-3,46	-3,10	
259	LwK 4.8	12,50	-1,200	-2,30	-2,05	
260	LwK 4.8	12,70	-1,000	-1,91	-1,71	
261	LwK 4.8	14,30	0,600	1,15	1,03	
262	LwK 4.8	13,70	0,000	0,00	0,00	
263	LwK 4.8	13,40	-0,300	-0,57	-0,51	
264	LwK 4.8	13,70	0,000	0,00	0,00	
265	LwK 4.8	13,41	-0,290	-0,55	-0,50	
266	LwK 4.8	12,80	-0,900	-1,72	-1,54	
267	LwK 4.8	13,43	-0,270	-0,52	-0,46	
268	LwK 4.8	13,45	-0,250	-0,48	-0,43	
270	LwK 4.8	13,20	-0,500	-0,96	-0,86	
271	LwK 4.8	13,75	0,050	0,10	0,09	
272	LwK 4.8	14,00	0,300	0,57	0,51	
273	LwK 4.8	13,70	0,000	0,00	0,00	

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker (S)**

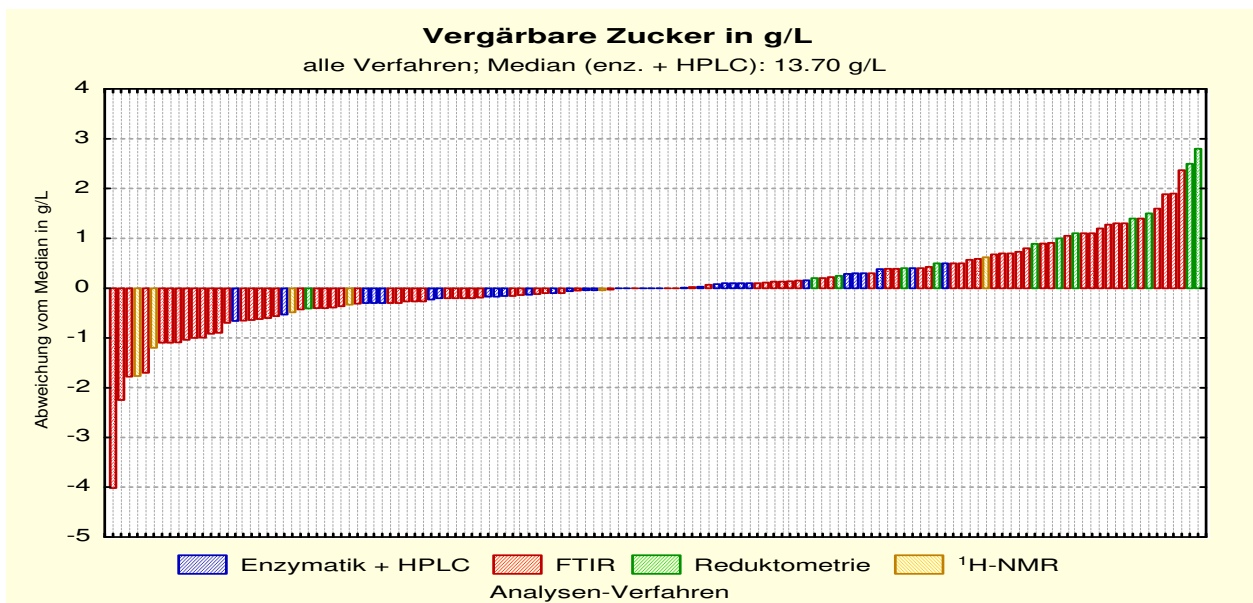
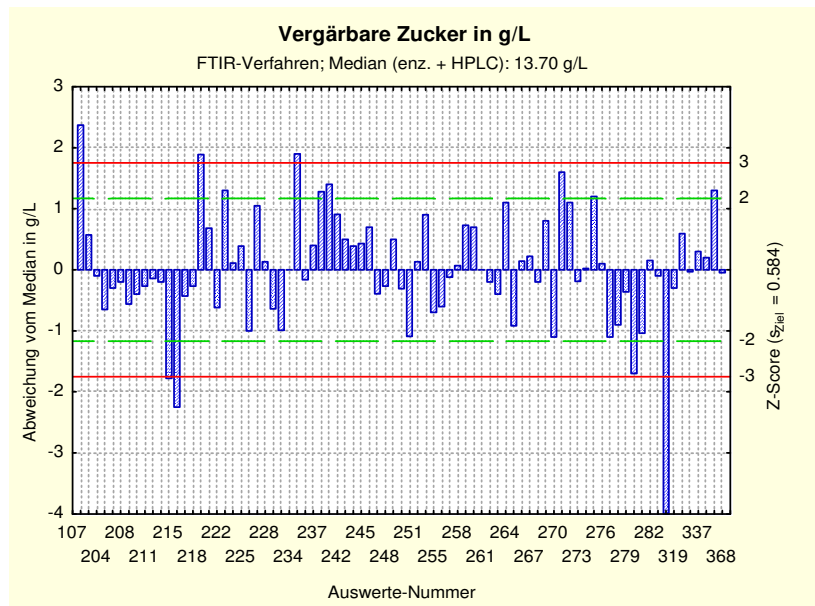
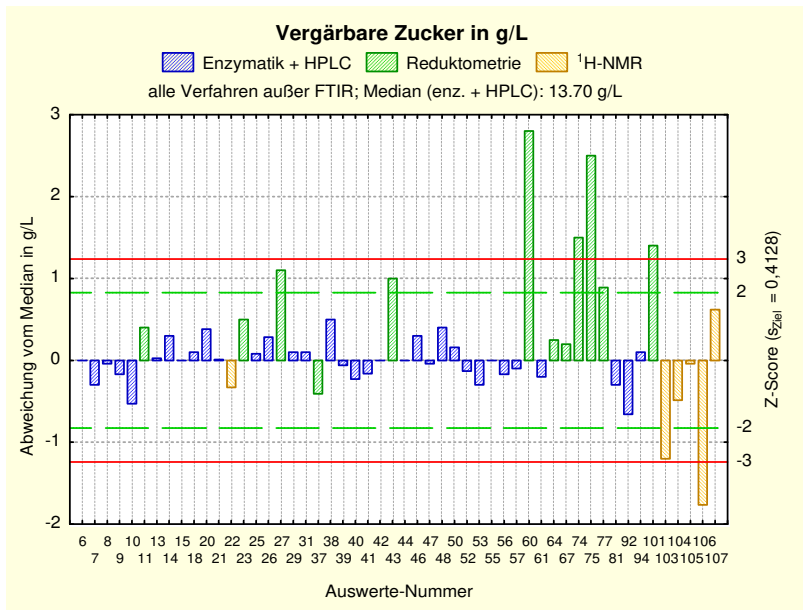
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
275	LwK 4.8	13,70	0,000	0,00	0,00	
276	LwK 4.8	12,20	-1,500	-2,87	-2,57	
277	LwK 4.8	12,59	-1,110	-2,12	-1,90	
278	LwK 4.8	14,20	0,500	0,96	0,86	
279	LwK 4.8	14,25	0,550	1,05	0,94	
280	LwK 4.8	12,10	-1,600	-3,06	-2,74	
281	LwK 4.8	12,66	-1,040	-1,99	-1,78	
282	LwK 4.8	12,64	-1,060	-2,03	-1,82	
283	LwK 4.8	12,50	-1,200	-2,30	-2,05	
284	LwK 4.8	12,73	-0,970	-1,86	-1,66	
312	LwK 4.8	11,99	-1,710	-3,27	-2,93	
319	LwK 4.8	13,50	-0,200	-0,38	-0,34	
320	LwK 4.8	13,44	-0,260	-0,50	-0,45	
323	LwK 4.8	13,80	0,100	0,19	0,17	
336	LwK 4.8	14,60	0,900	1,72	1,54	
337	LwK 4.8	14,10	0,400	0,77	0,68	
343	LwK 4.8	14,31	0,610	1,17	1,04	
349	LwK 4.8	14,20	0,500	0,96	0,86	
364	LwK 4.8	13,40	-0,300	-0,57	-0,51	

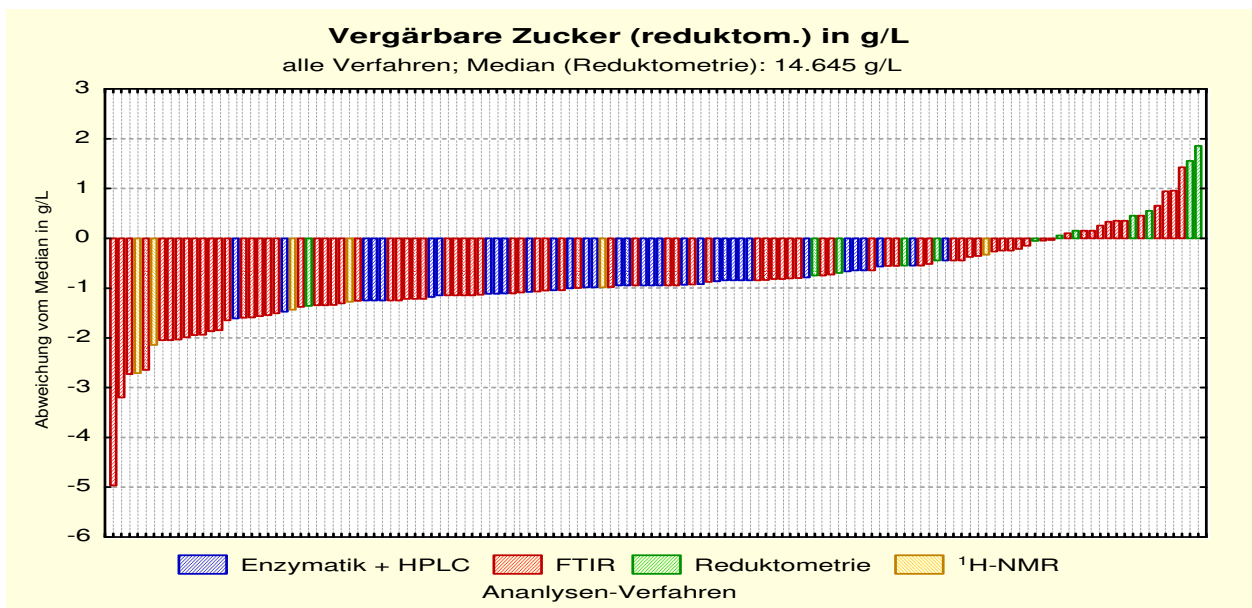
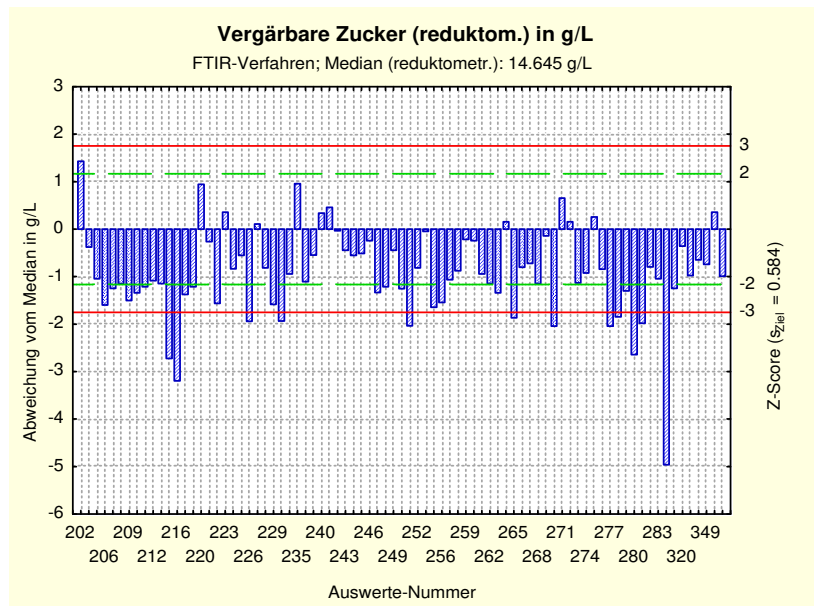
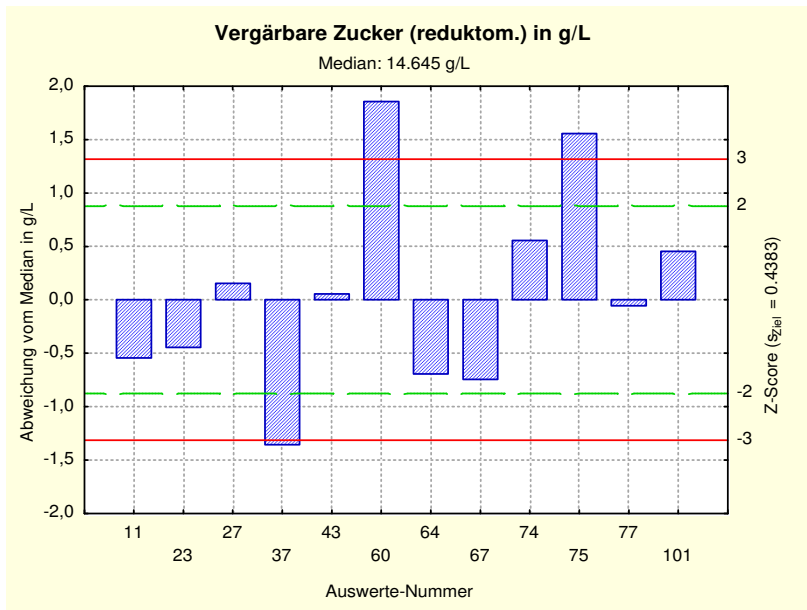
**5.4.6 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse für Vergärbare Zucker [g/L]	HPLC + enzymat.	Reduktometrisch
	alle Daten	alle Daten
Gültige Werte	34	12
Minimalwert	13,04	13,29
Mittelwert	13,684	14,711
Median	13,700	14,645
Maximalwert	14,20	16,50
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,251	0,940
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,043	0,271
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,523	0,553
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,413	0,438
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{Ü\ FTIR}$ )	0,584	0,584
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	0,48	1,70
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	0,61	2,14
Quotient ( $s_L/s_{Ü\ FTIR}$ )	0,43	1,61
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,08	0,49
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,10	0,62
Quotient ( $u_M/s_{Ü\ FTIR}$ )	0,07	0,46

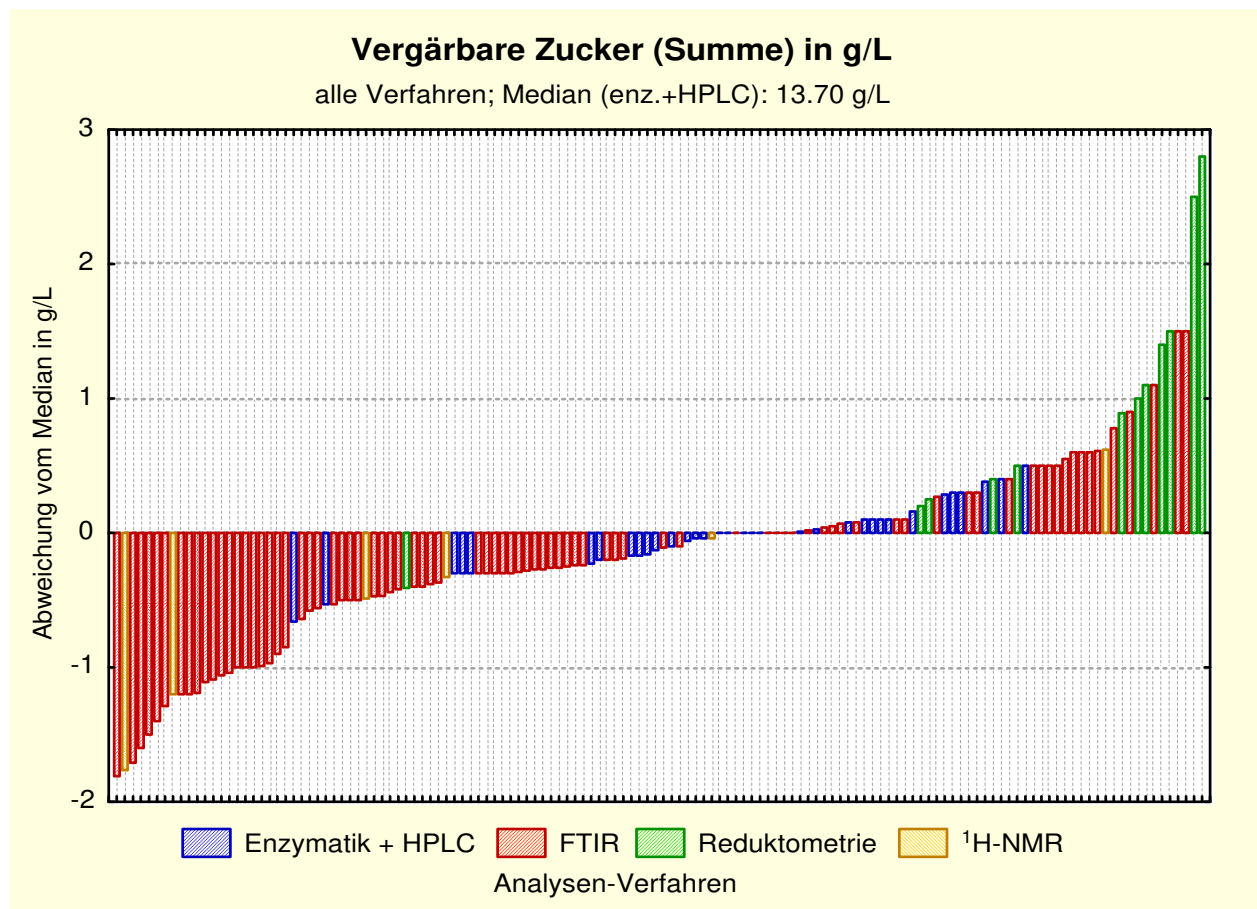
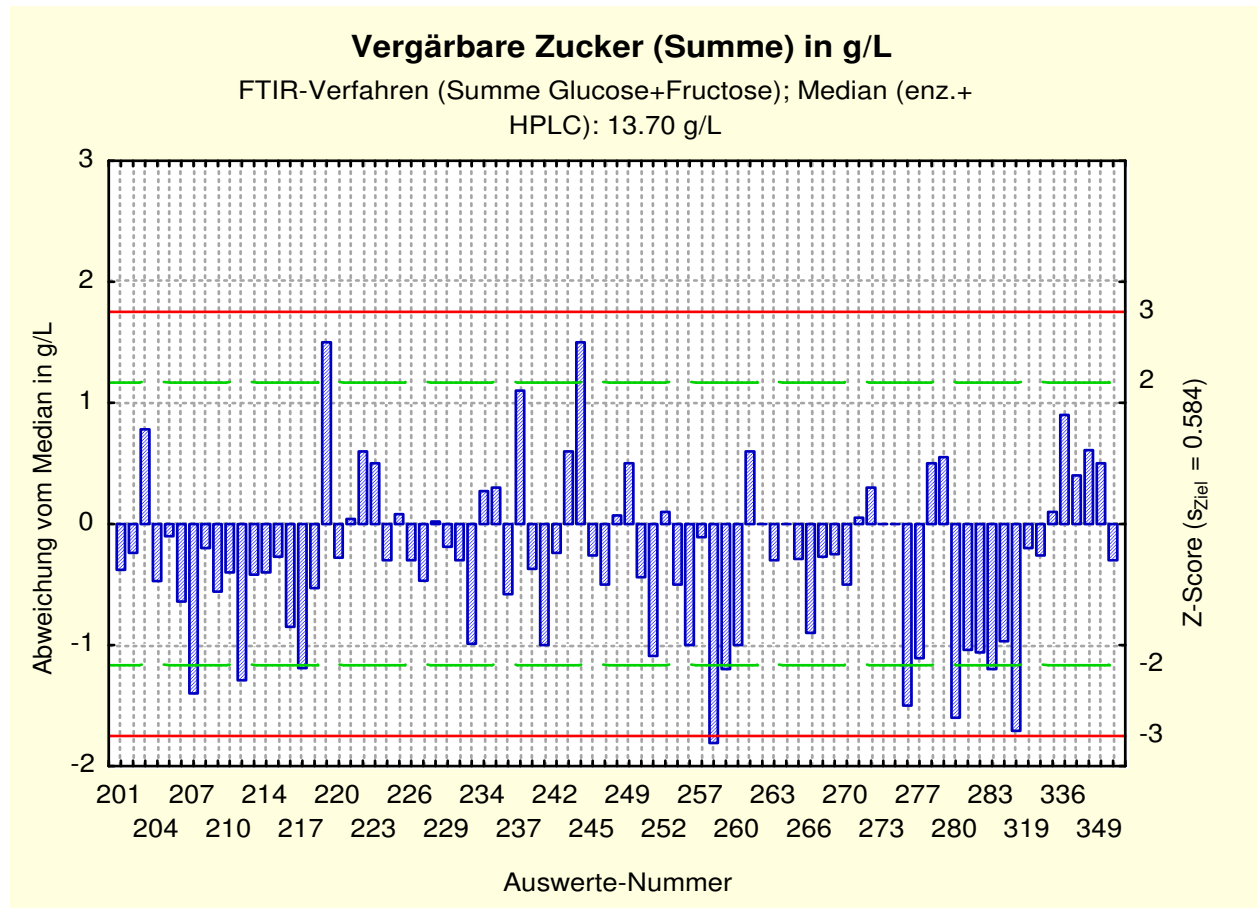
**5.4.7 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 4.1	Bestimmung n. Luff-Schoorl; OIV-MA-AS311-01A	1	14,100	
LwK 4.3	Schnellmethode n. Dr. Jakob	1	13,290	
LwK 4.4	Schnellmethode n. Dr. Rebelein	10	14,885	0,933
	reduktometrische Verfahren	12	14,686	0,997
LwK 4.5	Enzymatische Methode; OIV-MA-AS311-02	24	13,645	0,251
LwK 4.7	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; OIV-MA-AS311-03	10	13,776	0,177
	enzymatische und HPLC-Verfahren	34	13,690	0,236
LwK 4.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie			
	Basis: Vergärbare Zucker(r)	82	13,738	0,807
	Basis: Vergärbare Zucker(S)	84	13,412	0,653
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	6	13,177	0,938









## 5.5 Glucose [g/L]

### 5.5.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enzymat. Hand	6,79	0,005	0,02	0,02	
06	enzymat., autom.	6,83	0,045	0,16	0,20	
08	enzymat. Hand	6,90	0,115	0,40	0,51	
09	enzymat. Hand	6,84	0,055	0,19	0,24	
10	enzymat., autom.	6,74	-0,045	-0,16	-0,20	
11	enzymat., autom.	6,96	0,175	0,61	0,77	
13	HPLC	6,63	-0,153	-0,53	-0,68	
14	enzymat., autom.	6,89	0,105	0,36	0,46	
15	enzymat., autom.	6,96	0,175	0,61	0,77	
18	HPLC	6,69	-0,095	-0,33	-0,42	
20	HPLC	6,28	-0,505	-1,76	-2,23	
21	HPLC	6,60	-0,185	-0,64	-0,82	
22	NMR	6,87	0,085	0,30	0,38	
25	enzymat., autom.	6,55	-0,235	-0,82	-1,04	
26	HPLC	6,94	0,152	0,53	0,67	
29	enzymat., autom.	6,91	0,125	0,43	0,55	
31	enzymat., autom.	6,85	0,061	0,21	0,27	
38	enzymat., autom.	6,70	-0,085	-0,30	-0,38	
39	HPLC	6,34	-0,445	-1,55	-1,97	
40	enzymat., autom.	6,54	-0,245	-0,85	-1,08	
41	enzymat., autom.	6,84	0,055	0,19	0,24	
42	HPLC	6,56	-0,227	-0,79	-1,00	
44	enzymat., autom.	6,38	-0,405	-1,41	-1,79	
47	enzymat., autom.	6,82	0,035	0,12	0,15	
48	enzymat., autom.	6,70	-0,085	-0,30	-0,38	
50	HPLC	6,33	-0,455	-1,58	-2,01	
52	enzymat., autom.	6,81	0,025	0,09	0,11	
53	enzymat., autom.	6,66	-0,125	-0,43	-0,55	
56	enzymat., autom.	6,83	0,045	0,16	0,20	
57	enzymat., autom.	6,74	-0,045	-0,16	-0,20	
61	HPLC	6,50	-0,285	-0,99	-1,26	
64	enzymat. Hand	6,85	0,065	0,23	0,29	
69	enzymat., autom.	6,92	0,136	0,47	0,60	
81	enzymat. Hand	6,78	-0,005	-0,02	-0,02	
84	HPLC	6,90	0,115	0,40	0,51	
85	HPLC	6,28	-0,505	-1,76	-2,23	
86	enzymat. Hand	6,93	0,145	0,50	0,64	
88	enzymat., autom.	7,04	0,255	0,89	1,13	
92	enzymat., autom.	6,59	-0,195	-0,68	-0,86	
94	HPLC	6,36	-0,425	-1,48	-1,88	
101	enzymat. Hand	7,06	0,275	0,96	1,22	
103	NMR	6,30	-0,485	-1,69	-2,15	
104	NMR	6,80	0,012	0,04	0,05	
105	NMR	7,26	0,475	1,65	2,10	
106	NMR	6,08	-0,706	-2,45	-3,12	
107	NMR	6,99	0,209	0,73	0,92	

### 5.5.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	6,89	0,105	0,36	0,26	
202	FTIR	6,59	-0,195	-0,68	-0,48	
203	FTIR	7,34	0,555	1,93	1,36	
204	FTIR	6,63	-0,150	-0,52	-0,37	
205	FTIR	7,40	0,615	2,14	1,51	
206	FTIR	6,61	-0,175	-0,61	-0,43	
207	FTIR	7,10	0,315	1,09	0,77	
208	FTIR	7,00	0,215	0,75	0,53	
209	FTIR	6,58	-0,205	-0,71	-0,50	
210	FTIR	6,65	-0,135	-0,47	-0,33	
211	FTIR	6,13	-0,655	-2,28	-1,61	
212	FTIR	6,67	-0,115	-0,40	-0,28	

**Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
214	FTIR	6,80	0,015	0,05	0,04	
215	FTIR	6,49	-0,295	-1,03	-0,72	
216	FTIR	6,14	-0,645	-2,24	-1,58	
217	FTIR	6,01	-0,775	-2,69	-1,90	
218	FTIR	6,30	-0,485	-1,69	-1,19	
219	FTIR	8,70	1,915	6,66	4,69	
220	FTIR	5,96	-0,825	-2,87	-2,02	
221	FTIR	6,12	-0,665	-2,31	-1,63	
222	FTIR	7,10	0,315	1,09	0,77	
223	FTIR	7,00	0,215	0,75	0,53	
224	FTIR	6,40	-0,385	-1,34	-0,94	
225	FTIR	6,16	-0,625	-2,17	-1,53	
226	FTIR	6,90	0,115	0,40	0,28	
227	FTIR	6,79	0,005	0,02	0,01	
228	FTIR	7,49	0,705	2,45	1,73	
229	FTIR	6,80	0,015	0,05	0,04	
231	FTIR	6,50	-0,285	-0,99	-0,70	
232	FTIR	6,66	-0,125	-0,43	-0,31	
234	FTIR	6,93	0,145	0,50	0,36	
235	FTIR	6,80	0,015	0,05	0,04	
236	FTIR	6,58	-0,205	-0,71	-0,50	
237	FTIR	8,40	1,615	5,61	3,96	
240	FTIR	6,26	-0,525	-1,82	-1,29	
241	FTIR	7,10	0,315	1,09	0,77	
242	FTIR	6,24	-0,545	-1,89	-1,34	
243	FTIR	7,50	0,715	2,49	1,75	
244	FTIR	7,02	0,235	0,82	0,58	
245	FTIR	6,44	-0,345	-1,20	-0,85	
246	FTIR	6,30	-0,485	-1,69	-1,19	
247	FTIR	6,47	-0,315	-1,09	-0,77	
249	FTIR	7,10	0,315	1,09	0,77	
250	FTIR	6,08	-0,705	-2,45	-1,73	
251	FTIR	6,25	-0,535	-1,86	-1,31	
252	FTIR	6,86	0,075	0,26	0,18	
254	FTIR	6,70	-0,085	-0,30	-0,21	
256	FTIR	6,50	-0,285	-0,99	-0,70	
257	FTIR	6,66	-0,125	-0,43	-0,31	
258	FTIR	5,26	-1,525	-5,30	-3,74	
259	FTIR	5,94	-0,845	-2,94	-2,07	
260	FTIR	6,70	-0,085	-0,30	-0,21	
261	FTIR	7,30	0,515	1,79	1,26	
262	FTIR	7,40	0,615	2,14	1,51	
263	FTIR	7,00	0,215	0,75	0,53	
264	FTIR	6,60	-0,185	-0,64	-0,45	
265	FTIR	6,99	0,205	0,71	0,50	
266	FTIR	6,37	-0,415	-1,44	-1,02	
267	FTIR	7,06	0,275	0,96	0,67	
268	FTIR	6,15	-0,635	-2,21	-1,56	
270	FTIR	7,00	0,215	0,75	0,53	
271	FTIR	7,44	0,655	2,28	1,61	
272	FTIR	6,40	-0,385	-1,34	-0,94	
273	FTIR	6,60	-0,185	-0,64	-0,45	
275	FTIR	6,80	0,015	0,05	0,04	
276	FTIR	6,20	-0,585	-2,03	-1,43	
277	FTIR	6,52	-0,265	-0,92	-0,65	
278	FTIR	7,78	0,995	3,46	2,44	
279	FTIR	7,64	0,855	2,97	2,10	
280	FTIR	5,70	-1,085	-3,77	-2,66	
281	FTIR	6,33	-0,455	-1,58	-1,12	
282	FTIR	6,11	-0,675	-2,35	-1,65	
283	FTIR	6,00	-0,785	-2,73	-1,92	
284	FTIR	6,68	-0,105	-0,36	-0,26	
312	FTIR	5,45	-1,335	-4,64	-3,27	
319	FTIR	6,80	0,015	0,05	0,04	
320	FTIR	5,87	-0,915	-3,18	-2,24	
323	FTIR	7,30	0,515	1,79	1,26	

**Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse**

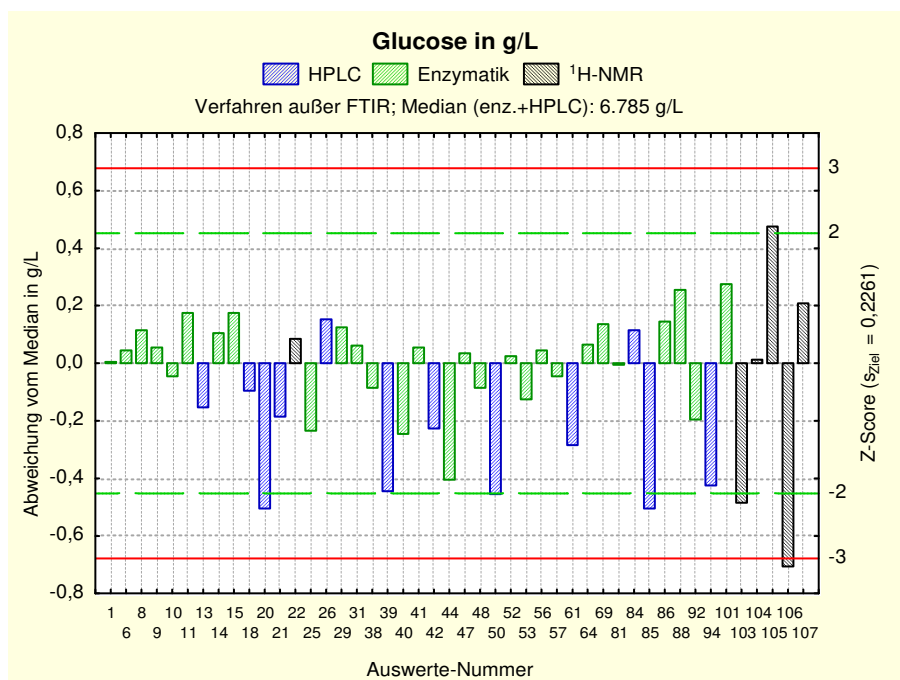
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
336	FTIR	7,10	0,315	1,09	0,77	
337	FTIR	6,40	-0,385	-1,34	-0,94	
343	FTIR	7,65	0,865	3,01	2,12	
349	FTIR	7,10	0,315	1,09	0,77	
364	FTIR	6,20	-0,585	-2,03	-1,43	

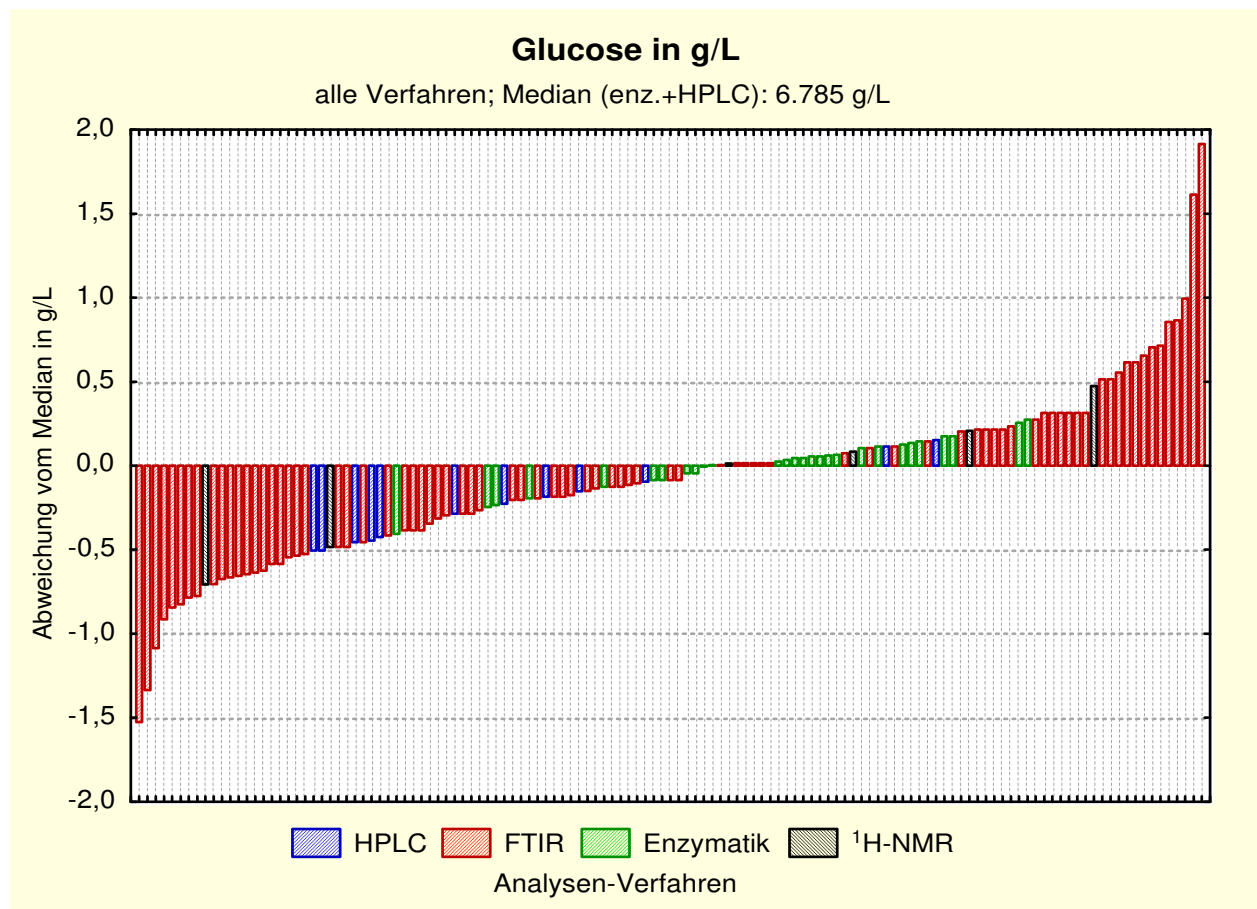
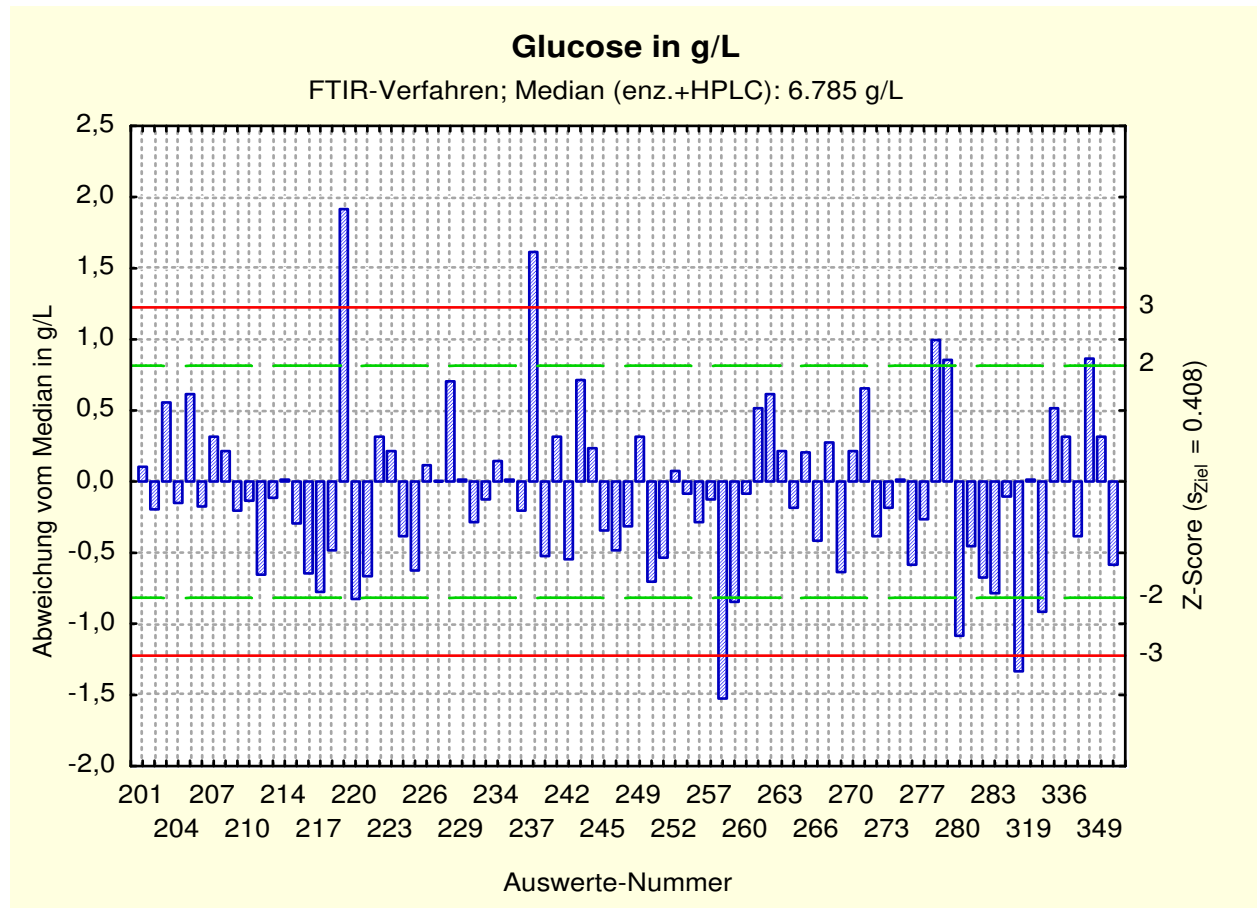
**5.5.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse für Glucose [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	40
Minimalwert	6,28
Mittelwert	6,720
Median	6,785
Maximalwert	7,06
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,216
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,034
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,288
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp herk.</sub> )	0,226
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,408
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	0,75
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	0,95
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,53
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,12
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	0,15
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,08

**5.5.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	OIV-MA-AS311-03; Hochleistungsflüssigkeitschromatographie;	12	6,532	0,255
enzymat. autom.	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, automatisiert	21	6,782	0,164
enzymat. Hand	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, manuell	7	6,871	0,092
	herkömmliche Verfahren	40	6,730	0,224
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	83	6,679	0,532
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	6	6,734	0,470





## 5.6 Fructose [g/L]

### 5.6.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enzymat. Hand	7,43	0,580	2,00	2,55	
06	enzymat., autom.	6,86	0,010	0,03	0,04	
08	enzymat. Hand	6,76	-0,090	-0,31	-0,39	
09	enzymat. Hand	6,69	-0,160	-0,55	-0,70	
10	enzymat., autom.	6,43	-0,420	-1,45	-1,84	
11	enzymat., autom.	6,71	-0,140	-0,48	-0,61	
13	HPLC	7,09	0,244	0,84	1,07	
14	enzymat., autom.	7,16	0,310	1,07	1,36	
15	enzymat., autom.	6,73	-0,116	-0,40	-0,51	
18	HPLC	7,09	0,240	0,83	1,05	
20	HPLC	7,80	0,950	3,28	4,17	
21	HPLC	7,11	0,260	0,90	1,14	
22	NMR	6,56	-0,290	-1,00	-1,27	
25	enzymat., autom.	7,23	0,380	1,31	1,67	
26	HPLC	7,05	0,197	0,68	0,87	
29	enzymat., autom.	6,82	-0,030	-0,10	-0,13	
31	enzymat., autom.	6,91	0,063	0,22	0,28	
38	enzymat., autom.	7,51	0,660	2,28	2,90	
39	HPLC	7,30	0,450	1,55	1,97	
40	enzymat., autom.	6,93	0,080	0,28	0,35	
41	enzymat., autom.	6,70	-0,155	-0,53	-0,68	
42	HPLC	7,17	0,316	1,09	1,39	
44	enzymat., autom.	7,32	0,470	1,62	2,06	
47	enzymat., autom.	6,84	-0,010	-0,03	-0,04	
48	enzymat., autom.	7,00	0,150	0,52	0,66	
50	HPLC	7,53	0,680	2,34	2,98	
52	enzymat., autom.	6,80	-0,050	-0,17	-0,22	
53	enzymat., autom.	6,67	-0,180	-0,62	-0,79	
56	enzymat., autom.	6,70	-0,150	-0,52	-0,66	
57	enzymat., autom.	6,82	-0,032	-0,11	-0,14	
61	HPLC	7,00	0,150	0,52	0,66	
64	enzymat. Hand	6,58	-0,270	-0,93	-1,18	
69	enzymat., autom.	6,77	-0,078	-0,27	-0,34	
81	enzymat. Hand	6,62	-0,230	-0,79	-1,01	
84	HPLC	7,30	0,450	1,55	1,97	
85	HPLC	6,46	-0,390	-1,34	-1,71	
86	enzymat. Hand	6,77	-0,080	-0,28	-0,35	
88	enzymat., autom.	6,66	-0,190	-0,66	-0,83	
92	enzymat., autom.	6,45	-0,400	-1,38	-1,76	
94	HPLC	7,36	0,510	1,76	2,24	
101	enzymat. Hand	6,76	-0,088	-0,30	-0,39	
103	NMR	6,20	-0,650	-2,24	-2,85	
104	NMR	6,42	-0,434	-1,50	-1,91	
105	NMR	6,40	-0,450	-1,55	-1,97	
106	NMR	5,86	-0,994	-3,43	-4,36	
107	NMR	7,33	0,476	1,64	2,09	

### 5.6.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	6,43	-0,420	-1,45	-1,27	
202	FTIR	6,87	0,020	0,07	0,06	
203	FTIR	7,14	0,290	1,00	0,88	
204	FTIR	6,59	-0,258	-0,89	-0,78	
205	FTIR	6,20	-0,650	-2,24	-1,97	
206	FTIR	6,45	-0,400	-1,38	-1,21	
207	FTIR	5,20	-1,650	-5,69	-5,00	(**)
208	FTIR	6,50	-0,350	-1,21	-1,06	
209	FTIR	6,56	-0,290	-1,00	-0,88	
210	FTIR	6,65	-0,200	-0,69	-0,61	
211	FTIR	6,28	-0,570	-1,97	-1,73	

(\*\*) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score vom Median der herkömmlichen Werte ab.

**Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
212	FTIR	6,61	-0,240	-0,83	-0,73	
214	FTIR	6,50	-0,350	-1,21	-1,06	
215	FTIR	6,94	0,090	0,31	0,27	
216	FTIR	6,71	-0,140	-0,48	-0,42	
217	FTIR	6,50	-0,350	-1,21	-1,06	
218	FTIR	6,87	0,020	0,07	0,06	
219	FTIR	6,50	-0,350	-1,21	-1,06	
220	FTIR	7,46	0,610	2,10	1,85	
221	FTIR	7,62	0,770	2,65	2,33	
222	FTIR	7,20	0,350	1,21	1,06	
223	FTIR	7,20	0,350	1,21	1,06	
224	FTIR	7,00	0,150	0,52	0,45	
225	FTIR	7,62	0,770	2,65	2,33	
226	FTIR	6,50	-0,350	-1,21	-1,06	
227	FTIR	6,44	-0,410	-1,41	-1,24	
228	FTIR	6,23	-0,620	-2,14	-1,88	
229	FTIR	6,71	-0,140	-0,48	-0,42	
231	FTIR	6,90	0,050	0,17	0,15	
232	FTIR	6,05	-0,800	-2,76	-2,42	
234	FTIR	7,04	0,190	0,66	0,58	
235	FTIR	7,20	0,350	1,21	1,06	
236	FTIR	6,54	-0,310	-1,07	-0,94	
237	FTIR	6,40	-0,450	-1,55	-1,36	
240	FTIR	7,07	0,220	0,76	0,67	
241	FTIR	5,60	-1,250	-4,31	-3,79	
242	FTIR	7,22	0,370	1,28	1,12	
243	FTIR	6,80	-0,050	-0,17	-0,15	
244	FTIR	8,18	1,330	4,59	4,03	
245	FTIR	7,00	0,150	0,52	0,45	
246	FTIR	6,90	0,050	0,17	0,15	
247	FTIR	7,30	0,450	1,55	1,36	
249	FTIR	7,10	0,250	0,86	0,76	
250	FTIR	7,18	0,330	1,14	1,00	
251	FTIR	6,36	-0,490	-1,69	-1,48	
252	FTIR	6,94	0,090	0,31	0,27	
254	FTIR	6,50	-0,350	-1,21	-1,06	
256	FTIR	6,20	-0,650	-2,24	-1,97	
257	FTIR	6,93	0,080	0,28	0,24	
258	FTIR	6,63	-0,220	-0,76	-0,67	
259	FTIR	6,56	-0,290	-1,00	-0,88	
260	FTIR	6,00	-0,850	-2,93	-2,58	
261	FTIR	7,00	0,150	0,52	0,45	
262	FTIR	6,30	-0,550	-1,90	-1,67	
263	FTIR	6,40	-0,450	-1,55	-1,36	
264	FTIR	7,10	0,250	0,86	0,76	
265	FTIR	6,42	-0,430	-1,48	-1,30	
266	FTIR	6,43	-0,420	-1,45	-1,27	
267	FTIR	6,37	-0,480	-1,65	-1,45	
268	FTIR	7,30	0,450	1,55	1,36	
270	FTIR	6,20	-0,650	-2,24	-1,97	
271	FTIR	6,31	-0,540	-1,86	-1,64	
272	FTIR	7,60	0,750	2,59	2,27	
273	FTIR	7,10	0,250	0,86	0,76	
275	FTIR	6,90	0,050	0,17	0,15	
276	FTIR	6,00	-0,850	-2,93	-2,58	
277	FTIR	6,07	-0,780	-2,69	-2,36	
278	FTIR	6,42	-0,430	-1,48	-1,30	
279	FTIR	6,61	-0,240	-0,83	-0,73	
280	FTIR	6,40	-0,450	-1,55	-1,36	
281	FTIR	6,33	-0,520	-1,79	-1,58	
282	FTIR	6,53	-0,320	-1,10	-0,97	
283	FTIR	6,50	-0,350	-1,21	-1,06	
284	FTIR	6,05	-0,800	-2,76	-2,42	
312	FTIR	6,54	-0,310	-1,07	-0,94	
319	FTIR	6,70	-0,150	-0,52	-0,45	
320	FTIR	7,57	0,720	2,48	2,18	

**Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse**

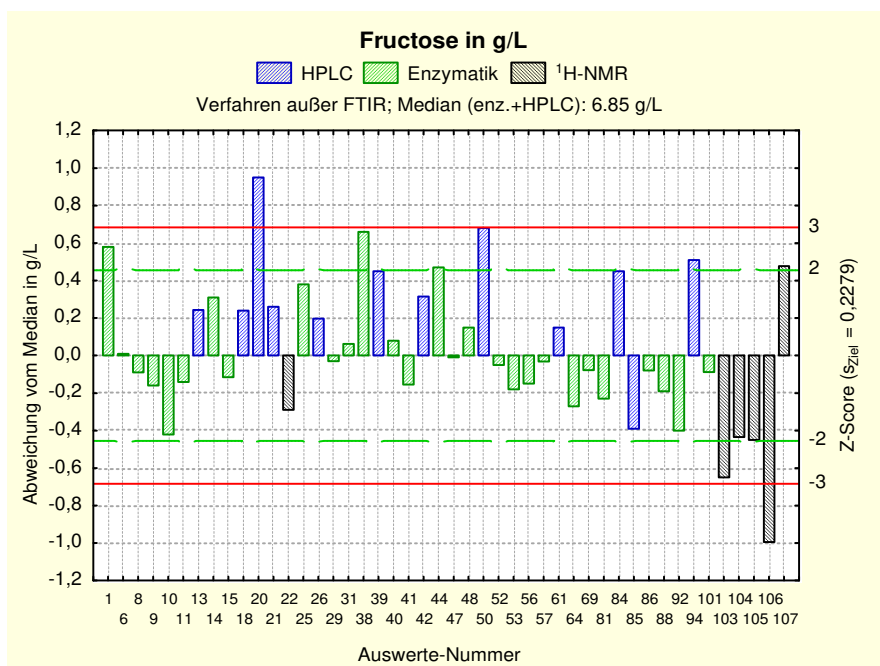
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
323	FTIR	6,50	-0,350	-1,21	-1,06	
336	FTIR	7,50	0,650	2,24	1,97	
337	FTIR	7,70	0,850	2,93	2,58	
343	FTIR	6,66	-0,190	-0,66	-0,58	
349	FTIR	7,10	0,250	0,86	0,76	
364	FTIR	7,20	0,350	1,21	1,06	

**5.6.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

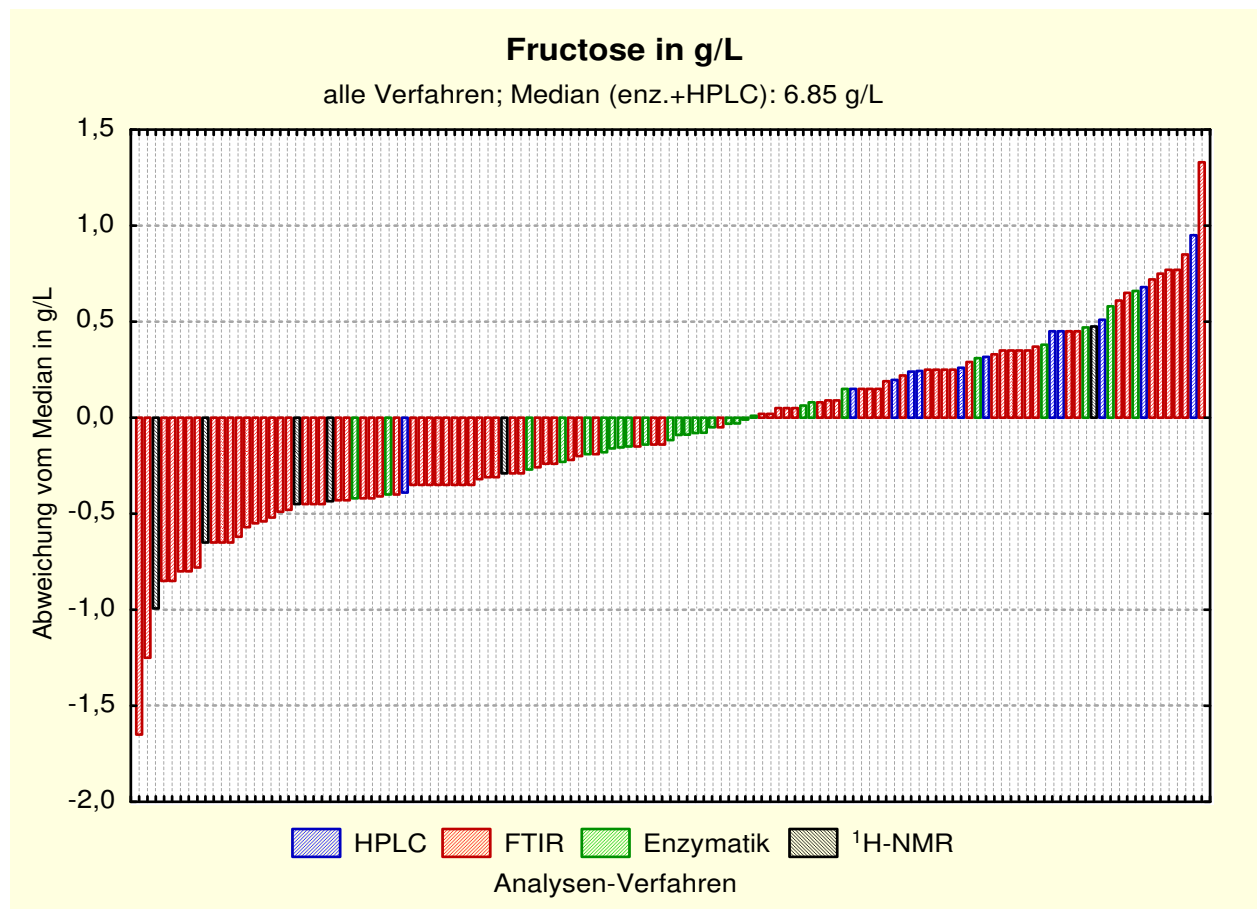
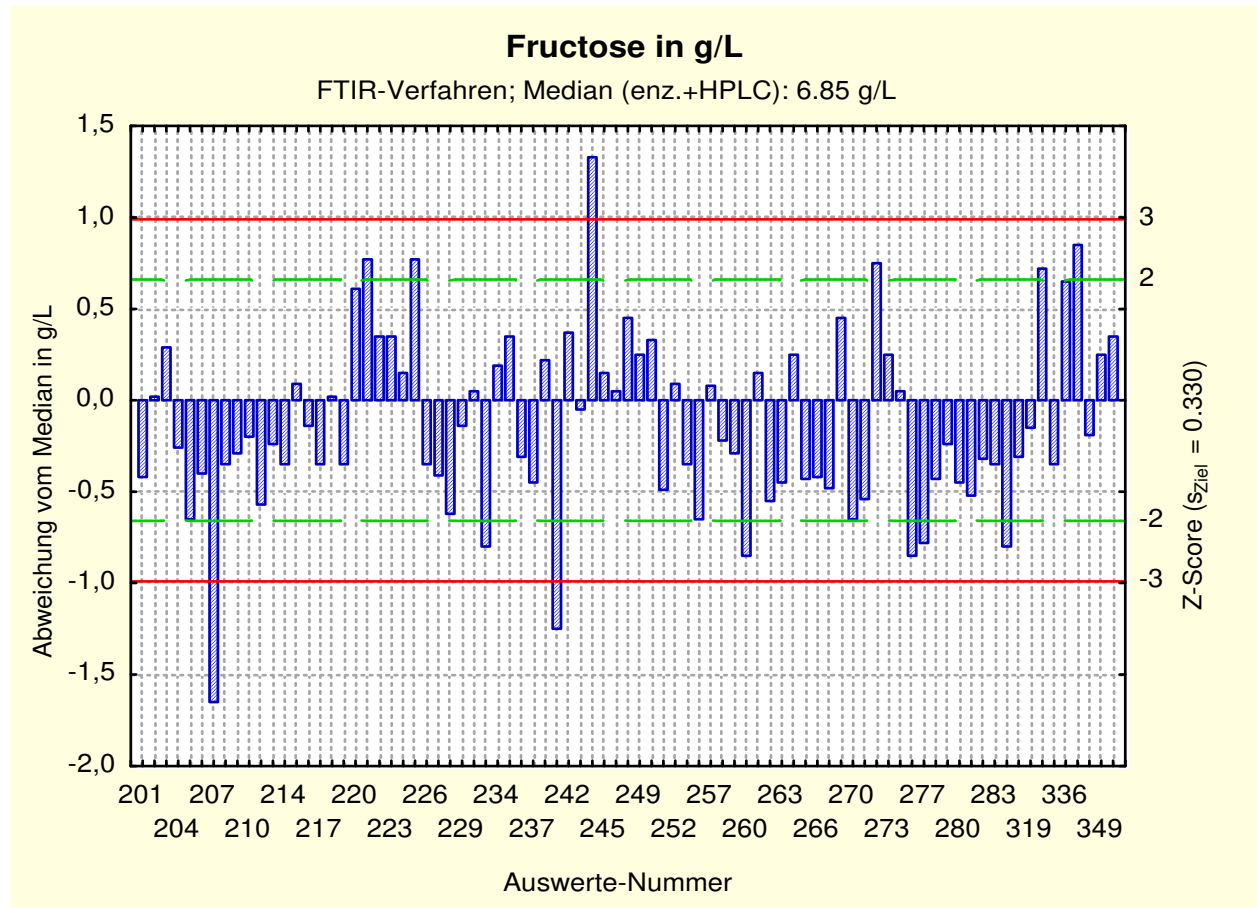
Ergebnisse für Fructose [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	40
Minimalwert	6,43
Mittelwert	6,947
Median	6,850
Maximalwert	7,80
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,324
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,051
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,290
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp herk.</sub> )	0,228
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>ÜFTIR</sub> )	0,330
Horvat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	1,12
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	1,42
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>ÜFTIR</sub> )	0,98
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,18
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	0,22
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>ÜFTIR</sub> )	0,16

**5.6.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	OIV-MA-AS311-03; Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	12	7,199	0,247
enzymat. autom.	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, automatisiert	21	6,841	0,254
enzymat. Hand	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, manuell	7	6,730	0,117
	herkömmliche Verfahren	40	6,929	0,325
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	83	6,714	0,473
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	6	6,435	0,449







## 5.7 Glycerin [g/L]

### 5.7.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	6,91	-0,13	-0,44	
06	enzymat. autom.	7,35	0,31	1,05	
07	enzymat. autom.	7,01	-0,03	-0,10	
08	enzymat. Hand	7,08	0,04	0,14	
10	enzymat. autom.	8,37	1,33	4,48	
11	enzymat. Hand	6,82	-0,22	-0,74	
13	HPLC	7,03	-0,01	-0,04	
20	HPLC	6,80	-0,24	-0,81	
21	HPLC	6,92	-0,12	-0,40	
22	NMR	6,89	-0,15	-0,50	
26	HPLC	7,14	0,11	0,36	
39	HPLC	6,70	-0,34	-1,14	
42	HPLC	7,07	0,03	0,12	
44	enzymat. autom.	7,16	0,12	0,41	
48	HPLC	6,89	-0,15	-0,50	
50	HPLC	7,02	-0,02	-0,07	
56	enzymat. autom.	7,01	-0,03	-0,10	
61	HPLC	6,60	-0,44	-1,48	
81	enzymat. Hand	7,36	0,32	1,08	
84	HPLC	7,30	0,26	0,88	
85	HPLC	7,30	0,26	0,88	
86	enzymat. Hand	6,96	-0,08	-0,27	
88	enzymat. autom.	7,38	0,34	1,13	
89	enzymat. Hand	7,23	0,19	0,64	
94	HPLC	7,05	0,01	0,04	
103	NMR	6,90	-0,14	-0,47	
104	NMR	6,61	-0,43	-1,44	
105	NMR	6,82	-0,22	-0,74	
106	NMR	6,56	-0,47	-1,60	
107	NMR	6,98	-0,06	-0,19	

### 5.7.2 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Glycerin [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	24
Minimalwert	6,6
Mittelwert	7,10
Median	7,04
Maximalwert	8,4
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,340
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,069
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,297
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\ddot{U}\ FTIR}$ )	0,348
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	1,15
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	
Quotient ( $s_L/s_{\ddot{U}\ FTIR}$ )	0,98
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,23
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	
Quotient ( $u_M/s_{\ddot{U}\ FTIR}$ )	0,20

### 5.7.3 Angaben zu den Analyseverfahren

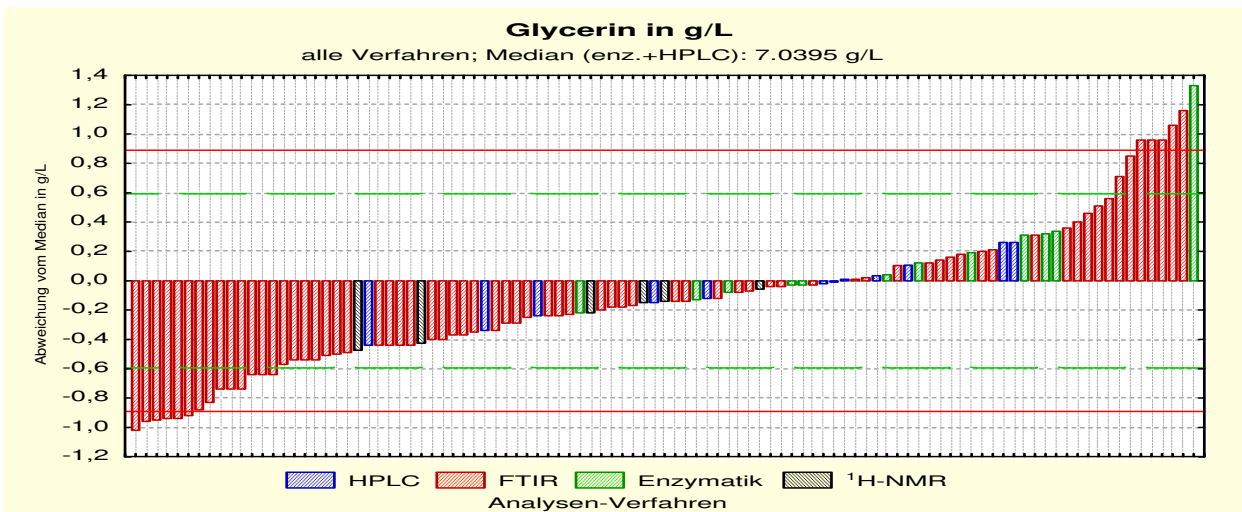
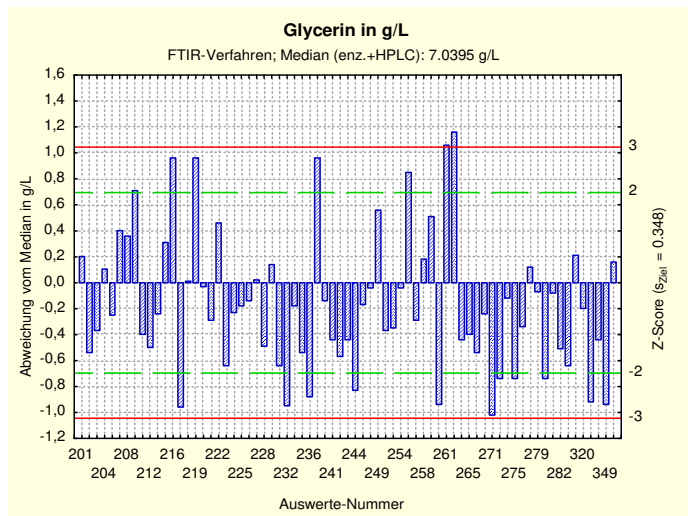
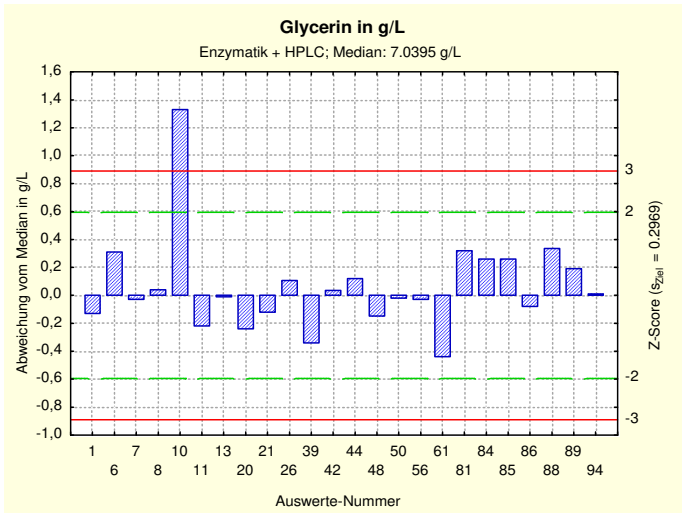
Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	12	6,993	0,232
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert	6	7,278	0,324
enzymat. Hand	enzymatisch, manuell	6	7,060	0,232
	herkömmliche Verfahren	24	7,067	0,236
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	71	6,837	0,516
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	6	6,808	0,170

**5.7.4 FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	7,24	0,20	0,68	0,58	
202	FTIR	6,50	-0,54	-1,82	-1,55	
203	FTIR	6,67	-0,37	-1,24	-1,06	
204	FTIR	7,14	0,10	0,35	0,30	
206	FTIR	6,79	-0,25	-0,84	-0,72	
207	FTIR	7,44	0,40	1,35	1,15	
208	FTIR	7,40	0,36	1,21	1,04	
209	FTIR	7,75	0,71	2,39	2,04	
211	FTIR	6,64	-0,40	-1,35	-1,15	
212	FTIR	6,54	-0,50	-1,68	-1,44	
214	FTIR	6,80	-0,24	-0,81	-0,69	
215	FTIR	7,35	0,31	1,05	0,89	
216	FTIR	8,00	0,96	3,24	2,76	
217	FTIR	6,08	-0,96	-3,23	-2,76	
218	FTIR	7,05	0,01	0,04	0,03	
219	FTIR	8,00	0,96	3,24	2,76	
220	FTIR	7,01	-0,03	-0,10	-0,08	
221	FTIR	6,75	-0,29	-0,98	-0,83	
222	FTIR	7,50	0,46	1,55	1,32	
223	FTIR	6,40	-0,64	-2,15	-1,84	
224	FTIR	6,81	-0,23	-0,77	-0,66	
225	FTIR	6,86	-0,18	-0,60	-0,52	
226	FTIR	6,90	-0,14	-0,47	-0,40	
227	FTIR	7,06	0,02	0,07	0,06	
228	FTIR	6,55	-0,49	-1,65	-1,41	
229	FTIR	7,18	0,14	0,47	0,40	
231	FTIR	6,40	-0,64	-2,15	-1,84	
232	FTIR	6,09	-0,95	-3,20	-2,73	
234	FTIR	6,86	-0,18	-0,60	-0,52	
235	FTIR	6,50	-0,54	-1,82	-1,55	
236	FTIR	6,16	-0,88	-2,96	-2,53	
237	FTIR	8,00	0,96	3,24	2,76	
240	FTIR	6,90	-0,14	-0,47	-0,40	
241	FTIR	6,60	-0,44	-1,48	-1,26	
242	FTIR	6,47	-0,57	-1,92	-1,64	
243	FTIR	6,60	-0,44	-1,48	-1,26	
244	FTIR	6,21	-0,83	-2,79	-2,38	
245	FTIR	6,87	-0,17	-0,57	-0,49	
246	FTIR	7,00	-0,04	-0,13	-0,11	
249	FTIR	7,60	0,56	1,89	1,61	
250	FTIR	6,67	-0,37	-1,24	-1,06	
252	FTIR	6,69	-0,35	-1,18	-1,00	
254	FTIR	7,00	-0,04	-0,13	-0,11	
256	FTIR	7,89	0,85	2,87	2,44	
257	FTIR	6,75	-0,29	-0,98	-0,83	
258	FTIR	7,22	0,18	0,61	0,52	
259	FTIR	7,55	0,51	1,72	1,47	
260	FTIR	6,10	-0,94	-3,16	-2,70	
261	FTIR	8,10	1,06	3,57	3,05	
262	FTIR	8,20	1,16	3,91	3,33	
263	FTIR	6,60	-0,44	-1,48	-1,26	
265	FTIR	6,64	-0,40	-1,35	-1,15	
266	FTIR	6,50	-0,54	-1,82	-1,55	
267	FTIR	6,80	-0,24	-0,81	-0,69	
271	FTIR	6,02	-1,02	-3,43	-2,93	
272	FTIR	6,30	-0,74	-2,49	-2,13	
273	FTIR	6,92	-0,12	-0,40	-0,34	
275	FTIR	6,30	-0,74	-2,49	-2,13	
276	FTIR	6,70	-0,34	-1,14	-0,98	
278	FTIR	7,16	0,12	0,41	0,35	
279	FTIR	6,97	-0,07	-0,23	-0,20	
280	FTIR	6,30	-0,74	-2,49	-2,13	
281	FTIR	6,96	-0,08	-0,27	-0,23	
282	FTIR	6,53	-0,51	-1,72	-1,46	
283	FTIR	6,40	-0,64	-2,15	-1,84	
284	FTIR	7,25	0,21	0,71	0,60	

**Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
320	FTIR	6,84	-0,20	-0,67	-0,57	
336	FTIR	6,12	-0,92	-3,10	-2,64	
337	FTIR	6,60	-0,44	-1,48	-1,26	
349	FTIR	6,10	-0,94	-3,16	-2,70	
368	FTIR	7,20	0,16	0,54	0,46	



## 5.8 pH-Wert

### 5.8.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
01	potentiometr.	3,67	-0,005	-0,11	
05	potentiometr.	3,71	0,035	0,74	
06	potentiometr.	3,68	0,005	0,11	
07	potentiometr.	3,69	0,015	0,32	
08	potentiometr.	3,76	0,085	1,79	
09	potentiometr.	3,68	0,005	0,11	
10	potentiometr.	3,72	0,045	0,95	
11	potentiometr.	3,70	0,025	0,53	
13	potentiometr.	3,65	-0,025	-0,53	
14	potentiometr.	3,68	0,005	0,11	
15	potentiometr.	3,63	-0,045	-0,95	
18	potentiometr.	3,74	0,066	1,39	
20	potentiometr.	3,65	-0,025	-0,53	
21	potentiometr.	3,55	-0,125	-2,63	
22	potentiometr.	3,68	0,005	0,11	
25	potentiometr.	3,62	-0,055	-1,16	
26	potentiometr.	3,66	-0,015	-0,32	
27	potentiometr.	3,86	0,185	3,89	
29	potentiometr.	3,69	0,015	0,32	
37	potentiometr.	3,48	-0,195	-4,10	
38	potentiometr.	3,64	-0,035	-0,74	
39	potentiometr.	3,60	-0,075	-1,58	
40	potentiometr.	3,67	0,000	0,00	
41	potentiometr.	3,67	0,000	0,00	
42	potentiometr.	3,85	0,175	3,68	
43	potentiometr.	3,64	-0,035	-0,74	
46	potentiometr.	3,65	-0,025	-0,53	
47	potentiometr.	3,56	-0,115	-2,42	
48	potentiometr.	3,63	-0,045	-0,95	
50	potentiometr.	3,68	0,005	0,11	
53	potentiometr.	3,69	0,015	0,32	
56	potentiometr.	3,71	0,035	0,74	
57	potentiometr.	3,47	-0,205	-4,31	
60	potentiometr.	3,67	-0,005	-0,11	
61	potentiometr.	3,40	-0,275	-5,78	(**)
64	potentiometr.	3,55	-0,125	-2,63	
67	potentiometr.	3,60	-0,075	-1,58	
69	potentiometr.	3,66	-0,015	-0,32	
74	potentiometr.	3,64	-0,035	-0,74	
75	potentiometr.	3,65	-0,025	-0,53	
77	potentiometr.	3,68	0,005	0,11	
81	potentiometr.	3,69	0,015	0,32	
84	potentiometr.	3,70	0,025	0,53	
86	potentiometr.	3,71	0,035	0,74	
88	potentiometr.	3,71	0,035	0,74	
101	potentiometr.	3,58	-0,095	-2,00	
102	potentiometr.	3,70	0,025	0,53	

(\*\*) Dieser Wert wurde bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

### 5.8.2 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
potentiometr.	potentiometrisch	47	3,663	0,0559
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	82	3,653	0,0763

**5.8.3 FTIR-Laboreergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	3,60	-0,075	-1,52	
202	FTIR	3,66	-0,015	-0,30	
203	FTIR	3,69	0,015	0,30	
204	FTIR	3,61	-0,068	-1,38	
205	FTIR	3,66	-0,015	-0,30	
206	FTIR	3,80	0,125	2,54	
207	FTIR	3,72	0,045	0,91	
208	FTIR	3,57	-0,105	-2,13	
209	FTIR	3,72	0,045	0,91	
211	FTIR	3,58	-0,095	-1,93	
212	FTIR	3,65	-0,025	-0,51	
214	FTIR	3,64	-0,035	-0,71	
215	FTIR	3,69	0,015	0,30	
216	FTIR	3,74	0,065	1,32	
217	FTIR	3,65	-0,025	-0,51	
218	FTIR	3,58	-0,095	-1,93	
219	FTIR	3,74	0,065	1,32	
220	FTIR	3,63	-0,045	-0,91	
221	FTIR	3,61	-0,065	-1,32	
222	FTIR	3,63	-0,045	-0,91	
223	FTIR	3,65	-0,025	-0,51	
224	FTIR	3,64	-0,035	-0,71	
225	FTIR	3,58	-0,095	-1,93	
226	FTIR	3,66	-0,015	-0,30	
227	FTIR	3,63	-0,045	-0,91	
228	FTIR	3,69	0,015	0,30	
229	FTIR	3,67	-0,005	-0,10	
231	FTIR	3,68	0,005	0,10	
232	FTIR	3,64	-0,035	-0,71	
234	FTIR	3,65	-0,025	-0,51	
235	FTIR	3,60	-0,075	-1,52	
236	FTIR	3,63	-0,045	-0,91	
237	FTIR	3,71	0,035	0,71	
240	FTIR	3,62	-0,055	-1,12	
241	FTIR	3,66	-0,015	-0,30	
242	FTIR	3,48	-0,195	-3,96	
243	FTIR	3,70	0,025	0,51	
244	FTIR	3,55	-0,125	-2,54	
245	FTIR	3,65	-0,025	-0,51	
246	FTIR	3,63	-0,045	-0,91	
247	FTIR	3,63	-0,045	-0,91	
248	FTIR	3,55	-0,125	-2,54	
249	FTIR	3,61	-0,065	-1,32	
250	FTIR	3,68	0,005	0,10	
251	FTIR	3,79	0,115	2,33	
252	FTIR	3,64	-0,035	-0,71	
254	FTIR	3,64	-0,035	-0,71	
256	FTIR	3,73	0,055	1,12	
257	FTIR	3,64	-0,035	-0,71	
258	FTIR	3,51	-0,165	-3,35	
259	FTIR	3,55	-0,125	-2,54	
260	FTIR	3,79	0,115	2,33	
261	FTIR	3,69	0,015	0,30	
262	FTIR	3,74	0,065	1,32	
263	FTIR	3,82	0,145	2,94	
264	FTIR	3,72	0,045	0,91	
265	FTIR	3,72	0,045	0,91	
266	FTIR	3,62	-0,055	-1,12	
267	FTIR	3,68	0,005	0,10	
268	FTIR	3,59	-0,090	-1,83	
269	FTIR	3,61	-0,065	-1,32	
270	FTIR	3,73	0,055	1,12	
271	FTIR	3,55	-0,125	-2,54	
272	FTIR	3,58	-0,095	-1,93	
273	FTIR	3,54	-0,135	-2,74	

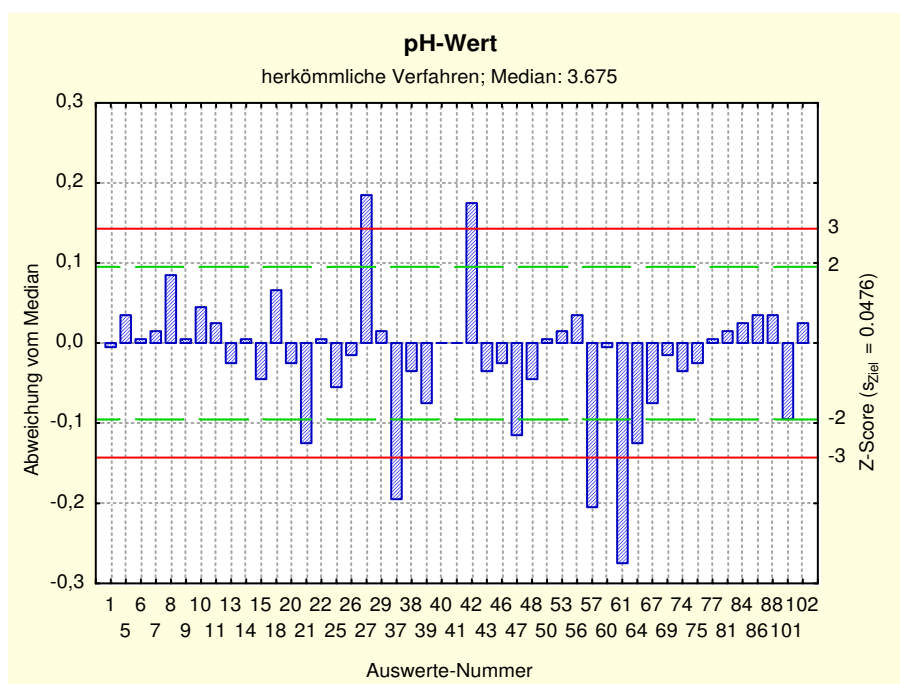
**Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse**

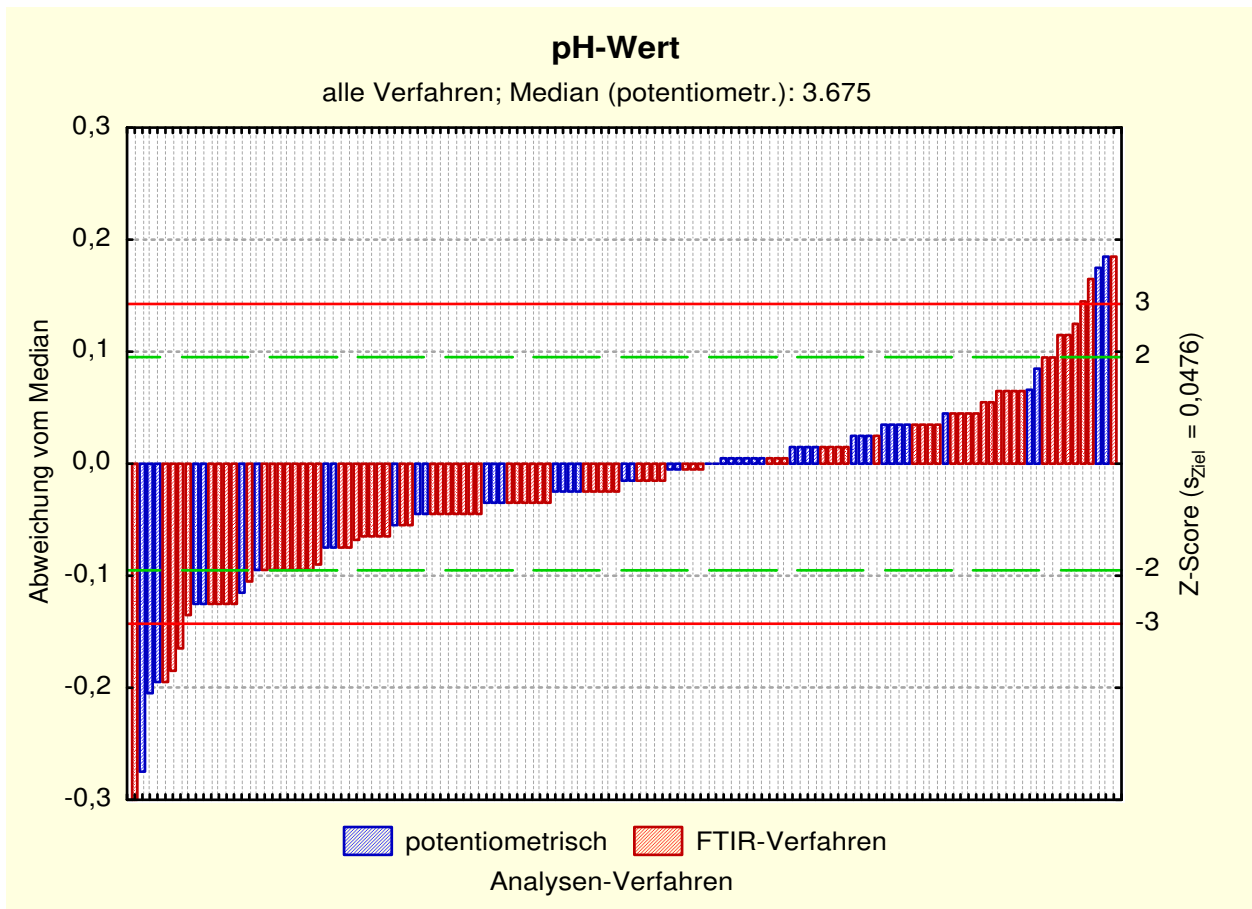
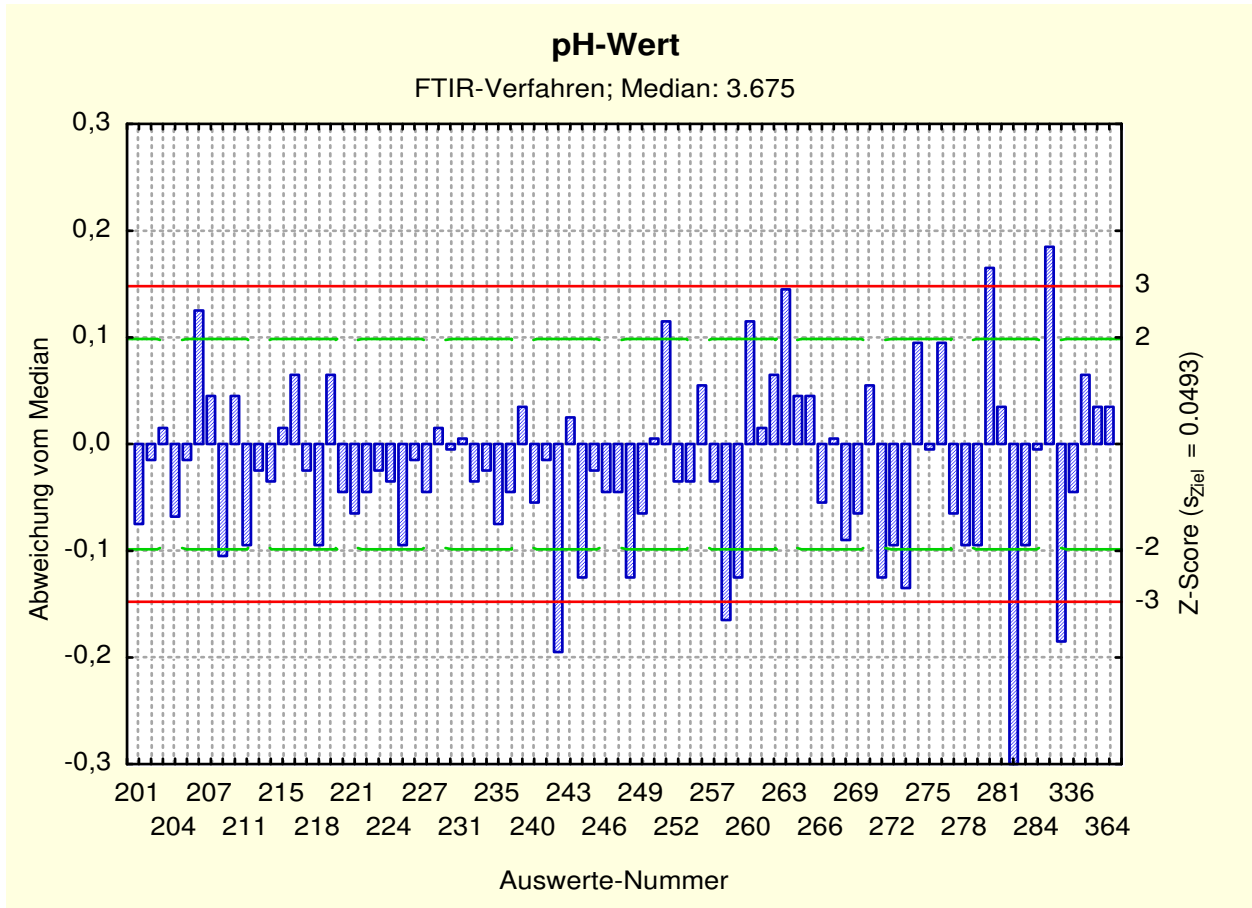
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
274	FTIR	3,77	0,095	1,93	
275	FTIR	3,67	-0,005	-0,10	
276	FTIR	3,77	0,095	1,93	
277	FTIR	3,61	-0,065	-1,32	
278	FTIR	3,58	-0,095	-1,93	
279	FTIR	3,58	-0,095	-1,93	
280	FTIR	3,84	0,165	3,35	
281	FTIR	3,71	0,035	0,71	
282	FTIR	3,04	-0,635	-12,88	(**)
283	FTIR	3,58	-0,095	-1,93	
284	FTIR	3,67	-0,005	-0,10	
319	FTIR	3,86	0,185	3,75	
320	FTIR	3,49	-0,185	-3,75	
336	FTIR	3,63	-0,045	-0,91	
337	FTIR	3,74	0,065	1,32	
349	FTIR	3,71	0,035	0,71	
364	FTIR	3,71	0,035	0,71	

(\*\*) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der potentiometrischen Werte ab.

**5.8.4 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse für pH-Wert	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	47	46
Minimalwert	3,40	3,47
Mittelwert	3,658	3,663
Median	3,675	3,675
Maximalwert	3,86	3,86
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,0816	0,0728
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,0119	0,0107
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )		
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp herk.</sub> )	0,0476	0,0476
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,0493	0,0493
Horvat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )		
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	1,71	1,53
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	1,66	1,48
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )		
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	0,25	0,23
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,24	0,22







**5.9 Gesamtsäure [g/L]****5.9.1 Herkömmliche Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 5.2.1	4,95	-0,134	-0,60	-1,25	
05	LwK 5.2.1	5,09	0,006	0,03	0,06	
06	LwK 5.1	4,84	-0,244	-1,08	-2,28	
07	LwK 5.2.1	4,92	-0,164	-0,73	-1,53	
08	LwK 5.2.1	5,41	0,326	1,45	3,04	
09	LwK 5.2.1	4,98	-0,104	-0,46	-0,97	
10	LwK 5.2.1	4,88	-0,204	-0,91	-1,90	
11	LwK 5.1	4,86	-0,224	-0,99	-2,09	
13	LwK 5.1	5,14	0,056	0,25	0,52	
14	LwK 5.1	5,28	0,196	0,87	1,83	
15	LwK 5.2.1	5,08	-0,004	-0,02	-0,04	
18	LwK 5.2.1	5,17	0,086	0,38	0,80	
20	LwK 5.1	5,30	0,216	0,96	2,02	
21	LwK 5.1	5,06	-0,024	-0,11	-0,22	
22	LwK 5.1	4,90	-0,184	-0,82	-1,72	
23	LwK 5.1	5,20	0,116	0,52	1,08	
25	LwK 5.1	5,16	0,076	0,34	0,71	
26	LwK 5.1	5,00	-0,084	-0,37	-0,78	
27	LwK 5.1	5,05	-0,034	-0,15	-0,32	
29	LwK 5.2.1	5,14	0,056	0,25	0,52	
31	LwK 5.1	5,00	-0,084	-0,37	-0,78	
34	LwK 5.2.1	5,00	-0,084	-0,37	-0,78	
37	LwK 5.1	5,67	0,586	2,60	5,47	(**)
38	LwK 5.1	5,30	0,216	0,96	2,02	
39	LwK 5.2.1	5,21	0,126	0,56	1,18	
40	LwK 5.1	4,92	-0,164	-0,73	-1,53	
41	LwK 5.1	5,10	0,016	0,07	0,15	
42	LwK 5.1	4,95	-0,134	-0,60	-1,25	
43	LwK 5.1	5,20	0,116	0,52	1,08	
46	LwK 5.1	5,20	0,116	0,52	1,08	
47	LwK 5.1	5,09	0,006	0,03	0,06	
48	LwK 5.1	5,20	0,116	0,52	1,08	
50	LwK 5.1	5,07	-0,014	-0,06	-0,13	
52	LwK 5.2.1	5,20	0,116	0,52	1,08	
53	LwK 5.2.1	5,00	-0,084	-0,37	-0,78	
55	LwK 5.2.2	5,39	0,306	1,36	2,86	
56	LwK 5.2.1	4,95	-0,134	-0,60	-1,25	
57	LwK 5.1	5,09	0,006	0,03	0,06	
60	LwK 5.2.1	5,40	0,316	1,40	2,95	
61	LwK 5.1	5,00	-0,084	-0,37	-0,78	
64	LwK 5.1	5,09	0,004	0,02	0,04	
67	LwK 5.2.1	5,00	-0,084	-0,37	-0,78	
69	LwK 5.2.1	5,50	0,416	1,85	3,88	
74	LwK 5.1	5,86	0,776	3,45	7,24	(**)
77	LwK 5.2.2	4,90	-0,184	-0,82	-1,72	
81	LwK 5.2.1	5,20	0,116	0,52	1,08	
84	LwK 5.2.1	5,00	-0,084	-0,37	-0,78	
86	LwK 5.2.1	4,97	-0,114	-0,51	-1,06	
101	LwK 5.1	5,10	0,016	0,07	0,15	
102	LwK 5.2.1	5,00	-0,084	-0,37	-0,78	

(\*\*) Diese Werte bleiben bei der wiederholten Berechnung unberücksichtigt.

**5.9.2 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 5.1	Potentiometrische Bestimmung n. AVV OIV-MA-AS-313-01;	27	5,104	0,160
LwK 5.2.1	- Nr. 5.2, Potentiometrische Bestimmung	21	5,073	0,144
LwK 5.2.2	- Nr. 5.3, Endpunktbestimmung mit Indikator	2	5,145	0,393
	herkömmliche Verfahren	50	5,096	0,167
LwK 5.3	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	88	5,146	0,171

**5.9.3 FTIR-Laboregebnisse**

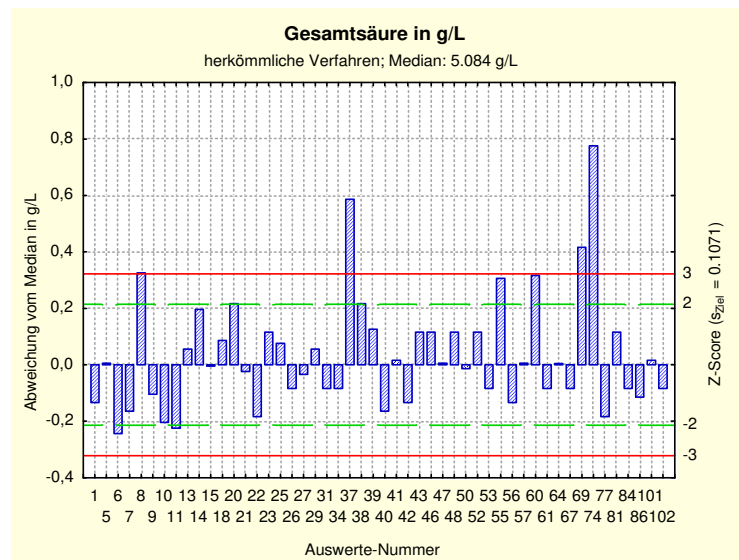
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 5.3	5,04	-0,048	-0,21	-0,33	
202	LwK 5.3	5,11	0,022	0,10	0,15	
203	LwK 5.3	4,99	-0,098	-0,43	-0,68	
204	LwK 5.3	5,09	0,005	0,02	0,03	
205	LwK 5.3	5,20	0,112	0,50	0,77	
206	LwK 5.3	5,00	-0,088	-0,39	-0,61	
207	LwK 5.3	5,10	0,012	0,05	0,08	
208	LwK 5.3	4,90	-0,188	-0,83	-1,30	
209	LwK 5.3	5,03	-0,058	-0,26	-0,40	
210	LwK 5.3	5,15	0,062	0,28	0,43	
211	LwK 5.3	4,98	-0,108	-0,48	-0,74	
212	LwK 5.3	5,15	0,062	0,28	0,43	
214	LwK 5.3	5,30	0,212	0,94	1,46	
215	LwK 5.3	4,99	-0,098	-0,43	-0,68	
216	LwK 5.3	4,83	-0,258	-1,15	-1,78	
217	LwK 5.3	5,11	0,022	0,10	0,15	
218	LwK 5.3	5,03	-0,058	-0,26	-0,40	
219	LwK 5.3	5,30	0,212	0,94	1,46	
220	LwK 5.3	5,33	0,242	1,07	1,67	
221	LwK 5.3	5,13	0,042	0,19	0,29	
222	LwK 5.3	5,20	0,112	0,50	0,77	
223	LwK 5.3	5,20	0,112	0,50	0,77	
224	LwK 5.3	5,35	0,262	1,16	1,81	
225	LwK 5.3	5,26	0,172	0,76	1,19	
226	LwK 5.3	5,10	0,012	0,05	0,08	
227	LwK 5.3	5,21	0,122	0,54	0,84	
228	LwK 5.3	5,43	0,342	1,52	2,36	
229	LwK 5.3	5,23	0,142	0,63	0,98	
231	LwK 5.3	5,01	-0,078	-0,35	-0,54	
232	LwK 5.3	5,33	0,242	1,07	1,67	
234	LwK 5.3	4,97	-0,118	-0,52	-0,81	
235	LwK 5.3	4,90	-0,188	-0,83	-1,30	
236	LwK 5.3	5,43	0,342	1,52	2,36	
237	LwK 5.3	5,10	0,012	0,05	0,08	
240	LwK 5.3	5,32	0,232	1,03	1,60	
241	LwK 5.3	5,30	0,212	0,94	1,46	
242	LwK 5.3	5,23	0,142	0,63	0,98	
243	LwK 5.3	4,90	-0,188	-0,83	-1,30	
244	LwK 5.3	5,27	0,182	0,81	1,26	
245	LwK 5.3	5,22	0,132	0,59	0,91	
246	LwK 5.3	5,10	0,012	0,05	0,08	
247	LwK 5.3	5,11	0,022	0,10	0,15	
248	LwK 5.3	5,69	0,602	2,67	4,15	
249	LwK 5.3	5,10	0,012	0,05	0,08	
250	LwK 5.3	5,28	0,192	0,85	1,32	
251	LwK 5.3	5,30	0,212	0,94	1,46	
252	LwK 5.3	5,27	0,182	0,81	1,26	
254	LwK 5.3	5,30	0,212	0,94	1,46	
255	LwK 5.3	5,40	0,312	1,38	2,15	
256	LwK 5.3	5,14	0,052	0,23	0,36	
257	LwK 5.3	5,12	0,032	0,14	0,22	
258	LwK 5.3	5,43	0,342	1,52	2,36	
259	LwK 5.3	4,98	-0,108	-0,48	-0,74	
260	LwK 5.3	5,00	-0,088	-0,39	-0,61	
261	LwK 5.3	5,00	-0,088	-0,39	-0,61	
262	LwK 5.3	4,70	-0,388	-1,72	-2,68	
263	LwK 5.3	5,10	0,012	0,05	0,08	
264	LwK 5.3	5,00	-0,088	-0,39	-0,61	
265	LwK 5.3	5,08	-0,008	-0,04	-0,06	
266	LwK 5.3	5,00	-0,088	-0,39	-0,61	
267	LwK 5.3	5,14	0,052	0,23	0,36	
268	LwK 5.3	5,04	-0,048	-0,21	-0,33	
269	LwK 5.3	4,80	-0,288	-1,28	-1,99	
270	LwK 5.3	5,40	0,312	1,38	2,15	
271	LwK 5.3	5,10	0,012	0,05	0,08	

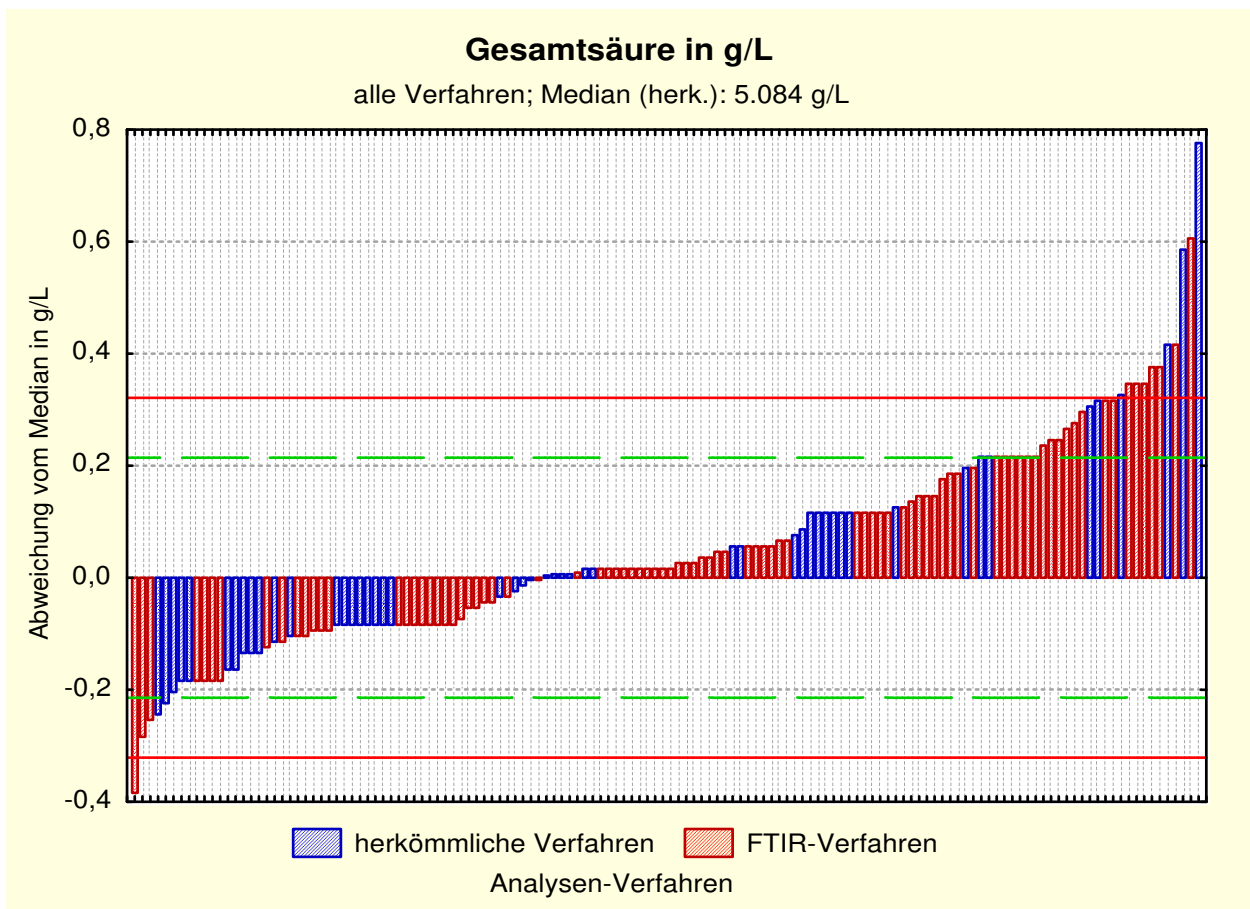
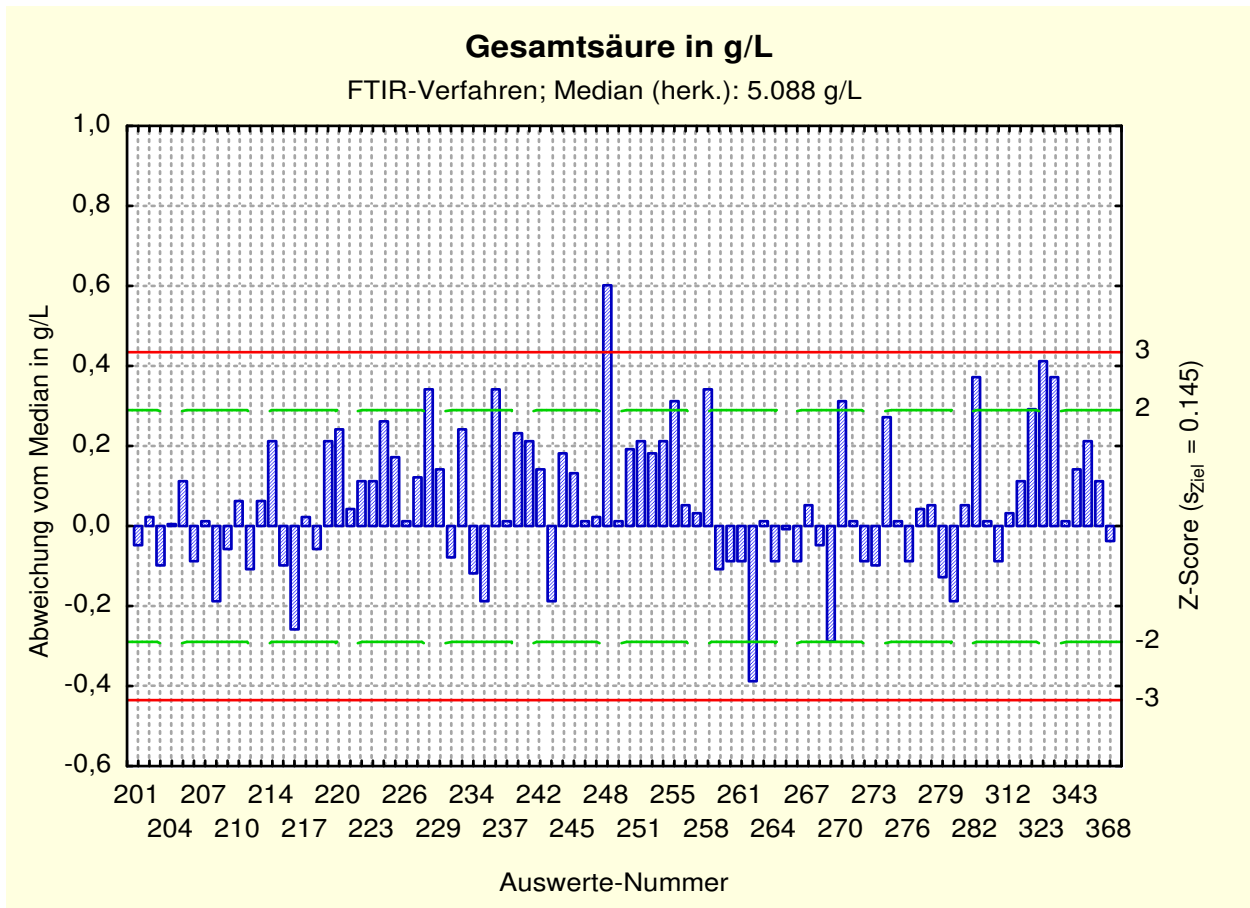
**Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
272	LwK 5.3	5,00	-0,088	-0,39	-0,61	
273	LwK 5.3	4,99	-0,098	-0,43	-0,68	
274	LwK 5.3	5,36	0,272	1,21	1,88	
275	LwK 5.3	5,10	0,012	0,05	0,08	
276	LwK 5.3	5,00	-0,088	-0,39	-0,61	
277	LwK 5.3	5,13	0,042	0,19	0,29	
278	LwK 5.3	5,14	0,052	0,23	0,36	
279	LwK 5.3	4,96	-0,128	-0,57	-0,88	
280	LwK 5.3	4,90	-0,188	-0,83	-1,30	
281	LwK 5.3	5,14	0,052	0,23	0,36	
282	LwK 5.3	5,46	0,372	1,65	2,57	
283	LwK 5.3	5,10	0,012	0,05	0,08	
284	LwK 5.3	5,00	-0,088	-0,39	-0,61	
312	LwK 5.3	5,12	0,032	0,14	0,22	
319	LwK 5.3	5,20	0,112	0,50	0,77	
320	LwK 5.3	5,38	0,292	1,30	2,01	
323	LwK 5.3	5,50	0,412	1,83	2,84	
336	LwK 5.3	5,46	0,372	1,65	2,57	
337	LwK 5.3	5,10	0,012	0,05	0,08	
343	LwK 5.3	5,23	0,142	0,63	0,98	
349	LwK 5.3	5,30	0,212	0,94	1,46	
364	LwK 5.3	5,20	0,112	0,50	0,77	
368	LwK 5.3	5,05	-0,038	-0,17	-0,26	

**5.9.4 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse für Gesamtsäure [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	50	48
Minimalwert	4,84	4,84
Mittelwert	5,119	5,092
Median	5,089	5,084
Maximalwert	5,86	5,50
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,203	0,155
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,029	0,022
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,225	0,225
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp herk.</sub> )	0,107	0,107
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,145	0,145
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	0,90	0,69
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	1,89	1,45
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	1,40	1,07
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,13	0,10
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	0,27	0,21
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,20	0,15





**5.10 Weinsäure [g/L]****5.10.1 Herkömmliche Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	HPLC	1,68	-0,010	-0,11	
02	IC	1,65	-0,040	-0,45	
05	photometr.	1,61	-0,080	-0,91	
06	HPLC	1,63	-0,060	-0,68	
07	HPLC	1,66	-0,030	-0,34	
08	HPLC	1,64	-0,050	-0,57	
10	photometr., autom.	1,56	-0,130	-1,47	
11	photometr.	1,86	0,170	1,92	
15	photometr., autom.	1,80	0,110	1,25	
21	HPLC	1,98	0,290	3,28	
22	NMR	1,72	0,030	0,34	
25	photometr., autom.	1,55	-0,140	-1,58	
26	HPLC	1,85	0,160	1,81	
29	photometr., autom.	1,90	0,210	2,38	
38	photometr., autom.	1,84	0,150	1,70	
39	IC	1,60	-0,090	-1,02	
40	photometr., autom.	1,93	0,240	2,72	
44	photometr., autom.	1,94	0,250	2,83	
47	photometr.	1,67	-0,020	-0,23	
48	photometr., autom.	1,80	0,110	1,25	
50	HPLC	1,61	-0,080	-0,91	
56	photometr., autom.	1,79	0,100	1,13	
57	photometr., autom.	1,69	0,000	0,00	
61	photometr., autom.	1,86	0,170	1,92	
84	HPLC	1,80	0,110	1,25	
92	photometr., autom.	1,85	0,160	1,81	
94	HPLC	1,62	-0,070	-0,79	
97	photometr.	1,55	-0,140	-1,58	
103	NMR	1,50	-0,190	-2,15	
104	NMR	1,53	-0,158	-1,79	
105	NMR	1,56	-0,130	-1,47	
106	NMR	1,41	-0,279	-3,16	
107	NMR	1,74	0,055	0,62	

**5.10.2 FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	1,72	0,030	0,34	0,13	
202	FTIR	1,44	-0,250	-2,83	-1,10	
203	FTIR	1,50	-0,190	-2,15	-0,84	
204	FTIR	2,05	0,364	4,12	1,60	
205	FTIR	1,78	0,090	1,02	0,40	
206	FTIR	1,95	0,260	2,94	1,15	
208	FTIR	1,70	0,010	0,11	0,04	
209	FTIR	1,78	0,090	1,02	0,40	
211	FTIR	2,02	0,330	3,74	1,45	
212	FTIR	2,17	0,480	5,43	2,11	
214	FTIR	1,70	0,010	0,11	0,04	
215	FTIR	1,38	-0,310	-3,51	-1,37	
216	FTIR	4,83	3,140	35,54	13,83	(*)
217	FTIR	1,91	0,220	2,49	0,97	
218	FTIR	1,81	0,120	1,36	0,53	
219	FTIR	1,80	0,110	1,25	0,48	
220	FTIR	1,70	0,010	0,11	0,04	
221	FTIR	2,15	0,460	5,21	2,03	
222	FTIR	1,81	0,120	1,36	0,53	
223	FTIR	1,70	0,010	0,11	0,04	
224	FTIR	1,92	0,230	2,60	1,01	
225	FTIR	1,88	0,190	2,15	0,84	
226	FTIR	1,80	0,110	1,25	0,48	

(\*) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der herkömmlichen Werte ab.

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

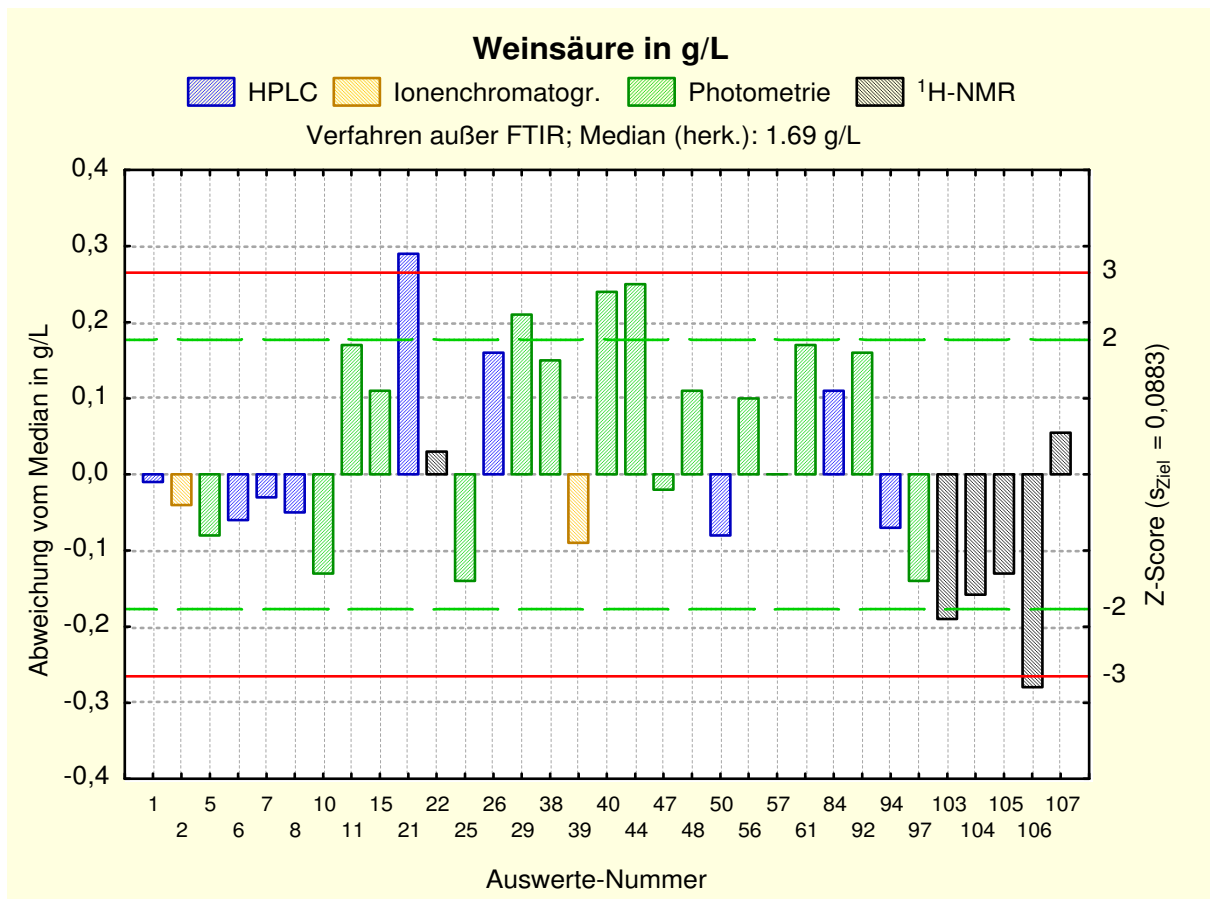
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
227	FTIR	1,76	0,070	0,79	0,31	
228	FTIR	2,04	0,350	3,96	1,54	
229	FTIR	1,90	0,210	2,38	0,93	
231	FTIR	2,23	0,540	6,11	2,38	
232	FTIR	1,73	0,040	0,45	0,18	
234	FTIR	2,23	0,540	6,11	2,38	
235	FTIR	0,90	-0,790	-8,94	-3,48	
236	FTIR	1,78	0,090	1,02	0,40	
237	FTIR	1,90	0,210	2,38	0,93	
240	FTIR	1,78	0,090	1,02	0,40	
241	FTIR	1,80	0,110	1,25	0,48	
242	FTIR	1,78	0,090	1,02	0,40	
243	FTIR	1,90	0,210	2,38	0,93	
244	FTIR	1,89	0,200	2,26	0,88	
245	FTIR	1,61	-0,080	-0,91	-0,35	
246	FTIR	1,80	0,110	1,25	0,48	
247	FTIR	1,67	-0,020	-0,23	-0,09	
249	FTIR	1,90	0,210	2,38	0,93	
250	FTIR	1,86	0,170	1,92	0,75	
252	FTIR	1,98	0,290	3,28	1,28	
254	FTIR	1,60	-0,090	-1,02	-0,40	
256	FTIR	1,95	0,260	2,94	1,15	
257	FTIR	2,16	0,470	5,32	2,07	
258	FTIR	2,10	0,410	4,64	1,81	
259	FTIR	1,94	0,250	2,83	1,10	
260	FTIR	1,40	-0,290	-3,28	-1,28	
261	FTIR	1,70	0,010	0,11	0,04	
262	FTIR	1,90	0,210	2,38	0,93	
264	FTIR	1,40	-0,290	-3,28	-1,28	
265	FTIR	1,52	-0,170	-1,92	-0,75	
266	FTIR	1,93	0,240	2,72	1,06	
267	FTIR	1,64	-0,050	-0,57	-0,22	
268	FTIR	1,85	0,160	1,81	0,70	
269	FTIR	2,15	0,460	5,21	2,03	
270	FTIR	1,90	0,210	2,38	0,93	
271	FTIR	1,70	0,010	0,11	0,04	
272	FTIR	2,00	0,310	3,51	1,37	
273	FTIR	1,71	0,020	0,23	0,09	
274	FTIR	1,78	0,090	1,02	0,40	
275	FTIR	1,70	0,010	0,11	0,04	
276	FTIR	1,90	0,210	2,38	0,93	
277	FTIR	1,80	0,110	1,25	0,48	
278	FTIR	2,30	0,610	6,91	2,69	
279	FTIR	2,06	0,370	4,19	1,63	
280	FTIR	1,80	0,110	1,25	0,48	
282	FTIR	1,91	0,220	2,49	0,97	
283	FTIR	2,00	0,310	3,51	1,37	
284	FTIR	1,97	0,280	3,17	1,23	
319	FTIR	2,10	0,410	4,64	1,81	
320	FTIR	1,73	0,040	0,45	0,18	
336	FTIR	1,77	0,080	0,91	0,35	
337	FTIR	1,40	-0,290	-3,28	-1,28	
349	FTIR	2,30	0,610	6,91	2,69	
364	FTIR	1,40	-0,290	-3,28	-1,28	

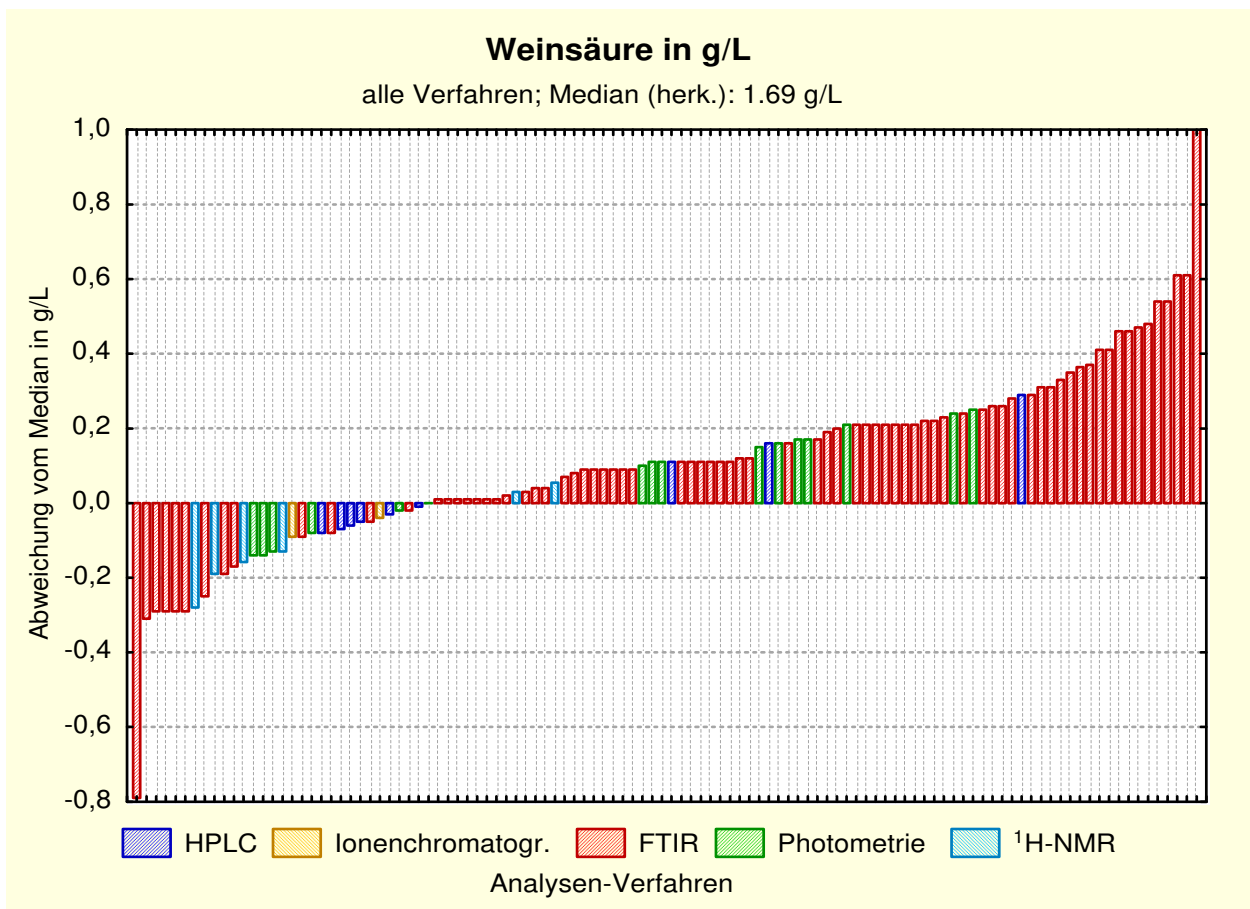
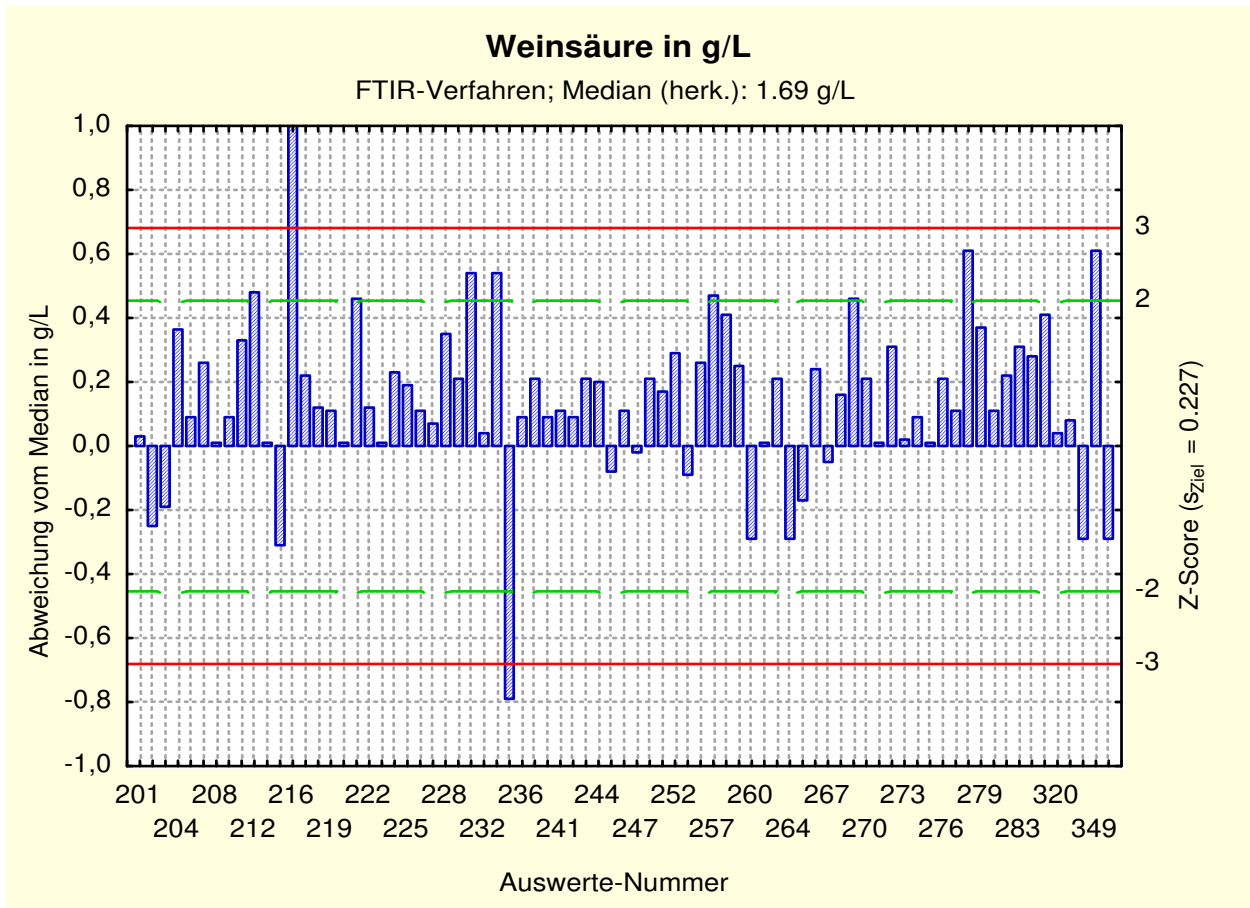
### 5.10.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Weinsäure [g/L]		
	alle Daten	alle Daten
Gültige Werte	11	27
Minimalwert	1,60	1,55
Mittelwert	1,702	1,738
Median	1,650	1,690
Maximalwert	1,98	1,98
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,122	0,132
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,037	0,025
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,087	0,088
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp. herk.}$ )		
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{Ü FTIR}$ )	0,227	0,227
Horrat-Wert ( $s_L/s_H$ )	1,41	1,50
Quotient ( $s_L/s_{exp. herk.}$ )		
Quotient ( $s_L/s_{Ü FTIR}$ )	0,54	0,58
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,42	0,29
Quotient ( $u_M/s_{exp. herk.}$ )		
Quotient ( $u_M/s_{Ü FTIR}$ )	0,16	0,11

### 5.10.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	9	1,705	0,117
IC	Ionenchromatographie	2	1,625	0,040
	HPLC + Ionenchromatographie	11	1,690	0,108
photometr.	photometrisch nach Rebelein	4	1,671	0,148
phot.autom.	photometrisch, automatisiert (Vanadat)	12	1,802	0,126
	herkömmliche Verfahren	27	1,737	0,148
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	77	1,838	0,212
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	6	1,578	0,147







## 5.11 Flüchtige Säure [g/L]

### 5.11.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Bewertungsbasis: Werte mit SO<sub>2</sub>-Korrektur und Zielstandardabweichung nach Horwitz

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
02	OIV SO <sub>2</sub> -korr.	0,690	0,1160	3,29	4,06	
06	Gerhardt SO <sub>2</sub> korr.	0,602	0,0280	0,79	0,98	
07	Halbmikro SO <sub>2</sub> korr.	0,570	-0,0040	-0,11	-0,14	
08	OIV o. SO <sub>2</sub> -korr.	0,620	0,0460	1,30	1,61	
09	OIV SO <sub>2</sub> -korr.	0,574	0,0000	0,00	0,00	
10	Halbmikro SO <sub>2</sub> korr.	0,543	-0,0310	-0,88	-1,08	
13	Gerhardt SO <sub>2</sub> korr.	0,578	0,0040	0,11	0,14	
20	Gerhardt SO <sub>2</sub> korr.	0,370	-0,2040	-5,78	-7,14	(**)
21	Halbmikro SO <sub>2</sub> unber.	0,680	0,1060	3,00	3,71	
25	Gerhardt SO <sub>2</sub> korr.	0,530	-0,0440	-1,25	-1,54	
26	Gerhardt SO <sub>2</sub> ausg.	0,685	0,1110	3,14	3,89	
29	Gerhardt SO <sub>2</sub> korr.	0,610	0,0360	1,02	1,26	
31	Halbmikro SO <sub>2</sub> korr.	0,561	-0,0130	-0,37	-0,45	
37	Halbmikro SO <sub>2</sub> unber.	0,576	0,0020	0,06	0,07	
38	Gerhardt SO <sub>2</sub> korr.	0,523	-0,0510	-1,44	-1,78	
39	Gerhardt SO <sub>2</sub> korr.	0,530	-0,0440	-1,25	-1,54	
40	Gerhardt SO <sub>2</sub> ausg.	0,654	0,0800	2,27	2,80	
41	Gerhardt SO <sub>2</sub> ausg.	0,638	0,0637	1,80	2,23	
42	Halbmikro SO <sub>2</sub> unber.	0,590	0,0160	0,45	0,56	
47	Gerhardt SO <sub>2</sub> korr.	0,780	0,2060	5,84	7,21	(**)
50	Halbmikro SO <sub>2</sub> korr.	0,501	-0,0730	-2,07	-2,55	
56	Rentschler mod. korr.	0,565	-0,0090	-0,25	-0,32	
57	Halbmikro SO <sub>2</sub> korr.	0,703	0,1290	3,65	4,51	
60	Wädenswil SO <sub>2</sub> unber.	0,620	0,0460	1,30	1,61	
64	Halbmikro SO <sub>2</sub> unber.	0,710	0,1360	3,85	4,76	
66	Wädenswil SO <sub>2</sub> unber.	0,580	0,0060	0,17	0,21	
67	Halbmikro SO <sub>2</sub> unber.	0,600	0,0260	0,74	0,91	
68	Wädenswil SO <sub>2</sub> unber.	0,580	0,0060	0,17	0,21	
81	Halbmikro SO <sub>2</sub> unber.	0,563	-0,0110	-0,31	-0,39	
88	OIV SO <sub>2</sub> -korr.	0,577	0,0030	0,08	0,11	
89	Halbmikro SO <sub>2</sub> korr.	0,567	-0,0070	-0,20	-0,25	
101	Halbmikro SO <sub>2</sub> unber.	0,760	0,1860	5,27	6,51	(***)

(\*\*) Diese Werte bleiben bei der wiederholten Berechnung unberücksichtigt.

(\*\*\*) Dies Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der SO<sub>2</sub>-korrigierten Werte ab.

### 5.11.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	0,680	0,1060	3,00	1,19	
202	FTIR	0,780	0,2060	5,84	2,31	
203	FTIR	0,730	0,1560	4,42	1,75	
204	FTIR	0,661	0,0870	2,46	0,98	
205	FTIR	0,590	0,0160	0,45	0,18	
206	FTIR	0,630	0,0560	1,59	0,63	
208	FTIR	0,520	-0,0540	-1,53	-0,61	
209	FTIR	0,580	0,0060	0,17	0,07	
210	FTIR	0,635	0,0610	1,73	0,68	
211	FTIR	0,640	0,0660	1,87	0,74	
214	FTIR	0,640	0,0660	1,87	0,74	
215	FTIR	0,570	-0,0040	-0,11	-0,04	
216	FTIR	0,390	-0,1840	-5,21	-2,07	
217	FTIR	0,550	-0,0240	-0,68	-0,27	
218	FTIR	0,540	-0,0340	-0,96	-0,38	
219	FTIR	0,770	0,1960	5,55	2,20	
220	FTIR	0,560	-0,0140	-0,40	-0,16	
221	FTIR	0,670	0,0960	2,72	1,08	
223	FTIR	0,620	0,0460	1,30	0,52	
224	FTIR	0,490	-0,0840	-2,38	-0,94	
225	FTIR	0,582	0,0080	0,23	0,09	

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
226	FTIR	0,560	-0,0140	-0,40	-0,16	
227	FTIR	0,720	0,1460	4,14	1,64	
228	FTIR	0,600	0,0260	0,74	0,29	
229	FTIR	0,468	-0,1060	-3,00	-1,19	
231	FTIR	0,580	0,0060	0,17	0,07	
232	FTIR	0,730	0,1560	4,42	1,75	
234	FTIR	0,480	-0,0940	-2,66	-1,05	
235	FTIR	0,590	0,0160	0,45	0,18	
236	FTIR	0,560	-0,0140	-0,40	-0,16	
237	FTIR	0,700	0,1260	3,57	1,41	
240	FTIR	0,630	0,0560	1,59	0,63	
241	FTIR	0,830	0,2560	7,25	2,87	
242	FTIR	0,670	0,0960	2,72	1,08	
243	FTIR	0,670	0,0960	2,72	1,08	
244	FTIR	0,650	0,0760	2,15	0,85	
245	FTIR	0,730	0,1560	4,42	1,75	
246	FTIR	0,640	0,0660	1,87	0,74	
247	FTIR	0,690	0,1160	3,29	1,30	
249	FTIR	0,650	0,0760	2,15	0,85	
250	FTIR	0,460	-0,1140	-3,23	-1,28	
251	FTIR	0,630	0,0560	1,59	0,63	
252	FTIR	0,630	0,0560	1,59	0,63	
254	FTIR	0,610	0,0360	1,02	0,40	
256	FTIR	0,780	0,2060	5,84	2,31	
257	FTIR	0,680	0,1060	3,00	1,19	
258	FTIR	0,520	-0,0540	-1,53	-0,61	
260	FTIR	0,600	0,0260	0,74	0,29	
261	FTIR	0,440	-0,1340	-3,80	-1,50	
262	FTIR	0,230	-0,3440	-9,75	-3,86	
263	FTIR	0,610	0,0360	1,02	0,40	
264	FTIR	0,540	-0,0340	-0,96	-0,38	
265	FTIR	0,570	-0,0040	-0,11	-0,04	
266	FTIR	0,560	-0,0140	-0,40	-0,16	
267	FTIR	0,610	0,0360	1,02	0,40	
268	FTIR	0,580	0,0060	0,17	0,07	
269	FTIR	0,950	0,3760	10,65	4,22	
270	FTIR	0,580	0,0060	0,17	0,07	
271	FTIR	0,460	-0,1140	-3,23	-1,28	
272	FTIR	0,540	-0,0340	-0,96	-0,38	
273	FTIR	0,550	-0,0240	-0,68	-0,27	
274	FTIR	3,770	3,1960	90,54	35,87	(*)
275	FTIR	0,590	0,0160	0,45	0,18	
276	FTIR	0,540	-0,0340	-0,96	-0,38	
277	FTIR	0,490	-0,0840	-2,38	-0,94	
278	FTIR	0,600	0,0260	0,74	0,29	
279	FTIR	0,590	0,0160	0,45	0,18	
280	FTIR	0,530	-0,0440	-1,25	-0,49	
281	FTIR	0,640	0,0660	1,87	0,74	
282	FTIR	0,600	0,0260	0,74	0,29	
283	FTIR	0,600	0,0260	0,74	0,29	
284	FTIR	0,470	-0,1040	-2,95	-1,17	
319	FTIR	0,630	0,0560	1,59	0,63	
320	FTIR	0,570	-0,0040	-0,11	-0,04	
336	FTIR	0,560	-0,0140	-0,40	-0,16	
337	FTIR	0,610	0,0360	1,02	0,40	
349	FTIR	0,760	0,1860	5,27	2,09	
364	FTIR	0,530	-0,0440	-1,25	-0,49	
368	FTIR	0,575	0,0010	0,03	0,01	

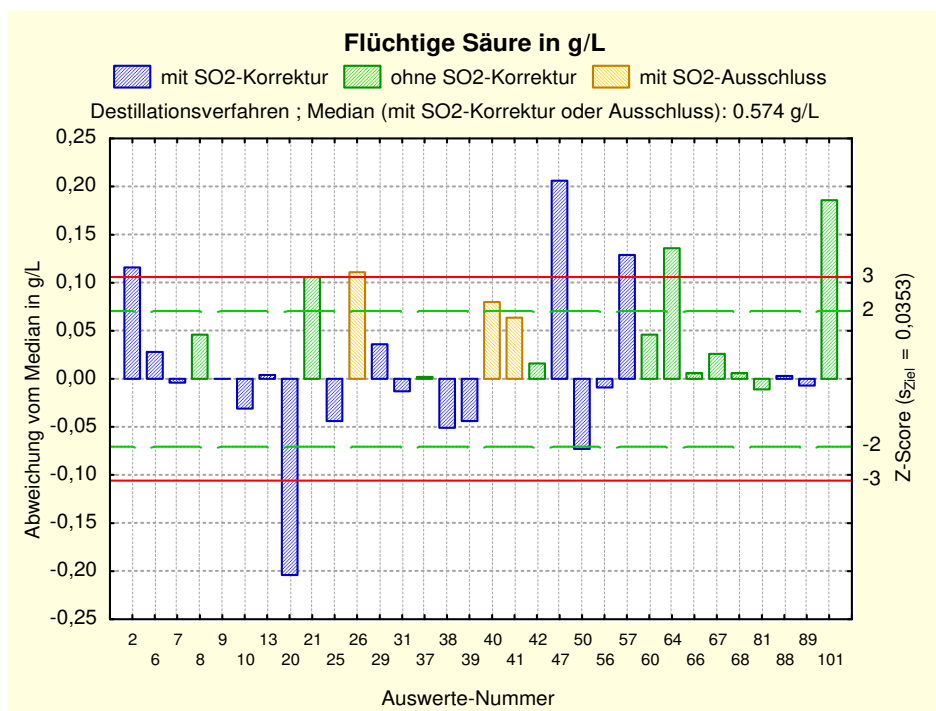
(\*) Dieser Wert weicht um mehr als 50 % vom Bezugswert ab.

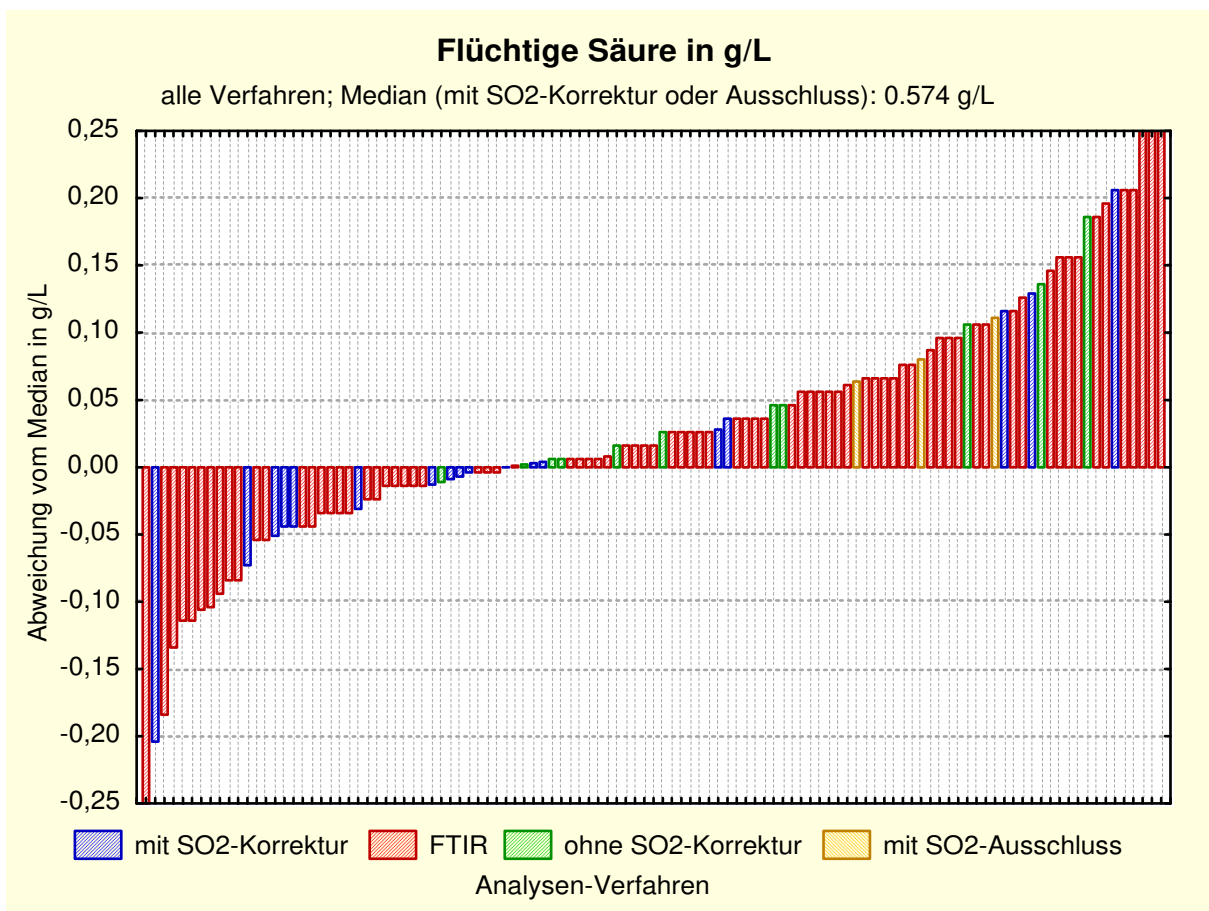
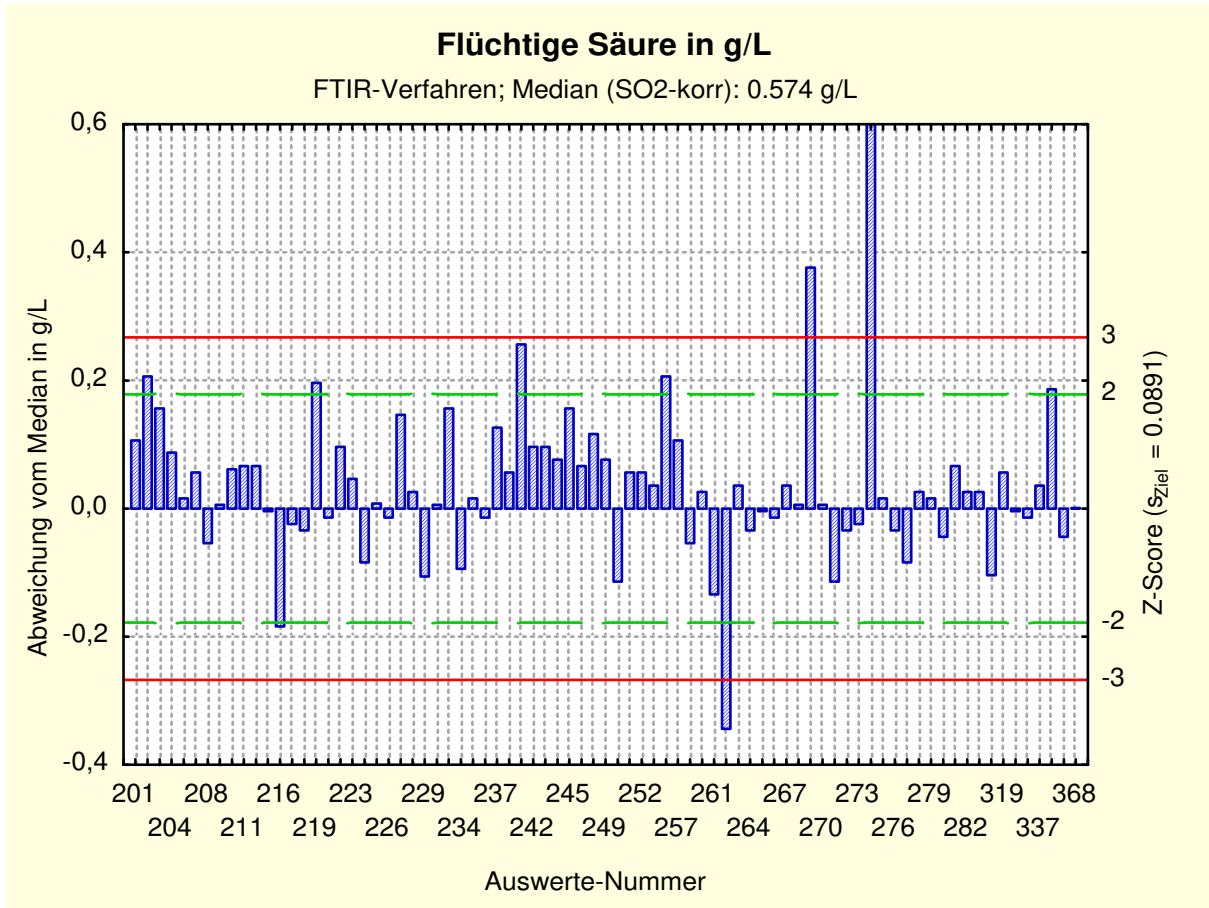
**5.11.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Destillationsverfahren**

Ergebnisse für Flüchtige Säure [g/L] nur Destillationsverfahren mit SO <sub>2</sub> -Korrektur	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	21	19
Minimalwert	0,370	0,501
Mittelwert	0,5881	0,5895
Median	0,5740	0,5740
Maximalwert	0,780	0,703
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,086	0,059
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,019	0,014
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,035	0,035
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp</sub> herk.)	0,029	0,029
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>Ü</sub> FTIR)	0,089	0,089
Horrrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	2,44	1,68
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp</sub> herk.)	3,01	2,08
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>Ü</sub> FTIR)	0,97	0,66
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,53	0,39
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp</sub> herk.)	0,66	0,48
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>Ü</sub> FTIR)	0,21	0,16

**5.11.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
Halbmikro	Halbmikrodestillation n. AVV			
SO <sub>2</sub> unber.	SO <sub>2</sub> -Einfluss nicht berücksichtigt	7	0,6358	0,0822
SO <sub>2</sub> korr.	SO <sub>2</sub> -Einfluss korrigiert	6	0,5639	0,0482
Wädenswil	Wädenswil-Verfahren			
SO <sub>2</sub> unber.	SO <sub>2</sub> -Einfluss nicht berücksichtigt	3	0,5931	0,0257
Gerhardt	Destillationsapparat Gerhardt			
SO <sub>2</sub> ausg.	SO <sub>2</sub> -Einfluss ausgeschlossen	3	0,6589	0,0273
SO <sub>2</sub> korr.	SO <sub>2</sub> -Einfluss korrigiert	8	0,5622	0,0901
OIV	OIV-MA-AS-313-02			
SO <sub>2</sub> -korr.	einschl. SO <sub>2</sub> -Korrektur	3	0,6103	0,0685
o. SO <sub>2</sub> -korr.	ohne SO <sub>2</sub> -Korrektur	1	0,6200	
Rentschler mod	Verfahren n. Rentschler mod. Dr. Nilles			
SO <sub>2</sub> -korr.	SO <sub>2</sub> -Einfluss korrigiert	1	0,5650	
	Destillationsverfahren mit SO <sub>2</sub> -Korrektur	21	0,5884	0,0732
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	79	0,6029	0,0869





**5.12 Acetat (als Essigsäure) [g/L]****5.12.1 Herkömmliche Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	0,483	-0,064	-1,89	
06	enzymat. autom.	0,549	0,002	0,06	
07	enzymat. autom.	0,490	-0,057	-1,68	
11	enzymat. autom.	0,600	0,053	1,56	
14	enzymat. autom.	0,640	0,093	2,74	
15	enzymat. autom.	0,530	-0,017	-0,50	
22	NMR	0,480	-0,067	-1,98	
25	enzymat. autom.	0,530	-0,017	-0,50	
26	HPLC	0,760	0,213	6,29	(**)
29	enzymat. autom.	0,630	0,083	2,45	
31	enzymat. autom.	0,530	-0,017	-0,50	
38	enzymat. autom.	0,520	-0,027	-0,80	
39	HPLC	0,529	-0,018	-0,53	
41	enzymat. autom.	0,545	-0,002	-0,06	
44	enzymat. autom.	0,560	0,013	0,38	
47	enzymat. autom.	0,630	0,083	2,45	
48	enzymat. autom.	0,440	-0,107	-3,16	
50	enzymat. Hand	0,443	-0,104	-3,07	
53	enzymat. autom.	0,660	0,113	3,33	
56	enzymat. autom.	0,577	0,030	0,89	
57	enzymat. autom.	0,560	0,013	0,38	
61	enzymat. autom.	0,700	0,153	4,52	
69	enzymat. autom.	0,600	0,053	1,56	
84	HPLC	0,570	0,023	0,68	
89	NMR	0,533	-0,014	-0,41	
92	enzymat. autom.	0,520	-0,027	-0,80	
94	HPLC	0,540	-0,007	-0,21	
103	NMR	0,485	-0,062	-1,83	
104	NMR	0,508	-0,039	-1,16	
105	NMR	0,558	0,011	0,32	
106	NMR	0,463	-0,084	-2,49	
107	NMR	0,563	0,016	0,47	
209	FTIR	0,600	0,053	1,56	
212	FTIR	0,570	0,023	0,68	
222	FTIR	0,630	0,083	2,45	
241	FTIR	0,540	-0,007	-0,21	
259	FTIR	0,850	0,303	8,94	(*)
260	FTIR	0,580	0,033	0,97	
284	FTIR	<=0			

(\*) Dieser Wert weicht um mehr als 50 % vom Median der herkömmlichen Werte ab.

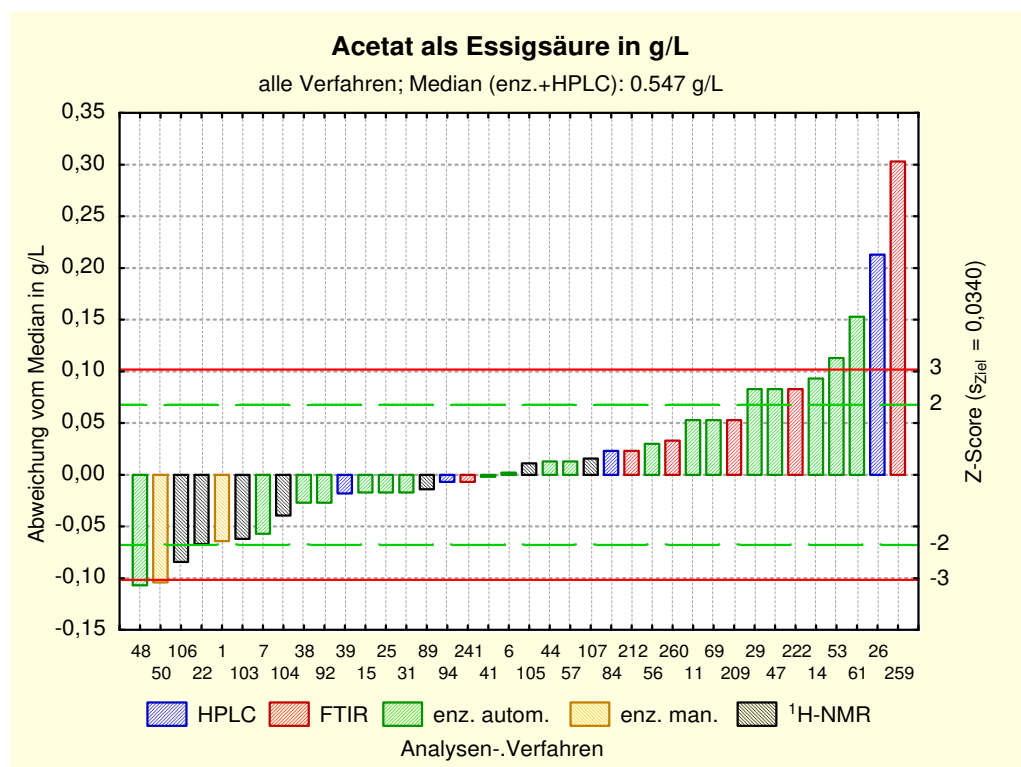
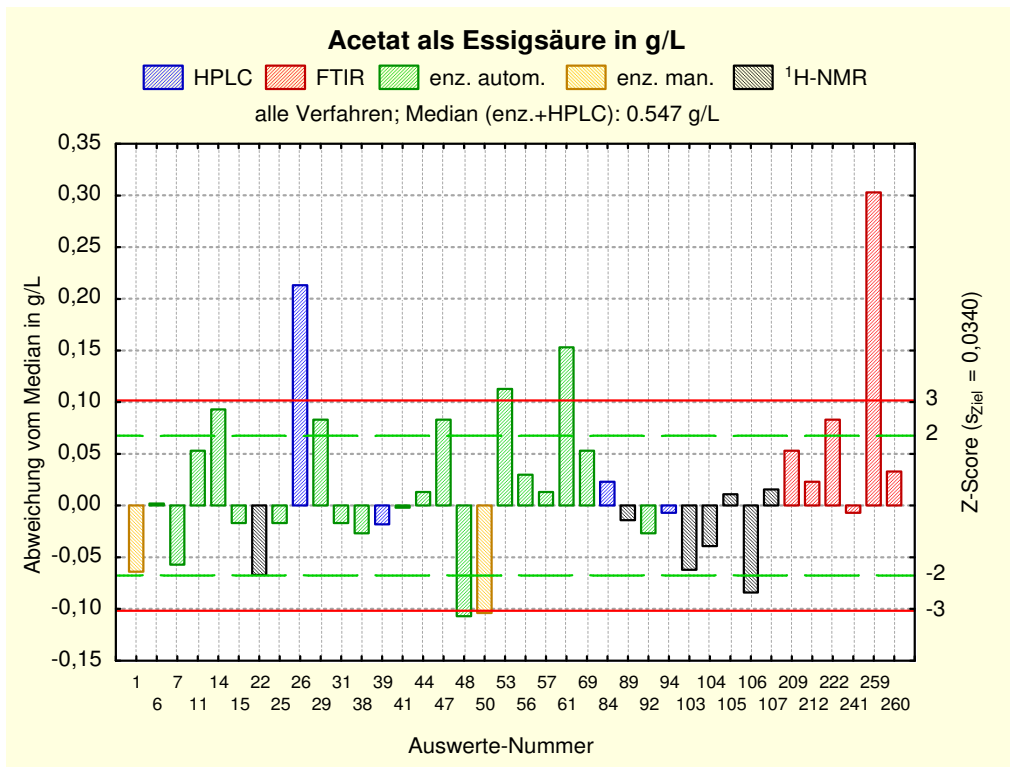
(\*\*) Dieser Wert bleibt wiederholten Berechnung unberücksichtigt.

**5.12.2 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse für Acetat (als Essigsäure) [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	25	24
Minimalwert	0,440	0,440
Mittelwert	0,565	0,557
Median	0,549	0,547
Maximalwert	0,760	0,700
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,075	0,065
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,015	0,013
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,034	0,034
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp herk.</sub> )		
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>Ü FTIR</sub> )		
Horvat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	2,21	1,90
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )		
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )		
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,44	0,39
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )		
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )		

5.12.3 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	4	0,5968	0,1162
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert	19	0,5682	0,0629
enzymat. Hand	enzymatisch, manuell	2	0,4630	0,0321
	herkömmliche Verfahren	25	0,5600	0,0664
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	6	0,6024	0,0615
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	7	0,5127	0,0447



## 5.13 Gesamte Äpfelsäure und L-Äpfelsäure [g/L]

### 5.13.1 Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enzymat. Hand	0,491	-0,139	-3,64	-4,10	
02	IC	0,650	0,020	0,52	0,59	
06	HPLC	0,530	-0,100	-2,62	-2,95	
07	HPLC	0,708	0,078	2,04	2,30	
08	HPLC	0,740	0,110	2,88	3,24	
21	HPLC	0,510	-0,120	-3,14	-3,54	
22	NMR	0,500	-0,130	-3,40	-3,83	
39	HPLC	1,450	0,820	21,46	24,19	(*)
50	HPLC	0,840	0,210	5,50	6,19	(**)
81	enzymat. Hand	0,520	-0,110	-2,88	-3,24	
84	HPLC	0,610	-0,020	-0,52	-0,59	
86	enzymat. Hand	0,812	0,182	4,76	5,37	
94	HPLC	0,790	0,160	4,19	4,72	
103	NMR	0,600	-0,030	-0,79	-0,88	
104	NMR	0,548	-0,082	-2,15	-2,42	
105	NMR	0,501	-0,129	-3,38	-3,81	
106	NMR	0,440	-0,190	-4,97	-5,60	(***)
107	NMR	0,821	0,191	4,99	5,63	

(\*) Dieser Wert weicht um mehr als 50 % vom Median ab und bleibt unberücksichtigt.

(\*\*) Dieser Wert wurde bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

(\*\*\*) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der herkömmlichen Werte ab.

### 5.13.2 Laborergebnisse L-Äpfelsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enz.(L-) Hand	0,491	-0,044	-1,32	-1,40	
06	enz.(L-), autom.	0,542	0,007	0,21	0,22	
07	enz.(L-), autom.	0,570	0,035	1,05	1,11	
09	enz.(L-) Hand	0,500	-0,035	-1,05	-1,11	
10	enz.(L-), autom.	0,495	-0,040	-1,20	-1,27	
11	enz.(L-), autom.	0,710	0,175	5,26	5,56	(**)
15	enz.(L-), autom.	0,540	0,005	0,15	0,16	
25	enz.(L-), autom.	0,930	0,395	11,88	12,54	(*)
29	enz.(L-), autom.	0,600	0,065	1,95	2,06	
31	enz.(L-), autom.	0,590	0,055	1,65	1,75	
38	enz.(L-), autom.	0,850	0,315	9,47	10,00	(*)
40	enz.(L-), autom.	0,660	0,125	3,76	3,97	
41	enz.(L-), autom.	0,535	0,000	0,00	0,00	
42	enz.(L-), autom.	0,480	-0,055	-1,65	-1,75	
44	enz.(L-), autom.	0,910	0,375	11,28	11,91	(*)
47	enz.(L-), autom.	0,680	0,145	4,36	4,60	
48	enz.(L-), autom.	0,600	0,065	1,95	2,06	
56	enz.(L-), autom.	0,480	-0,055	-1,65	-1,75	
57	enz.(L-), autom.	0,630	0,095	2,86	3,02	
61	enz.(L-), autom.	0,730	0,195	5,86	6,19	(**)
64	enz.(L-) Hand	0,490	-0,045	-1,35	-1,43	
69	enz.(L-), autom.	0,540	0,005	0,15	0,16	
81	enz.(L-) Hand	0,478	-0,057	-1,71	-1,81	
86	enz.(L-) Hand	0,786	0,251	7,55	7,97	(**)
88	enz.(L-), autom.	0,463	-0,072	-2,17	-2,29	
92	enz.(L-), autom.	0,450	-0,085	-2,56	-2,70	
101	enz.(L-) Hand	0,494	-0,041	-1,24	-1,31	

(\*) Diese Werte weichen um mehr als 50 % vom Median ab und bleiben unberücksichtigt.

(\*\*) Diese Werte wurden bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

### 5.13.3 FTIR-Laboreergebnisse Gesamte Äpfelsäure

#### Hinweis:

Der Gehalt an Gesamter Äpfelsäure liegt unterhalb der Bestimmungsgrenze des FTIR-Verfahrens. Daher werden keine Z-Score ausgewiesen.

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	0,270	-0,360			(*)
202	FTIR	0,600	-0,030			
203	FTIR	-0,050	-0,680			(*)
204	FTIR	0,189	-0,441			(*)
205	FTIR	<= 0				
206	FTIR	0,620	-0,010			
208	FTIR	0,400	-0,230			
209	FTIR	0,650	0,020			
211	FTIR	0,370	-0,260			
212	FTIR	0,960	0,330			
214	FTIR	1,000	0,370			
215	FTIR	0,460	-0,170			
216	FTIR	0,130	-0,500			(*)
217	FTIR	0,480	-0,150			
218	FTIR	0,490	-0,140			
219	FTIR	0,300	-0,330			(*)
220	FTIR	0,700	0,070			
221	FTIR	0,580	-0,050			
222	FTIR	0,620	-0,010			
223	FTIR	0,400	-0,230			
224	FTIR	0,200	-0,430			(*)
225	FTIR	0,740	0,110			
226	FTIR	0,600	-0,030			
227	FTIR	0,320	-0,310			(*)
228	FTIR	<= 0				
229	FTIR	0,410	-0,220			
231	FTIR	0,650	0,020			
232	FTIR	0,290	-0,340			(*)
234	FTIR	0,560	-0,070			
236	FTIR	0,410	-0,220			
237	FTIR	0,400	-0,230			
240	FTIR	0,480	-0,150			
241	FTIR	<= 0				
242	FTIR	0,430	-0,200			
243	FTIR	0,500	-0,130			
244	FTIR	0,450	-0,180			
245	FTIR	1,190	0,560			(*)
246	FTIR	0,300	-0,330			(*)
247	FTIR	0,740	0,110			
249	FTIR	0,600	-0,030			
250	FTIR	0,670	0,040			
252	FTIR	0,210	-0,420			(*)
254	FTIR	0,400	-0,230			
256	FTIR	0,350	-0,280			
257	FTIR	0,550	-0,080			
258	FTIR	0,310	-0,320			(*)
259	FTIR	0,750	0,120			
260	FTIR	<= 0				
261	FTIR	0,400	-0,230			
262	FTIR	0,300	-0,330			(*)
264	FTIR	<= 0				
265	FTIR	0,790	0,160			
266	FTIR	0,120	-0,510			(*)
267	FTIR	0,750	0,120			
268	FTIR	0,550	-0,080			
269	FTIR	0,810	0,180			
270	FTIR	0,500	-0,130			
271	FTIR	0,270	-0,360			(*)
272	FTIR	0,800	0,170			
273	FTIR	0,400	-0,230			

(\*) Diese Werte weichen um mehr als 50 % vom Median der herkömmlichen Werte ab.

<=0: Fehlerhafte Angaben von Ergebnissen unter Bestimmungsgrenze als "0" wurden vom Auswerter ersetzt.



**Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
274	FTIR	0,090	-0,540			(*)
275	FTIR	0,200	-0,430			(*)
276	FTIR	0,500	-0,130			
277	FTIR	0,070	-0,560			(*)
278	FTIR	0,330	-0,300			(*)
279	FTIR	0,600	-0,030			
280	FTIR	0,900	0,270			
281	FTIR	0,480	-0,150			
282	FTIR	1,210	0,580			(*)
283	FTIR	0,700	0,070			
284	FTIR	0,490	-0,140			
319	FTIR	<= 0				
320	FTIR	0,310	-0,320			(*)
336	FTIR	0,410	-0,220			
337	FTIR	0,300	-0,330			(*)
349	FTIR	<= 0				
364	FTIR	<= 0				

(\*) Diese Werte weichen um mehr als 50 % vom Median der herkömmlichen Werte ab.

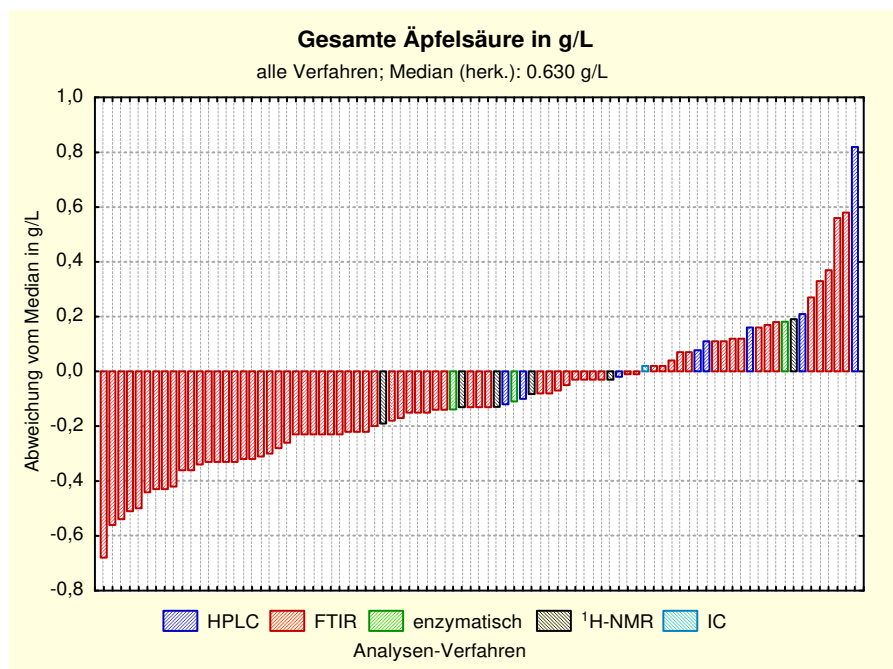
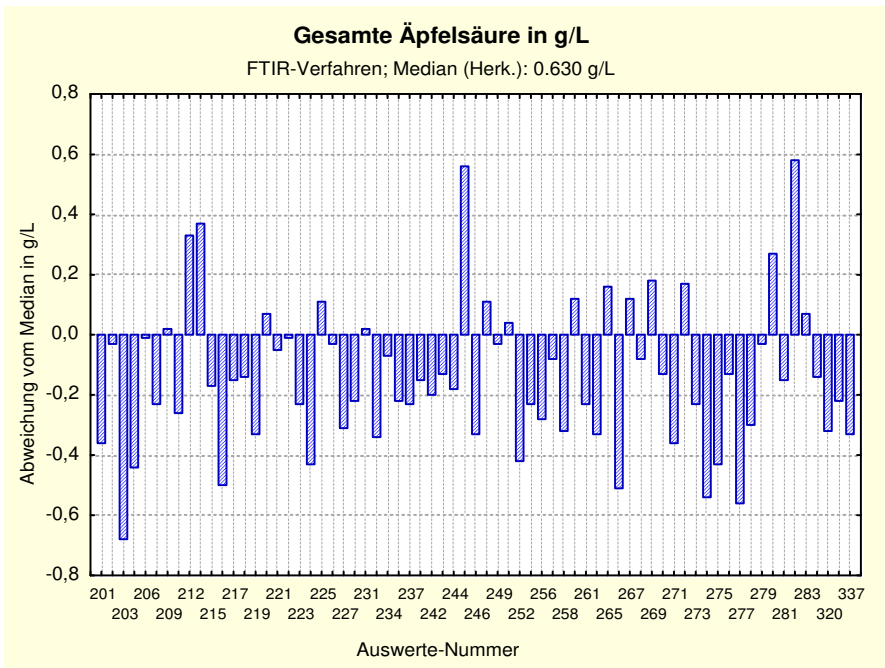
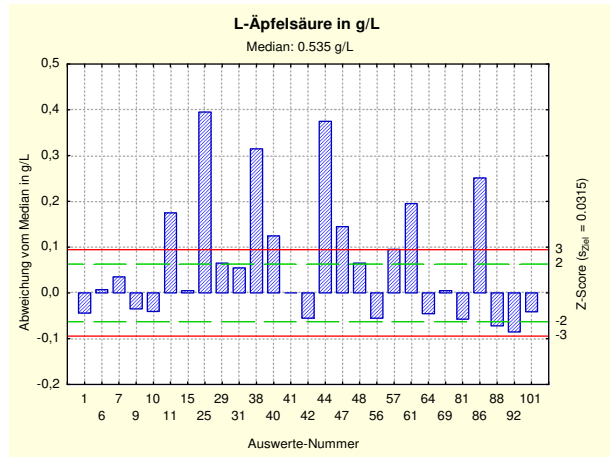
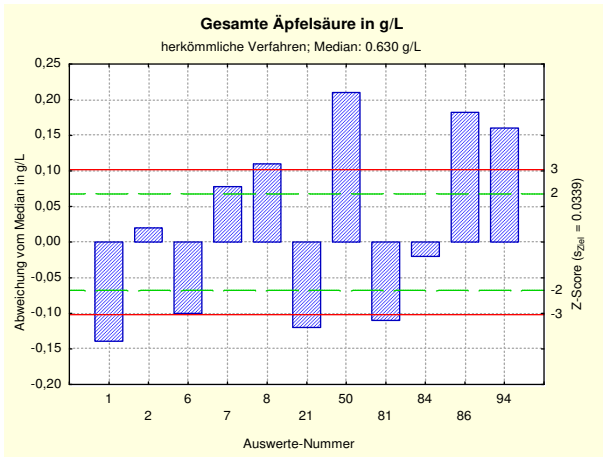
<=0: Fehlerhafte Angaben von Ergebnissen unter Bestimmungsgrenze als "0" wurden vom Auswerter ersetzt.

**5.13.4 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse [g/L]	Gesamte Äpfelsäure		L-Äpfelsäure	
	alle Daten	ber. Daten	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	11	10	24	21
Minimalwert	0,49	0,49	0,45	0,45
Mittelwert	0,655	0,636	0,564	0,538
Median	0,650	0,630	0,540	0,535
Maximalwert	0,84	0,81	0,79	0,68
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,131	0,122	0,093	0,066
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,039	0,038	0,019	0,015
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,039	0,038	0,034	0,033
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp}$ )	0,034	0,034	0,032	0,031
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\bar{U}_{FTIR}}$ )	(0,218)	(0,218)		
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	3,33	3,18	2,78	2,00
Quotient ( $s_L/s_{exp}$ )	3,80	3,59	2,95	2,11
Quotient ( $s_L/s_{\bar{U}_{FTIR}}$ )	(0,60)	(0,56)		
Quotient ( $u_M/s_H$ )	1,00	1,01	0,57	0,44
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	1,15	1,13	0,60	0,46
Quotient ( $u_M/s_{\bar{U}_{FTIR}}$ )	(0,18)	(0,17)		

**5.13.5 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	8	0,7150	0,1848
enzymat. Hand	D- und L-Äpfelsäure, enzymatisch, manuell	3	0,5904	0,1675
IC	Ionenchromatographie	1	0,6500	
	herkömmliche Verfahren ohne IC: Ges. Äpfelsäure	12	0,6775	0,1675
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	69	0,4803	0,2340
NMR	$^1\text{H}$ -Kernresonanzspektroskopie	6	0,5506	0,1093
enz.(L-), autom.	enzymatisch nur L-Form, automatisiert	21	0,6035	0,1262
enz.(L-) Hand	enzymatisch nur L-Form, manuell	6	0,4950	0,0134
	alle Verfahren L-Äpfelsäure	27	0,5829	0,1178



## 5.14 Gesamte Milchsäure und L-Milchsäure [g/L]

### 5.14.1 Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Milchsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	3,01	-0,292	-1,87	
06	enzymat. autom.	3,28	-0,022	-0,14	
07	HPLC	3,16	-0,142	-0,91	
08	enzymat. Hand	3,40	0,098	0,63	
09	enzymat. Hand	3,18	-0,122	-0,78	
10	enzymat. autom.	3,07	-0,232	-1,49	
21	HPLC	2,00	-1,302	-8,35	(**)
22	NMR	3,11	-0,192	-1,23	
26	HPLC	3,10	-0,202	-1,30	
39	HPLC	2,32	-0,982	-6,29	(**)
50	HPLC	3,37	0,068	0,43	
64	enzymat. Hand	3,44	0,135	0,86	
69	enzymat. autom.	3,05	-0,252	-1,62	
81	enzymat. Hand	3,68	0,374	2,39	
84	HPLC	3,31	0,008	0,05	
86	enzymat. Hand	3,35	0,044	0,28	
88	enzymat. autom.	3,54	0,240	1,54	
92	enzymat. autom.	3,44	0,138	0,88	
94	HPLC	2,91	-0,392	-2,51	
101	enzymat. Hand	3,30	0,000	0,00	
103	NMR	2,80	-0,502	-3,22	
104	NMR	2,93	-0,368	-2,36	
105	NMR	3,07	-0,232	-1,49	
106	NMR	2,74	-0,563	-3,61	
107	NMR	3,08	-0,222	-1,42	

(\*\*) Diese Werte wurden bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

### 5.14.2 Laborergebnisse L-Milchsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enz.(L-) Hand	3,01	0,302	2,29	2,18	
06	enz.(L-) autom.	2,70	-0,008	-0,06	-0,06	
09	enz.(L-) Hand	2,61	-0,098	-0,75	-0,71	
10	enz.(L-) autom.	2,55	-0,160	-1,21	-1,16	
11	enz.(L-) autom.	2,74	0,032	0,24	0,23	
15	enz.(L-) autom.	2,70	-0,008	-0,06	-0,06	
25	enz.(L-) autom.	2,50	-0,208	-1,58	-1,51	
29	enz.(L-) autom.	3,10	0,392	2,97	2,83	
31	enz.(L-) autom.	2,92	0,212	1,60	1,53	
38	enz.(L-) autom.	2,26	-0,448	-3,40	-3,24	
40	enz.(L-) autom.	1,87	-0,838	-6,36	-6,06	(**)
41	enz.(L-) autom.	2,59	-0,123	-0,94	-0,89	
42	enz.(L-) autom.	2,54	-0,166	-1,26	-1,20	
44	enz.(L-) autom.	2,55	-0,158	-1,20	-1,14	
47	enz.(L-) autom.	2,78	0,072	0,54	0,52	
48	enz.(L-) autom.	2,40	-0,308	-2,34	-2,23	
56	enz.(L-) autom.	2,64	-0,068	-0,52	-0,49	
57	enz.(L-) autom.	2,80	0,092	0,69	0,66	
61	enz.(L-) autom.	1,10	-1,608	-12,20	-11,62	(*)
64	enz.(L-) Hand	2,82	0,110	0,83	0,79	
69	enz.(L-) autom.	2,52	-0,184	-1,39	-1,33	
81	enz.(L-) Hand	2,96	0,256	1,94	1,85	
86	enz.(L-) Hand	2,72	0,013	0,10	0,09	
88	enz.(L-) autom.	3,00	0,290	2,20	2,09	
92	enz.(L-) autom.	2,89	0,182	1,38	1,31	
101	enz.(L-) Hand	2,72	0,008	0,06	0,06	

(\*) Dieser Wert weicht um mehr als 50 % vom Median ab und bleibt unberücksichtigt.

(\*\*) Dieser Wert wurde bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

**5.14.3 FTIR-Laboregebnisse Gesamte Milchsäure**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	3,30	0,009	0,06	0,04	
202	FTIR	3,01	-0,281	-1,81	-1,35	
203	FTIR	2,65	-0,641	-4,12	-3,07	
204	FTIR	2,62	-0,675	-4,34	-3,23	
205	FTIR	3,47	0,179	1,15	0,86	
206	FTIR	3,50	0,209	1,34	1,00	
208	FTIR	3,10	-0,191	-1,23	-0,91	
209	FTIR	3,24	-0,051	-0,33	-0,24	
211	FTIR	2,49	-0,801	-5,15	-3,83	
212	FTIR	2,57	-0,721	-4,63	-3,45	
214	FTIR	3,00	-0,291	-1,87	-1,39	
215	FTIR	2,32	-0,971	-6,24	-4,65	
216	FTIR	2,59	-0,701	-4,51	-3,36	
217	FTIR	3,49	0,199	1,28	0,95	
218	FTIR	3,28	-0,011	-0,07	-0,05	
219	FTIR	2,60	-0,691	-4,44	-3,31	
220	FTIR	2,94	-0,351	-2,26	-1,68	
221	FTIR	2,44	-0,851	-5,47	-4,07	
222	FTIR	3,42	0,129	0,83	0,62	
223	FTIR	2,80	-0,491	-3,16	-2,35	
224	FTIR	2,86	-0,431	-2,77	-2,06	
225	FTIR	2,47	-0,821	-5,28	-3,93	
226	FTIR	2,80	-0,491	-3,16	-2,35	
227	FTIR	2,72	-0,571	-3,67	-2,73	
228	FTIR	2,99	-0,301	-1,94	-1,44	
229	FTIR	3,31	0,019	0,12	0,09	
231	FTIR	2,99	-0,301	-1,94	-1,44	
232	FTIR	2,86	-0,431	-2,77	-2,06	
234	FTIR	3,39	0,099	0,63	0,47	
236	FTIR	2,48	-0,811	-5,21	-3,88	
237	FTIR	2,60	-0,691	-4,44	-3,31	
240	FTIR	2,91	-0,381	-2,45	-1,82	
241	FTIR	2,60	-0,691	-4,44	-3,31	
242	FTIR	3,32	0,029	0,19	0,14	
243	FTIR	2,50	-0,791	-5,08	-3,79	
244	FTIR	2,51	-0,781	-5,02	-3,74	
245	FTIR	3,03	-0,261	-1,68	-1,25	
246	FTIR	3,00	-0,291	-1,87	-1,39	
247	FTIR	2,92	-0,371	-2,39	-1,78	
249	FTIR	2,90	-0,391	-2,51	-1,87	
250	FTIR	2,95	-0,341	-2,19	-1,63	
252	FTIR	2,74	-0,551	-3,54	-2,64	
254	FTIR	2,90	-0,391	-2,51	-1,87	
256	FTIR	3,31	0,019	0,12	0,09	
257	FTIR	2,80	-0,491	-3,16	-2,35	
258	FTIR	2,36	-0,931	-5,98	-4,46	
259	FTIR	2,22	-1,071	-6,88	-5,13	(**)
260	FTIR	2,20	-1,091	-7,01	-5,22	(**)
261	FTIR	3,20	-0,091	-0,59	-0,44	
262	FTIR	2,70	-0,591	-3,80	-2,83	
264	FTIR	3,20	-0,091	-0,59	-0,44	
265	FTIR	3,39	0,099	0,63	0,47	
266	FTIR	2,50	-0,791	-5,08	-3,79	
267	FTIR	2,87	-0,421	-2,71	-2,02	
268	FTIR	3,30	0,009	0,06	0,04	
269	FTIR	2,44	-0,851	-5,47	-4,07	
270	FTIR	2,20	-1,091	-7,01	-5,22	(**)
271	FTIR	2,65	-0,641	-4,12	-3,07	
272	FTIR	2,50	-0,791	-5,08	-3,79	
273	FTIR	2,94	-0,351	-2,26	-1,68	
274	FTIR	2,84	-0,451	-2,90	-2,16	
275	FTIR	2,70	-0,591	-3,80	-2,83	
276	FTIR	2,40	-0,891	-5,73	-4,26	
277	FTIR	2,88	-0,411	-2,64	-1,97	

(\*\*) Diese Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der herkömmlichen Werte ab.

**Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse**

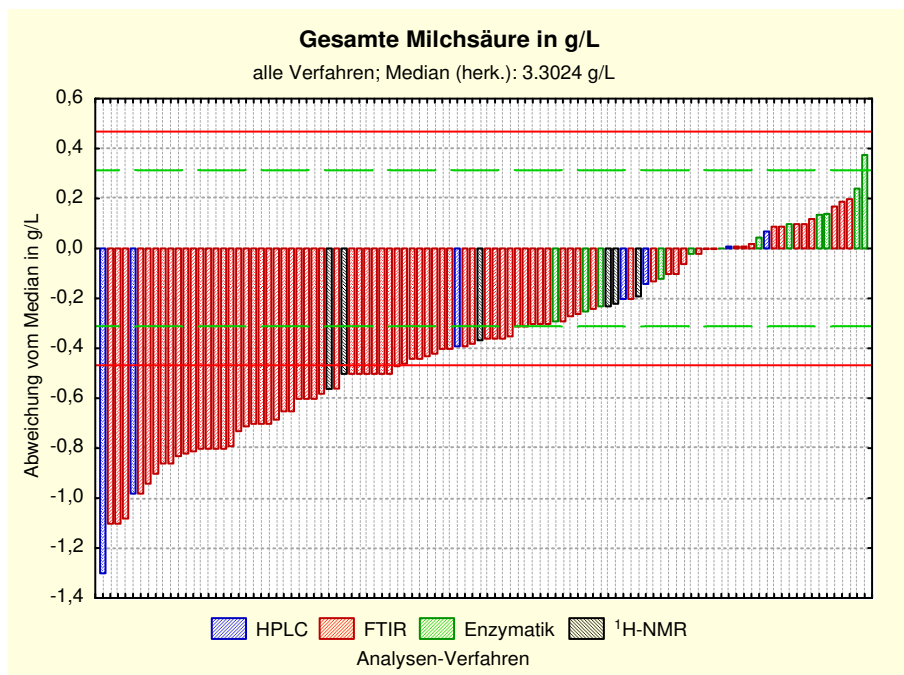
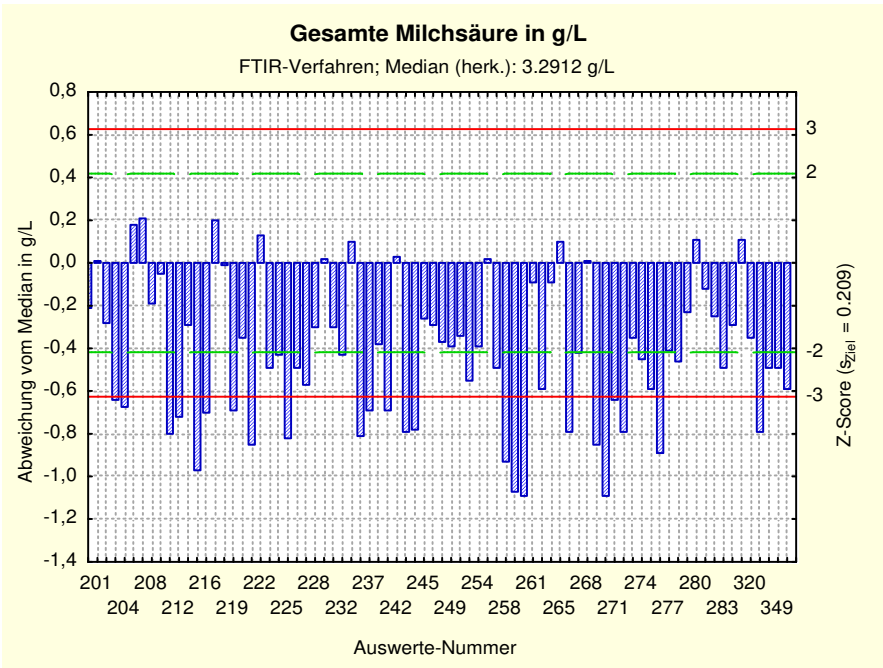
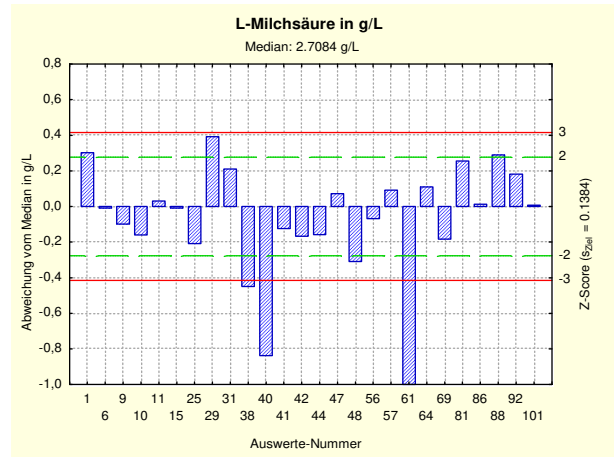
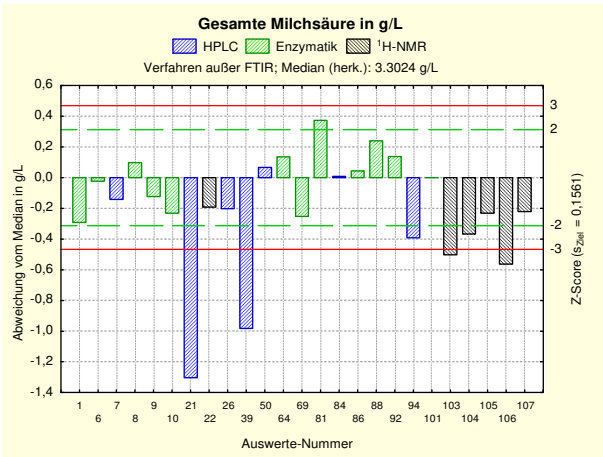
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
278	FTIR	2,83	-0,461	-2,96	-2,21	
279	FTIR	3,06	-0,231	-1,49	-1,11	
280	FTIR	3,40	0,109	0,70	0,52	
281	FTIR	3,17	-0,121	-0,78	-0,58	
282	FTIR	3,04	-0,251	-1,61	-1,20	
283	FTIR	2,80	-0,491	-3,16	-2,35	
284	FTIR	3,00	-0,291	-1,87	-1,39	
319	FTIR	3,40	0,109	0,70	0,52	
320	FTIR	2,94	-0,351	-2,26	-1,68	
336	FTIR	2,50	-0,791	-5,08	-3,79	
337	FTIR	2,80	-0,491	-3,16	-2,35	
349	FTIR	2,80	-0,491	-3,16	-2,35	
364	FTIR	2,70	-0,591	-3,80	-2,83	

**5.14.4 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse [g/L]:	Gesamte Milchsäure		L-Milchsäure	
	alle Daten	ber. Daten	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	19	17	25	24
Minimalwert	2,00	2,91	1,87	2,26
Mittelwert	3,153	3,270	2,676	2,709
Median	3,280	3,302	2,700	2,708
Maximalwert	3,68	3,68	3,10	3,10
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,403	0,204	0,263	0,206
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,092	0,049	0,053	0,042
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,155	0,156	0,132	0,132
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp}$ )			0,138	0,138
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\bar{U}_{FTIR}}$ )	0,209	0,209		
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	2,60	1,31	2,00	1,56
Quotient ( $s_L/s_{exp}$ )			1,90	1,49
Quotient ( $s_L/s_{\bar{U}_{FTIR}}$ )	1,93	0,98		
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,60	0,32	0,40	0,32
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )			0,38	0,30
Quotient ( $u_M/s_{\bar{U}_{FTIR}}$ )	0,44	0,23		

**5.14.5 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	7	2,895	0,569
enzymat. autom.	D- und L-Milchsäure, enzymatisch, automatisiert	5	3,276	0,248
enzymat. Hand	D- und L-Milchsäure, enzymatisch, manuell	7	3,337	0,227
	herkömmliche Verfahren Ges. Milchsäure	19	3,221	0,260
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	77	2,867	0,370
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	6	2,965	0,162
enz.(L-) autom.	enzymatisch nur L-Form, automatisiert	20	2,627	0,273
enz.(L-) Hand	enzymatisch nur L-Form	6	2,806	0,175
	alle Verfahren L-Milchsäure	26	2,678	0,249



## 5.15 Reduktone [mg/L]

### 5.15.1 Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	Glyoxal/Stärke	4,0	-8,90	-6,34	(*)
06	Acetaldehyd/potent.	5,0	-7,90	-5,62	(*)
13	Glyoxal/potentiometr.	10,0	-2,90	-2,06	
14	Glyoxal/potentiometr.	9,0	-3,90	-2,78	
15	Glyoxal/Stärke	3,0	-9,90	-7,05	(*)
17	Glyoxal/Stärke	15,0	2,10	1,50	
18	Glyoxal/potentiometr.	18,1	5,20	3,70	
20	Glyoxal/Stärke	18,0	5,10	3,63	
21	Glyoxal/potentiometr.	25,0	12,10	8,61	(*)
22	Glyoxal/Stärke	18,0	5,10	3,63	
23	Glyoxal/Stärke	14,0	1,10	0,78	
25	Glyoxal/potentiometr.	11,2	-1,75	-1,25	
26	Propionaldehyd/Stärke	10,0	-2,90	-2,06	
28	Glyoxal/Stärke	13,0	0,10	0,07	
29	Glyoxal/Stärke	10,0	-2,90	-2,06	
31	Glyoxal/Stärke	12,0	-0,90	-0,64	
34	Glyoxal/Stärke	11,0	-1,90	-1,35	
35	Glyoxal/Stärke	22,0	9,10	6,48	(*)
36	Glyoxal/Stärke	14,0	1,10	0,78	
37	Glyoxal/Stärke	23,5	10,60	7,55	(*)
38	Glyoxal/Stärke	0,0	-12,90	-9,18	(*)
39	Glyoxal/potentiometr.	12,9	0,00	0,00	
41	Glyoxal/Stärke	12,0	-0,90	-0,64	
42	Glyoxal/Stärke	15,0	2,10	1,50	
43	Glyoxal/Stärke	2,0	-10,90	-7,76	(*)
46	Glyoxal/Stärke	13,0	0,10	0,07	
48	Glyoxal/Stärke	18,0	5,10	3,63	
50	Glyoxal/potentiometr.	5,0	-7,90	-5,62	(*)
52	Propionaldehyd/Stärke	14,0	1,10	0,78	
56	Glyoxal/MTT	4,7	-8,20	-5,84	(*)
60	Glyoxal/potentiometr.	9,0	-3,90	-2,78	
61	Glyoxal/Stärke	11,0	-1,90	-1,35	
64	Glyoxal/Stärke	14,0	1,10	0,78	
65	Glyoxal/Stärke	74,0	61,10	43,50	(*)
66	Glyoxal/potentiometr.	7,0	-5,90	-4,20	
67	Glyoxal/Stärke	14,0	1,10	0,78	
68	Glyoxal/potentiometr.	12,0	-0,90	-0,64	
69	Glyoxal/potentiometr.	11,3	-1,60	-1,14	
72	Glyoxal/potentiometr.	15,0	2,10	1,50	
74	Glyoxal/potentiometr.	9,0	-3,90	-2,78	
75	Glyoxal/Stärke	7,0	-5,90	-4,20	
77	Propionaldehyd/Stärke	16,0	3,10	2,21	
79	Glyoxal/potentiometr.	7,0	-5,90	-4,20	
80	Glyoxal/potentiometr.	5,0	-7,90	-5,62	(*)
81	Glyoxal/Stärke	16,8	3,90	2,78	
83	Glyoxal/potentiometr.	24,0	11,10	7,90	(*)
84	Glyoxal/potentiometr.	4,4	-8,50	-6,05	(*)
94	Glyoxal/potentiometr.	8,7	-4,25	-3,03	
101	Glyoxal/Stärke	16,0	3,10	2,21	

(\*) Diese Werte weichen mehr als 50 % vom Median ab. Sie wurden nicht berücksichtigt.

#### Anmerkung:

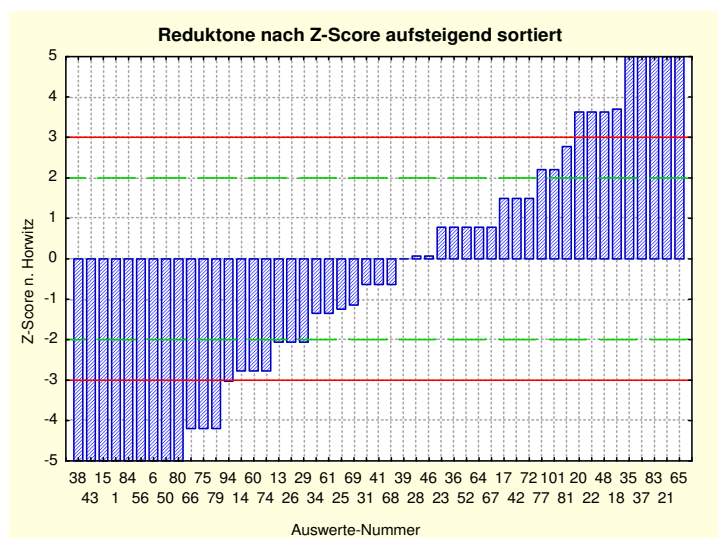
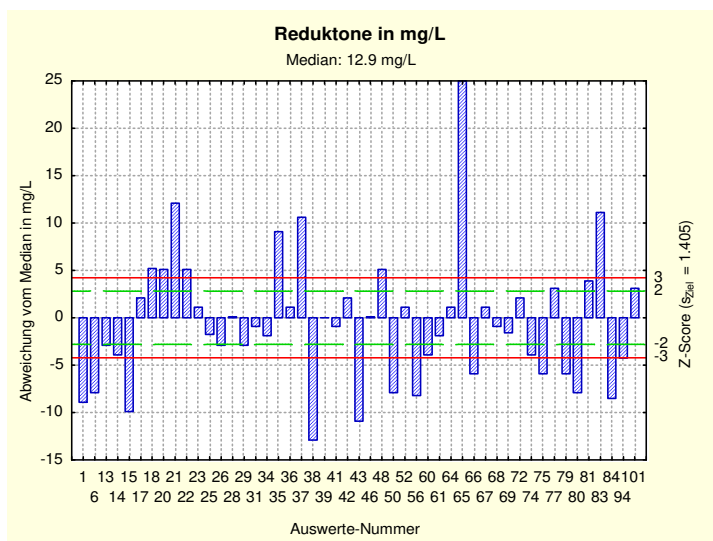
Die Bestimmung der Reduktone war geboten. Da der Quotient  $s_L/s_H$  über 2,0 liegt, stellen die Z-Score keine gültige Beschreibung der Laborleistung dar. Sie sind daher in grauer Schriftfarbe dargestellt.

### 5.15.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Reduktone [mg/L]	alle Daten
Gültige Werte	35
Minimalwert	7,0
Mittelwert	12,63
Median	12,90
Maximalwert	18,1
Standardabweichung (sL)	3,276
Standardfehler des Mittelwertes	0,554
Zielstandardabweichung n. Horwitz (sH)	1,405
Zielstandardabweichung, experimentell (sexp)	
Horrat-Wert (sL/s <sub>H</sub> )	<b>2,33</b>
Quotient (sL/s <sub>exp</sub> )	
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	<b>0,39</b>
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	

### 5.15.3 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
Acetaldehyd/potent.	SO <sub>2</sub> -Bindung mit Acetaldehyd; Platinelektrode	1	5,00	
Propionaldehyd/Stärke	SO <sub>2</sub> -Bindung mit Propionaldehyd; Stärke als Indikator	3	13,33	3,46
Glyoxal/Stärke	SO <sub>2</sub> -Bindung mit Glyoxal; Stärke als Indikator	26	13,27	6,19
Glyoxal/potentiometr.	SO <sub>2</sub> -Bindung mit Glyoxal; Platinelektrode	18	10,60	5,04
Glyoxal/MTT	SO <sub>2</sub> -Bindung mit Glyoxal; automat. phot. mit MTT	1	4,70	
	alle Verfahren	49	11,92	5,95





## 5.16 Freie Schweflige Säure [mg/L]

### 5.16.1 Laborergebnisse mit Destillations- und photometrischen Verfahren; FTIR

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse aus Destillations- und photometrischen Verfahren

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
05	LwK 6.3	37,0	13,64	5,86	(*)
06	LwK 6.2	21,6	-1,76	-0,76	
07	LwK 6.2	23,4	0,00	0,00	
09	LwK 6.2	21,9	-1,46	-0,63	
10	LwK 6.2	26,9	3,52	1,51	
11	LwK 6.3	19,0	-4,36	-1,87	
27	LwK 6.2	23,7	0,34	0,15	
44	LwK 6.3	27,0	3,64	1,56	
47	LwK 6.3	27,0	3,64	1,56	
48	LwK 6.3	18,0	-5,36	-2,30	
53	LwK 6.3	17,0	-6,36	-2,73	
55	LwK 6.4	22,0	-1,36	-0,58	
56	LwK 6.4	23,8	0,44	0,19	
57	LwK 6.4	22,7	-0,67	-0,29	
88	LwK 6.2	35,0	11,64	5,00	(**)
92	LwK 6.2	26,7	3,34	1,44	
100	LwK 6.2	25,2	1,84	0,79	
206	LwK 6.5	19,0	-4,36	-1,87	
207	LwK 6.5	24,1	0,74	0,32	
209	LwK 6.5	22,1	-1,26	-0,54	
210	LwK 6.5	22,5	-0,86	-0,37	
211	LwK 6.5	23,0	-0,36	-0,15	
218	LwK 6.5	21,5	-1,86	-0,80	
224	LwK 6.5	25,0	1,64	0,71	
237	LwK 6.5	24,0	0,64	0,28	
251	LwK 6.5	32,0	8,64	3,71	
252	LwK 6.5	28,0	4,64	1,99	
258	LwK 6.5	33,6	10,24	4,40	
262	LwK 6.5	10,0	-13,36	-5,74	(*)
263	LwK 6.5	23,0	-0,36	-0,15	
270	LwK 6.5	21,0	-2,36	-1,01	
284	LwK 6.5	25,0	1,64	0,71	
319	LwK 6.5	26,0	2,64	1,13	
336	LwK 6.5	28,0	4,64	1,99	
337	LwK 6.5	24,0	0,64	0,28	
364	LwK 6.5	38,0	14,64	6,29	(*)

(\*) Dieser Wert weicht mehr als 50 % vom Median ab und bleibt bei Berechnung unberücksichtigt.

(\*\*) Dieser Wert wurde bei der mit  $Z_{Max} = 4,5$  wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

(\*\*\*) Diese Werte weichen um mehr als 50 % vom Median der Ergebnisse aus Destillationsverfahren ab.

### 5.16.2 Deskriptive Ergebnisse für Destillations-, photometrische und FTIR-Verfahren

Ergebnisse für Freie Schweflige Säure [mg/L]	Destillation und Photometrie		Destillation, Photometrie + FTIR alle Daten
	alle Daten	$Z_{Max} = 4,5$ ber. Daten	
Gültige Werte	16	15	33
Minimalwert	17,0	17,0	17,0
Mittelwert	23,80	23,06	24,32
Median	23,53	23,36	23,80
Maximalwert	35,0	27,0	35,0
Standardabweichung ( $s_L$ )	4,335	3,252	4,036
Standardfehler des Mittelwertes	1,084	0,840	0,703
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	2,340	2,326	2,363
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp}$ )			
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	1,85	1,40	1,71
Quotient ( $s_L/s_{exp}$ )			
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,46	0,36	0,30
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )			

**5.16.3 Laborergebnisse, jodometrisch einschließlich Reduktone**

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmung einschließlich Reduktone

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	LwK 6.1(incl.Red.)	30,0	-1,00	-0,34	
13	LwK 6.1(incl.Red.)	31,0	0,00	0,00	
14	LwK 6.1(incl.Red.)	30,0	-1,00	-0,34	
15	LwK 6.1(incl.Red.)	25,0	-6,00	-2,03	
17	LwK 6.1(incl.Red.)	32,0	1,00	0,34	
18	LwK 6.1(incl.Red.)	38,4	7,40	2,50	
20	LwK 6.1(incl.Red.)	34,0	3,00	1,01	
21	LwK 6.1(incl.Red.)	45,0	14,00	4,73	
22	LwK 6.1(incl.Red.)	32,0	1,00	0,34	
23	LwK 6.1(incl.Red.)	31,0	0,00	0,00	
25	LwK 6.1(incl.Red.)	40,6	9,63	3,26	
26	LwK 6.1(incl.Red.)	28,0	-3,00	-1,01	
28	LwK 6.1(incl.Red.)	34,0	3,00	1,01	
29	LwK 6.1(incl.Red.)	30,0	-1,00	-0,34	
31	LwK 6.1(incl.Red.)	29,0	-2,00	-0,68	
34	LwK 6.1(incl.Red.)	30,0	-1,00	-0,34	
35	LwK 6.1(incl.Red.)	44,0	13,00	4,39	
36	LwK 6.1(incl.Red.)	40,0	9,00	3,04	
37	LwK 6.1(incl.Red.)	36,0	5,00	1,69	
38	LwK 6.1(incl.Red.)	26,0	-5,00	-1,69	
39	LwK 6.1(incl.Red.)	38,2	7,20	2,43	
40	LwK 6.1(incl.Red.)	29,0	-2,00	-0,68	
41	LwK 6.1(incl.Red.)	33,0	2,00	0,68	
42	LwK 6.1(incl.Red.)	34,0	3,00	1,01	
43	LwK 6.1(incl.Red.)	19,0	-12,00	-4,06	
46	LwK 6.1(incl.Red.)	34,0	3,00	1,01	
50	LwK 6.1(incl.Red.)	30,0	-1,00	-0,34	
52	LwK 6.1(incl.Red.)	32,0	1,00	0,34	
60	LwK 6.1(incl.Red.)	29,0	-2,00	-0,68	
61	LwK 6.1(incl.Red.)	31,0	0,00	0,00	
64	LwK 6.1(incl.Red.)	35,0	4,00	1,35	
65	LwK 6.1(incl.Red.)	31,0	0,00	0,00	
66	LwK 6.1(incl.Red.)	29,0	-2,00	-0,68	
67	LwK 6.1(incl.Red.)	47,0	16,00	5,41	(**)
68	LwK 6.1(incl.Red.)	44,0	13,00	4,39	
69	LwK 6.1(incl.Red.)	35,2	4,16	1,41	
72	LwK 6.1(incl.Red.)	30,0	-1,00	-0,34	
74	LwK 6.1(incl.Red.)	28,0	-3,00	-1,01	
75	LwK 6.1(incl.Red.)	27,0	-4,00	-1,35	
77	LwK 6.1(incl.Red.)	32,0	1,00	0,34	
79	Redox(incl.Red.)	33,0	2,00	0,68	
80	LwK 6.1(incl.Red.)	28,0	-3,00	-1,01	
81	LwK 6.1(incl.Red.)	34,9	3,90	1,32	
83	LwK 6.1(incl.Red.)	38,0	7,00	2,37	
84	LwK 6.1(incl.Red.)	26,4	-4,60	-1,56	
101	LwK 6.1(incl.Red.)	31,0	0,00	0,00	

(\*\*) Dieser Wert wurde bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

**5.16.4 Laborergebnisse, jodometrisch ausschließlich Reduktone**

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmung ausschließlich Reduktone.

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score SH incl. Red.	Hinweis
01	LwK 6.1(excl.Red.)	26,0	5,70	2,76	1,93	
13	LwK 6.1(excl.Red.)	21,0	0,70	0,34	0,24	
14	LwK 6.1(excl.Red.)	21,0	0,70	0,34	0,24	
15	LwK 6.1(excl.Red.)	22,0	1,70	0,82	0,57	
17	LwK 6.1(excl.Red.)	17,0	-3,30	-1,60	-1,12	
18	LwK 6.1(excl.Red.)	20,3	0,00	0,00	0,00	
20	LwK 6.1(excl.Red.)	16,0	-4,30	-2,08	-1,45	
21	LwK 6.1(excl.Red.)	20,0	-0,30	-0,15	-0,10	
22	LwK 6.1(excl.Red.)	14,0	-6,30	-3,05	-2,13	
23	LwK 6.1(excl.Red.)	17,0	-3,30	-1,60	-1,12	

**Fortsetzung: Laborergebnisse, jodometrisch ausschließlich Reduktone**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score	Z-Score	Hinweis
				Horwitz	$S_H$ incl. Red.	
25	LwK 6.1(excl.Red.)	29,5	9,18	4,45	3,10	
26	LwK 6.1(excl.Red.)	18,0	-2,30	-1,11	-0,78	
28	LwK 6.1(excl.Red.)	21,0	0,70	0,34	0,24	
29	LwK 6.1(excl.Red.)	20,0	-0,30	-0,15	-0,10	
31	LwK 6.1(excl.Red.)	17,0	-3,30	-1,60	-1,12	
34	LwK 6.1(excl.Red.)	19,0	-1,30	-0,63	-0,44	
35	LwK 6.1(excl.Red.)	22,0	1,70	0,82	0,57	
36	LwK 6.1(excl.Red.)	26,0	5,70	2,76	1,93	
37	LwK 6.1(excl.Red.)	12,5	-7,80	-3,78	-2,64	
38	LwK 6.1(excl.Red.)	26,0	5,70	2,76	1,93	
39	LwK 6.1(excl.Red.)	25,3	5,00	2,42	1,69	
41	LwK 6.1(excl.Red.)	21,0	0,70	0,34	0,24	
42	LwK 6.1(excl.Red.)	19,0	-1,30	-0,63	-0,44	
43	LwK 6.1(excl.Red.)	17,0	-3,30	-1,60	-1,12	
46	LwK 6.1(excl.Red.)	21,0	0,70	0,34	0,24	
50	LwK 6.1(excl.Red.)	25,0	4,70	2,28	1,59	
52	LwK 6.1(excl.Red.)	18,0	-2,30	-1,11	-0,78	
60	LwK 6.1(excl.Red.)	20,0	-0,30	-0,15	-0,10	
61	LwK 6.1(excl.Red.)	20,0	-0,30	-0,15	-0,10	
64	LwK 6.1(excl.Red.)	21,0	0,70	0,34	0,24	
65	LwK 6.1(excl.Red.)	-43,0	-63,30	-30,66	-21,40	(*)
66	LwK 6.1(excl.Red.)	22,0	1,70	0,82	0,57	
67	LwK 6.1(excl.Red.)	33,0	12,70	6,15	4,29	
68	LwK 6.1(excl.Red.)	32,0	11,70	5,67	3,96	
69	LwK 6.1(excl.Red.)	23,9	3,56	1,72	1,20	
72	LwK 6.1(excl.Red.)	15,0	-5,30	-2,57	-1,79	
73	LwK 6.1(excl.Red.)	32,0	11,70	5,67	3,96	
74	LwK 6.1(excl.Red.)	19,0	-1,30	-0,63	-0,44	
75	LwK 6.1(excl.Red.)	20,0	-0,30	-0,15	-0,10	
77	LwK 6.1(excl.Red.)	16,0	-4,30	-2,08	-1,45	
79	Redox(excl.Red.)	26,0	5,70	2,76	1,93	
80	LwK 6.1(excl.Red.)	23,0	2,70	1,31	0,91	
81	LwK 6.1(excl.Red.)	18,1	-2,20	-1,07	-0,74	
83	LwK 6.1(excl.Red.)	14,0	-6,30	-3,05	-2,13	
84	LwK 6.1(excl.Red.)	22,0	1,70	0,82	0,57	
101	LwK 6.1(excl.Red.)	15,0	-5,30	-2,57	-1,79	

(\*) Dieser Wert weicht mehr als 50 % vom Median ab und wurde nicht berücksichtigt.

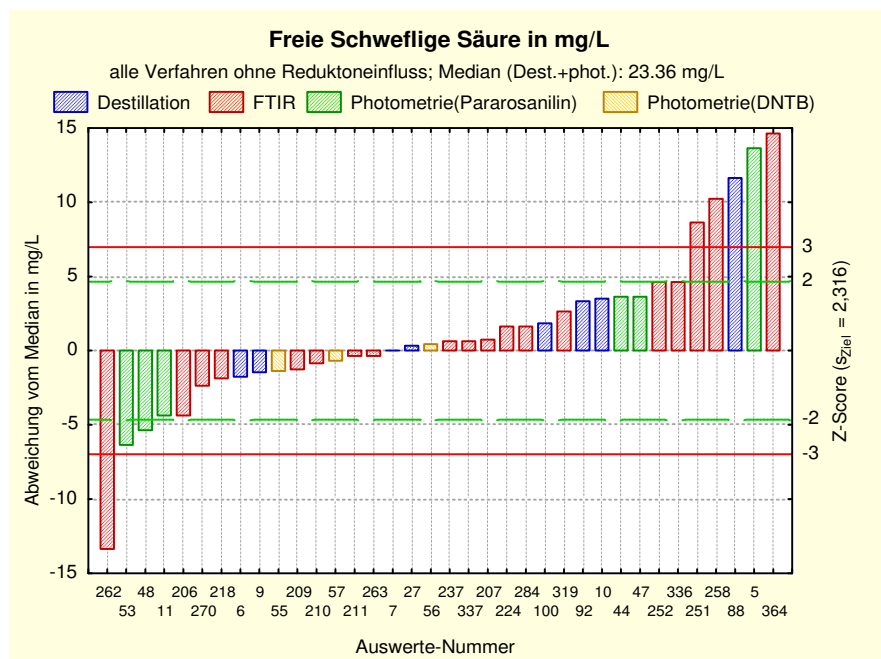
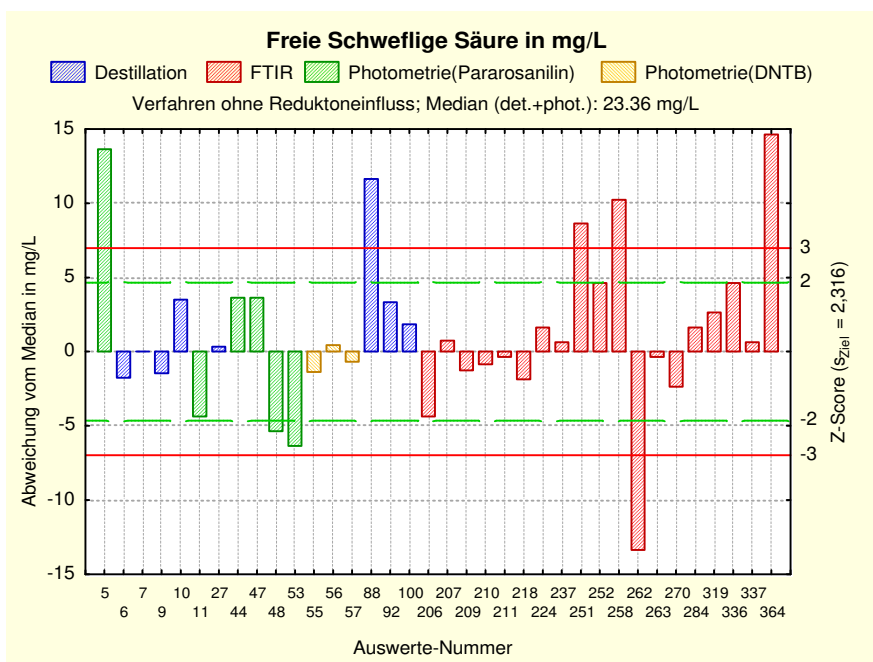
( $S_H$  incl. Red.): Zielstandardabweichung berechnet nach Horwitz aus Median der Werte inklusive Reduktone

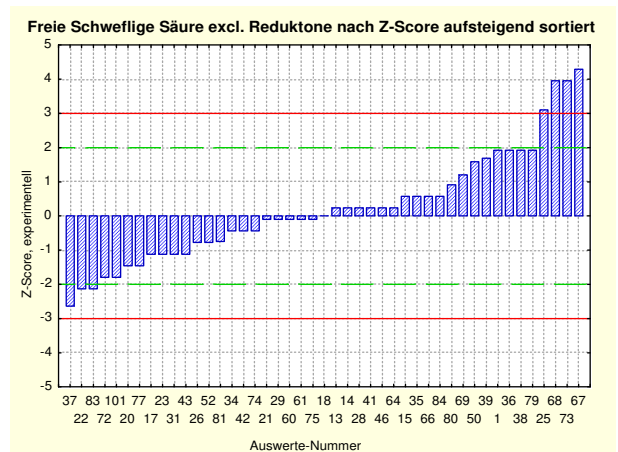
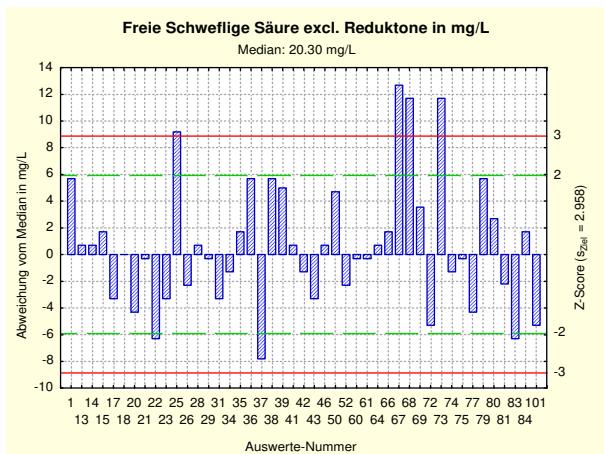
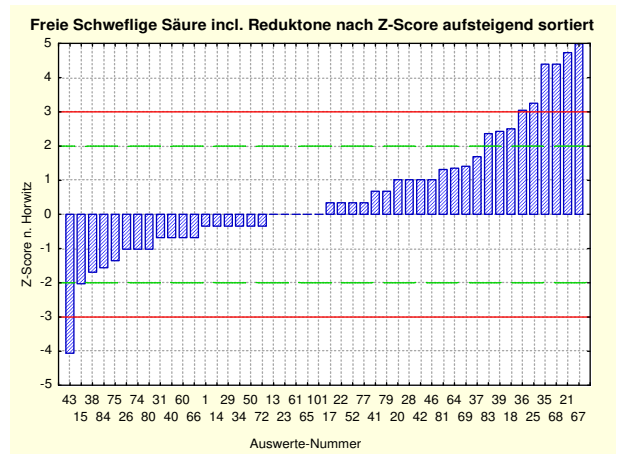
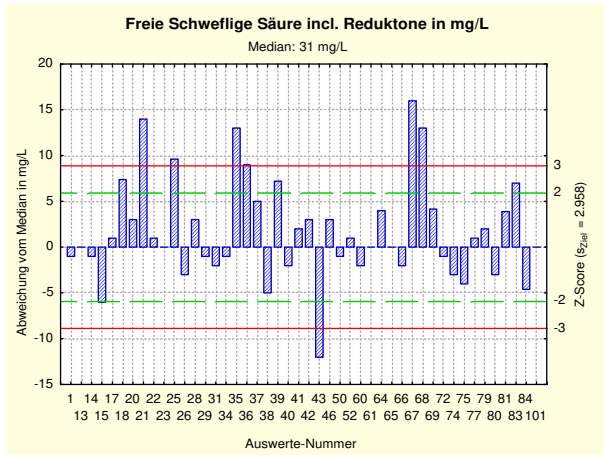
**5.16.5 Deskriptive Ergebnisse jodometrischer Verfahren**

Ergebnisse für Freie Schweflige Säure [mg/L]	incl. Reduktone		excl. Reduktone
	alle Daten	ber. Daten	alle Daten
Gültige Werte	46	45	45
Minimalwert	19,0	19,0	12,5
Mittelwert	32,71	32,39	20,97
Median	31,50	31,00	20,30
Maximalwert	47,0	45,0	33,0
Standardabweichung ( $s_L$ )	5,573	5,198	4,788
Standardfehler des Mittelwertes	0,822	0,775	0,714
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	2,999	2,958	2,065
Zielstandardabweichung, experimentell ( $S_H$ incl. Red.)			2,958
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	1,86	1,76	2,32
Quotient ( $s_L/S_H$ incl. Red.)			1,62
Quotient ( $u_M/S_H$ )	0,27	0,26	0,35
Quotient ( $u_M/S_H$ incl. Red.)			0,24

5.16.6 Angaben zu den Analyseverfahren

Code	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 6.1	Direkte jodometrische Titration OIV-MA-AS323-04B	45	32,28	4,81
(incl.Red.)	ohne Abzug der Reduktone			
(excl.Red.)	mit Abzug der Reduktone	45	20,31	4,48
Redox incl.	elektrometrische Bestimmung mit pH-Meter im mV-Modus und der Redoxelektrode ORP inklusive Reduktone	1	33,00	
Redox excl.	exclusive Reduktone	1	26,00	
	jodometrisch ohne Abzug der Reduktone	46	32,29	4,71
	jodometrisch mit Abzug der Reduktone	46	20,46	4,58
LwK 6.2	Methode n. Paul bzw. OIV-MA-AS323-04A	8	24,85	3,09
LwK 6.3	Pararosanilinnmethode	6	24,11	8,61
LwK 6.4	DNTB-Verfahren	3	22,83	1,03
	Destillations- und photometrische Verfahren	17	23,96	4,43
LwK 6.5	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der Gasphase	19	24,63	4,33
	Destillations-, photometrische und FTIR-Verfahren	36	24,28	4,24





## 5.17 Gesamte Schweflige Säure [mg/L]

### 5.17.1 Laborergebnisse (wie mitgeteilt)

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse aus Destillationsverfahren

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 7.4.2	87,0	18,73	3,24	3,50	
05	LwK 7.7	77,0	8,73	1,51	1,63	
06	LwK 7.3	71,0	2,73	0,47	0,51	
07	LwK 7.3	68,8	0,53	0,09	0,10	
08	LwK 7.4.2	68,0	-0,27	-0,05	-0,05	
09	LwK 7.3	70,2	1,93	0,33	0,36	
10	LwK 7.3	65,9	-2,37	-0,41	-0,44	
11	LwK 7.4.2	73,0	4,73	0,82	0,88	
13	LwK 7.4.2	65,0	-3,27	-0,57	-0,61	
14	LwK 7.5.1(excl. Red.)	74,0	5,73	0,99	1,07	
15	LwK 7.5.1(incl. Red.)	63,0	-5,27	-0,91	-0,98	
17	LwK 7.5.1(incl. Red.)	71,0	2,73	0,47	0,51	
18	LwK 7.5.1(excl. Red.)	58,4	-9,87	-1,71	-1,84	
20	LwK 7.4.2	80,0	11,73	2,03	2,19	
21	LwK 7.5.1(incl. Red.)	97,0	28,73	4,97	5,36	(**)
22	LwK 7.4.2m	82,0	13,73	2,37	2,56	
23	LwK 7.5.1(incl. Red.)	71,0	2,73	0,47	0,51	
25	LwK 7.4.2	79,0	10,73	1,85	2,00	
26	LwK 7.5.1(incl. Red.)	66,0	-2,27	-0,39	-0,42	
27	LwK 7.3	74,4	6,13	1,06	1,14	
28	LwK 7.5.1(incl. Red.)	81,0	12,73	2,20	2,38	
29	LwK 7.5.1(incl. Red.)	72,0	3,73	0,64	0,70	
31	LwK 7.4.1	62,0	-6,27	-1,08	-1,17	
34	LwK 7.5.1(incl. Red.)	75,0	6,73	1,16	1,26	
35	LwK 7.5.1(incl. Red.)	85,0	16,73	2,89	3,12	
36	LwK 7.5.1(incl. Red.)	96,0	27,73	4,79	5,18	(**)
37	LwK 7.4.1	72,0	3,73	0,64	0,70	
38	LwK 7.7	75,0	6,73	1,16	1,26	
39	LwK 7.5.1(excl. Red.)	72,7	4,43	0,77	0,83	
40	LwK 7.4.1	65,0	-3,27	-0,57	-0,61	
41	LwK 7.4.1	65,0	-3,27	-0,57	-0,61	
42	LwK 7.4.2	74,0	5,73	0,99	1,07	
43	LwK 7.5.1(incl. Red.)	72,0	3,73	0,64	0,70	
44	LwK 7.4.2	71,0	2,73	0,47	0,51	
46	LwK 7.5.1(incl. Red.)	78,0	9,73	1,68	1,82	
47	LwK 7.4.2	66,0	-2,27	-0,39	-0,42	
48	LwK 7.7	62,0	-6,27	-1,08	-1,17	
50	LwK 7.4.2	86,0	17,73	3,06	3,31	
52	LwK 7.5.2(incl. Red.)	75,0	6,73	1,16	1,26	
53	LwK 7.7	62,0	-6,27	-1,08	-1,17	
55	LwK 7.7	59,0	-9,27	-1,60	-1,73	
56	LwK 7.7	63,0	-5,27	-0,91	-0,98	
57	LwK 7.4.2	67,0	-1,27	-0,22	-0,24	
60	LwK 7.5.2(incl. Red.)	74,0	5,73	0,99	1,07	
61	LwK 7.5.1(incl. Red.)	60,0	-8,27	-1,43	-1,54	
64	LwK 7.4.2	59,0	-9,27	-1,60	-1,73	
65	LwK 7.5.3(incl. Red.)	15,0	-53,27	-9,21	-9,94	(*)
66	LwK 7.5.1(incl. Red.)	70,0	1,73	0,30	0,32	
67	LwK 7.4.2	63,0	-5,27	-0,91	-0,98	
68	LwK 7.5.1(excl. Red.)	76,0	7,73	1,34	1,44	
69	LwK 7.5.1(incl. Red.)	84,0	15,77	2,73	2,94	
72	LwK 7.5.1(excl. Red.)	65,0	-3,27	-0,57	-0,61	
74	LwK 7.2	78,6	10,33	1,79	1,93	
75	LwK 7.4.2	60,0	-8,27	-1,43	-1,54	
77	LwK 7.5.1(excl. Red.)	64,0	-4,27	-0,74	-0,80	
79	LwK 7.5.1(excl. Red.)	78,0	9,73	1,68	1,82	
80	LwK 7.5.1(excl. Red.)	80,0	11,73	2,03	2,19	
81	LwK 7.3	64,3	-3,97	-0,69	-0,74	
83	LwK 7.5.1(incl. Red.)	82,0	13,73	2,37	2,56	

Der mit (\*) gekennzeichnete Wert weicht um mehr als 50 % vom Bezugswert aus Destillationsverfahren ab.

Die mit (\*\*) gekennzeichneten Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Bezugswert ab.

**Fortsetzung: Laborergebnisse** (wie mitgeteilt)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
84	LwK 7.2	67,5	-0,77	-0,13	-0,14	
86	LwK 7.1	64,0	-4,27	-0,74	-0,80	
88	LwK 7.3	81,0	12,73	2,20	2,38	
89	LwK 7.4.2	68,5	0,27	0,05	0,05	
90	LwK 7.5.1(incl. Red.)	83,0	14,73	2,55	2,75	
91	LwK 7.5.2(excl. Red.)	69,0	0,73	0,13	0,14	
92	LwK 7.3	59,7	-8,57	-1,48	-1,60	
93	LwK 7.4.2	84,0	15,73	2,72	2,94	
94	LwK 7.5.1(incl. Red.)	92,0	23,73	4,10	4,43	
95	LwK 7.4.1	65,0	-3,27	-0,57	-0,61	
97	LwK 7.7	63,0	-5,27	-0,91	-0,98	
98	LwK 7.7	69,0	0,73	0,13	0,14	
99	LwK 7.4.1	69,0	0,73	0,13	0,14	
100	LwK 7.3	64,6	-3,67	-0,63	-0,69	
101	LwK 7.4.2	62,0	-6,27	-1,08	-1,17	
206	LwK 7.8	76,0	7,73	1,34	1,44	
207	LwK 7.8	60,1	-8,17	-1,41	-1,53	
208	FTIR(direkt)	71,0	2,73	0,47	0,51	
209	LwK 7.8	75,1	6,83	1,18	1,27	
210	LwK 7.8	65,5	-2,77	-0,48	-0,52	
211	LwK 7.8	74,0	5,73	0,99	1,07	
218	LwK 7.8	62,0	-6,27	-1,08	-1,17	
224	LwK 7.8	85,0	16,73	2,89	3,12	
237	LwK 7.8	71,0	2,73	0,47	0,51	
251	LwK 7.8	69,0	0,73	0,13	0,14	
252	LwK 7.8	71,0	2,73	0,47	0,51	
258	LwK 7.8	79,0	10,73	1,85	2,00	
262	LwK 7.8	53,0	-15,27	-2,64	-2,85	
263	LwK 7.8	76,0	7,73	1,34	1,44	
270	LwK 7.8	60,0	-8,27	-1,43	-1,54	
284	LwK 7.8	56,0	-12,27	-2,12	-2,29	
319	LwK 7.8	73,0	4,73	0,82	0,88	
336	LwK 7.8	87,0	18,73	3,24	3,50	
337	LwK 7.8	73,0	4,73	0,82	0,88	
364	LwK 7.8	72,0	3,73	0,64	0,70	

Mittels Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie erhaltene Werte (LwK 7.8) wurden mit derselben Zielstandardabweichung bewertet wie die Ergebnisse herkömmlicher Methoden (Vergleichsstandardabweichung OIV-MA-323-04A).

**5.17.2 Laborergebnisse: jodometrisch einschließlich Reduktone**

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmung einschließlich Reduktone

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
14	LwK 7.5.1(incl. Red.)	83,0	3,00	0,45	0,56	
15	LwK 7.5.1(incl. Red.)	63,0	-17,00	-2,57	-3,17	
17	LwK 7.5.1(incl. Red.)	71,0	-9,00	-1,36	-1,68	
18	LwK 7.5.1(incl. Red.)	76,5	-3,50	-0,53	-0,65	
21	LwK 7.5.1(incl. Red.)	97,0	17,00	2,57	3,17	
23	LwK 7.5.1(incl. Red.)	71,0	-9,00	-1,36	-1,68	
26	LwK 7.5.1(incl. Red.)	66,0	-14,00	-2,12	-2,61	
28	LwK 7.5.1(incl. Red.)	81,0	1,00	0,15	0,19	
29	LwK 7.5.1(incl. Red.)	72,0	-8,00	-1,21	-1,49	
34	LwK 7.5.1(incl. Red.)	75,0	-5,00	-0,76	-0,93	
35	LwK 7.5.1(incl. Red.)	85,0	5,00	0,76	0,93	
36	LwK 7.5.1(incl. Red.)	96,0	16,00	2,42	2,99	
39	LwK 7.5.1(incl. Red.)	85,6	5,60	0,85	1,05	
43	LwK 7.5.1(incl. Red.)	72,0	-8,00	-1,21	-1,49	
46	LwK 7.5.1(incl. Red.)	78,0	-2,00	-0,30	-0,37	
52	LwK 7.5.2(incl. Red.)	75,0	-5,00	-0,76	-0,93	
60	LwK 7.5.2(incl. Red.)	74,0	-6,00	-0,91	-1,12	
61	LwK 7.5.1(incl. Red.)	60,0	-20,00	-3,02	-3,73	
65	LwK 7.5.3(incl. Red.)	15,0	-65,00	-9,82	-12,13	(*)
66	LwK 7.5.1(incl. Red.)	70,0	-10,00	-1,51	-1,87	

Der mit (\*) markierte Wert weicht um mehr als 50 % vom Median ab und bleibt unberücksichtigt.

**Fortsetzung: Laborergebnisse: jodometrisch einschließlich Reduktone**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
68	LwK 7.5.1(incl. Red.)	88,0	8,00	1,21	1,49	
69	LwK 7.5.1(incl. Red.)	84,0	4,04	0,61	0,75	
72	LwK 7.5.1(incl. Red.)	80,0	0,00	0,00	0,00	
77	LwK 7.5.1(incl. Red.)	80,0	0,00	0,00	0,00	
79	LwK 7.5.1(incl. Red.)	85,0	5,00	0,76	0,93	
80	LwK 7.5.1(incl. Red.)	85,0	5,00	0,76	0,93	
83	LwK 7.5.1(incl. Red.)	82,0	2,00	0,30	0,37	
90	LwK 7.5.1(incl. Red.)	83,0	3,00	0,45	0,56	
91	LwK 7.5.2(incl. Red.)	72,0	-8,00	-1,21	-1,49	
94	LwK 7.5.1(incl. Red.)	92,0	12,00	1,81	2,24	

**5.17.3 Laborergebnisse: jodometrisch ausschließlich Reduktone**

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmung ausschließlich Reduktone

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
14	LwK 7.5.1(excl. Red.)	74,0	6,00	1,04	1,12	
15	LwK 7.5.1(excl. Red.)	60,0	-8,00	-1,39	-1,49	
17	LwK 7.5.1(excl. Red.)	56,0	-12,00	-2,08	-2,24	
18	LwK 7.5.1(excl. Red.)	58,4	-9,60	-1,67	-1,79	
21	LwK 7.5.1(excl. Red.)	72,0	4,00	0,69	0,75	
23	LwK 7.5.1(excl. Red.)	57,0	-11,00	-1,91	-2,05	
26	LwK 7.5.1(excl. Red.)	56,0	-12,00	-2,08	-2,24	
28	LwK 7.5.1(excl. Red.)	68,0	0,00	0,00	0,00	
29	LwK 7.5.1(excl. Red.)	62,0	-6,00	-1,04	-1,12	
34	LwK 7.5.1(excl. Red.)	64,0	-4,00	-0,69	-0,75	
35	LwK 7.5.1(excl. Red.)	63,0	-5,00	-0,87	-0,93	
36	LwK 7.5.1(excl. Red.)	82,0	14,00	2,43	2,61	
39	LwK 7.5.1(excl. Red.)	72,7	4,70	0,82	0,88	
43	LwK 7.5.1(excl. Red.)	70,0	2,00	0,35	0,37	
46	LwK 7.5.1(excl. Red.)	65,0	-3,00	-0,52	-0,56	
52	LwK 7.5.2(excl. Red.)	89,0	21,00	3,64	3,92	
60	LwK 7.5.2(excl. Red.)	83,0	15,00	2,60	2,80	
61	LwK 7.5.1(excl. Red.)	49,0	-19,00	-3,30	-3,55	
65	LwK 7.5.3(excl. Red.)	-59,0	-127,00	-22,03	-23,71	(*)
66	LwK 7.5.1(excl. Red.)	63,0	-5,00	-0,87	-0,93	
68	LwK 7.5.1(excl. Red.)	76,0	8,00	1,39	1,49	
69	LwK 7.5.1(excl. Red.)	72,7	4,74	0,82	0,88	
72	LwK 7.5.1(excl. Red.)	65,0	-3,00	-0,52	-0,56	
77	LwK 7.5.1(excl. Red.)	64,0	-4,00	-0,69	-0,75	
79	LwK 7.5.1(excl. Red.)	78,0	10,00	1,73	1,87	
80	LwK 7.5.1(excl. Red.)	80,0	12,00	2,08	2,24	
83	LwK 7.5.1(excl. Red.)	58,0	-10,00	-1,73	-1,87	
90	LwK 7.5.1(excl. Red.)	73,0	5,00	0,87	0,93	
91	LwK 7.5.2(excl. Red.)	69,0	1,00	0,17	0,19	
94	LwK 7.5.1(excl. Red.)	83,3	15,35	2,66	2,87	

Der mit (\*) markierte Wert weicht um mehr als 50 % vom Median ab und bleibt unberücksichtigt.

**Anmerkung:**

Die Ergebnisse der jodometrischen Bestimmungen waren von den Laboratorien auftragsgemäß entsprechend den Regeln des laboreigenen Qualitätsmanagements mitzuteilen. Die Bestimmung der Reduktone war bei jodometrischer Bestimmung der Schwefligen Säure geboten. Sofern die laborinternen Qualitätsregelungen bei jodometrischen Bestimmungen einen Abzug der Reduktone vorsehen, ist das Ergebnis nach diesem Abzug für die Bewertung der Laborleistung maßgeblich. Bewertungsgrundlage ist stets der Median der Ergebnisse des jeweiligen Bestimmungsverfahrens und die experimentelle Zielstandardabweichung gemäß der Methode OIV-MA-AS323-04A.



**5.17.4 Deskriptive Ergebnisse**

Ergebnisse für Gesamte Schweflige Säure [mg/L]	Destillationsverfahren alle Daten	incl. Reduktone alle Daten	excl. Reduktone alle Daten
Gültige Werte	36	29	29
Minimalwert	59,0	60,0	49,0
Mittelwert	70,07	78,69	68,39
Median	68,27	80,00	68,00
Maximalwert	87,0	97,0	89,0
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	7,690	9,045	9,802
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	1,282	1,680	1,820
Zielstandardabweichung			
- n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	5,785	6,619	5,765
- experimentell (s <sub>exp</sub> )	5,357	5,357	5,357
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	1,33	1,37	1,70
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp</sub> herk.)	1,44	1,69	1,83
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,22	0,25	0,32
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp</sub> herk.)	0,24	0,31	0,34

**5.17.5 Angaben zu den Analyseverfahren**

Code	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 7.1	Methode nach AVV V2	1	64,00	
LwK 7.2	Methode n. Tanner	2	73,05	8,90
LwK 7.3	Methode n. Paul bzw. OIV-MA-AS323-04A	9	68,56	6,39
LwK 7.4.1	Destillationsmethode n. Dr. Jakob	6	66,21	3,91
LwK 7.4.2	Destillationsmethode n. Dr. Rebelein	17	71,22	10,04
LwK 7.4.2m	Destillationsmethode n. Dr. Rebelein, modifiziert	1	82,00	
	alle Destillationsverfahren	36	69,60	7,75
LwK 7.5.1 (incl. Red.)	jodometrisch n. einf. Hydrolyse ohne Reduktonabzug	26	79,35	9,56
LwK 7.5.2 (incl. Red.)	jodometrisch n. dopp. Hydrolyse ohne Reduktonabzug	3	73,67	1,73
LwK 7.5.3 (incl. Red.)	jodometrisch mit Hydrolyse n. Rebelein	1	15,00	
	alle jodometrischen Verfahren ohne Reduktonabzug	30	78,06	9,71
LwK 7.5.1(excl. Red.)	jodometrisch n. einf. Hydrolyse unter Reduktonabzug	26	67,06	9,68
LwK 7.5.2(excl. Red.)	jodometrisch n. einf. Hydrolyse unter Reduktonabzug	3	80,55	11,23
LwK 7.5.3(excl. Red.)	Jodometrisch mit Hydrolyse n. Rebelein mit Abzug	1	-59,00	
	alle jodometrischen Verfahren mit Reduktonabzug	30	67,66	10,78
LwK 7.7	DNTB-Verfahren	8	66,07	7,30
LwK 7.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der Gasphase	19	70,60	9,56
FTIR(direkt)	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der flüss. Phase	1	71,00	

