



Landwirtschaftskammer
Rheinland-Pfalz

Landwirtschaftskammer Rheinland-Pfalz

Abteilung Weinbau

und

Wissenschaftlicher Arbeitsausschuss
FTIR-Kalibrierung für die amtliche Weinuntersuchung

Laborvergleichsuntersuchung „Wein 2018“

Teil 3
Durchführung und Ergebnisse
der Untersuchung eines Rotweines FT18P04
und eines Roséweines FT18P05

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

Stand: 25.09.2018

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	7
2	Durchführung der Laborvergleichsuntersuchung	7
2.1	Untersuchungsmaterial	7
2.1.1	Herstellung und Auswahl des Untersuchungsgutes	7
2.1.2	Ergebnisse der Homogenitätsprüfung der Prüfgüter FT18P04 und FT18P05	7
2.2	Hinweise auf Informationen zur Durchführung und Ergebnisauswertung	12
3	Gesamtergebnis der Laborvergleichsuntersuchung an den Prüfgütern FT18P04 und FT18P05	13
3.1	Herkömmliche Methoden mit Diskussion einzelner Parameter	13
3.2	Gesamtergebnis der FTIR-Untersuchungen	16
4	Ergebnisse zu den einzelnen Parametern der Probe FT18P04	20
4.1	Relative Dichte 20 °C/20 °C	20
4.1.1	Herkömmliche Laborergebnisse	20
4.1.2	FTIR-Laborergebnisse	21
4.1.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	22
4.1.4	Angaben zu den Analyseverfahren	22
4.2	Vorhandener Alkohol [g/L]	24
4.2.1	Herkömmliche Laborergebnisse	24
4.2.2	FTIR-Laborergebnisse	25
4.2.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	26
4.2.4	Angaben zu den Analyseverfahren	26
4.3	Gesamtextrakt [g/L]	28
4.3.1	Herkömmliche Laborergebnisse	28
4.3.2	FTIR-Laborergebnisse	28
4.3.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	29
4.3.4	Angaben zu den Analyseverfahren	30
4.4	Vergärbare Zucker [g/L]	31
4.4.1	Herkömmliche Laborergebnisse	31
4.4.2	FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker	31
4.4.5	FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker(S)	34
4.4.6	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	35
4.4.7	Angaben zu den Analyseverfahren	36
4.5	Glucose [g/L]	39
4.5.1	Herkömmliche Laborergebnisse	39
4.5.2	FTIR-Laborergebnisse	39
4.5.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	41
4.5.4	Angaben zu den Analyseverfahren	41
4.6	Fructose [g/L]	43
4.6.1	Herkömmliche Laborergebnisse	43
4.6.2	FTIR-Laborergebnisse	43
4.6.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	45
4.6.4	Angaben zu den Analyseverfahren	45
4.7	Glycerin [g/L]	47
4.7.1	Herkömmliche Laborergebnisse	47
4.7.2	FTIR-Laborergebnisse	47
4.7.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	48
4.7.4	Angaben zu den Analyseverfahren	48

4.8	pH-Wert	50
4.8.1	Herkömmliche Laborergebnisse	50
4.8.2	FTIR-Laborergebnisse	50
4.8.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	52
4.8.4	Angaben zu den Analyseverfahren	52
4.9	Gesamtsäure [g/L]	54
4.9.1	Herkömmliche Laborergebnisse	54
4.9.2	FTIR-Laborergebnisse	54
4.9.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	56
4.9.4	Angaben zu den Analyseverfahren	56
4.10	Weinsäure [g/L]	58
4.10.1	Herkömmliche Laborergebnisse	58
4.10.2	FTIR-Laborergebnisse	58
4.10.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	60
4.10.4	Angaben zu den Analyseverfahren	60
4.11	Flüchtige Säure [g/L]	62
4.11.1	Herkömmliche Laborergebnisse	62
4.11.2	FTIR-Laborergebnisse	62
4.11.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Destillationsverfahren	64
4.11.4	Angaben zu den Analyseverfahren	64
4.12	Acetat (als Essigsäure) [g/L]	66
4.12.1	Herkömmliche und FTIR-Laborergebnisse, Teil 1	66
4.12.2	Herkömmliche und FTIR-Laborergebnisse, Teil 2	67
4.12.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	67
4.12.4	Angaben zu den Analyseverfahren	67
4.13	Gesamte Äpfelsäure und L-Äpfelsäure [g/L]	69
4.13.1	Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure	69
4.13.2	Laborergebnisse L-Äpfelsäure	69
4.13.3	FTIR-Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure	69
4.13.4	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	71
4.13.5	Angaben zu den Analyseverfahren	71
4.14	Gesamte Milchsäure und L-Milchsäure [g/L]	73
4.14.1	Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Milchsäure	73
4.14.2	Laborergebnisse L-Milchsäure	73
4.14.3	FTIR-Laborergebnisse Gesamte Milchsäure	73
4.14.4	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	75
4.14.5	Angaben zu den Analyseverfahren	75
4.15	Reduktone [mg/L]	77
4.15.1	Laborergebnisse	77
4.15.2	Deskriptive Ergebnisse	77
4.15.3	Angaben zu den Analyseverfahren	78
4.16	Freie Schweflige Säure [mg/L]	79
4.16.1	Laborergebnisse mit Destillations-, photometrischen Verfahren und FTIR	79
4.16.2	Laborergebnisse: jodometrisch, mitgeteilt einschließlich Reduktone	79
4.16.3	Laborergebnisse: jodometrisch ausschließlich Reduktone	80
4.16.4	Deskriptive Ergebnisse	81
4.16.5	Angaben zu den Analyseverfahren	81
4.17	Gesamte Schweflige Säure [mg/L]	83
4.17.1	Laborergebnisse	83
4.17.2	Laborergebnisse: jodometrische Verfahren einschließlich Reduktone	84
4.17.3	Laborergebnisse: jodometrische Verfahren ausschließlich Reduktone	84
4.17.4	Deskriptive Ergebnisse	85
4.17.5	Angaben zu den Analyseverfahren	85

5	Ergebnisse zu den einzelnen Parametern der Probe FT18P05	88
5.1	Relative Dichte 20 °C/20 °C	88
5.1.1	Herkömmliche Laborergebnisse	88
5.1.2	FTIR-Laborergebnisse	89
5.1.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	90
5.1.4	Angaben zu den Analyseverfahren	90
5.2	Vorhandener Alkohol [g/L]	92
5.2.1	Herkömmliche Laborergebnisse	92
5.2.2	FTIR-Laborergebnisse	93
5.2.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	94
5.2.4	Angaben zu den Analyseverfahren	94
5.3	Gesamtextrakt [g/L]	96
5.3.1	Herkömmliche Laborergebnisse	96
5.3.2	Angaben zu den Analyseverfahren	96
5.3.3	FTIR-Laborergebnisse	97
5.3.4	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	98
5.4	Vergärbare Zucker [g/L]	100
5.4.1	Herkömmliche Laborergebnisse	100
5.4.2	FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker	100
5.4.4	FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker(r)	102
5.4.5	FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker(S)	103
5.4.6	Angaben zu den Analyseverfahren	104
5.4.7	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	105
5.5	Glucose [g/L]	108
5.5.1	Herkömmliche Laborergebnisse	108
5.5.2	FTIR-Laborergebnisse	108
5.5.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	109
5.5.4	Angaben zu den Analyseverfahren	110
5.6	Fructose [g/L]	112
5.6.1	Herkömmliche Laborergebnisse	112
5.6.2	FTIR-Laborergebnisse	112
5.6.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	114
5.6.4	Angaben zu den Analyseverfahren	114
5.7	Glycerin [g/L]	116
5.7.1	Herkömmliche Laborergebnisse	116
5.7.2	FTIR-Laborergebnisse	116
5.7.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	117
5.7.4	Angaben zu den Analyseverfahren	118
5.8	pH-Wert	119
5.8.1	Herkömmliche Laborergebnisse	119
5.8.2	FTIR-Laborergebnisse	119
5.8.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	121
5.8.4	Angaben zu den Analyseverfahren	121
5.9	Gesamtsäure [g/L]	123
5.9.1	Herkömmliche Laborergebnisse	123
5.9.2	FTIR-Laborergebnisse	123
5.9.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	125
5.9.4	Angaben zu den Analyseverfahren	125
5.10	Weinsäure [g/L]	127
5.10.1	Herkömmliche Laborergebnisse	127
5.10.2	FTIR-Laborergebnisse	127
5.10.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	129
5.10.4	Angaben zu den Analyseverfahren	129

5.11	Flüchtige Säure [g/L]	131
5.11.1	Herkömmliche Laborergebnisse	131
5.11.2	FTIR-Laborergebnisse	131
5.11.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Destillationsverfahren	133
5.11.4	Angaben zu den Analyseverfahren	133
5.12	Acetat (als Essigsäure) [g/L]	135
5.12.1	Herkömmliche und FTIR-Laborergebnisse, Teil 1	135
5.12.2	Herkömmliche und FTIR-Laborergebnisse, Teil 2	136
5.12.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	136
5.12.4	Angaben zu den Analyseverfahren	136
5.13	Gesamte Äpfelsäure und L-Äpfelsäure [g/L]	138
5.13.1	Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure	138
5.13.2	Laborergebnisse L-Äpfelsäure	138
5.13.3	FTIR-Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure	139
5.13.4	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	140
5.13.5	Angaben zu den Analyseverfahren	140
5.14	Gesamte Milchsäure und L-Milchsäure [g/L]	142
5.14.1	Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Milchsäure	142
5.14.2	Laborergebnisse L-Milchsäure	142
5.14.3	FTIR-Laborergebnisse Gesamte Milchsäure	143
5.14.4	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	144
5.14.5	Angaben zu den Analyseverfahren	144
5.15	Reduktone [mg/L]	146
5.15.1	Laborergebnisse	146
5.15.2	Deskriptive Ergebnisse	146
5.15.3	Angaben zu den Analyseverfahren	146
5.16	Freie Schweflige Säure [mg/L]	148
5.16.1	Laborergebnisse mit Destillations-, photometrischen Verfahren und FTIR	148
5.16.2	Laborergebnisse: jodometrisch, mitgeteilt einschließlich Reduktone	148
5.16.3	Laborergebnisse: jodometrisch ausschließlich Reduktone	149
5.16.5	Angaben zu den Analyseverfahren	150
5.17	Gesamte Schweflige Säure [mg/L]	152
5.17.1	Laborergebnisse	152
5.17.2	Laborergebnisse: jodometrische Verfahren einschließlich Reduktone	153
5.17.3	Laborergebnisse: jodometrische Verfahren ausschließlich Reduktone	154
5.17.4	Deskriptive Ergebnisse	154
5.17.5	Angaben zu den Analyseverfahren	154

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 waren von den beteiligten Laboratorien im Rahmen ihrer Möglichkeiten mit herkömmlichen Methoden Parameter zu bestimmen, die über den Umfang der amtlichen Qualitätsweinanalyse hinausgehen, aber üblicherweise mit Hilfe des Verfahrens der Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie im mittleren Infrarot (FTIR) bestimmt werden. Neben einem Weißwein, der allen teilnehmenden Laboratorien zur Verfügung stand, waren von den Teilnehmern an der speziellen FTIR-Laborvergleichsuntersuchung ein weiterer Weißwein, zwei Rotweine und ein Roséwein sowohl mit den herkömmlichen Verfahren als auch mittels FTIR zu untersuchen.

Der vorliegende Teil 3 dokumentiert die Ergebnisse an den Prüfmaterialien FT18P04 und FT18P05, nachdem in Teil 1 die für alle Prüfmaterialien gemeinsamen Aspekte und die Ergebnisse für das Prüfmaterial FT18P01 sowie in Teil 2 die Ergebnisse für die Prüfmaterialien FT18P02 und FT18P03 behandelt wurden. Die Ausführungen beschränken sich dabei auf Gesichtspunkte und Sachverhalte, die nicht bereits in Teil 1 oder Teil 2 der Berichte behandelt wurden. Daher wird bei Bedarf auf diese Teile verwiesen.

2 Durchführung der Laborvergleichsuntersuchung

Im Folgenden werden die spezifischen Informationen zur Auswahl bzw. Herstellung der Prüfmaterialien FT18P04 und FT18P05 und die Ergebnisse der Homogenitätsprüfung für diese Prüfmaterialien dargestellt.

2.1 Untersuchungsmaterial

2.1.1 Herstellung und Auswahl des Untersuchungsgutes

Als Prüfgut FT18P04 wurde aus der Pfalz ein 2017er Rotwein der Rebsorte Dornfelder mit 1,2 g/L Flüchtiger Säure durch Zusatz von rotem Traubensaft auf rund 36 g/L Restzucker eingestellt und gefüllt. Weitere Angaben siehe Teil 1 Abschnitt 2.1.2 der Berichte.

Als Vertreter ausländischer Weine wurde ein aus Südafrika stammender trockener Rosé des Jahrganges 2016 aus gewerblicher Produktion bezogen und unverändert als Prüfgut FT18P05 eingesetzt, zu dem sich weitere Angaben im Teil 1 Abschnitt 2.1.2 der Berichte finden.

Eine Prüfung auf Homogenität wurde für beide Prüfgüter durchgeführt.

2.1.2 Ergebnisse der Homogenitätsprüfung der Prüfgüter FT18P04 und FT18P05

Zur Homogenitätsprüfung wurden während der Füllung von insgesamt 248 Flaschen a 0,375 L insgesamt 17 Flaschen für die Homogenitätsprüfung entnommen. Dies wie die Auswahl von 12

Flaschen für die für die analytischen Prüfungen erfolgte wie im Detail für das Prüfgut FT18P02 in Teil 2 der Berichte beschrieben. Wie dort berichtet, wurden vier Serien von Teilproben gebildet, aus denen jeweils Doppelproben für die analytischen Untersuchungen unter Wiederholbedingungen gebildet wurden. Die Messergebnisse sind in der Tabelle 1 und der Tabelle 2 dokumentiert.

Tabelle 1: Messergebnisse zur Homogenitätsprüfung des Prüfgutes FT18P04

Lfd. Nr.	Probe Nr.	pH-Wert	Gesamtsäure	Reduktone	Schweflige Säure		
			g/L	mg/L	frei mg/L	gebunden mg/L	gesamt mg/L
1	16	3,58	6,61	12,81	49,48	50,00	99,48
2	6	3,53	6,62	12,81	50,00	51,04	101,04
3	1	3,52	6,69	13,13	50,00	50,00	100,00
4	5	3,53	6,61	13,13	50,00	51,04	101,04
5	7	3,52	6,61	13,13	50,00	51,04	101,04
6	11	3,52	6,62	12,50	49,48	51,04	100,52
7	15	3,53	6,61	12,50	50,00	51,04	101,04
8	13	3,53	6,58	12,81	49,48	51,04	100,52
9	12	3,54	6,61	12,81	50,00	51,04	101,04
10	3	3,54	6,6	12,50	50,00	51,04	101,04
11	4	3,54	6,6	12,50	51,04	51,04	102,08
12	8	3,55	6,57	12,50	50,52	50,00	100,52
13	1	3,53	6,59	12,19	50,52	50,00	100,52
14	6	3,52	6,58	12,19	50,52	50,00	100,52
15	4	3,53	6,6	12,19	51,04	50,00	101,04
16	16	3,51	6,57	12,19	50,00	50,00	100,00
17	11	3,54	6,58	12,19	49,48	51,04	100,52
18	5	3,54	6,6	12,19	50,00	51,04	101,04
19	15	3,56	6,57	12,19	50,00	51,04	101,04
20	13	3,55	6,55	11,88	50,52	50,00	100,52
21	12	3,53	6,59	12,19	50,52	50,00	100,52
22	3	3,55	6,57	12,19	50,52	50,00	100,52
23	7	3,56	6,57	12,19	50,52	50,00	100,52
24	8	3,55	6,54	11,88	50,52	50,00	100,52

Die Messergebnisse beider Tabellen wurden wie in Teil 1 beschrieben zunächst graphisch auf Auffälligkeiten geprüft. Bei einzelnen auffälligen Messergebnissen ordnete sich der Wiederholungswert unauffällig in die Gesamtschar der Messergebnisse ein. Weder einzelne Messungen noch einzelne Proben zeigten jedoch wesentliche Ausreißermerkmale. Die Prüfungen auf eine Korrelation zur Messreihenfolge ergaben häufig, die Prüfungen auf eine Korrelation zur Probennummer nur vereinzelt signifikante Korrelationen. Ob diese Korrelationen für das Ergebnis der Homogenitätsprüfung oder die Eignung des Prüfgutes für die Laborvergleichsuntersuchung wesentlich sind, zeigt sich insbesondere bei einer Verknüpfung dieser Beobachtungen mit den Ergebnissen der abschließenden Varianzanalyse. Mehrfach z.B. bei den FTIR-Messwerten des pH-Wertes bzw. den Messwerten der Reduktone ergaben sich sprunghaft unterschiedliche Werte, die beim pH-Wert auf eine zu geringe Stellenzahl bei der Ausgabe der Messwerte und bei den Reduktonen auf eine Ergebnisrundung bzw. schrittweise Ablesung von Rohwerten durch das Programm des Messgerätes deuten. Die nachfolgenden varianzanalytischen Prüfungen zeigen, dass sich diese Abweichungen nicht nachteilig auf die Homogenitätsprüfung auswirkten.

Tabelle 2: Messergebnisse zur Homogenitätsprüfung des Prüfgutes FT18P04, 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	16	1,01052	76,53	61,62	36,61	18,12	18,43	6,970	3,45	6,32	2,17	0,87	2,06	0,810
2	6	1,01058	76,74	61,70	36,94	18,08	18,46	6,880	3,44	6,33	2,13	0,88	2,06	0,800
3	1	1,01055	76,88	61,61	36,93	18,06	18,52	6,840	3,44	6,34	2,13	0,87	2,08	0,799
4	5	1,01057	76,74	61,62	36,81	18,05	18,41	6,980	3,44	6,34	2,11	0,92	2,08	0,806
5	7	1,01056	76,83	61,64	36,69	18,00	18,41	6,930	3,45	6,33	2,13	0,84	2,10	0,804
6	11	1,01058	76,93	61,71	36,93	18,17	18,43	6,920	3,44	6,35	2,14	0,79	2,10	0,800
7	15	1,01060	76,79	61,67	36,78	18,13	18,42	6,980	3,44	6,35	2,13	0,83	2,10	0,806
8	13	1,01059	76,58	61,68	36,77	18,01	18,49	6,980	3,44	6,34	2,14	0,84	2,05	0,810
9	12	1,01062	76,76	61,71	36,96	18,26	18,31	6,920	3,44	6,34	2,11	0,79	2,10	0,806
10	3	1,01066	76,70	61,76	36,98	18,22	18,36	7,000	3,44	6,36	2,13	0,81	2,10	0,803
11	4	1,01061	76,66	61,71	37,07	18,19	18,45	6,920	3,44	6,35	2,16	0,76	2,07	0,803
12	8	1,01065	76,71	61,81	37,06	18,27	18,40	7,010	3,44	6,35	2,14	0,79	2,05	0,806
13	1	1,01058	76,39	61,74	36,73	18,16	18,35	7,120	3,44	6,33	2,18	0,74	2,05	0,832
14	6	1,01055	76,45	61,74	36,98	18,31	18,41	6,930	3,44	6,34	2,19	0,78	2,05	0,821
15	4	1,01059	76,62	61,74	36,70	18,02	18,38	7,010	3,44	6,34	2,18	0,81	2,05	0,818
16	16	1,01059	76,68	61,79	37,04	18,20	18,36	6,990	3,44	6,33	2,18	0,76	2,04	0,817
17	11	1,01056	76,65	61,78	36,85	18,27	18,33	6,950	3,44	6,36	2,20	0,74	2,03	0,800
18	5	1,01061	76,59	61,73	36,80	18,04	18,45	6,940	3,44	6,35	2,15	0,85	2,09	0,820
19	15	1,01060	76,65	61,73	37,03	18,15	18,42	6,980	3,44	6,36	2,15	0,79	2,06	0,805
20	13	1,01060	76,50	61,77	37,00	18,20	18,45	7,030	3,44	6,34	2,17	0,80	2,06	0,827
21	12	1,01064	76,57	61,74	36,91	17,95	18,47	7,050	3,43	6,35	2,16	0,76	2,09	0,812
22	3	1,01060	76,60	61,74	36,81	18,15	18,37	7,000	3,44	6,35	2,16	0,79	2,05	0,807
23	7	1,01060	76,45	61,71	36,74	18,00	18,44	6,960	3,44	6,35	2,16	0,82	2,05	0,809
24	8	1,01064	76,57	61,85	36,97	18,19	18,44	6,990	3,44	6,37	2,17	0,82	2,08	0,807

Die Ergebnisse der varianzanalytischen Prüfungen sind in der Tabelle 3 zusammengefasst.

Tabelle 3: Ergebnisse der Homogenitätsprüfung für das Prüfgut FT18P04

	Mittelwert	N	F	p	Standardabweichungen			Quotienten		Maximal tolerierter Wert für s_{Pr}
					Fehler (s_i)	Proben (s_{Pr})	Ziel (s_z)	s_r/s_z	s_{Pr}/s_z	
Rel. Dichte FTIR	1,010594	24	2,7108	0,0504	0,000025	0,000023	0,000132	0,189	0,175	0,0001
Vorh. Alkohol FTIR	76,65	24	0,2713	0,9807	0,1690		0,5350	0,316		0,2657
Gesamtextrakt FTIR	61,72	24	1,0493	0,4648	0,0594	0,0093	0,5940	0,100	0,016	0,2446
Vergärbare Zucker FTIR	36,88	24	0,5545	0,8310	0,1482		0,5968	0,248		0,2761
Glucose FTIR	18,13	24	0,9104	0,5584	0,1025		0,2795	0,367		0,1470
Fructose FTIR	18,41	24	0,4728	0,8874	0,0587		0,3126	0,188		0,1367
Glycerin FTIR	6,970	24	0,3778	0,9412	0,0685		0,2944	0,233		0,1341
pH-Wert	3,440	24	1,0606	0,4577	0,0035	0,0006	0,0476	0,074	0,013	0,0194
Gesamtsäure FTIR	6,345	24	3,0107	0,0354	0,0084	0,0084	0,1070	0,079	0,079	0,0436
Weinsäure FTIR	2,153	24	0,5420	0,8401	0,0276		0,1085	0,254		0,0505
Äpfelsäure FTIR	0,8104	24	0,8434	0,6076	0,0477		0,0385	1,241		0,0469
Milchsäure FTIR	2,069	24	0,6038	0,7940	0,0246		0,1049	0,234		0,0479
Flüchtige Säure FTIR	0,8095	24	0,5381	0,8429	0,0099		0,0473	0,210		0,0211
pH-Wert, potentiometr.	3,538	24	0,3595	0,9497	0,0191		0,0476	0,402		0,0261
Gesamtsäure, acidimetr.	6,593	24	1,0017	0,4954	0,0297	0,0009	0,1070	0,278	0,008	0,0510
Reduktone	50,17	24	2,6909	0,0516	0,3357	0,3086	4,4529	0,075	0,069	1,8135
Freie SO ₂	50,52	24	1,0909	0,4392	0,5200	0,1109	4,4791	0,116	0,025	1,8606
Gebundene SO ₂	102,1	24	0,5920	0,8030	1,780		8,14	0,219		3,6593
Gesamte SO ₂	171,4	24	1,3631	0,3007	1,849	0,788	5,36	0,345	0,147	2,7486

N = Anzahl der Messwerte

Für die Aussagekraft der Varianzanalyse ist der Quotient s_r/s_{Ziel} maßgeblich. Er überschreitet den höchstzulässigen Wert 0,5 nur für den Parameter Äpfelsäure. Die FTIR-Messergebnisse für Äpfelsäure tragen daher zur Entscheidung über die ausreichende Homogenität nicht bei. Für alle anderen geprüften Parameter sind die Ergebnisse der Varianzanalyse aussagekräftig und belegen – mit Ausnahme des Parameters Gesamtsäure bei FTIR-Messung – ohne weitere Prüfungen eine ausreichende Homogenität. Für diesen Parameter ergibt sich ein nur schwach signifikantes Ergebnis der Varianzanalyse. Es wird durch die acidimetrischen Messergebnisse nicht unterstützt. Die weiteren Prüfungen anhand des Quotienten aus der Standardabweichung zwischen den Proben s_{Pr} und der Zielstandardabweichung (s_{Ziel}), der einen Betrag von 0,3 nicht überschreiten soll, sowie der Vergleich von s_{Pr} mit dem nach Fearn und Thompson berechneten höchstzulässigen Betrag für diese Standardabweichung belegen, dass auch für den Parameter Gesamtextrakt eine ausreichende Homogenität vorliegt. Weder der zulässige Höchstwert des Quotienten s_{Pr}/s_{Ziel} noch der Maximalwert für s_{Pr} werden überschritten. Insgesamt ergibt sich für das **Prüfgut FT18P04** eine **ausreichende Homogenität** für die Laborvergleichsuntersuchung.

Von dem Prüfgut **FT18P05** wurden 336 Flaschen a 0,187 L in 28 Kartons a 12 Flaschen bezogen. Die Kartons wurden nummeriert und aus 12 durch Zufallsgenerator bestimmten Kartons je eine Flasche als Probe zur Homogenitätsprüfung gezogen. Wegen des geringen verfügbaren Volumens je Probe wurden nur drei Serien von Doppelproben gebildet. Die erste Serie diente der Bestimmung der Relativen Dichte mit elektronischer Densitometrie (Biegeschwinger) und Vorhandenem Alkohol mit Nahinfrarotspektroskopie (NIR). Die zweite Serie wurde mit Hochleistungsflüssigkeitschromatographie (HPLC) auf Glucose und Fructose untersucht, während die dritte Serie zur Bestimmung der Freien und Gesamten Schwefligen Säure diente. Weitere Details zur Durchführung der Untersuchungen stimmen mit der Verfahrensweise beim Prüfgut FT18P01 überein. Die Messergebnisse sind in der Tabelle 4 zusammengestellt.

Tabelle 4: Messergebnisse zur Homogenitätsprüfung des Prüfgutes FT18P05

Lfd. Nr.	Probe-Nr.	Relative Dichte	Vorhand. Alkohol	Gesamt-extrakt	Glucose	Fructose	Zucker nach Inv.	pH-Wert	Ges. Säure	Reduktone	Freie SO ₂	Gesamte SO ₂
1	26	0,99352	101,13	26,6	3,67	5,28	9,16	3,29	4,40	7,8	25,5	105,6
2	15	0,99357	101,37	26,8	3,80	5,33	9,28	3,32	4,35	8,3	28,1	107,2
3	14	0,99357	101,29	26,7	3,78	5,37	9,15	3,30	4,39	7,8	28,1	108,8
4	10	0,99349	101,21	26,5	3,75	5,39	9,14	3,29	4,37	7,8	25,5	104,8
5	12	0,99340	100,89	26,2	3,83	5,45	9,28	3,32	4,37	8,3	26,6	108,4
6	1	0,99351	100,73	26,4	3,68	5,37	9,32	3,29	4,39	7,8	28,7	109,4
7	2	0,99332	101,05	26,0	3,87	5,40	9,27	3,31	4,37	7,8	26,0	106,2
8	19	0,99344	100,42	26,1	3,80	5,39	9,32	3,27	4,38	7,8	27,1	108,3
9	6	0,99334	100,02	25,7	3,81	5,33	9,27	3,29	4,38	7,8	27,1	106,7
10	20	0,99348	100,34	26,2	3,84	5,34	9,37	3,27	4,38	8,3	26,6	105,3
11	7	0,99346	101,76	26,6	3,90	5,31	9,21	3,32	4,36	8,3	27,1	107,5
12	21	0,99346	101,60	26,6	3,79	5,35	9,24	3,31	4,38	7,8	25,0	104,2
13	14	0,99352	101,92	26,8	3,74	5,25	9,26				27,1	108,3
14	21	0,99345	101,76	26,6	3,86	5,31	9,17				25,0	105,0
15	7	0,99345	101,52	26,5	3,77	5,29	9,06				27,1	106,7
16	2	0,99344	101,29	26,4	3,68	5,27	9,12				26,0	106,2
17	6	0,99344	100,89	26,2	3,75	5,31	9,12				27,6	107,3
18	1	0,99352	99,55	26,0	3,91	5,27	9,18				28,7	110,2
19	12	0,99344	99,55	25,8	3,67	5,29	9,04				26,6	106,1
20	10	0,99352	99,47	25,9	3,77	5,36	9,13				26,0	107,0
21	15	0,99354	101,13	26,6	3,79	5,33	9,16				28,1	107,2
22	19	0,99346	101,52	26,5	3,84	5,27	9,11				27,1	107,5
23	20	0,99341	101,84	26,5	3,88	5,30	9,18				26,6	106,9
24	26	0,99351	101,84	26,8	3,86	5,39	9,25				26,6	106,9

Die Tabelle 4 zeigt ferner, dass ergänzend zu den Doppelmessungen einfache Messungen der Parameter pH-Wert, Gesamtsäure und Reduktone mit dem noch verfügbaren restlichen Probenmaterial aus jeder Probeflasche durchgeführt wurden. Die Messergebnisse geben keine Hinweise auf eine eventuell erhebliche Inhomogenität. Die graphische Prüfung der Messergebnisse erfolgte wie bei den anderen Prüfgütern. Sie zeigte keine Besonderheiten, d.h. zu erkennen abweichenden Messergebnissen lag der zweite Messwert in der Regel im Hauptfeld der Streuungen. Eine schwache und schwach signifikante Korrelation zur Messfolge war nur bei dem Parameter Vergärbare Zucker und ebensolche Korrelationen zur Probenfolge waren nur bei den Parametern Gesamtextrakt und Vergärbare Zucker zu beobachten. Die Ergebnisse der abschließenden Varianzanalyse zeigt Tabelle 5.

Tabelle 5: Ergebnisse der Homogenitätsprüfung für das Prüfgut FT18P05

	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.	0,993469	24	4,4354	0,0082	0,000039	0,000051	0,000132	0,293	0,385	0,000064
Vorh. Alkohol (NIR)	101,004	24	1,3827	0,2926	0,693	0,303	0,535	1,296	0,567	0,6772
Gesamtextrakt	26,375	24	2,5833	0,0589	0,245	0,218	0,594	0,412	0,367	0,3291
Glucose	3,793	24	0,3203	0,9655	0,0869		0,145	0,598		0,0994
Fructose	5,331	24	0,2333	0,9890	0,0640		0,187	0,343		0,0956
Zucker nach Inv.	9,200	24	0,3122	0,9684	0,105		0,291	0,360		0,1521
Freie SO ₂	26,829	24	19,3824	0,0000	0,336	1,019	2,62	0,128	0,389	1,0950
Gesamte SO ₂	106,987	24	5,0090	0,0049	0,855	1,211	5,36	0,160	0,226	2,2908

Diese Ergebnisse zeigen, dass die beobachteten Abweichungen bei Einzelwerten und die Korrelation zur Messfolge beim Parameter Vergärbare Zucker die Wiederholbarkeit der Messungen nicht beeinträchtigen. Für den Parameter Glucose liegt der Wert des Quotienten s_r/s_{Ziel} etwas und für den Parameter Vorhandener Alkohol erheblich über 0,5. Für letzteren Parameter deutet die Abfolge der Messwerte in der Graphik auf eine Störung der Messung. Diese Messergebnisse tragen daher nicht zur Aussage über die Homogenität des Prüfgutes bei. Für die weiteren Parameter ist die Aussagekraft der Varianzanalyse ist damit gegeben. Sie zeigt für die Parameter Relative Dichte, Freie und Gesamte Schweflige Säure ein signifikantes, d.h. eine Inhomogenität anzeigendes Ergebnis. Für die Parameter Relative Dichte und Freie Schweflige Säure übersteigt der im nächsten Schritt zu prüfende Wert des Quotienten s_{Pr}/s_{Ziel} ebenfalls den zulässigen Höchstwert von 0,3. Der Vergleich der Standardabweichung der Proben (s_{Pr}) mit dem nach Fearn und Thompson maximal tolerierbaren Wert ergibt jedoch auch für diese Parameter, dass dieser Höchstwert nicht überschritten wird. Damit ist das Prüfgut **FT18P05 ausreichend homogen** und für die Verwendung in der Laborvergleichsuntersuchung geeignet.

2.2 Hinweise auf Informationen zur Durchführung und Ergebnisauswertung

Die Informationen zur Verteilung des Untersuchungsmaterials an die Laboratorien, die Erläuterungen zur Durchführung der Untersuchungen, Ergebnisübermittlung und Ergebnisbehandlung können Teil 1 der Berichte entnommen werden. Hinsichtlich der Verfahrensweise bei der Ergebnisauswertung, insbesondere hinsichtlich der Grundlagen für die Bewertung der FTIR-Untersuchungsergebnisse unter Anwendung Matrixeffekte berücksichtigender Zielstandardabweichungen wird auf Abschnitt 2.4 in Teil 1 der Berichte verwiesen.

3 Gesamtergebnis der Laborvergleichsuntersuchung an den Prüfgütern FT18P04 und FT18P05

3.1 Herkömmliche Methoden mit Diskussion einzelner Parameter

Das Gesamtergebnis der Laborvergleichsuntersuchung für das Prüfgut FT18P04 wird durch die in Tabelle 6 und für das Prüfgut FT18P05 durch die in Tabelle 7 zusammengestellten deskriptiv-statistischen Ergebnisse für die geprüften Parameter beschrieben. Hinsichtlich der über die Legende hinausgehenden Erläuterungen zu den Tabellen und der prinzipiellen Interpretation der Daten wird auf Teil 1 der Berichte verwiesen.

Nach den Daten in Tabelle 6 fanden sich unter den Laborergebnissen der herkömmlichen Methoden für das Prüfgut **FT18P04** bei den 28 Datengruppen nur vereinzelt Laborergebnisse, die um mehr als 50 % vom Median abwichen. Trifft dies nur für ein Laborergebnis zu, zeigt die Erfahrung, dass häufig Übertragungsfehler oder eine Nichtberücksichtigung von Verdünnungsfaktoren vorliegen dürften. Analytische Probleme sind hingegen typischerweise Ursache einer Häufung derartiger Laborergebnisse, so z.B. in der Regel bei dem Parameter Reduktone. In diesem Fall liegt die relative Häufigkeit von Ausreißern häufig knapp unter 20 % und nimmt erst bei Anwesenheit von merklichen Ascorbinsäuregehalten ab.

Wegen eines Z-Score im absoluten Betrag über 5 wurden bei elf Datengruppen bis zu zwei Laborergebnisse ausgeschlossen. Drei oder mehr Laborergebnisse wurden aus diesem Grund bei keinem Parameter ausgeschlossen. Die höchstzulässige Ausschlussquote von 22 % wurde somit nicht erreicht. Der Quotient aus der Standardabweichung der Laborergebnisse und der maßgeblichen Zielstandardabweichung (s_L/s_{Ziel}) lag bei 21 der 28 Datengruppen unter 1,5 und damit im voll befriedigenden Bereich. Für weitere vier aus der Tabelle 6 ersichtliche Datengruppen lag der Wert dieses Quotienten über 1,5 bis 2,0 und war damit mäßig erhöht. Bei den Parametern Gesamte Milchsäure und Freie Schweflige Säure (Destillations- und photometrische Verfahren) ist damit bereits eine eingeschränkte Zuverlässigkeit des Bezugswertes verbunden, d.h. der Quotient u_M/s_{Ziel} ist auf eine Stelle gerundet größer als 0,3. Bei sehr geringen Ergebniszahlen wie den Parametern Vergärbare Zucker (reduktometrisch) oder Gesamte Äpfelsäure trat dieser Befund auch bei Werten des Quotienten s_L/s_{Ziel} unterhalb 1,5 auf. Der Höchstwert 2,0 des Quotienten s_L/s_{Ziel} wurde nur bei den Laborergebnissen für Reduktone und mit deren Bestimmung verbundene Datengruppen für Freie und Gesamte Schweflige Säure überschritten. Für die Parameter **Reduktone** und **jodometrisch bestimmte Gesamte Schweflige Säure nach Abzug der Reduktone** konnten aus diesem Grund **keine gültigen Z-Score** ermittelt werden. Sie sind wie die Daten in den entsprechenden Zeilen der Tabelle 6 in den Abschnitten 4.15.1 und 4.17.3 daher in grauer Schrift dargestellt. Erhöhte Werte des Quotienten u_M/s_{Ziel} sind bei der Bewertung der Z-Score zu Gunsten der Labors zu beachten soweit die Z-Score auf dieser Grundlage ermittelt wurden. Im Übrigen werden die Ergebnisse aller Parameter mit unbefriedigendem Gesamtergebnis alle Prüfgüter übergreifend im Abschnitt 4 des ersten Teiles der Berichte diskutiert, worauf hier verwiesen wird. Für die hier **nicht genannten Parameter** wurden **gültige Z-Score** erhalten.

Tabelle 6: Deskriptiv-statistische Kennzahlen der Ergebnisse mit herkömmlichen Methoden für das Rotweinprüfgut FT18P04

Parameter	Alle Werte	Gültige Werte	Mittel-Wert	Median-Wert	Labor-Stdabw. s_L	Labor-Stdfehler u_M	Zielstandardabweichungen			Quotienten					
							n. Horwitz s_H	exp. herk. s_{exp}	exp. FTIR $s_{\bar{U}}$	s_L/s_H	s_L/s_{exp}	$s_L/s_{\bar{U}}$	u_M/s_{Ziel}	$u_M/s_{\bar{U}}$	
Relative Dichte 20 °C/20 °C	49	47	1,01037	1,01037	0,000141	0,000021			0,000132	0,000190		1,06	0,74	0,16	0,11
Vorhandener Alkohol (g/L)	23	22	74,598	74,535	0,516	0,110	2,204		0,535	0,886	0,23	0,97	0,58	0,21	0,12
Gesamtextrakt (g/L)	41	39	60,18	60,20	0,607	0,0971	1,838		0,594	0,594	0,33	1,02	1,02	0,16	0,16
Vergärbare Zucker (g/L)															
- enzymatisch +HPLC	33	33	36,42	36,40	0,689	0,120	1,199		1,026	1,026	0,57	0,67	0,67	0,12	0,12
- reduktometrisch	10	9	36,58	36,50	1,481	0,494	1,201		1,028	1,028	1,23	1,44	1,44	0,48	0,48
Glucose (g/L)	35	35	18,43	18,38	0,426	0,072	0,671		0,539	0,539	0,63	0,79	0,79	0,13	0,13
Fructose (g/L)	35	35	18,11	18,08	0,452	0,076	0,662		0,531	0,531	0,68	0,85	0,85	0,14	0,14
Glycerin (g/L)	21	20	7,219	7,235	0,253	0,057	0,304			0,348	0,83		0,73	0,19	0,16
pH-Wert	40	40	3,582	3,570	0,0529	0,0084			0,0476	0,0493		1,11	1,07	0,18	0,17
Gesamtsäure (g/L)	42	42	6,276	6,250	0,115	0,0178	0,268		0,107	0,145	0,43	1,08	0,80	0,17	0,12
Weinsäure (g/L)															
- nur HPLC + IC	10	10	2,146	2,140	0,0822	0,0260	0,108			0,227	0,76		0,36	0,24	0,11
- alle herk. Verfahren	28	27	2,128	2,111	0,173	0,0334	0,107			0,227	1,63		0,76	0,31	0,15
Flüchtige Säure (g/L)	26	25	1,014	1,046	0,0875	0,0175	0,0587			0,0891	1,49		0,98	0,30	0,20
Acetat als Essigsäure (g/L)															
- enzymatisch, automatisiert	18	18	1,020	1,010	0,0655	0,0154	0,0570			0,0570	1,15		1,15	0,27	0,27
- sonst. Verfahren	9	9	0,9622	0,9400	0,0493	0,0164	0,0537			0,0537	0,92		0,92	0,31	0,31
Gesamte Äpfelsäure (g/L)	10	10	0,9649	0,9700	0,0512	0,0162	0,0551		0,0425	0,218	0,93	1,20	0,23	0,38	0,07
L-Äpfelsäure (g/L)	30	28	0,9825	0,9750	0,0509	0,0096	0,0554		0,0427		0,92	1,19		0,23	
Gesamte Milchsäure (g/L)	15	15	3,027	3,090	0,235	0,0607	0,147			0,209	1,59		1,12	0,41	0,29
L-Milchsäure (g/L)	25 (1)	24	2,071	2,058	0,155	0,0316	0,104		0,109		1,48	1,42		0,29	
Reduktone (mg/L)	34 (7)	34	15,89	16,52	4,09	0,701	1,73				2,36			0,40	
Freie Schweflige Säure (mg/L)															
- Destillation	9	9	44,55	44,48	3,45	1,15	4,02			4,02	0,86		0,86	0,29	0,29
- Destillation + Photometrie	18	18	40,23	41,70	5,88	1,39	3,81			3,81	1,55		1,55	0,36	0,36
- jodometr. incl. Reduktone	25	25	49,99	50,00	3,54	0,708	4,44				0,80			0,16	
- jodometr. excl. Reduktone)	11	11	39,44	38,00	9,15	2,76	3,52		4,44		2,60		2,06	0,62	
- wie vor, Basis erweitert ¹⁾	35	35	34,94	35,00	7,46	1,26	3,28		4,44		2,28		1,68	0,28	
Gesamte Schweflige Säure (mg/L)															
- Destillationsverfahren	32	32	81,29	80,00	4,46	0,788	6,62		5,36	6,62	0,67		0,83	0,67	0,15
- jodometr. incl. Reduktone	15	14	86,80	84,00	6,70	1,79	6,90		5,36		0,97		1,25	0,33	
- jodometr. excl. Reduktone ¹⁾	19 (2)	19	73,91	72,00	11,01	2,53	6,05		5,36		1,82		2,06	0,47	

¹⁾ Basis erweitert; weitere Erläuterungen siehe Teil 1 Abschnitt 4.4.2, Erläuterungen zur Tabelle 14 (Seite 34)

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 OIV-Methoden)

Zielstdabw. exp. FTIR ($s_{\bar{U}}$) = Zielstandardabweichung aus experimentellen Daten für die Bewertung der Ergebnisse des FTIR-Verfahrens

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

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

Tabelle 7: Deskriptiv-statistische Kennzahlen der Ergebnisse mit herkömmlichen Methoden für das Roséweinprüfgut FT18P05

Parameter	Alle Werte	Gültige Werte	Mittelwert	Medianwert	Labor-Stdabw. s _L	Labor-Stdfehler u _M	Zielstandardabweichung				Quotienten					
							n. Horwitz s _H	exp. herk. s _{exp}	exp. FTIR s _Ü	s _L /s _H	s _L /s _{exp}	s _L /s _Ü	u _M /s _{Ziel}	u _M /s _Ü		
Relative Dichte 20 °C/20 °C	52	50	0,99358	0,99358	0,000138	0,000020			0,000132	0,000190			1,05	0,73	0,15	0,10
Vorhandener Alkohol (g/L)	27	26	99,679	99,650	0,984	0,193	2,820		0,535	0,886	0,35	1,84	1,11	0,36	0,22	
Gesamtextrakt (g/L)	44	43	26,20	26,10	0,533	0,0813	0,904		0,594	0,594	0,59	0,90	0,90	0,14	0,14	
Vergärbare Zucker (g/L)																
- enzymatisch + HPLC	32	32	8,974	8,930	0,330	0,0584	0,363		0,284	0,584	0,91	1,16	0,57	0,21	0,10	
- reduktometrisch	11	10	9,331	9,300	0,628	0,199	0,376		0,294	0,584	1,67	2,14	1,07	0,68	0,34	
Glucose (g/L)	35	35	3,689	3,710	0,168	0,0283	0,172		0,143	0,408	0,97	1,17	0,41	0,20	0,07	
- z _{Max} = 4,5	35	34	3,709	3,715	0,119	0,0204	0,172		0,143	0,408	0,69	0,83	0,29	0,14	0,05	
Fructose (g/L)	34	34	5,245	5,245	0,224	0,0385	0,231		0,185	0,330	0,97	1,22	0,68	0,21	0,12	
Glycerin (g/L)	21	20	5,074	5,065	0,254	0,0567	0,224		0,348		1,13					
pH-Wert	45	44	3,340	3,350	0,0491	0,0074			0,0476	0,0493		1,03	1,00	0,16	0,15	
Gesamtsäure (g/L)	46	45	4,437	4,400	0,120	0,0179	0,199		0,107	0,145	0,60	1,12	0,83	0,17	0,12	
Weinsäure (g/L)																
- nur HPLC + IC	13	13	1,801	1,800	0,0644	0,0179	0,0932			0,227	0,69		0,28	0,19	0,08	
- alle Verfahren	33	33	1,827	1,820	0,117	0,0204	0,0941			0,227	1,24		0,52	0,22	0,09	
Flüchtige Säure (g/L)	29	29	0,3667	0,3600	0,0466	0,0087	0,0237		0,0286	0,0891	1,96	1,63	0,52	0,30	0,10	
Acetat als Essigsäure (g/L)																
- enzymatisch, automatisiert	20	20	0,3646	0,3650	0,0438	0,0098	0,0240			0,0240	1,82		1,82	0,41	0,41	
- sonst. Verfahren	10	10	0,3047	0,2935	0,0304	0,0096	0,0200			0,0200	1,52		1,52	0,48	0,48	
Gesamte Äpfelsäure (g/L)	13	13	1,289	1,270	0,0721	0,0200	0,0693		0,0502	0,218	1,04	1,44	0,33	0,40	0,09	
L-Äpfelsäure (g/L)	32	30	1,149	1,150	0,0642	0,0117	0,0637		0,0471		1,01	1,36	0,25	0,25		
Gesamte Milchsäure (g/L)	19	18	0,3370	0,3475	0,0428	0,0101	0,0230			0,209	1,86		0,20	0,44	0,05	
L-Milchsäure (g/L)	27 (2)	26	0,2641	0,2630	0,0354	0,0069	0,0182		0,0293		1,95	1,21		0,24		
Reduktone (mg/L)	13 (4)	13	4,62	5,00	1,83	0,509	0,628				2,92			0,81		
Freie Schweflige Säure																
- Destillation	10	10	24,82	24,85	3,34	1,057	2,45			2,45	1,36		1,36	0,43	0,43	
- Destillation+Photometrie	19	19	24,01	24,00	3,33	0,763	2,38			2,38	1,40		1,40	0,32	0,32	
- incl. Reduktone	28	28	27,70	26,55	3,27	0,618	2,59				1,26			0,24		
- excl. Reduktone	12	12	26,91	27,00	2,70	0,779	2,63		2,59		1,03	1,04		0,30		
- wie vor, Basis erweitert	19	19	25,24	26,00	3,67	0,843	2,55		2,59		1,44	1,42		0,32		
Gesamte Schweflige Säure (mg/L)																
- Destillationsverfahren	31	31	103,84	104,00	5,45	0,979	8,27		5,36	8,27	0,66	1,02	0,66	0,18	0,12	
- jodometr. incl. Reduktone	17	16	101,71	101,00	7,20	1,80	8,07		5,36		0,89	1,34		0,34		
- jodometr. excl. Reduktone*)	12	12	102,21	103,80	7,45	2,15	8,26		5,36		0,90	1,39		0,40		

*) Basis erweitert; weitere Erläuterungen siehe Teil 1 Abschnitt 4.4.2, Erläuterungen zur Tabelle 14 (Seite 34)

Weitere Erläuterungen zu Tabelle 6 und Tabelle 7:

Quotient (s_L/s_Ü) = Quotient 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_Ü = Quotient aus dem Standardfehler des Mittelwertes und der Zielstandardabweichung für die Bewertung der Ergebnisse des FTIR-Verfahrens

Blau markierte Daten sind auffällig und werden in der Regel 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.

Auch bei dem Prüfgut **FT18P05** lagen nur wenige, um mehr als 50 % vom Median abweichende, Laborergebnisse vor, die bei allen statistischen Berechnungen unberücksichtigt bleiben aber durch Z-Score bewertet werden. Ausschlüsse aus diesem Grund ergaben sich bei denselben Parametern **Reduktone** und **L-Milchsäure** wie bei dem Prüfgut FT18P04. Bei 11 von 29 Datengruppen wurden ein bis zwei Laborergebnisse mit einem Z-Scorebetrag über 5 ausgeschlossen. Höhere Ausschlusszahlen ergaben sich nicht. Den höchstzulässigen Anteil von 22,2 % ausgeschlossener Laborergebnissen überschritt nur der Parameter Reduktone.

Mäßig erhöhte Quotienten s_L/s_{Ziel} zwischen 1,5 und 2,0 finden sich bei vier Parameterdatengruppen der Tabelle 7 wobei für drei Parameter (Vorhandener Alkohol, Acetat (automatisiert) und Gesamte Milchsäure) die Zuverlässigkeit des Bezugswertes für die Bewertung der Ergebnisse mit herkömmlichen Methoden eingeschränkt ist, weil der Wert des Quotienten u_M/s_{Ziel} über 0,3 liegt. Die Zuverlässigkeit des Bezugswertes ist auch bei weiteren Parametern – vor allem mit geringer Ergebnisanzahl – eingeschränkt. Der Höchstwert 2,0 für den Quotienten s_L/s_{Ziel} wird bei den Ergebnissen für Vergärbare Zucker (reduktometrisch) und Reduktone überschritten. Zugleich liegt der Wert des Quotienten u_M/s_{Ziel} über dem Höchstwert 0,5. Auswirkungen auf die Bewertung der Laborleistung hat dies nur für den Parameter **Reduktone**, für den **keine gültigen Z-Score** erhalten werden.

Zusammenfassend ergeben sich für **beide Prüfgüter** und die überwiegende Mehrzahl der Parameterdatengruppen **geeignete Bezugswerte und aussagekräftige Z-Score**.

3.2 Gesamtergebnis der FTIR-Untersuchungen

Wie in Teil 1 im Abschnitt 5.2 begründet, wurden auch für die Proben FT18P04 und FT18P05 die Ergebnisse der FTIR-Untersuchungen ergänzend einer auf sie beschränkten Gesamtauswertung unterzogen, aber keine auf dieser Grundlage berechneten Z-Score ausgewiesen. Hierbei werden die mit robusten statistischen Verfahren ermittelten, beschreibenden statistischen Kennzahlen der Laborergebnisse mit den Vergleichsstandardabweichungen des FTIR-Verfahrens verglichen. Die Daten sind für das Prüfgut FT18P04 in der Tabelle 8 und für das Prüfgut FT18P05 in der Tabelle 9 enthalten. Insgesamt bestätigen sich die im Abschnitt 5.3 des Teiles 1 und im Abschnitt 3.2 des Teiles 2 dieses Berichtes angesprochenen Probleme und Schlussfolgerungen hinsichtlich der mangelnden Übereinstimmung der FTIR-Messergebnisse.

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 Methodvalidierung 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

Markierungen wie in den Erläuterungen zu Tabelle 6 und Tabelle 7 beschrieben

Tabelle 8: Deskriptiv-statistische Ergebnisse der FTIR-Untersuchungen für das Rotwein- Prüfgut FT18P04

Parameter	Alle Werte	Mittel-Wert	Median-Wert	Labor-Stdabw. s_L	Zielstdabw n. Horwitz s_H	Zielstdabw exp. FTIR s_{FTIR}	Quotient s_L/s_H	Quotient s_L/s_{FTIR}	Quotient u_M/s_{FTIR}
Relative Dichte 20 °C/20 °C	76	1,01038	1,010400	0,000296		0,000146		2,03	0,23
Vorhandener Alkohol (g/L)	78	75,820	75,830	0,884	2,236	0,739	0,40	1,20	0,14
Gesamtextrakt (g/L)	50	61,127	61,045	0,846	1,860	0,415	0,46	2,04	0,29
Vergärbare Zucker (r) (g/L)	72	36,323	36,305	1,164	1,196	0,354	0,97	3,29	0,39
Vergärbare Zucker (S) (g/L)	75	35,612	35,690	0,920	1,179	0,354	0,78	2,60	0,30
Glucose (g/L)	75	17,977	18,020	0,594	0,660	0,288	0,90	2,06	0,24
Fructose (g/L)	75	17,596	17,610	0,659	0,647	0,222	1,02	2,97	0,34
Glycerin (g/L)	67	7,096	7,000	0,605	0,295	0,265	2,05	2,28	0,28
pH-Wert	76	3,530	3,530	0,084		0,0188		4,48	0,51
Gesamtsäure (g/L)	78	6,176	6,200	0,228	0,267	0,0816	0,86	2,80	0,32
Weinsäure (g/L)	71	2,008	2,040	0,261	0,104	0,132	2,52	1,98	0,23
Flüchtige Säure (g/L)	71	0,862	0,850	0,1755	0,0493	0,0427	3,56	4,11	0,49
Gesamte Äpfelsäure (g/L)	71	1,083	1,100	0,307	0,061	0,0975	5,00	3,15	0,37
Gesamte Milchsäure (g/L)	69	2,647	2,680	0,386	0,131	0,0805	2,95	4,79	0,58
Freie Schweflige Säure (mg/L)	20	38,50	38,50	5,93	3,56	3,56	1,67	1,67	0,37
Gesamte Schweflige Säure (mg/L)	21	89,18	87,00	8,84	7,11	7,11	1,24	1,24	0,27

Tabelle 9: Deskriptiv-statistische Ergebnisse der FTIR-Untersuchungen für das Roséwein-Prüfgut FT18P05

Parameter	Alle Werte	Mittel-Wert	Median-Wert	Labor-Stdabw. s_L	Zielstdabw n. Horwitz s_H	Zielstdabw exp. FTIR s_{FTIR}	Quotient s_L/s_H	Quotient s_L/s_{FTIR}	Quotient u_M/s_{FTIR}
Relative Dichte 20 °C/20 °C	78	0,99377	0,993800	0,000295		0,000146		2,02	0,23
Vorhandener Alkohol (g/L)	80	100,058	100,000	1,055	2,828	0,739	0,37	1,43	0,16
Gesamtextrakt (g/L)	50	26,615	26,585	0,729	0,918	0,415	0,79	1,76	0,25
Vergärbare Zucker (r) (g/L)	73	9,209	9,230	0,716	0,374	0,354	1,92	2,02	0,24
Vergärbare Zucker (S) (g/L)	77	9,199	9,100	0,853	0,369	0,354	2,31	2,41	0,27
Glucose (g/L)	77	3,974	3,960	0,562	0,182	0,288	3,09	1,95	0,22
Fructose (g/L)	77	5,196	5,110	0,547	0,226	0,222	2,42	2,47	0,28
Glycerin (g/L)	67	5,430	5,400	0,333	0,237	0,265	1,40	1,26	0,15
pH-Wert	78	3,396	3,390	0,071		0,0188		3,78	0,43
Gesamtsäure (g/L)	80	4,553	4,555	0,167	0,205	0,0816	0,82	2,05	0,23
Weinsäure (g/L)	72	1,871	1,865	0,278	0,096	0,132	2,90	2,11	0,25
Flüchtige Säure (g/L)	73	0,3891	0,3900	0,0884	0,0254	0,0427	3,48	2,07	0,24
Gesamte Äpfelsäure (g/L)	73	1,397	1,390	0,248	0,075	0,0975	3,32	2,55	0,30
Gesamte Milchsäure (g/L)	67	0,5063	0,5100	0,249	0,0319	0,0805	7,79	3,09	0,38
Freie Schweflige Säure (mg/L)	20	27,53	26,00	6,32	2,55	2,55	2,48	2,48	0,55
Gesamte Schweflige Säure (mg/L)	21	103,75	104,07	9,57	8,28	8,28	1,16	1,16	0,25

Das Prüfgut **FT18P05** weist einen Gehalt an **Gesamter Milchsäure** an der Untergrenze des Anwendungsbereichs des FTIR-Verfahrens auf. Daher erfolgt die Darstellung der Daten für diese Prüfgut/Parameter-Kombination in der Tabelle 9 in grauer Schriftfarbe und es werden in der Datentabelle des Abschnittes 5.4.3 sowie in den Laborergebnismitteilungen für diese Parameter/Prüfgut-Kombination **keine Z-Score** ausgewiesen. Bei den anderen Parametern wird bei den Prüfgütern die Untergrenze des Anwendungsbereiches der Methode nicht erreicht.

Abschließend werden in der Tabelle 10 für das Prüfgut FT18P04 und in der Tabelle 11 für das Prüfgut FT18P05 die Abweichungen der Mediane der Ergebnisse herkömmlicher Verfahren und des FTIR-Verfahrens sowie die ihnen entsprechenden Z-Score-Werte auf der Basis der Matrixeffekte berücksichtigenden Zielstandardabweichungen zusammengestellt. Wie stets für den Parameter **Gesamtextrakt** wird bei diesem Vergleich an deren Stelle die Zielstandardabweichung für die Ergebnisse der herkömmlichen Methoden verwendet, weil deren Betrag größer ist als der Betrag der Übereinstimmungsstandardabweichung und sie auch für die Bewertung der Laborergebnisse verwendet wird. Dies gilt für das Prüfgut **FT18P04** auch für die Bewertung der Differenz bei den Messergebnissen für **Vergärbare Zucker, Glucose** und **Fructose**.

Tabelle 10: Differenz herkömmlicher und FTIR-Ergebnisse das Prüfgut FT18P04

	Median FTIR	Median herk.	Differenz	Ziel- StdAbw	Zü- Score
Relative Dichte 20°C/20°C	1,01040	1,01037	0,000030	0,000190	0,16
Vorhandener Alkohol (g/L)	75,830	74,535	1,295	0,886	1,46
Gesamtextrakt (g/L)	60,600	60,200	0,400	0,594	0,67
Vergärbare Zucker (g/L), reduktometr.	36,305	36,500	-0,195	1,028	-0,19
Vergärbare Zucker (g/L), Summe	35,690	36,400	-0,710	1,026	-0,69
Glucose (g/L)	18,020	18,380	-0,360	0,539	-0,67
Fructose (g/L)	17,610	18,080	-0,470	0,531	-0,89
Glycerin (g/L)	7,000	7,230	-0,230	0,348	-0,66
pH-Wert	3,530	3,570	-0,040	0,049	-0,81
Gesamtsäure (g/L)	6,200	6,250	-0,050	0,145	-0,34
Weinsäure (g/L)	2,040	2,111	-0,071	0,227	-0,31
Flüchtige Säure (g/L)	0,850	1,046	-0,196	0,089	-2,19
Gesamte Äpfelsäure (g/L)	1,100	0,970	0,130	0,218	0,60
Gesamte Milchsäure (g/L)	2,68	3,090	-0,410	0,209	-1,96
Freie Schweflige Säure (mg/L)	38,49	41,70	-3,21	3,81	-0,84
Gesamte Schweflige Säure (mg/L)	87,00	80,00	7,00	5,36	1,31

Die erhaltenen Z-Score zeigen an, in welchem Ausmaß die "mittleren" Ergebnisse beider Gruppen verschieden sind bzw. inwieweit sich bei den Ergebnissen des FTIR-Verfahrens Matrixeffekte auf die im Vergleich mit den Ergebnissen herkömmlicher Untersuchungsmethoden erhaltenen Z-Score auswirken. Entsprechen die systematischen Matrixeffekte einem absoluten Z-Scorebetrag unter 1 so sind sie für die Praxis und die Bewertung der FTIR-Laborergebnisse nicht relevant. Bei dem Prüfgut **FT18P04** liegt dieser Z-Score für vier Parameter über 1,0 davon für zwei Parameter sogar über 1,5 und zeigt damit erhebliche Differenzen an. Der wie bei dem Prüfgut FT18P03 auffällige Minderbefund bei dem Parameter **Flüchtige Säure** ist bei Prüfgütern mit infolge natürlicher mikrobiologischer Vorgänge über etwa 0,7 g/L erhöhten Gehalten an Flüchtiger Säure nicht ungewöhnlich. Es muss davon ausgegangen werden, dass derartige

Probenmaterial bei der Erarbeitung einer stark verbreiteten Basiskalibrierung nicht ausreichend vertreten war. Dies hat zur Folge, dass die Matrixeffekte durch das mathematische Schätzverfahren nicht ausgeglichen werden. Bei dem Parameter **Gesamte Milchsäure** zeigt sich nur bei diesem Prüfgut ein Minderbefund, der im Vorjahr wesentlich ausgeprägter bei allen Prüfgütern beobachtet wurde. Insoweit besteht der Eindruck einer Verbesserung der Laborleistung, die durch Slope-Interzept-Korrekturen erreicht wurde. Erhöhte absolute Z-Score-Beträge der Laborergebnisse weisen bei diesem Prüfgut und diesen Parametern nicht mit Sicherheit auf gerätebedingte Mängel der Arbeitsbedingungen hin.

Dahingegen zeigen beim Prüfgut **FT18P05** die Z_Ü-Score der Mediane im Wesentlichen keine beachtenswerten Matrixeffekte an, wenn auch bei den Parametern Relative Dichte und Gesamtsäure mäßig erhöhte Werte vorliegen. Die Laborergebnisse für dieses Prüfgut sind also gut zur Überprüfung der eigenen Arbeitsbedingungen im Hinblick auf eine einwandfreie Gerätefunktion und korrekte Probenbehandlung geeignet.

Tabelle 11: Differenz herkömmlicher und FTIR-Ergebnisse des Prüfgut FT18P05

	Median FTIR	Median herk.	Differenz	Ziel- StdAbw	Z _Ü - Score
Relative Dichte 20°C/20°C	0,99380	0,99358	0,000215	0,000190	1,13
Vorhandener Alkohol (g/L)	100,000	99,650	0,350	0,886	0,40
Gesamtextrakt (g/L)	26,585	26,100	0,485	0,594	0,82
Vergärbare Zucker (g/L), reduktometr.	9,230	9,300	-0,070	0,584	-0,12
Vergärbare Zucker (g/L), Summe	9,100	8,930	0,170	0,584	0,29
Glucose (g/L)	3,960	3,710	0,250	0,408	0,61
Fructose (g/L)	5,110	5,245	-0,135	0,330	-0,41
Glycerin (g/L)	5,400	5,060	0,340	0,348	0,98
pH-Wert	3,390	3,350	0,040	0,049	0,81
Gesamtsäure (g/L)	4,550	4,400	0,150	0,145	1,03
Weinsäure (g/L)	1,865	1,820	0,045	0,227	0,20
Flüchtige Säure (g/L)	0,390	0,360	0,030	0,089	0,34
Gesamte Äpfelsäure (g/L)	1,390	1,270	0,120	0,218	0,55
Gesamte Milchsäure (g/L)	0,510	0,347	0,163	0,209	0,78
Freie Schweflige Säure (mg/L)	26,00	24,00	2,00	2,38	0,84
Gesamte Schweflige Säure (mg/L)	104,07	104,00	0,07	5,36	0,01

Weitere Details zur Bewertung der FTIR-Ergebnisse wurden in den Abschnitten 5.2 und 5.3 des ersten Teiles und im Abschnitt 3.2 des zweiten Teiles der Berichte über diese Laborvergleichsuntersuchung angesprochen. Ferner wurde auf erhebliche Matrixeffekte bereits in dem Kurzbericht hingewiesen, der den Ergebnismitteilungen für die Teilnehmer beigelegt war.

4 Ergebnisse zu den einzelnen Parametern der Probe FT18P04

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	1,01028	-0,000090	-0,68	
02	LwK 8.1	1,01035	-0,000020	-0,15	
04	LwK 8.4	1,01042	0,000050	0,38	
05	LwK 8.4	1,01028	-0,000090	-0,68	
06	LwK 8.4	1,01045	0,000080	0,61	
07	LwK 8.4	1,01040	0,000030	0,23	
08	LwK 8.1	1,01040	0,000030	0,23	
10	LwK 8.1	1,01033	-0,000040	-0,30	
11	LwK 8.4	1,01038	0,000010	0,08	
12	LwK 8.4	1,01037	0,000000	0,00	
14	LwK 8.4	1,01035	-0,000020	-0,15	
16	LwK 8.4	1,01020	-0,000170	-1,29	
17	LwK 8.4	1,01037	0,000000	0,00	
19	LwK 8.4	1,01030	-0,000070	-0,53	
20	LwK 8.4	1,01030	-0,000070	-0,53	
22	LwK 8.4	1,01045	0,000080	0,61	
23	LwK 8.4	1,01060	0,000230	1,74	
24	LwK 8.4	1,01026	-0,000110	-0,83	
25	LwK 8.4	1,01032	-0,000050	-0,38	
27	LwK 8.4	1,01034	-0,000030	-0,23	
28	LwK 8.4	1,01030	-0,000070	-0,53	
29	LwK 8.4	1,01033	-0,000040	-0,30	
31	LwK 8.4	1,01036	-0,000010	-0,08	
35	LwK 8.4	1,01040	0,000030	0,23	
37	LwK 8.4	1,01040	0,000030	0,23	
38	LwK 8.3	1,01024	-0,000130	-0,98	
39	LwK 8.4	1,01040	0,000030	0,23	
40	LwK 8.4	1,01039	0,000020	0,15	
41	LwK 8.4	1,01028	-0,000090	-0,68	
42	LwK 8.4	1,01050	0,000130	0,98	
43	LwK 8.4	1,01034	-0,000030	-0,23	
45	LwK 8.4	1,01040	0,000030	0,23	
49	LwK 8.4	1,01024	-0,000130	-0,98	
50	LwK 8.4	1,01035	-0,000020	-0,15	
53	LwK 8.4	1,01050	0,000130	0,98	
55	LwK 8.4	1,01040	0,000030	0,23	
56	LwK 8.4	1,01022	-0,000150	-1,14	
57	LwK 8.4	1,01030	-0,000070	-0,53	
60	LwK 8.4	1,00980	-0,000570	-4,32	
61	LwK 8.4	1,01050	0,000130	0,98	
63	LwK 8.4	1,01040	0,000030	0,23	
64	LwK 8.4	1,01060	0,000230	1,74	
68	LwK 8.4	1,01040	0,000030	0,23	
74	LwK 8.4	1,01070	0,000330	2,50	
81	LwK 8.4	1,01176	0,001390	10,53	(**)
84	LwK 8.2	1,00860	-0,001770	-13,41	(**)
86	LwK 8.4	1,01052	0,000150	1,14	
92	LwK 8.4	1,01049	0,000120	0,91	
105	LwK 8.4	1,01070	0,000330	2,50	

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

4.1.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	1,01000	-0,000370	-1,95	
202	FTIR	1,01023	-0,000140	-0,74	
203	FTIR	1,00994	-0,000430	-2,26	
204	FTIR	1,01062	0,000250	1,32	
206	FTIR	1,00980	-0,000570	-3,00	
207	FTIR	1,01028	-0,000090	-0,47	
208	FTIR	1,01008	-0,000290	-1,53	
209	FTIR	1,01000	-0,000370	-1,95	
210	FTIR	1,01041	0,000040	0,21	
212	FTIR	1,01008	-0,000290	-1,53	
213	FTIR	1,01030	-0,000070	-0,37	
214	FTIR	1,01030	-0,000070	-0,37	
216	FTIR	1,01010	-0,000270	-1,42	
217	FTIR	1,01040	0,000030	0,16	
218	FTIR	1,01050	0,000130	0,68	
219	FTIR	1,01060	0,000230	1,21	
220	FTIR	1,01035	-0,000020	-0,11	
221	FTIR	1,01020	-0,000170	-0,89	
222	FTIR	1,01020	-0,000170	-0,89	
223	FTIR	1,01054	0,000170	0,89	
224	FTIR	1,01099	0,000620	3,26	
225	FTIR	1,01070	0,000330	1,74	
226	FTIR	1,00650	-0,003870	-20,37	(**)
227	FTIR	1,01057	0,000200	1,05	
228	FTIR	1,01050	0,000130	0,68	
229	FTIR	1,01045	0,000080	0,42	
230	FTIR	1,01040	0,000030	0,16	
231	FTIR	1,01018	-0,000190	-1,00	
233	FTIR	1,01050	0,000130	0,68	
235	FTIR	1,01020	-0,000170	-0,89	
236	FTIR	1,01070	0,000330	1,74	
237	FTIR	1,01069	0,000320	1,68	
238	FTIR	1,01063	0,000260	1,37	
241	FTIR	1,01045	0,000080	0,42	
242	FTIR	1,01000	-0,000370	-1,95	
243	FTIR	1,01038	0,000010	0,05	
244	FTIR	1,01040	0,000030	0,16	
245	FTIR	1,01040	0,000030	0,16	
246	FTIR	1,01040	0,000030	0,16	
247	FTIR	1,01010	-0,000270	-1,42	
249	FTIR	1,01030	-0,000070	-0,37	
250	FTIR	1,01060	0,000230	1,21	
251	FTIR	1,01070	0,000330	1,74	
254	FTIR	1,01070	0,000330	1,74	
255	FTIR	1,01060	0,000230	1,21	
256	FTIR	1,00999	-0,000380	-2,00	
257	FTIR	1,01010	-0,000270	-1,42	
258	FTIR	1,01040	0,000030	0,16	
259	FTIR	1,01077	0,000400	2,11	
260	FTIR	1,01030	-0,000070	-0,37	
261	FTIR	1,01090	0,000530	2,79	
262	FTIR	1,01040	0,000030	0,16	
263	FTIR	1,01020	-0,000170	-0,89	
264	FTIR	1,01060	0,000230	1,21	
265	FTIR	1,01020	-0,000170	-0,89	
266	FTIR	1,01061	0,000240	1,26	
267	FTIR	1,00990	-0,000470	-2,47	
268	FTIR	1,01042	0,000050	0,26	
269	FTIR	1,01060	0,000230	1,21	
270	FTIR	1,01070	0,000330	1,74	
271	FTIR	1,01060	0,000230	1,21	
273	FTIR	1,01047	0,000100	0,53	
274	FTIR	1,01000	-0,000370	-1,95	
275	FTIR	1,01000	-0,000370	-1,95	

(**) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der Werte herkömmlicher Verfahren ab

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
276	FTIR	1,01040	0,000030	0,16	
277	FTIR	1,01030	-0,000070	-0,37	
278	FTIR	1,01060	0,000230	1,21	
280	FTIR	1,00940	-0,000970	-5,11	(**)
281	FTIR	1,01020	-0,000170	-0,89	
282	FTIR	1,01070	0,000330	1,74	
283	FTIR	1,01075	0,000380	2,00	
284	FTIR	1,00860	-0,001770	-9,32	(**)
322	FTIR	1,01060	0,000230	1,21	
338	FTIR	1,01077	0,000400	2,11	
349	FTIR	1,01050	0,000130	0,68	
363	FTIR	1,01070	0,000330	1,74	

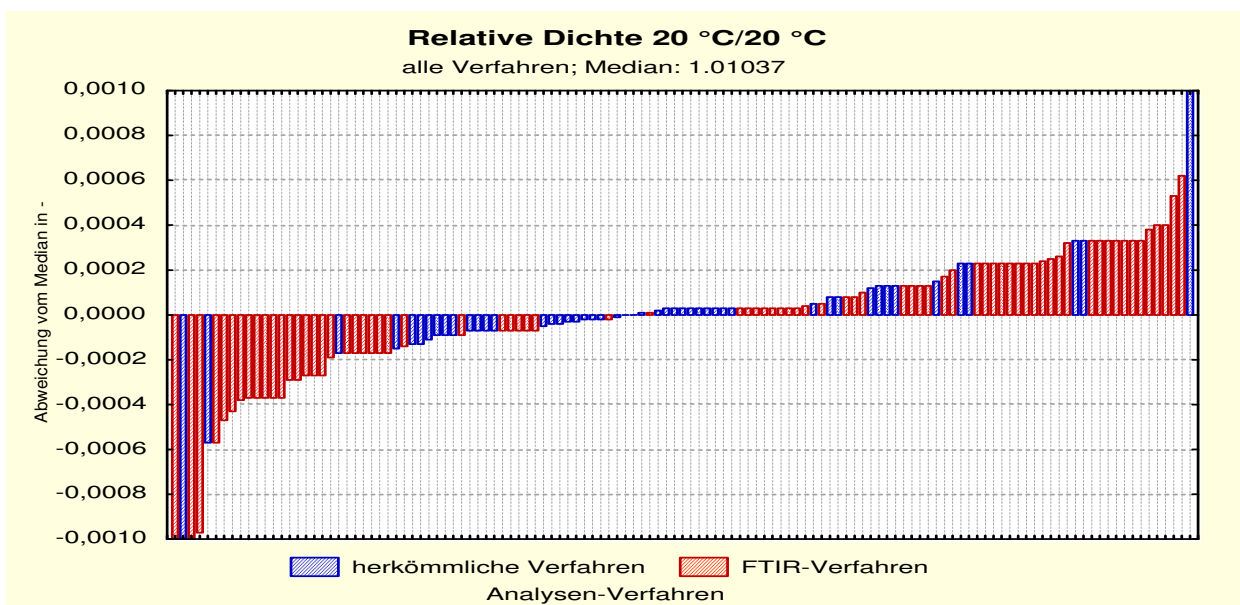
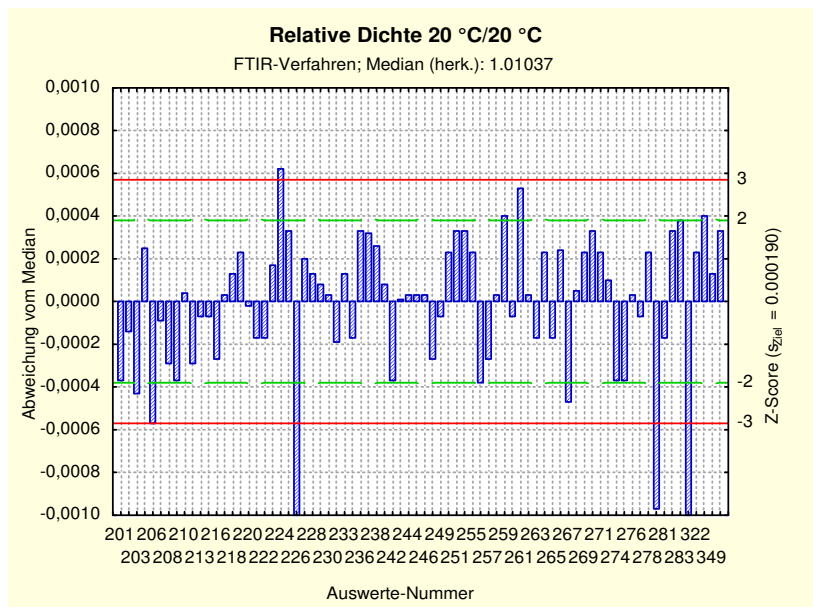
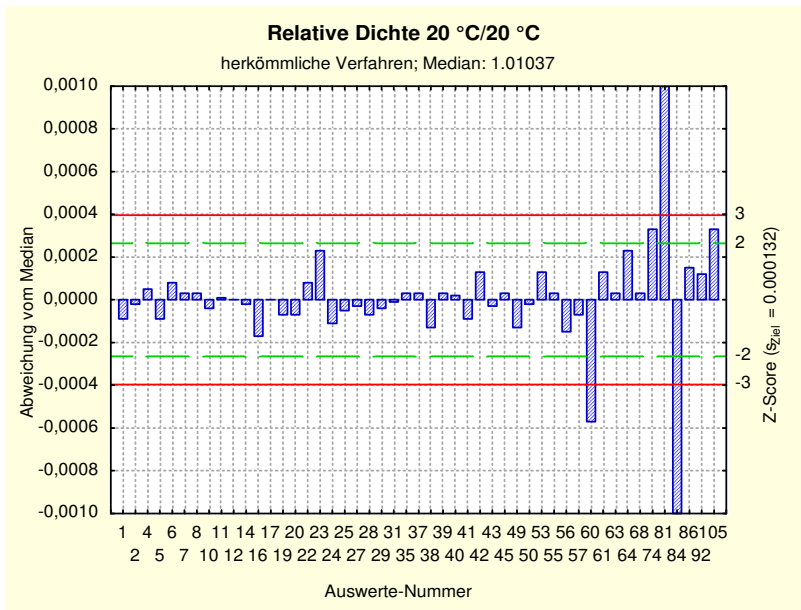
(**) Diese Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der Werte herkömmlicher Verfahren ab

4.1.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Relative Dichte 20 °C/20 °C	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	49	47
Minimalwert	1,00860	1,00980
Mittelwert	1,010367	1,010375
Median	1,010370	1,010370
Maximalwert	1,01176	1,01070
Standardabweichung (s_L)	0,000353	0,000141
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,000050	0,000021
Zielstandardabweichung n. Horwitz (S_H)		
Zielstandardabweichung, experimentell ($S_{exp\ herk.}$)	0,000132	0,000132
Zielstandardabweichung, experimentell ($S_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,000190	0,000190
Horrat-Wert (S_L/S_H)		
Quotient ($S_L/S_{exp\ herk.}$)	2,67	1,06
Quotient ($S_L/S_{\bar{U}\ FTIR}$)	1,86	0,74
Quotient (u_M/S_H)		
Quotient ($u_M/S_{exp\ herk.}$)	0,38	0,16
Quotient ($u_M/S_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,27	0,11

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	4	1,01034	0,000056
LwK 8.2	Bestimmung mit dem Aräometer; OIV-MA-AS2-01B	1	1,00860	
LwK 8.3	Hydrostatische Waage; OIV-MA-AS2-01A, Nr. 2C	1	1,01024	
LwK 8.4	Bestimmung mit dem Biegeschwinger	43	1,01039	0,000112
	herkömmliche Verfahren	49	1,01037	0,000110
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	76	1,01038	0,000296



4.2 Vorhandener Alkohol [g/L]

4.2.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 2.1	74,40	-0,135	-0,06	-0,25	
02	LwK 2.1	76,09	1,555	0,71	2,91	
04	LwK 2.9	75,99	1,455	0,66	2,72	
05	LwK 2.1	74,27	-0,268	-0,12	-0,50	
06	LwK 2.4	74,37	-0,165	-0,07	-0,31	
07	LwK 2.9	75,06	0,525	0,24	0,98	
08	LwK 2.4	75,29	0,755	0,34	1,41	
10	LwK 2.4	74,45	-0,085	-0,04	-0,16	
11	LwK 2.1	75,17	0,635	0,29	1,19	
12	LwK 2.1	74,60	0,065	0,03	0,12	
14	LwK 2.1	73,90	-0,635	-0,29	-1,19	
16	LwK 2.9	75,26	0,725	0,33	1,36	
17	LwK 2.9	74,80	0,265	0,12	0,50	
19	LwK 2.9	75,60	1,065	0,48	1,99	
20	LwK 2.1	74,09	-0,445	-0,20	-0,83	
22	LwK 2.7	74,13	-0,405	-0,18	-0,76	
23	LwK 2.7	75,27	0,735	0,33	1,37	
24	LwK 2.9	74,70	0,165	0,07	0,31	
25	LwK 2.5	76,00	1,465	0,66	2,74	
27	LwK 2.1	74,57	0,035	0,02	0,07	
28	LwK 2.4	74,90	0,365	0,17	0,68	
29	LwK 2.5	76,20	1,665	0,76	3,11	
31	LwK 2.1	74,39	-0,145	-0,07	-0,27	
36	LwK 2.9	75,80	1,265	0,57	2,36	
38	LwK 2.2	75,80	1,265	0,57	2,36	
39	LwK 2.9	75,80	1,265	0,57	2,36	
40	LwK 2.9	75,00	0,465	0,21	0,87	
41	LwK 2.4	74,85	0,315	0,14	0,59	
42	LwK 2.5	74,21	-0,325	-0,15	-0,61	
43	LwK 2.4	74,70	0,165	0,07	0,31	
45	LwK 2.1	74,90	0,365	0,17	0,68	
49	LwK 2.4	74,50	-0,035	-0,02	-0,07	
50	LwK 2.9	75,10	0,565	0,26	1,06	
53	LwK 2.9	74,70	0,165	0,07	0,31	
55	LwK 2.1	74,38	-0,155	-0,07	-0,29	
56	LwK 2.9	75,30	0,765	0,35	1,43	
57	LwK 2.5	77,00	2,465	1,12	4,61	
60	LwK 2.1	74,60	0,065	0,03	0,12	
61	LwK 2.9	75,10	0,565	0,26	1,06	
63	LwK 2.5	74,93	0,395	0,18	0,74	
64	LwK 2.9	74,90	0,365	0,17	0,68	
68	LwK 2.9	75,47	0,935	0,42	1,75	
74	LwK 2.9	74,11	-0,425	-0,19	-0,79	
75	LwK 2.4	71,45	-3,085	-1,40	-5,77	(**)
84	LwK 2.2	76,40	1,865	0,85	3,49	
86	LwK 2.5	76,37	1,835	0,83	3,43	
88	LwK 2.4	73,97	-0,565	-0,26	-1,06	
92	LwK 2.7	74,49	-0,045	-0,02	-0,08	
94	LwK 2.5	76,70	2,165	0,98	4,05	
96	LwK 2.9	75,63	1,095	0,50	2,05	
100	LwK 2.9	74,90	0,365	0,17	0,68	
102	LwK 2.4	73,77	-0,765	-0,35	-1,43	
105	LwK 2.5	74,00	-0,535	-0,24	-1,00	
106	LwK 2.4	75,00	0,465	0,21	0,87	
107	NMR	70,87	-3,670	-1,67	-6,86	(***)
108	NMR	70,88	-3,655	-1,66	-6,83	(***)
109	NMR	64,89	-9,642	-4,38	-18,02	(***)
110	NMR	73,22	-1,316	-0,60	-2,46	

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

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

4.2.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 2.8	75,03	0,530	0,24	0,60	
202	LwK 2.8	75,50	1,000	0,45	1,13	
203	LwK 2.8	75,75	1,250	0,57	1,41	
204	LwK 2.8	76,00	1,500	0,68	1,69	
206	LwK 2.8	76,27	1,770	0,80	2,00	
207	LwK 2.8	76,59	2,090	0,95	2,36	
208	LwK 2.8	76,63	2,130	0,97	2,40	
209	LwK 2.8	74,70	0,200	0,09	0,23	
210	LwK 2.8	75,31	0,810	0,37	0,91	
212	LwK 2.8	75,90	1,400	0,64	1,58	
213	LwK 2.8	76,80	2,300	1,04	2,60	
214	LwK 2.8	76,32	1,820	0,83	2,05	
216	LwK 2.8	76,40	1,900	0,86	2,14	
217	LwK 2.8	75,80	1,300	0,59	1,47	
218	LwK 2.8	75,95	1,450	0,66	1,64	
219	LwK 2.8	79,10	4,600	2,09	5,19	(**)
220	LwK 2.8	76,70	2,200	1,00	2,48	
221	LwK 2.8	75,40	0,900	0,41	1,02	
222	LwK 2.8	75,80	1,300	0,59	1,47	
223	LwK 2.8	76,25	1,750	0,79	1,98	
224	LwK 2.8	75,43	0,930	0,42	1,05	
225	LwK 2.8	76,30	1,800	0,82	2,03	
226	LwK 2.8	74,83	0,330	0,15	0,37	
227	LwK 2.8	75,31	0,810	0,37	0,91	
228	LwK 2.8	75,60	1,100	0,50	1,24	
229	LwK 2.8	75,55	1,050	0,48	1,19	
230	LwK 2.8	74,90	0,400	0,18	0,45	
231	LwK 2.8	76,19	1,690	0,77	1,91	
233	LwK 2.8	76,40	1,900	0,86	2,14	
235	LwK 2.8	75,40	0,900	0,41	1,02	
236	LwK 2.8	76,90	2,400	1,09	2,71	
237	LwK 2.8	75,00	0,500	0,23	0,56	
238	LwK 2.8	74,95	0,450	0,20	0,51	
241	LwK 2.8	76,40	1,900	0,86	2,14	
242	LwK 2.8	74,60	0,100	0,05	0,11	
243	LwK 2.8	75,93	1,430	0,65	1,61	
244	LwK 2.8	76,27	1,770	0,80	2,00	
245	LwK 2.8	76,47	1,970	0,89	2,22	
246	LwK 2.8	75,20	0,700	0,32	0,79	
247	LwK 2.8	75,15	0,650	0,30	0,73	
248	LwK 2.8	76,99	2,490	1,13	2,81	
249	LwK 2.8	75,10	0,600	0,27	0,68	
250	LwK 2.8	76,60	2,100	0,95	2,37	
251	LwK 2.8	75,30	0,800	0,36	0,90	
254	LwK 2.8	75,50	1,000	0,45	1,13	
255	LwK 2.8	74,10	-0,400	-0,18	-0,45	
256	LwK 2.8	76,20	1,700	0,77	1,92	
257	LwK 2.8	76,00	1,500	0,68	1,69	
258	LwK 2.8	75,00	0,500	0,23	0,56	
259	LwK 2.8	75,79	1,290	0,59	1,46	
260	LwK 2.8	74,60	0,100	0,05	0,11	
261	LwK 2.8	78,20	3,700	1,68	4,18	
262	LwK 2.8	76,20	1,700	0,77	1,92	
263	LwK 2.8	76,40	1,900	0,86	2,14	
264	LwK 2.8	74,71	0,210	0,10	0,24	
265	LwK 2.8	76,97	2,470	1,12	2,79	
266	LwK 2.8	76,02	1,520	0,69	1,72	
267	LwK 2.8	75,20	0,700	0,32	0,79	
268	LwK 2.8	75,50	1,000	0,45	1,13	
269	LwK 2.8	80,40	5,900	2,68	6,66	(**)
270	LwK 2.8	74,40	-0,100	-0,05	-0,11	
271	LwK 2.8	74,40	-0,100	-0,05	-0,11	
273	LwK 2.8	76,90	2,400	1,09	2,71	
274	LwK 2.8	76,40	1,900	0,86	2,14	

(**) Diese Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der Werte aus Destillationsverfahren ab

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
275	LwK 2.8	74,84	0,345	0,16	0,39	
276	LwK 2.8	75,86	1,360	0,62	1,53	
277	LwK 2.8	75,38	0,880	0,40	0,99	
278	LwK 2.8	76,90	2,400	1,09	2,71	
280	LwK 2.8	77,42	2,924	1,33	3,30	
281	LwK 2.8	76,90	2,400	1,09	2,71	
282	LwK 2.8	75,38	0,880	0,40	0,99	
283	LwK 2.8	74,62	0,120	0,05	0,14	
284	LwK 2.8	75,34	0,840	0,38	0,95	
313	LwK 2.8	75,30	0,800	0,36	0,90	
322	LwK 2.8	76,30	1,800	0,82	2,03	
338	LwK 2.8	74,80	0,300	0,14	0,34	
349	LwK 2.8	81,50	7,000	3,18	7,90	(**)
363	LwK 2.8	75,90	1,400	0,64	1,58	

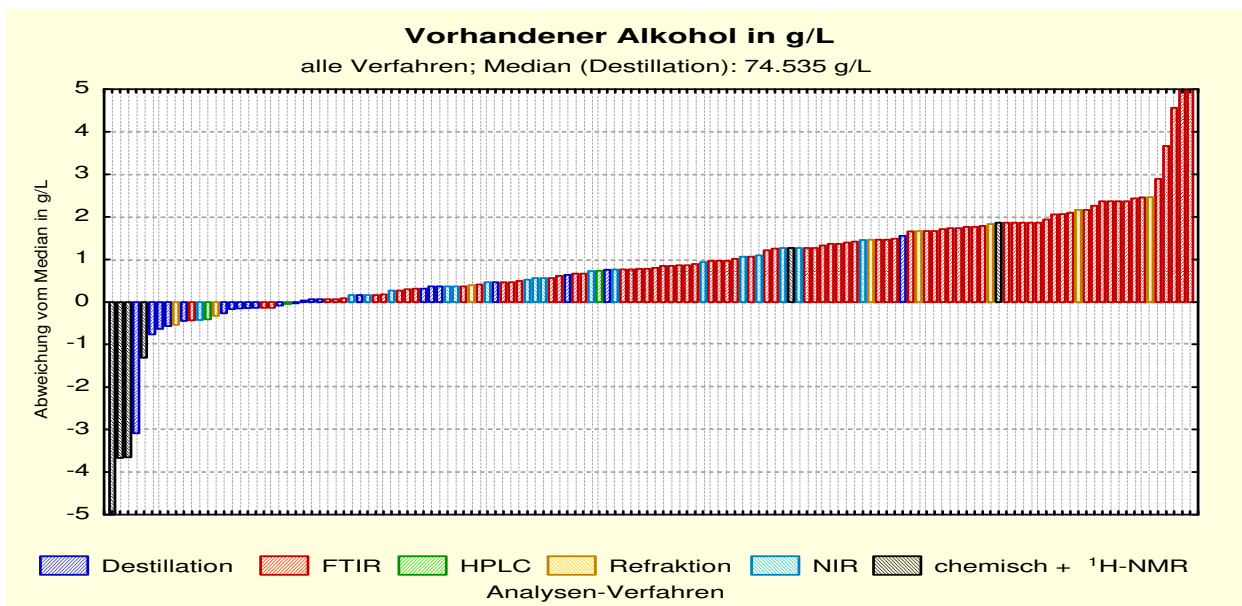
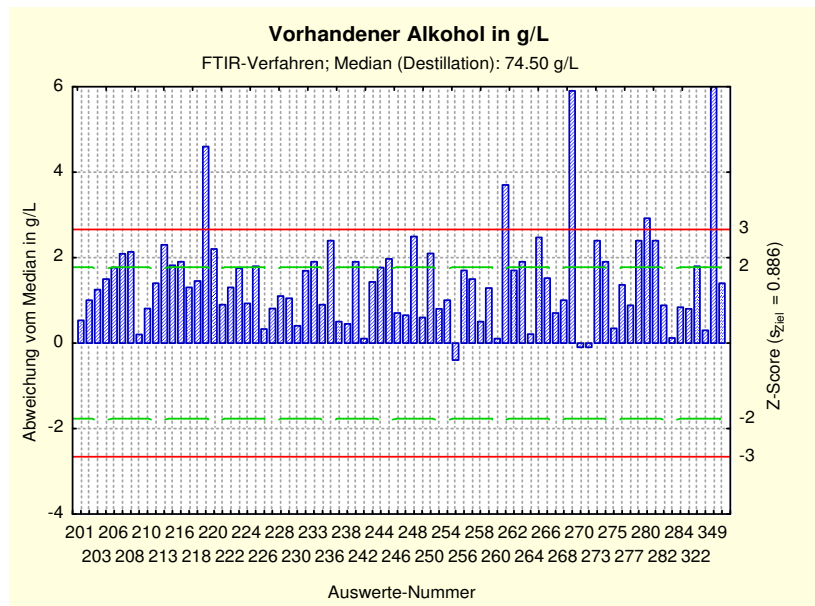
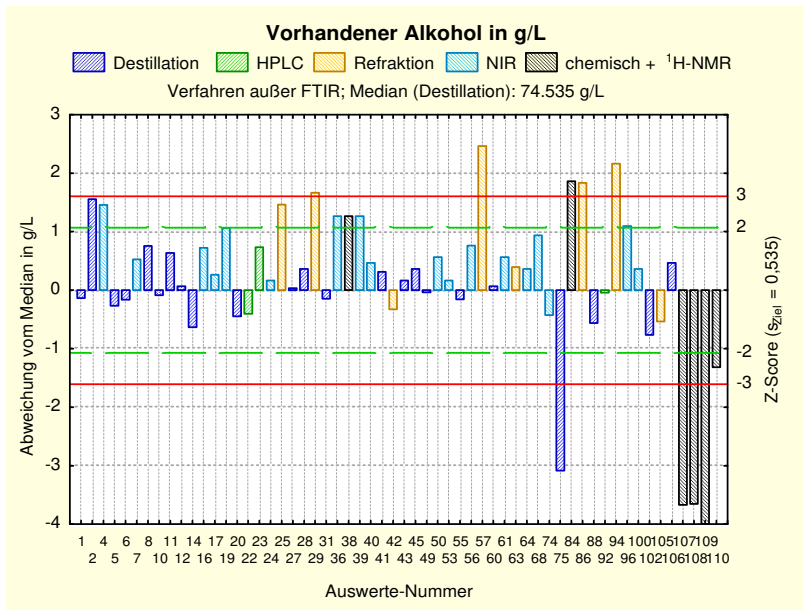
(**) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der Werte aus Destillationsverfahren ab

4.2.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Vorhandenen Alkohol [g/L] nur Destillationsverfahren	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	23	22
Minimalwert	71,45	73,77
Mittelwert	74,461	74,598
Median	74,500	74,535
Maximalwert	76,09	76,09
Standardabweichung (s_L)	0,828	0,516
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,173	0,110
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	2,203	2,204
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,535	0,535
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ FTIR}$)	0,886	0,886
Horvat-Wert (s_L/s_H)	0,38	0,23
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	1,55	0,97
Quotient ($s_L/s_{exp\ FTIR}$)	0,93	0,58
Quotient (u_M/s_H)	0,08	0,05
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,32	0,21
Quotient (u_M/s_{FTIR})	0,19	0,12

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	74,535	0,436
LwK 2.4	Einfache direkte Destillation n. AVV V2	11	74,489	0,609
	Destillationsverfahren	23	74,527	0,509
LwK 2.2	Chemische Alkoholbestimmung n. Dr. Jakob	2	76,100	0,481
LwK 2.5	Berechnung aus relativer Dichte und Refraktion	8	75,707	1,248
LwK 2.7	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie, z.B. n. Heidger	3	74,630	0,661
LwK 2.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	78	75,820	0,884
LwK 2.9	Nah-Infrarotspektroskopie	18	75,195	0,487
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	4	70,131	3,676



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	58,6	-1,60	-0,87	-2,69	
02	LwK 3.3	60,6	0,40	0,22	0,67	
04	LwK 3.3	60,8	0,60	0,33	1,01	
06	LwK 3.3	60,1	-0,10	-0,05	-0,17	
07	LwK 3.3	60,3	0,10	0,05	0,17	
08	LwK 3.1	60,2	0,00	0,00	0,00	
10	LwK 3.1	59,8	-0,40	-0,22	-0,67	
11	LwK 3.3	60,3	0,10	0,05	0,17	
12	LwK 3.3	60,0	-0,20	-0,11	-0,34	
14	LwK 3.3	59,7	-0,50	-0,27	-0,84	
16	LwK 3.3	60,1	-0,10	-0,05	-0,17	
17	LwK 3.3	60,1	-0,10	-0,05	-0,17	
19	LwK 3.3	60,1	-0,10	-0,05	-0,17	
20	LwK 3.2	60,2	0,00	0,00	0,00	
22	LwK 3.3	60,0	-0,20	-0,11	-0,34	
23	LwK 3.3	60,2	0,00	0,00	0,00	
24	LwK 3.3	59,7	-0,50	-0,27	-0,84	
25	LwK 3.3	60,4	0,20	0,11	0,34	
27	LwK 3.3	59,9	-0,30	-0,16	-0,51	
28	LwK 3.3	59,8	-0,40	-0,22	-0,67	
29	LwK 3.3	60,7	0,50	0,27	0,84	
31	LwK 3.2	59,9	-0,30	-0,16	-0,51	
36	LwK 3.3	61,3	1,10	0,60	1,85	
38	LwK 3.3	60,2	0,00	0,00	0,00	
39	LwK 3.3	60,5	0,30	0,16	0,51	
40	LwK 3.3	60,2	0,00	0,00	0,00	
41	LwK 3.3	59,9	-0,30	-0,16	-0,51	
42	LwK 3.3	60,1	-0,10	-0,05	-0,17	
43	LwK 3.3	59,9	-0,30	-0,16	-0,51	
45	LwK 3.3	60,2	0,00	0,00	0,00	
49	LwK 3.2	59,6	-0,60	-0,33	-1,01	
50	LwK 3.3	60,3	0,10	0,05	0,17	
53	LwK 3.3	60,4	0,20	0,11	0,34	
55	LwK 3.2	45,3	-14,90	-8,11	-25,08	(**)
56	LwK 3.3	59,9	-0,30	-0,16	-0,51	
57	LwK 3.3	60,9	0,70	0,38	1,18	
60	LwK 3.2	58,5	-1,70	-0,92	-2,86	
63	FTIR	61,1	0,90	0,49	1,52	
81	LwK 3.3	62,0	1,80	0,98	3,03	
84	LwK 3.3	53,5	-6,70	-3,65	-11,28	(**)
86	LwK 3.3	61,1	0,89	0,48	1,50	
92	LwK 3.3	60,5	0,30	0,16	0,51	
105	FTIR	61,0	0,80	0,44	1,35	

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

4.3.2 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR (gemessen)	59,5	-0,70	-0,38	-1,18	
202	FTIR (gemessen)	60,8	0,61	0,33	1,03	
203	FTIR (gemessen)	61,5	1,29	0,70	2,17	
204	FTIR (gemessen)	62,7	2,50	1,36	4,21	
206	FTIR (gemessen)	60,0	-0,19	-0,10	-0,32	
208	FTIR (gemessen)	60,8	0,62	0,34	1,04	
210	FTIR (gemessen)	60,6	0,40	0,22	0,67	
212	FTIR (gemessen)	60,0	-0,20	-0,11	-0,34	
217	FTIR (gemessen)	60,6	0,40	0,22	0,67	
218	FTIR (gemessen)	60,3	0,14	0,08	0,24	
219	FTIR (gemessen)	62,7	2,50	1,36	4,21	
220	FTIR (gemessen)	60,7	0,50	0,27	0,84	

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
221	FTIR (gemessen)	62,0	1,80	0,98	3,03	
222	FTIR (gemessen)	60,6	0,40	0,22	0,67	
223	FTIR (gemessen)	60,7	0,50	0,27	0,84	
224	FTIR-Basis	61,9	1,70	0,92	2,86	
225	FTIR (gemessen)	60,8	0,60	0,33	1,01	
227	FTIR (gemessen)	61,5	1,29	0,70	2,17	
228	FTIR (gemessen)	62,0	1,80	0,98	3,03	
229	FTIR (gemessen)	61,9	1,72	0,94	2,90	
230	FTIR (gemessen)	60,2	0,00	0,00	0,00	
231	FTIR (gemessen)	61,5	1,26	0,69	2,12	
233	FTIR (gemessen)	61,0	0,83	0,45	1,40	
237	FTIR (gemessen)	60,2	0,00	0,00	0,00	
238	FTIR (gemessen)	62,0	1,85	1,01	3,11	
241	FTIR (gemessen)	62,2	2,00	1,09	3,37	
247	FTIR (gemessen)	61,3	1,10	0,60	1,85	
249	FTIR (gemessen)	61,8	1,60	0,87	2,69	
251	FTIR (gemessen)	62,1	1,90	1,03	3,20	
254	FTIR (gemessen)	62,2	2,00	1,09	3,37	
255	FTIR-Basis	62,1	1,90	1,03	3,20	
258	LwK 3.3	60,2	0,00	0,00	0,00	
259	FTIR-Basis	61,6	1,40	0,76	2,36	
260	FTIR-Basis	59,8	-0,40	-0,22	-0,67	
261	FTIR (gemessen)	61,1	0,90	0,49	1,52	
262	FTIR (gemessen)	61,0	0,80	0,44	1,35	
263	FTIR (gemessen)	61,1	0,90	0,49	1,52	
265	FTIR (gemessen)	59,5	-0,70	-0,38	-1,18	
266	FTIR (gemessen)	61,0	0,83	0,45	1,40	
267	FTIR (gemessen)	60,7	0,50	0,27	0,84	
268	FTIR (gemessen)	60,5	0,28	0,15	0,47	
269	FTIR (gemessen)	62,5	2,30	1,25	3,87	
270	FTIR (gemessen)	61,1	0,90	0,49	1,52	
271	FTIR (gemessen)	61,1	0,86	0,47	1,45	
273	FTIR (gemessen)	61,0	0,80	0,44	1,35	
274	FTIR (gemessen)	50,1	-10,10	-5,50	-17,00	(**)
276	FTIR (gemessen)	60,2	0,01	0,01	0,02	
277	FTIR (gemessen)	60,6	0,40	0,22	0,67	
278	FTIR (gemessen)	61,7	1,50	0,82	2,53	
281	FTIR (gemessen)	61,2	1,00	0,54	1,68	
284	FTIR (gemessen)	62,0	1,80	0,98	3,03	
322	FTIR (gemessen)	61,7	1,50	0,82	2,53	
338	FTIR (gemessen)	62,3	2,13	1,16	3,59	

(**) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der Werte herkömmlicher Verfahren ab

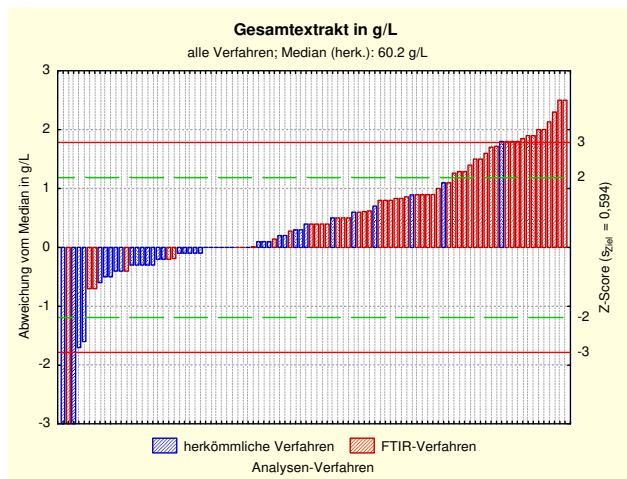
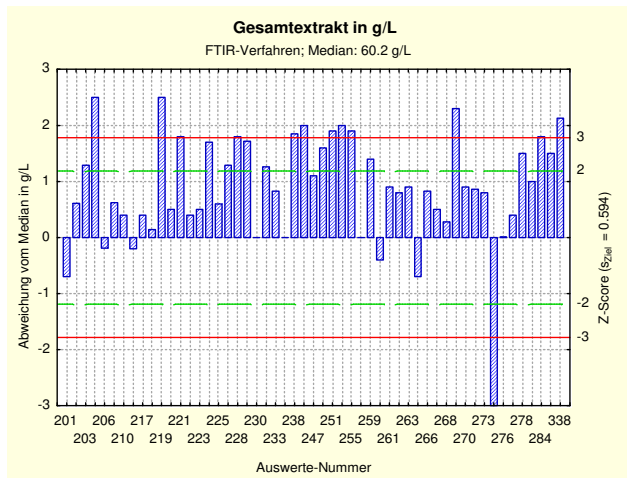
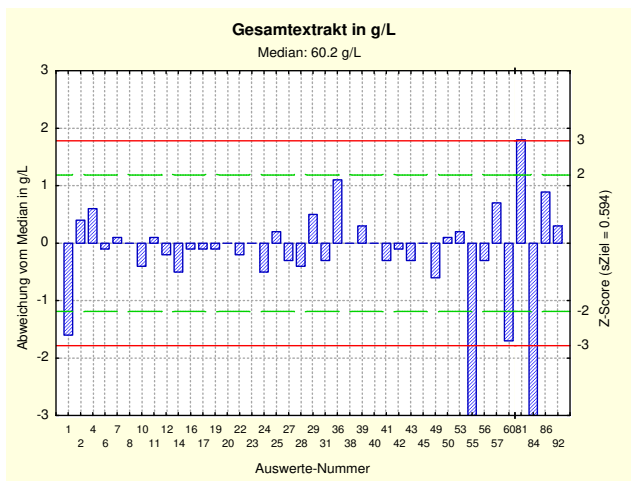
4.3.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Gesamtextrakt [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	41	39
Minimalwert	45,3	58,5
Mittelwert	59,65	60,18
Median	60,10	60,20
Maximalwert	62,0	62,0
Standardabweichung (s_L)	2,592	0,607
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,405	0,097
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	1,835	1,838
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,594	0,594
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\bar{U}\ FTIR}$) ¹⁾	(0,565)	(0,565)
Horrat-Wert (s_L/s_H)	1,41	0,33
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	4,36	1,02
Quotient ($s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	(4,59)	(1,07)
Quotient (u_M/s_H)	0,22	0,05
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,68	0,16
Quotient ($u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	(0,72)	(0,17)

¹⁾ 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	60,000	0,321
LwK 3.2	Berechnung n. Tabarie auf Basis Alkohol nach LwK 2.1; OIV-MA-AS2-03B	6	58,938	1,409
LwK 3.3	Berechnung n. Tabarie auf Basis anderer Alkoholbest. herkömmliche Verfahren	34	60,238	0,399
FTIR (gemessen)	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie unmittelbar aus Spektrum ermittelt	41	60,136	0,444
FTIR-Basis	Berechnung nach Tabarie auf der Basis von FTIR-Dichte + FTIR-Alkohol	4	61,378	1,133



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
04	LwK 4.7	35,82	-0,580	-0,48	-0,57	
06	LwK 4.5	36,10	-0,300	-0,25	-0,29	
07	LwK 4.5	36,14	-0,260	-0,22	-0,25	
08	LwK 4.7	38,00	1,600	1,33	1,56	
10	LwK 4.5	35,72	-0,680	-0,57	-0,66	
11	LwK 4.7	37,10	0,700	0,58	0,68	
12	LwK 4.1	30,33	-6,070	-5,06	-5,92	(**)
14	LwK 4.5	36,80	0,400	0,33	0,39	
16	LwK 4.5	36,40	0,000	0,00	0,00	
17	LwK 4.5	36,40	0,000	0,00	0,00	
20	LwK 4.5	35,68	-0,720	-0,60	-0,70	
22	LwK 4.7	36,14	-0,260	-0,22	-0,25	
23	LwK 4.7	36,50	0,100	0,08	0,10	
24	NMR	35,10	-1,300	-1,08	-1,27	
25	LwK 4.4	35,30	-1,100	-0,92	-1,07	
27	LwK 4.5	36,67	0,270	0,23	0,26	
28	LwK 4.7	37,50	1,100	0,92	1,07	
29	LwK 4.4	37,30	0,900	0,75	0,88	
31	LwK 4.5	37,20	0,800	0,67	0,78	
36	LwK 4.5	36,20	-0,200	-0,17	-0,19	
38	LwK 4.3	35,85	-0,550	-0,46	-0,54	
39	LwK 4.5	37,22	0,820	0,68	0,80	
40	LwK 4.7	35,70	-0,700	-0,58	-0,68	
41	LwK 4.5	37,10	0,700	0,58	0,68	
42	LwK 4.5	36,78	0,380	0,32	0,37	
43	LwK 4.5	36,38	-0,025	-0,02	-0,02	
45	LwK 4.5	35,82	-0,580	-0,48	-0,57	
49	LwK 4.4	35,00	-1,400	-1,17	-1,36	
50	LwK 4.5	36,70	0,300	0,25	0,29	
53	LwK 4.5	37,00	0,600	0,50	0,58	
55	LwK 4.5	37,00	0,600	0,50	0,58	
56	LwK 4.5	35,54	-0,860	-0,72	-0,84	
57	LwK 4.5	36,40	0,000	0,00	0,00	
60	LwK 4.4	38,30	1,900	1,59	1,85	
61	LwK 4.5	34,70	-1,700	-1,42	-1,66	
63	LwK 4.4	36,75	0,350	0,29	0,34	
68	LwK 4.5	36,52	0,120	0,10	0,12	
74	LwK 4.5	37,00	0,600	0,50	0,58	
75	LwK 4.4	35,00	-1,400	-1,17	-1,36	
81	LwK 4.5	35,17	-1,230	-1,03	-1,20	
84	LwK 4.3	39,20	2,800	2,34	2,73	
92	LwK 4.7	36,29	-0,110	-0,09	-0,11	
101	LwK 4.7	36,30	-0,100	-0,08	-0,10	
105	LwK 4.4	36,5	0,100	0,08	0,10	
107	NMR	33,45	-2,954	-2,46	-2,88	
108	NMR	33,98	-2,416	-2,02	-2,36	
109	NMR	31,63	-4,769	-3,98	-4,65	
110	NMR	37,15	0,751	0,63	0,73	

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

4.4.2 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	35,04	-1,360	-1,13	-1,33	
203	LwK 4.8	35,92	-0,480	-0,40	-0,47	
204	LwK 4.8	36,45	0,050	0,04	0,05	
206	LwK 4.8	36,70	0,300	0,25	0,29	
207	LwK 4.8	36,32	-0,080	-0,07	-0,08	
209	LwK 4.8	35,00	-1,400	-1,17	-1,36	
210	LwK 4.8	36,20	-0,200	-0,17	-0,19	

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
212	LwK 4.8	36,05	-0,350	-0,29	-0,34	
213	LwK 4.8	35,91	-0,490	-0,41	-0,48	
214	LwK 4.8	37,21	0,810	0,68	0,79	
216	LwK 4.8	36,20	-0,200	-0,17	-0,19	
217	LwK 4.8	33,09	-3,310	-2,76	-3,23	
218	LwK 4.8	32,17	-4,230	-3,53	-4,12	
219	LwK 4.8	36,25	-0,150	-0,13	-0,15	
220	LwK 4.8	35,68	-0,720	-0,60	-0,70	
221	LwK 4.8	36,10	-0,300	-0,25	-0,29	
222	LwK 4.8	37,21	0,810	0,68	0,79	
224	LwK 4.8	33,68	-2,720	-2,27	-2,65	
225	LwK 4.8	35,80	-0,600	-0,50	-0,58	
226	LwK 4.8	37,00	0,600	0,50	0,58	
227	LwK 4.8	36,71	0,310	0,26	0,30	
228	LwK 4.8	34,70	-1,700	-1,42	-1,66	
229	LwK 4.8	37,24	0,840	0,70	0,82	
230	LwK 4.8	35,93	-0,470	-0,39	-0,46	
231	LwK 4.8	35,23	-1,170	-0,98	-1,14	
233	LwK 4.8	35,34	-1,060	-0,88	-1,03	
235	LwK 4.8	37,96	1,560	1,30	1,52	
236	LwK 4.8	29,80	-6,600	-5,51	-6,43	(**)
237	LwK 4.8	35,70	-0,700	-0,58	-0,68	
238	LwK 4.8	37,03	0,630	0,53	0,61	
241	LwK 4.8	37,56	1,160	0,97	1,13	
242	LwK 4.8	37,40	1,000	0,83	0,97	
243	LwK 4.8	36,99	0,590	0,49	0,58	
244	LwK 4.8	36,50	0,100	0,08	0,10	
245	LwK 4.8	35,24	-1,160	-0,97	-1,13	
246	LwK 4.8	35,32	-1,080	-0,90	-1,05	
247	LwK 4.8	34,89	-1,510	-1,26	-1,47	
248	LwK 4.8	37,28	0,880	0,73	0,86	
249	LwK 4.8	35,10	-1,300	-1,08	-1,27	
250	LwK 4.8	36,36	-0,040	-0,03	-0,04	
251	LwK 4.8	35,35	-1,050	-0,88	-1,02	
254	LwK 4.8	37,70	1,300	1,08	1,27	
255	LwK 4.8	36,30	-0,100	-0,08	-0,10	
256	LwK 4.8	35,90	-0,500	-0,42	-0,49	
257	LwK 4.8	35,86	-0,540	-0,45	-0,53	
258	LwK 4.8	34,30	-2,100	-1,75	-2,05	
259	LwK 4.8	37,13	0,730	0,61	0,71	
260	LwK 4.8	36,60	0,200	0,17	0,19	
261	LwK 4.8	37,80	1,400	1,17	1,36	
262	LwK 4.8	36,30	-0,100	-0,08	-0,10	
263	LwK 4.8	37,40	1,000	0,83	0,97	
264	LwK 4.8	38,23	1,830	1,53	1,78	
265	LwK 4.8	35,64	-0,760	-0,63	-0,74	
266	LwK 4.8	36,96	0,560	0,47	0,55	
267	LwK 4.8	36,72	0,320	0,27	0,31	
268	LwK 4.8	36,70	0,300	0,25	0,29	
269	LwK 4.8	37,00	0,600	0,50	0,58	
270	LwK 4.8	38,30	1,900	1,59	1,85	
271	LwK 4.8	36,31	-0,090	-0,08	-0,09	
273	LwK 4.8	38,26	1,860	1,55	1,81	
274	LwK 4.8	36,50	0,100	0,08	0,10	
275	LwK 4.8	36,38	-0,020	-0,02	-0,02	
276	LwK 4.8	35,47	-0,930	-0,78	-0,91	
277	LwK 4.8	35,67	-0,730	-0,61	-0,71	
278	LwK 4.8	36,20	-0,200	-0,17	-0,19	
281	LwK 4.8	38,20	1,800	1,50	1,75	
282	LwK 4.8	33,80	-2,600	-2,17	-2,53	
284	LwK 4.8	39,10	2,700	2,25	2,63	
322	LwK 4.8	37,21	0,810	0,68	0,79	
338	LwK 4.8	37,18	0,780	0,65	0,76	
349	LwK 4.8	35,60	-0,800	-0,67	-0,78	
363	LwK 4.8	38,40	2,000	1,67	1,95	

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

4.4.3 Reduktometrische Laborergebnisse

(Bewertungsbasis: reduktometrische Verfahren; informative Bewertung)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
12	LwK 4.1	30,33	-6,170	-5,14	-6,00	(**)
25	LwK 4.4	35,30	-1,200	-1,00	-1,17	
29	LwK 4.4	37,30	0,800	0,67	0,78	
38	LwK 4.3	35,85	-0,650	-0,54	-0,63	
49	LwK 4.4	35,00	-1,500	-1,25	-1,46	
60	LwK 4.4	38,30	1,800	1,50	1,75	
63	LwK 4.4	36,75	0,250	0,21	0,24	
75	LwK 4.4	35,00	-1,500	-1,25	-1,46	
84	LwK 4.3	39,20	2,700	2,25	2,63	
105	LwK 4.4	36,50	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	35,04	-1,460	-1,22	-1,42	
203	LwK 4.8	35,92	-0,580	-0,48	-0,56	
204	LwK 4.8	36,45	-0,050	-0,04	-0,05	
206	LwK 4.8	36,70	0,200	0,17	0,19	
207	LwK 4.8	36,32	-0,180	-0,15	-0,18	
209	LwK 4.8	35,00	-1,500	-1,25	-1,46	
210	LwK 4.8	36,20	-0,300	-0,25	-0,29	
212	LwK 4.8	36,05	-0,450	-0,37	-0,44	
213	LwK 4.8	35,91	-0,590	-0,49	-0,57	
214	LwK 4.8	37,21	0,710	0,59	0,69	
216	LwK 4.8	36,20	-0,300	-0,25	-0,29	
217	LwK 4.8	33,09	-3,410	-2,84	-3,32	
218	LwK 4.8	32,17	-4,330	-3,60	-4,21	
219	LwK 4.8	36,25	-0,250	-0,21	-0,24	
220	LwK 4.8	35,68	-0,820	-0,68	-0,80	
221	LwK 4.8	36,10	-0,400	-0,33	-0,39	
222	LwK 4.8	37,21	0,710	0,59	0,69	
224	LwK 4.8	33,68	-2,820	-2,35	-2,74	
225	LwK 4.8	35,80	-0,700	-0,58	-0,68	
226	LwK 4.8	37,00	0,500	0,42	0,49	
227	LwK 4.8	36,71	0,210	0,17	0,20	
228	LwK 4.8	34,70	-1,800	-1,50	-1,75	
229	LwK 4.8	37,24	0,740	0,62	0,72	
230	LwK 4.8	35,93	-0,570	-0,47	-0,55	
231	LwK 4.8	35,23	-1,270	-1,06	-1,23	
233	LwK 4.8	35,34	-1,160	-0,97	-1,13	
235	LwK 4.8	37,96	1,460	1,22	1,42	
236	LwK 4.8	29,80	-6,700	-5,58	-6,51	(**)
237	LwK 4.8	35,70	-0,800	-0,67	-0,78	
238	LwK 4.8	37,03	0,530	0,44	0,52	
241	LwK 4.8	37,56	1,060	0,88	1,03	
242	LwK 4.8	37,40	0,900	0,75	0,88	
243	LwK 4.8	36,99	0,490	0,41	0,48	
244	LwK 4.8	36,50	0,000	0,00	0,00	
245	LwK 4.8	35,24	-1,260	-1,05	-1,23	
246	LwK 4.8	35,32	-1,180	-0,98	-1,15	
247	LwK 4.8	34,89	-1,610	-1,34	-1,57	
248	LwK 4.8	37,28	0,780	0,65	0,76	
249	LwK 4.8	35,10	-1,400	-1,17	-1,36	
250	LwK 4.8	36,36	-0,140	-0,12	-0,14	
251	LwK 4.8	35,35	-1,150	-0,96	-1,12	
254	LwK 4.8	37,70	1,200	1,00	1,17	
255	LwK 4.8	36,30	-0,200	-0,17	-0,19	
256	LwK 4.8	35,90	-0,600	-0,50	-0,58	
257	LwK 4.8	35,86	-0,640	-0,53	-0,62	
258	LwK 4.8	34,30	-2,200	-1,83	-2,14	

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

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker(r)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
259	LwK 4.8	37,13	0,630	0,52	0,61	
260	LwK 4.8	36,60	0,100	0,08	0,10	
261	LwK 4.8	37,80	1,300	1,08	1,26	
262	LwK 4.8	36,30	-0,200	-0,17	-0,19	
263	LwK 4.8	37,40	0,900	0,75	0,88	
264	LwK 4.8	38,23	1,730	1,44	1,68	
265	LwK 4.8	35,64	-0,860	-0,72	-0,84	
266	LwK 4.8	36,96	0,460	0,38	0,45	
267	LwK 4.8	36,72	0,220	0,18	0,21	
268	LwK 4.8	36,70	0,200	0,17	0,19	
269	LwK 4.8	37,00	0,500	0,42	0,49	
270	LwK 4.8	38,30	1,800	1,50	1,75	
271	LwK 4.8	36,31	-0,190	-0,16	-0,18	
273	LwK 4.8	38,26	1,760	1,46	1,71	
274	LwK 4.8	36,50	0,000	0,00	0,00	
275	LwK 4.8	36,38	-0,120	-0,10	-0,12	
276	LwK 4.8	35,47	-1,030	-0,86	-1,00	
277	LwK 4.8	35,67	-0,830	-0,69	-0,81	
278	LwK 4.8	36,20	-0,300	-0,25	-0,29	
281	LwK 4.8	38,20	1,700	1,41	1,65	
282	LwK 4.8	33,80	-2,700	-2,25	-2,63	
284	LwK 4.8	39,10	2,600	2,16	2,53	
322	LwK 4.8	37,21	0,710	0,59	0,69	
338	LwK 4.8	37,18	0,680	0,57	0,66	
349	LwK 4.8	35,60	-0,900	-0,75	-0,88	
363	LwK 4.8	38,40	1,900	1,58	1,85	

4.4.5 FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker(S)

(Bewertungsbasis: Hochleistungsflüssigkeitschromatographie und Enzymatik; informative Bewertung)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 4.8	35,80	-0,600	-0,50	-0,58	
202	LwK 4.8	35,04	-1,360	-1,13	-1,33	
203	LwK 4.8	35,92	-0,480	-0,40	-0,47	
204	LwK 4.8	36,30	-0,100	-0,08	-0,10	
206	LwK 4.8	36,70	0,300	0,25	0,29	
207	LwK 4.8	35,90	-0,500	-0,42	-0,49	
208	LwK 4.8	35,70	-0,700	-0,58	-0,68	
209	LwK 4.8	34,90	-1,500	-1,25	-1,46	
210	LwK 4.8	36,21	-0,190	-0,16	-0,19	
212	LwK 4.8	33,93	-2,470	-2,06	-2,41	
213	LwK 4.8	35,13	-1,270	-1,06	-1,24	
214	LwK 4.8	37,65	1,250	1,04	1,22	
216	LwK 4.8	35,50	-0,900	-0,75	-0,88	
217	LwK 4.8	34,59	-1,810	-1,51	-1,76	
218	LwK 4.8	33,38	-3,020	-2,52	-2,94	
219	LwK 4.8	33,59	-2,810	-2,34	-2,74	
220	LwK 4.8	34,84	-1,560	-1,30	-1,52	
221	LwK 4.8	36,10	-0,300	-0,25	-0,29	
222	LwK 4.8	35,85	-0,550	-0,46	-0,54	
223	LwK 4.8	36,78	0,380	0,32	0,37	
224	LwK 4.8	34,72	-1,680	-1,40	-1,64	
225	LwK 4.8	35,50	-0,900	-0,75	-0,88	
226	LwK 4.8	36,04	-0,360	-0,30	-0,35	
227	LwK 4.8	36,57	0,170	0,14	0,17	
228	LwK 4.8	36,80	0,400	0,33	0,39	
229	LwK 4.8	36,09	-0,310	-0,26	-0,30	
230	LwK 4.8	36,17	-0,230	-0,19	-0,22	
231	LwK 4.8	34,95	-1,450	-1,21	-1,41	
233	LwK 4.8	35,34	-1,060	-0,88	-1,03	
235	LwK 4.8	35,31	-1,090	-0,91	-1,06	
236	LwK 4.8	29,80	-6,600	-5,51	-6,43	(**)
237	LwK 4.8	35,20	-1,200	-1,00	-1,17	
238	LwK 4.8	34,95	-1,450	-1,21	-1,41	

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

Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse für Vergärbare Zucker(S)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
241	LwK 4.8	36,08	-0,320	-0,27	-0,31	
242	LwK 4.8	33,40	-3,000	-2,50	-2,92	
243	LwK 4.8	35,40	-1,000	-0,83	-0,97	
244	LwK 4.8	36,26	-0,140	-0,12	-0,14	
245	LwK 4.8	35,69	-0,710	-0,59	-0,69	
246	LwK 4.8	33,87	-2,530	-2,11	-2,47	
247	LwK 4.8	35,22	-1,180	-0,98	-1,15	
248	LwK 4.8	36,21	-0,190	-0,16	-0,19	
249	LwK 4.8	35,10	-1,300	-1,08	-1,27	
250	LwK 4.8	35,72	-0,680	-0,57	-0,66	
251	LwK 4.8	35,36	-1,040	-0,87	-1,01	
254	LwK 4.8	36,10	-0,300	-0,25	-0,29	
256	LwK 4.8	36,70	0,300	0,25	0,29	
257	LwK 4.8	35,58	-0,820	-0,68	-0,80	
258	LwK 4.8	35,10	-1,300	-1,08	-1,27	
259	LwK 4.8	35,33	-1,070	-0,89	-1,04	
260	LwK 4.8	34,80	-1,600	-1,33	-1,56	
261	LwK 4.8	35,90	-0,500	-0,42	-0,49	
262	LwK 4.8	36,30	-0,100	-0,08	-0,10	
263	LwK 4.8	35,30	-1,100	-0,92	-1,07	
264	LwK 4.8	38,23	1,830	1,53	1,78	
265	LwK 4.8	35,20	-1,200	-1,00	-1,17	
266	LwK 4.8	36,64	0,240	0,20	0,23	
267	LwK 4.8	35,74	-0,660	-0,55	-0,64	
269	LwK 4.8	35,90	-0,500	-0,42	-0,49	
270	LwK 4.8	36,00	-0,400	-0,33	-0,39	
271	LwK 4.8	36,49	0,090	0,08	0,09	
273	LwK 4.8	36,82	0,420	0,35	0,41	
274	LwK 4.8	34,50	-1,900	-1,59	-1,85	
275	LwK 4.8	36,38	-0,020	-0,02	-0,02	
276	LwK 4.8	37,02	0,620	0,52	0,60	
277	LwK 4.8	38,01	1,610	1,34	1,57	
278	LwK 4.8	34,40	-2,000	-1,67	-1,95	
280	LwK 4.8	34,67	-1,730	-1,44	-1,69	
281	LwK 4.8	36,11	-0,290	-0,24	-0,28	
282	LwK 4.8	34,68	-1,720	-1,43	-1,68	
283	LwK 4.8	34,59	-1,815	-1,51	-1,77	
313	LwK 4.8	34,92	-1,480	-1,23	-1,44	
322	LwK 4.8	36,25	-0,150	-0,13	-0,15	
338	LwK 4.8	37,18	0,780	0,65	0,76	
349	LwK 4.8	35,00	-1,400	-1,17	-1,36	
363	LwK 4.8	35,20	-1,200	-1,00	-1,17	

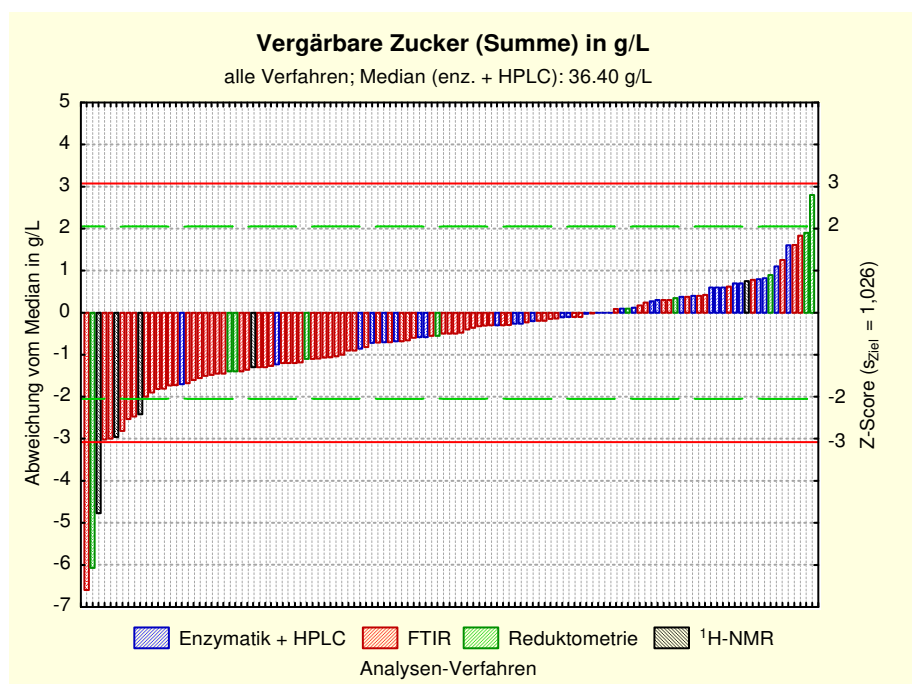
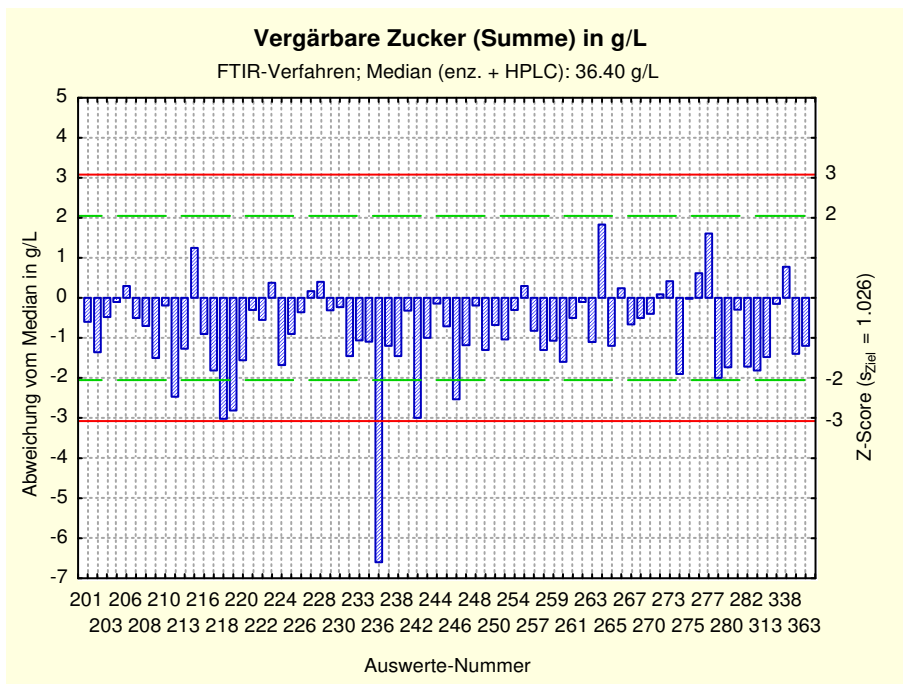
4.4.6 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

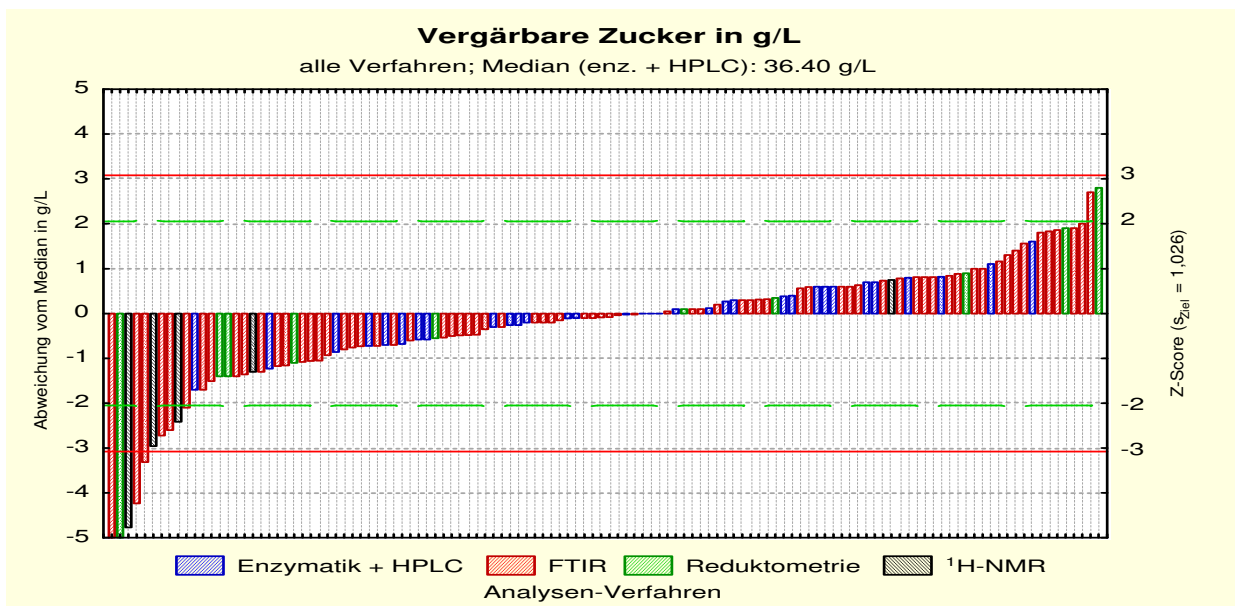
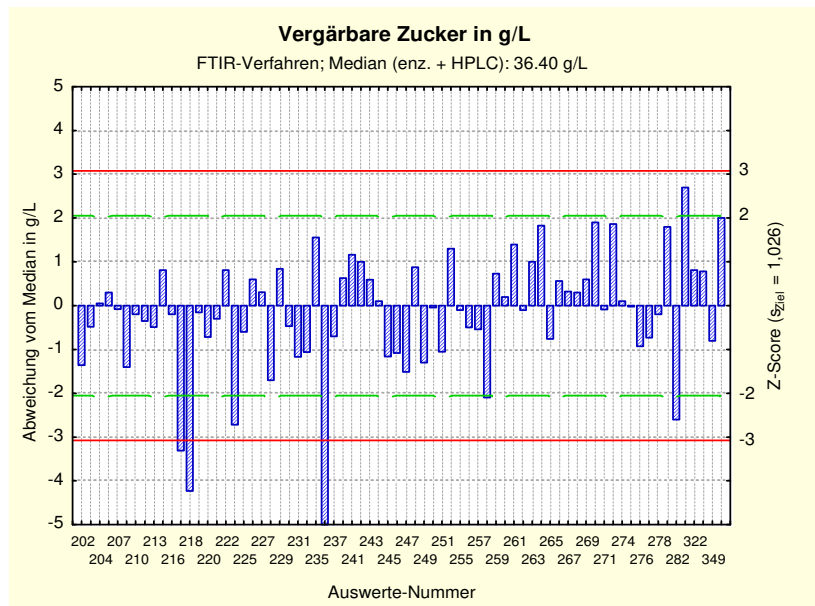
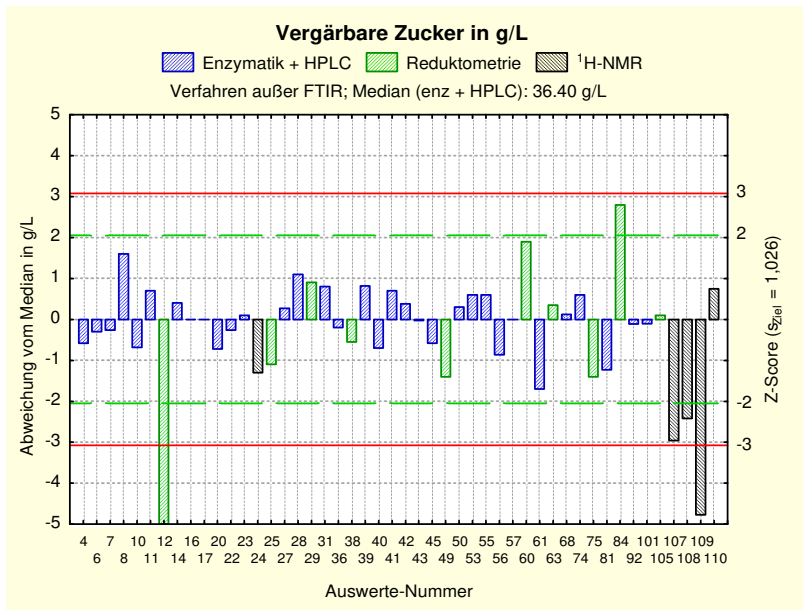
Ergebnisse für Vergärbare Zucker [g/L]	HPLC + enzymatisch	reduktometrisch	
	alle Daten	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	33	10	9
Minimalwert	34,70	30,33	35,00
Mittelwert	36,424	35,953	36,578
Median	36,400	36,175	36,500
Maximalwert	38,00	39,20	39,20
Standardabweichung (s_L)	0,689	2,419	1,481
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,120	0,765	0,494
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	1,199	1,192	1,201
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	1,026	1,020	1,028
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\bar{U}\ FTIR}$)	(0,584)	(0,584)	(0,584)
Horrat-Wert (s_L/s_H)	0,57	2,03	1,23
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	0,67	2,37	1,44
Quotient ($s_L/\bar{U}\ FTIR$)	(1,18)	(4,14)	(2,54)
Quotient (u_M/s_H)	0,10	0,64	0,41
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,12	0,75	0,48
Quotient ($u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	(0,21)	(1,31)	(0,85)

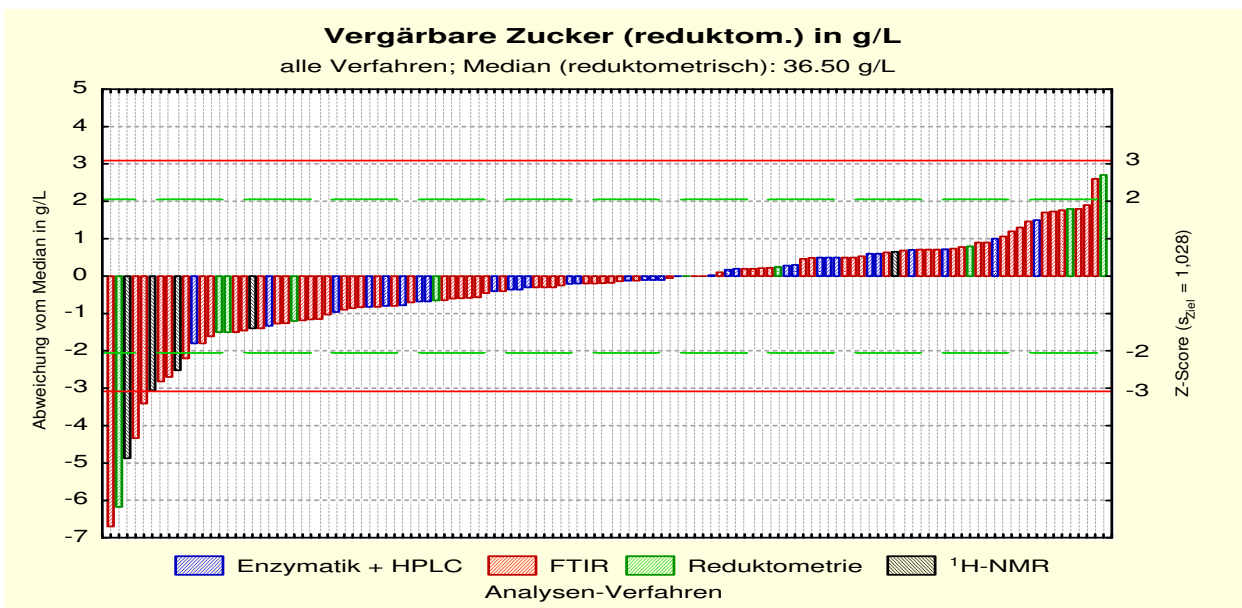
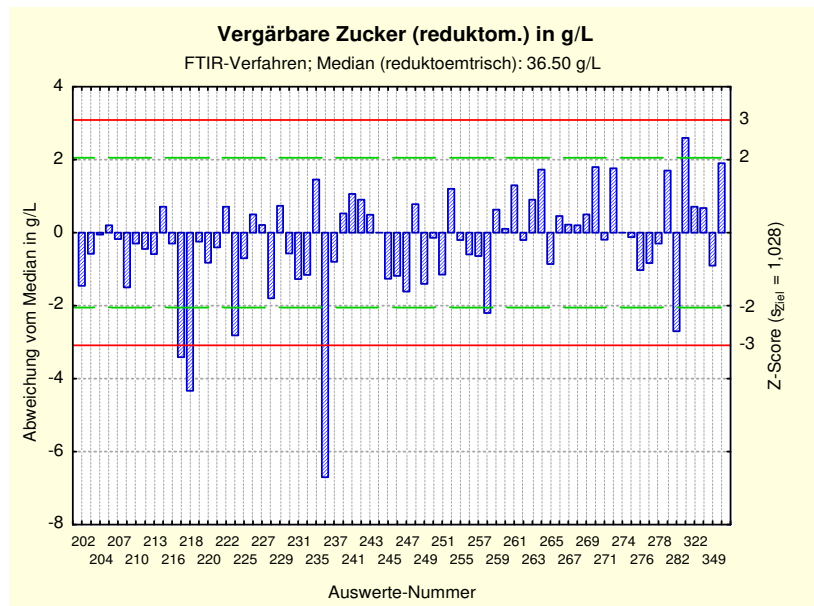
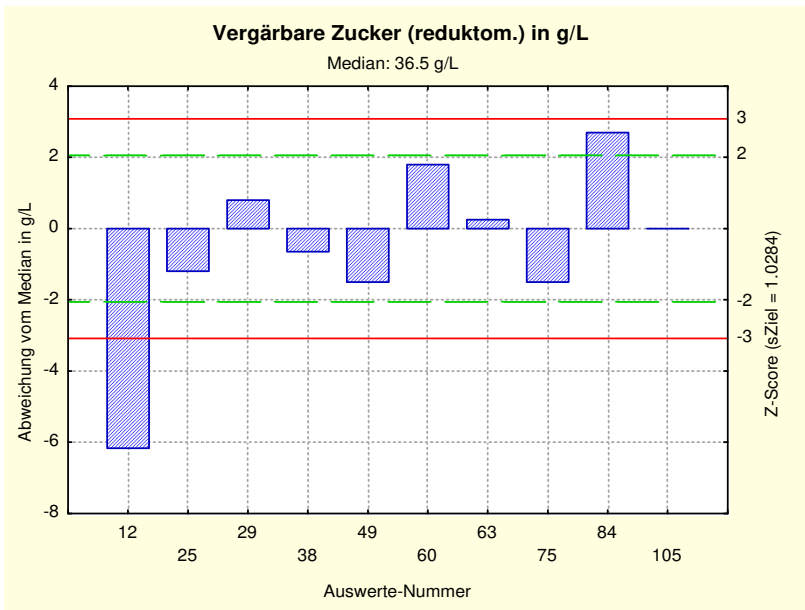
¹⁾ Die FTIR-Laboreergebnisse wurden mit der Zielstandardabweichung $s_{exp\ herk.}$ bewertet.

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	30,330	
LwK 4.3	Schnellmethode n. Dr. Jakob	2	37,525	2,686
LwK 4.4	Schnellmethode n. Dr. Rebelein	7	36,307	1,436
	reduktometrische Verfahren	10	36,249	1,972
LwK 4.5	Enzymatische Methode; OIV-MA-AS311-02	24	36,401	0,648
LwK 4.7	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; OIV-MA-AS311-03	9	36,552	0,798
	enzymatische und HPLC-Verfahren	33	36,435	0,664
LwK 4.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie			
	Basis: Vergärbare Zucker(r)	72	36,323	1,164
	Basis: Vergärbare Zucker(S)	75	35,612	0,920
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	5	34,125	2,055







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	19,02	0,640	0,95	1,19	
02	enzymat. Hand	18,29	-0,090	-0,13	-0,17	
04	HPLC	17,63	-0,750	-1,12	-1,39	
05	enzymat., autom.	19,06	0,680	1,01	1,26	
06	enzymat., autom.	18,07	-0,310	-0,46	-0,57	
07	enzymat. Hand	18,61	0,230	0,34	0,43	
08	HPLC	19,71	1,330	1,98	2,47	
10	enzymat. Hand	18,01	-0,370	-0,55	-0,69	
11	HPLC	19,20	0,820	1,22	1,52	
12	enzymat., autom.	18,38	0,000	0,00	0,00	
14	enzymat., autom.	18,62	0,240	0,36	0,45	
16	enzymat., autom.	18,23	-0,150	-0,22	-0,28	
17	enzymat., autom.	18,29	-0,091	-0,14	-0,17	
20	enzymat., autom.	18,04	-0,340	-0,51	-0,63	
22	HPLC	18,12	-0,260	-0,39	-0,48	
23	HPLC	18,45	0,070	0,10	0,13	
24	NMR	17,87	-0,510	-0,76	-0,95	
27	enzymat., autom.	18,42	0,040	0,06	0,07	
28	HPLC	18,56	0,180	0,27	0,33	
31	enzymat., autom.	18,30	-0,080	-0,12	-0,15	
36	enzymat., autom.	18,00	-0,380	-0,57	-0,70	
39	enzymat., autom.	18,50	0,120	0,18	0,22	
40	HPLC	17,90	-0,480	-0,72	-0,89	
41	enzymat., autom.	18,69	0,310	0,46	0,57	
42	enzymat., autom.	18,70	0,320	0,48	0,59	
43	enzymat., autom.	18,21	-0,169	-0,25	-0,31	
45	enzymat., autom.	18,39	0,010	0,01	0,02	
50	enzymat., autom.	18,30	-0,080	-0,12	-0,15	
53	enzymat., autom.	18,81	0,430	0,64	0,80	
56	enzymat., autom.	18,09	-0,290	-0,43	-0,54	
57	enzymat., autom.	18,70	0,325	0,48	0,60	
68	enzymat., autom.	18,48	0,100	0,15	0,19	
81	enzymat. Hand	17,97	-0,410	-0,61	-0,76	
85	HPLC	19,09	0,710	1,06	1,32	
92	HPLC	18,25	-0,130	-0,19	-0,24	
101	HPLC	18,09	-0,290	-0,43	-0,54	
107	NMR	17,04	-1,339	-2,00	-2,48	
108	NMR	17,19	-1,186	-1,77	-2,20	
109	NMR	16,02	-2,358	-3,52	-4,37	
110	NMR	18,71	0,326	0,49	0,60	

4.5.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	18,39	0,010	0,01	0,02	
202	FTIR	17,54	-0,840	-1,25	-1,56	
203	FTIR	18,34	-0,040	-0,06	-0,07	
204	FTIR	18,30	-0,080	-0,12	-0,15	
206	FTIR	18,49	0,110	0,16	0,20	
207	FTIR	18,20	-0,180	-0,27	-0,33	
208	FTIR	17,92	-0,460	-0,69	-0,85	
209	FTIR	17,50	-0,880	-1,31	-1,63	
210	FTIR	17,71	-0,670	-1,00	-1,24	
212	FTIR	17,46	-0,920	-1,37	-1,71	
213	FTIR	17,72	-0,660	-0,98	-1,22	
214	FTIR	18,94	0,560	0,83	1,04	
216	FTIR	18,30	-0,080	-0,12	-0,15	
217	FTIR	17,54	-0,840	-1,25	-1,56	
218	FTIR	16,58	-1,800	-2,68	-3,34	
219	FTIR	17,07	-1,310	-1,95	-2,43	

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
220	FTIR	17,09	-1,290	-1,92	-2,39	
221	FTIR	19,30	0,920	1,37	1,71	
222	FTIR	17,77	-0,610	-0,91	-1,13	
223	FTIR	18,29	-0,090	-0,13	-0,17	
224	FTIR	17,43	-0,950	-1,42	-1,76	
225	FTIR	18,00	-0,380	-0,57	-0,70	
226	FTIR	18,10	-0,280	-0,42	-0,52	
227	FTIR	18,21	-0,170	-0,25	-0,32	
228	FTIR	18,70	0,320	0,48	0,59	
229	FTIR	18,58	0,200	0,30	0,37	
230	FTIR	18,46	0,080	0,12	0,15	
231	FTIR	17,59	-0,790	-1,18	-1,47	
233	FTIR	18,42	0,040	0,06	0,07	
235	FTIR	17,70	-0,680	-1,01	-1,26	
236	FTIR	16,80	-1,580	-2,36	-2,93	
237	FTIR	17,90	-0,480	-0,72	-0,89	
238	FTIR	18,53	0,150	0,22	0,28	
241	FTIR	18,22	-0,160	-0,24	-0,30	
242	FTIR	17,10	-1,280	-1,91	-2,37	
243	FTIR	17,50	-0,880	-1,31	-1,63	
244	FTIR	18,47	0,090	0,13	0,17	
245	FTIR	18,02	-0,360	-0,54	-0,67	
246	FTIR	16,86	-1,520	-2,27	-2,82	
247	FTIR	18,24	-0,140	-0,21	-0,26	
248	FTIR	18,63	0,250	0,37	0,46	
249	FTIR	17,50	-0,880	-1,31	-1,63	
250	FTIR	18,01	-0,370	-0,55	-0,69	
251	FTIR	17,48	-0,900	-1,34	-1,67	
254	FTIR	18,20	-0,180	-0,27	-0,33	
256	FTIR	17,70	-0,680	-1,01	-1,26	
257	FTIR	17,59	-0,790	-1,18	-1,47	
258	FTIR	17,50	-0,880	-1,31	-1,63	
259	FTIR	18,03	-0,350	-0,52	-0,65	
260	FTIR	18,20	-0,180	-0,27	-0,33	
261	FTIR	17,70	-0,680	-1,01	-1,26	
262	FTIR	18,70	0,320	0,48	0,59	
263	FTIR	17,60	-0,780	-1,16	-1,45	
264	FTIR	19,92	1,540	2,30	2,86	
265	FTIR	18,20	-0,180	-0,27	-0,33	
266	FTIR	18,32	-0,060	-0,09	-0,11	
267	FTIR	17,77	-0,610	-0,91	-1,13	
269	FTIR	18,70	0,320	0,48	0,59	
270	FTIR	18,07	-0,310	-0,46	-0,57	
271	FTIR	18,11	-0,270	-0,40	-0,50	
273	FTIR	18,47	0,090	0,13	0,17	
274	FTIR	17,90	-0,480	-0,72	-0,89	
275	FTIR	17,52	-0,860	-1,28	-1,60	
276	FTIR	19,39	1,010	1,51	1,87	
277	FTIR	19,34	0,960	1,43	1,78	
278	FTIR	17,80	-0,580	-0,86	-1,08	
280	FTIR	18,25	-0,130	-0,19	-0,24	
281	FTIR	19,05	0,670	1,00	1,24	
282	FTIR	17,38	-1,000	-1,49	-1,85	
283	FTIR	17,33	-1,052	-1,57	-1,95	
313	FTIR	17,14	-1,240	-1,85	-2,30	
322	FTIR	18,35	-0,030	-0,04	-0,06	
338	FTIR	18,16	-0,220	-0,33	-0,41	
349	FTIR	17,50	-0,880	-1,31	-1,63	
363	FTIR	17,20	-1,180	-1,76	-2,19	

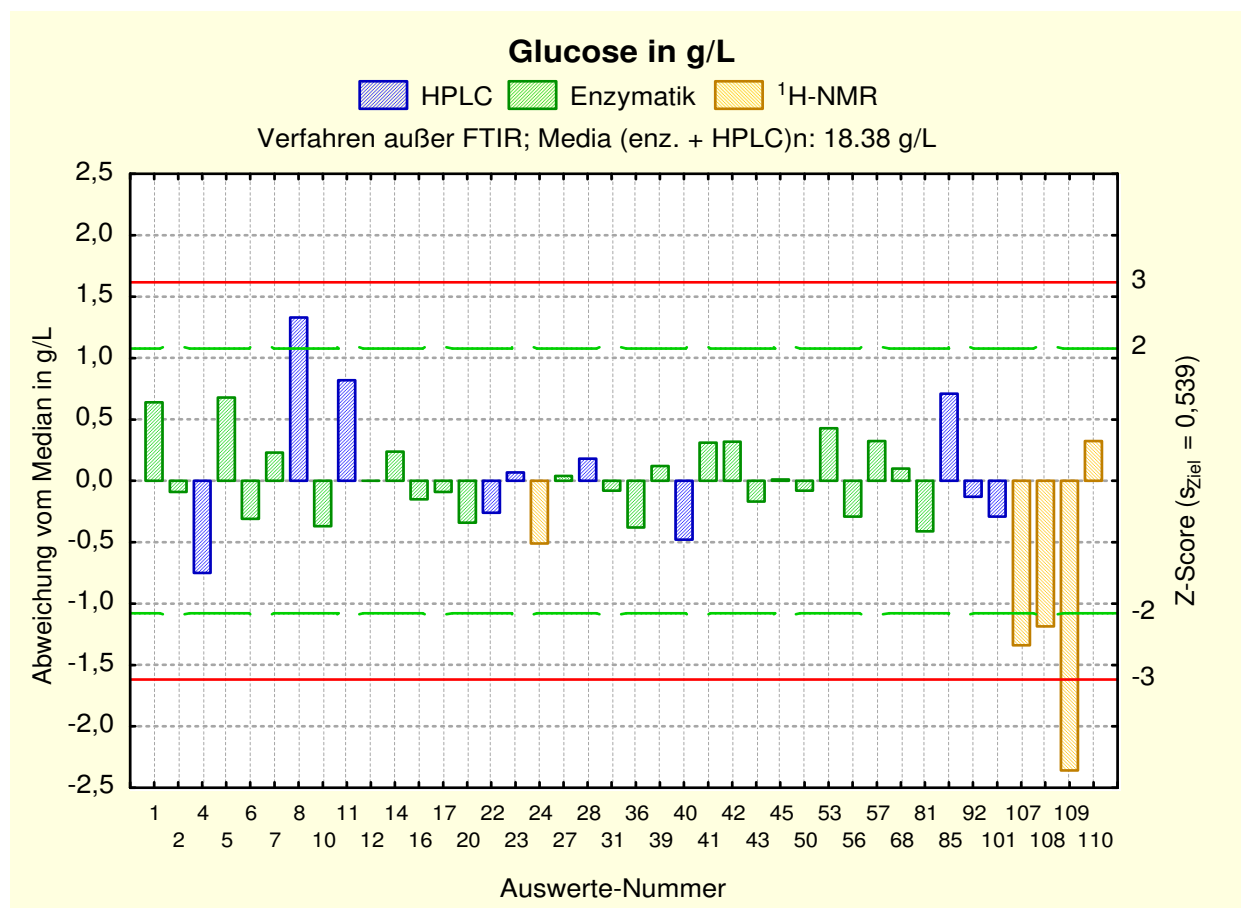
4.5.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

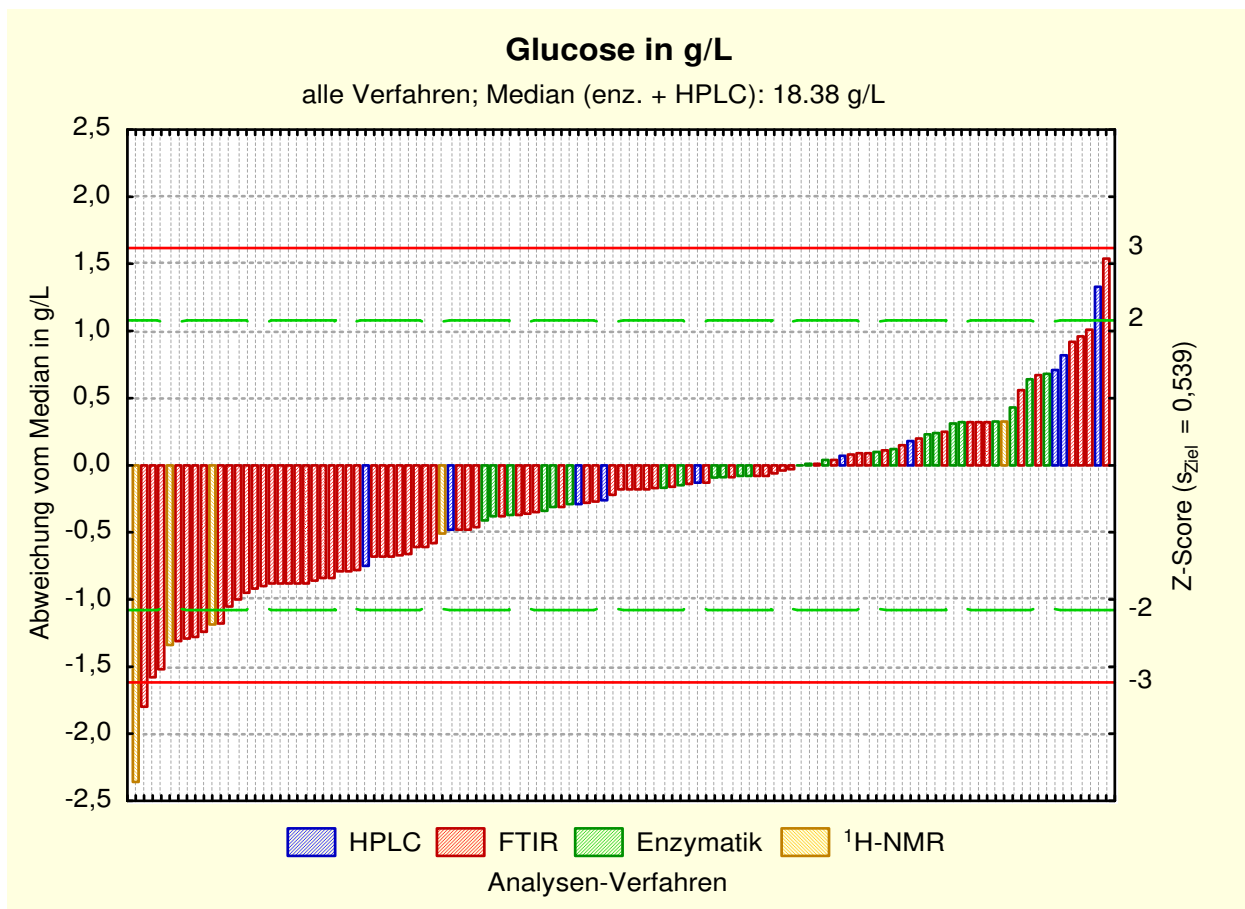
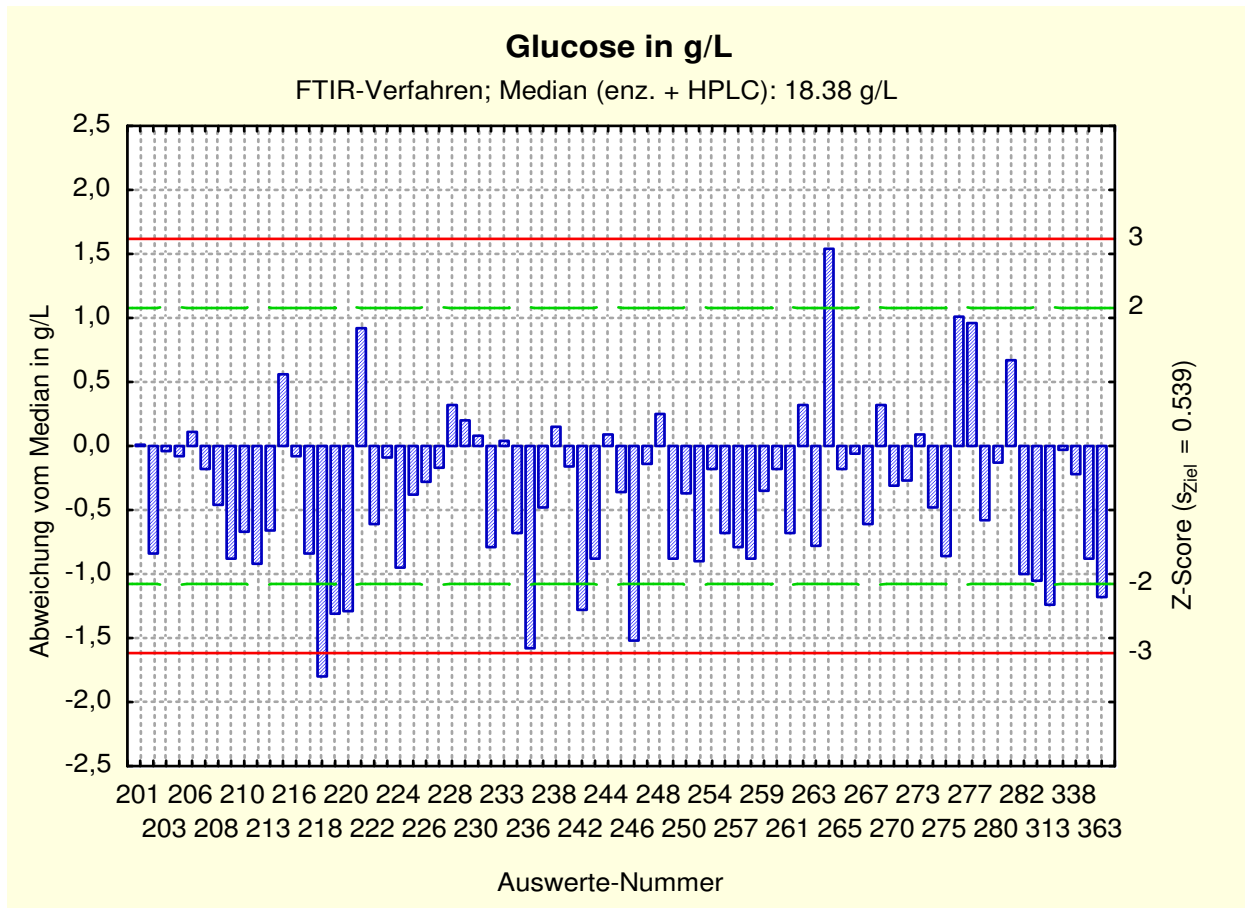
Ergebnisse für Glucose [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	35
Minimalwert	17,63
Mittelwert	18,434
Median	18,380
Maximalwert	19,71
Standardabweichung (s_L)	0,426
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,072
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,671
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,539
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\bar{U}\ FTIR}$)	(0,408)
Horrat-Wert (s_L/s_H)	0,63
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	0,79
Quotient ($s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	(1,04)
Quotient (u_M/s_H)	0,11
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,13
Quotient ($u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	(0,18)

^{*)} Die FTIR-Laboregebnisse wurden mit der Zielstandardabweichung $s_{exp\ herk}$ bewertet.

4.5.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; OIV-MA-AS311-03	10	18,472	0,679
enzymat. autom.	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, automatisiert	20	18,404	0,296
enzymat. Hand	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, manuell	5	18,376	0,492
	herkömmliche Verfahren	35	18,408	0,393
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	75	17,977	0,594
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	5	17,365	1,130





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	19,60	1,520	2,30	2,86	
02	enzymat. Hand	17,91	-0,170	-0,26	-0,32	
04	HPLC	18,19	0,110	0,17	0,21	
05	enzymat., autom.	17,92	-0,160	-0,24	-0,30	
06	enzymat., autom.	18,04	-0,040	-0,06	-0,08	
07	enzymat. Hand	18,11	0,030	0,05	0,06	
08	HPLC	18,29	0,210	0,32	0,40	
10	enzymat. Hand	17,71	-0,370	-0,56	-0,70	
11	HPLC	17,90	-0,180	-0,27	-0,34	
12	enzymat., autom.	17,99	-0,090	-0,14	-0,17	
14	enzymat., autom.	18,13	0,050	0,08	0,09	
16	enzymat., autom.	18,12	0,040	0,06	0,08	
17	enzymat., autom.	18,10	0,021	0,03	0,04	
20	enzymat., autom.	17,64	-0,440	-0,67	-0,83	
22	HPLC	18,02	-0,060	-0,09	-0,11	
23	HPLC	18,05	-0,030	-0,05	-0,06	
24	NMR	17,26	-0,820	-1,24	-1,54	
27	enzymat., autom.	18,25	0,170	0,26	0,32	
28	HPLC	18,97	0,890	1,35	1,68	
31	enzymat., autom.	18,83	0,750	1,13	1,41	
36	enzymat., autom.	18,10	0,020	0,03	0,04	
39	enzymat., autom.	18,72	0,640	0,97	1,21	
40	HPLC	17,80	-0,280	-0,42	-0,53	
41	enzymat., autom.	18,38	0,296	0,45	0,56	
42	enzymat., autom.	18,08	0,000	0,00	0,00	
43	enzymat., autom.	18,16	0,085	0,13	0,16	
45	enzymat., autom.	17,53	-0,550	-0,83	-1,04	
50	enzymat., autom.	17,90	-0,180	-0,27	-0,34	
53	enzymat., autom.	18,36	0,280	0,42	0,53	
56	enzymat., autom.	17,45	-0,630	-0,95	-1,19	
57	enzymat., autom.	17,54	-0,539	-0,81	-1,01	
68	enzymat., autom.	18,03	-0,050	-0,08	-0,09	
81	enzymat. Hand	17,20	-0,880	-1,33	-1,66	
85	HPLC	18,65	0,570	0,86	1,07	
92	HPLC	18,04	-0,040	-0,06	-0,08	
101	HPLC	18,21	0,130	0,20	0,24	
107	NMR	16,41	-1,675	-2,53	-3,15	
108	NMR	16,79	-1,290	-1,95	-2,43	
109	NMR	15,61	-2,471	-3,74	-4,65	
110	NMR	18,44	0,365	0,55	0,69	

4.6.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	17,41	-0,670	-1,01	-1,26	
202	FTIR	17,50	-0,580	-0,88	-1,09	
203	FTIR	17,58	-0,500	-0,76	-0,94	
204	FTIR	18,00	-0,080	-0,12	-0,15	
206	FTIR	18,21	0,130	0,20	0,24	
207	FTIR	17,70	-0,380	-0,57	-0,72	
208	FTIR	17,78	-0,300	-0,45	-0,56	
209	FTIR	17,40	-0,680	-1,03	-1,28	
210	FTIR	18,50	0,420	0,63	0,79	
212	FTIR	16,47	-1,610	-2,43	-3,03	
213	FTIR	17,41	-0,670	-1,01	-1,26	
214	FTIR	18,71	0,630	0,95	1,19	
216	FTIR	17,20	-0,880	-1,33	-1,66	
217	FTIR	17,05	-1,030	-1,56	-1,94	
218	FTIR	16,80	-1,280	-1,93	-2,41	
219	FTIR	16,52	-1,560	-2,36	-2,94	

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
220	FTIR	17,75	-0,330	-0,50	-0,62	
221	FTIR	16,80	-1,280	-1,93	-2,41	
222	FTIR	18,08	0,000	0,00	0,00	
223	FTIR	18,49	0,410	0,62	0,77	
224	FTIR	17,29	-0,790	-1,19	-1,49	
225	FTIR	17,50	-0,580	-0,88	-1,09	
226	FTIR	17,94	-0,140	-0,21	-0,26	
227	FTIR	18,36	0,280	0,42	0,53	
228	FTIR	18,10	0,020	0,03	0,04	
229	FTIR	17,51	-0,570	-0,86	-1,07	
230	FTIR	17,71	-0,370	-0,56	-0,70	
231	FTIR	17,36	-0,720	-1,09	-1,36	
233	FTIR	16,92	-1,160	-1,75	-2,18	
235	FTIR	17,61	-0,470	-0,71	-0,89	
236	FTIR	13,00	-5,080	-7,68	-9,57	(**)
237	FTIR	17,30	-0,780	-1,18	-1,47	
238	FTIR	16,42	-1,660	-2,51	-3,13	
241	FTIR	17,86	-0,220	-0,33	-0,41	
242	FTIR	16,30	-1,780	-2,69	-3,35	
243	FTIR	17,90	-0,180	-0,27	-0,34	
244	FTIR	17,79	-0,290	-0,44	-0,55	
245	FTIR	17,67	-0,410	-0,62	-0,77	
246	FTIR	17,01	-1,070	-1,62	-2,01	
247	FTIR	16,98	-1,100	-1,66	-2,07	
248	FTIR	17,58	-0,500	-0,76	-0,94	
249	FTIR	17,60	-0,480	-0,73	-0,90	
250	FTIR	17,71	-0,370	-0,56	-0,70	
251	FTIR	17,88	-0,200	-0,30	-0,38	
254	FTIR	17,90	-0,180	-0,27	-0,34	
256	FTIR	19,00	0,920	1,39	1,73	
257	FTIR	17,99	-0,090	-0,14	-0,17	
258	FTIR	17,60	-0,480	-0,73	-0,90	
259	FTIR	17,30	-0,780	-1,18	-1,47	
260	FTIR	16,60	-1,480	-2,24	-2,79	
261	FTIR	18,20	0,120	0,18	0,23	
262	FTIR	17,60	-0,480	-0,73	-0,90	
263	FTIR	17,70	-0,380	-0,57	-0,72	
264	FTIR	18,31	0,230	0,35	0,43	
265	FTIR	17,00	-1,080	-1,63	-2,03	
266	FTIR	18,32	0,240	0,36	0,45	
267	FTIR	17,97	-0,110	-0,17	-0,21	
269	FTIR	17,20	-0,880	-1,33	-1,66	
270	FTIR	17,93	-0,150	-0,23	-0,28	
271	FTIR	18,38	0,300	0,45	0,56	
273	FTIR	18,35	0,270	0,41	0,51	
274	FTIR	16,60	-1,480	-2,24	-2,79	
275	FTIR	18,86	0,780	1,18	1,47	
276	FTIR	17,63	-0,450	-0,68	-0,85	
277	FTIR	18,67	0,590	0,89	1,11	
278	FTIR	16,60	-1,480	-2,24	-2,79	
280	FTIR	16,42	-1,660	-2,51	-3,13	
281	FTIR	17,06	-1,020	-1,54	-1,92	
282	FTIR	17,30	-0,780	-1,18	-1,47	
283	FTIR	17,26	-0,823	-1,24	-1,55	
313	FTIR	17,78	-0,300	-0,45	-0,56	
322	FTIR	17,90	-0,180	-0,27	-0,34	
338	FTIR	19,02	0,940	1,42	1,77	
349	FTIR	17,50	-0,580	-0,88	-1,09	
363	FTIR	18,00	-0,080	-0,12	-0,15	

(**) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der Werte herkömmlicher Verfahren ab

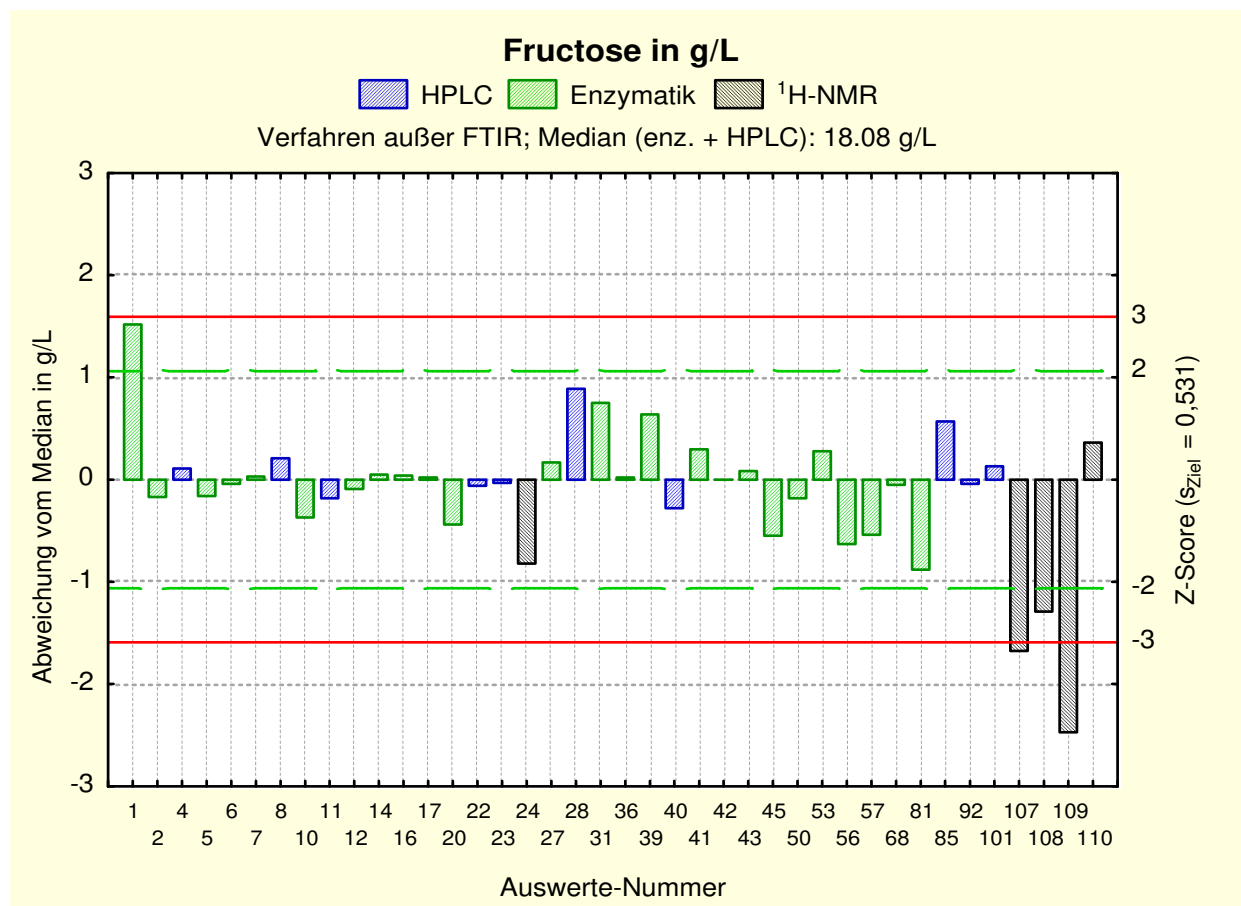
4.6.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

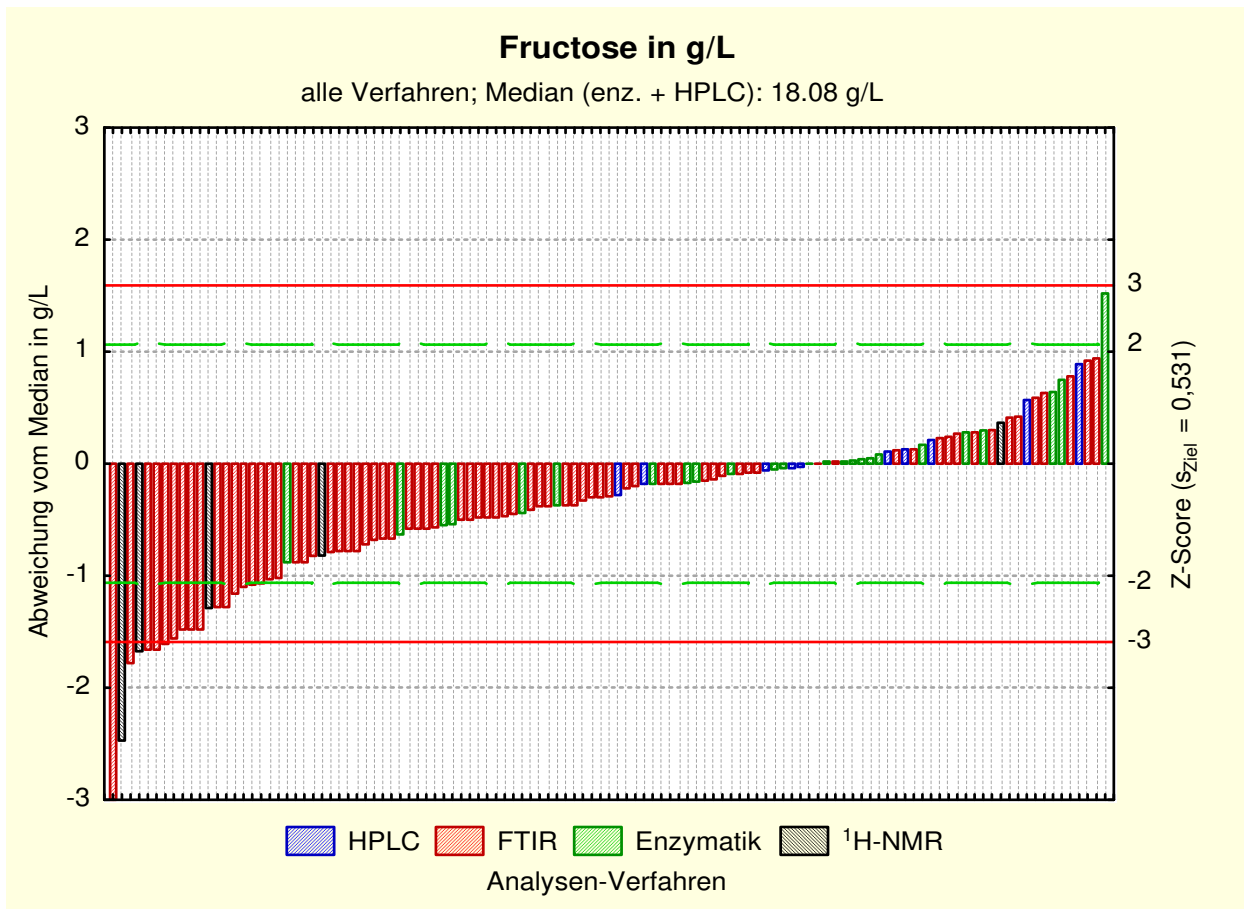
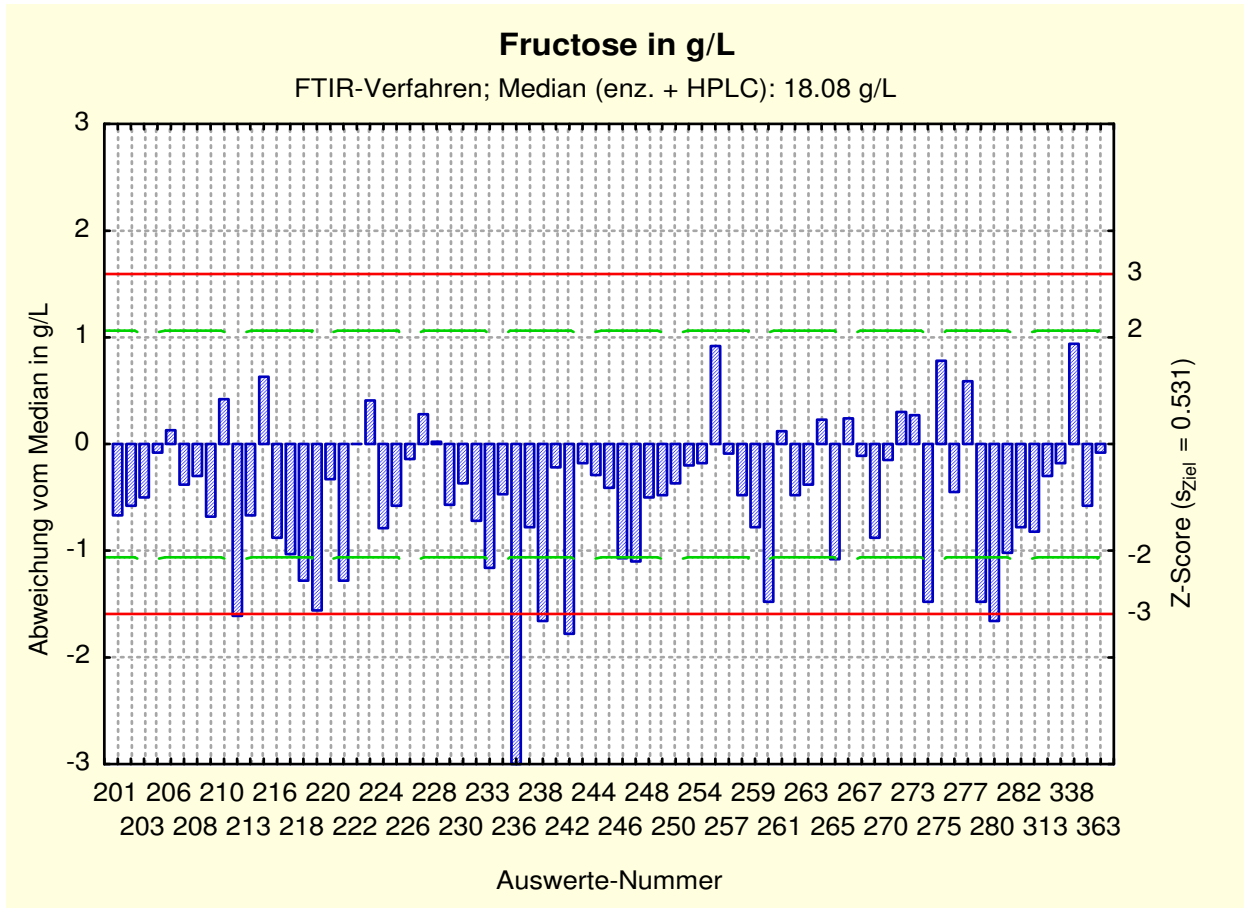
Ergebnisse für Fructose [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	35
Minimalwert	17,20
Mittelwert	18,112
Median	18,080
Maximalwert	19,60
Standardabweichung (s_L)	0,452
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,076
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,662
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,531
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\bar{U}\ FTIR}$)	(0,330)
Horrat-Wert (s_L/s_H)	0,68
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	0,85
Quotient ($s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	(1,37)
Quotient (u_M/s_H)	0,12
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,14
Quotient ($u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	(0,23)

¹⁾ Die FTIR-Laboreergebnisse wurden mit der Zielstandardabweichung $s_{exp\ herk.}$ bewertet.

4.6.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; OIV-MA-AS311-03	10	18,183	0,325
enzymat. autom.	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, automatisiert	20	18,049	0,350
enzymat. Hand	OIV-MA-AS311-02, enzymatisch, manuell	5	18,129	0,983
	herkömmliche Verfahren	35	18,077	0,360
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	75	17,596	0,659
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	5	16,925	1,140





4.7 Glycerin [g/L]

4.7.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	7,25	0,02	0,05	
02	enzymat. Hand	7,11	-0,12	-0,41	
04	HPLC	7,03	-0,20	-0,67	
05	enzymat. autom.	7,22	-0,01	-0,05	
06	enzymat. autom.	7,19	-0,04	-0,15	
07	enzymat. Hand	6,92	-0,31	-1,04	
08	HPLC	7,03	-0,20	-0,67	
11	enzymat. autom.	7,43	0,20	0,64	
12	enzymat. Hand	6,83	-0,40	-1,33	
16	enzymat. autom.	8,80	1,57	5,15	(**)
22	HPLC	7,28	0,05	0,15	
23	HPLC	7,28	0,05	0,15	
24	NMR	7,26	0,03	0,08	
28	HPLC	6,92	-0,31	-1,04	
40	HPLC	7,40	0,17	0,54	
45	enzymat. autom.	7,40	0,17	0,54	
50	HPLC	7,33	0,10	0,31	
56	enzymat. autom.	7,26	0,03	0,08	
81	enzymat. Hand	6,90	-0,33	-1,10	
85	HPLC	7,79	0,56	1,83	
90	enzymat. autom.	7,70	0,47	1,53	
92	HPLC	7,11	-0,12	-0,41	
107	NMR	7,25	0,01	0,04	
108	NMR	6,66	-0,57	-1,89	
109	NMR	6,49	-0,75	-2,47	
110	NMR	7,41	0,17	0,57	

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

4.7.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	7,21	-0,04	-0,13	-0,11	
202	FTIR	6,59	-0,66	-2,17	-1,90	
203	FTIR	6,34	-0,91	-2,99	-2,61	
204	FTIR	7,07	-0,18	-0,59	-0,52	
206	FTIR	6,97	-0,28	-0,92	-0,80	
207	FTIR	7,47	0,22	0,72	0,63	
208	FTIR	7,07	-0,18	-0,59	-0,52	
209	FTIR	7,90	0,65	2,14	1,87	
210	FTIR	7,44	0,19	0,62	0,55	
212	FTIR	7,44	0,19	0,62	0,55	
213	FTIR	7,40	0,15	0,49	0,43	
214	FTIR	5,82	-1,43	-4,70	-4,11	
216	FTIR	6,70	-0,55	-1,81	-1,58	
217	FTIR	8,32	1,07	3,52	3,07	
218	FTIR	8,63	1,38	4,53	3,97	
219	FTIR	6,87	-0,38	-1,25	-1,09	
220	FTIR	7,50	0,25	0,82	0,72	
221	FTIR	8,60	1,35	4,44	3,88	
222	FTIR	7,43	0,18	0,59	0,52	
223	FTIR	7,47	0,22	0,72	0,63	
224	FTIR	6,98	-0,27	-0,89	-0,78	
225	FTIR	6,30	-0,95	-3,12	-2,73	
226	FTIR	6,52	-0,73	-2,40	-2,10	
227	FTIR	6,91	-0,34	-1,12	-0,98	
228	FTIR	6,90	-0,35	-1,15	-1,01	
229	FTIR	7,05	-0,20	-0,66	-0,57	
230	FTIR	6,81	-0,44	-1,45	-1,26	
231	FTIR	6,87	-0,38	-1,25	-1,09	
233	FTIR	6,77	-0,48	-1,58	-1,38	
235	FTIR	7,61	0,36	1,18	1,03	

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
236	FTIR	6,70	-0,55	-1,81	-1,58	
237	FTIR	6,10	-1,15	-3,78	-3,30	
238	FTIR	8,64	1,39	4,57	3,99	
241	FTIR	7,00	-0,25	-0,82	-0,72	
242	FTIR	7,00	-0,25	-0,82	-0,72	
243	FTIR	6,40	-0,85	-2,79	-2,44	
244	FTIR	6,40	-0,85	-2,79	-2,44	
245	FTIR	6,57	-0,68	-2,23	-1,95	
246	FTIR	6,80	-0,45	-1,48	-1,29	
249	FTIR	8,70	1,45	4,76	4,17	
250	FTIR	7,23	-0,02	-0,07	-0,06	
254	FTIR	7,20	-0,05	-0,16	-0,14	
256	FTIR	8,08	0,83	2,73	2,39	
257	FTIR	6,57	-0,68	-2,23	-1,95	
258	FTIR	8,30	1,05	3,45	3,02	
259	FTIR	6,47	-0,78	-2,56	-2,24	
260	FTIR	6,40	-0,85	-2,79	-2,44	
261	FTIR	9,40	2,15	7,06	6,18	(**)
262	FTIR	7,10	-0,15	-0,49	-0,43	
265	FTIR	6,91	-0,34	-1,12	-0,98	
266	FTIR	7,07	-0,18	-0,59	-0,52	
267	FTIR	8,10	0,85	2,79	2,44	
270	FTIR	6,84	-0,41	-1,35	-1,18	
271	FTIR	7,04	-0,21	-0,69	-0,60	
273	FTIR	6,31	-0,94	-3,09	-2,70	
274	FTIR	6,70	-0,55	-1,81	-1,58	
276	FTIR	6,94	-0,31	-1,02	-0,89	
277	FTIR	6,92	-0,33	-1,08	-0,95	
278	FTIR	6,70	-0,55	-1,81	-1,58	
280	FTIR	8,00	0,75	2,46	2,16	
281	FTIR	6,85	-0,40	-1,31	-1,15	
282	FTIR	7,53	0,28	0,92	0,80	
283	FTIR	7,37	0,12	0,40	0,35	
284	FTIR	7,60	0,35	1,15	1,01	
322	FTIR	7,02	-0,23	-0,76	-0,66	
338	FTIR	6,50	-0,75	-2,46	-2,16	
349	FTIR	7,30	0,05	0,16	0,14	

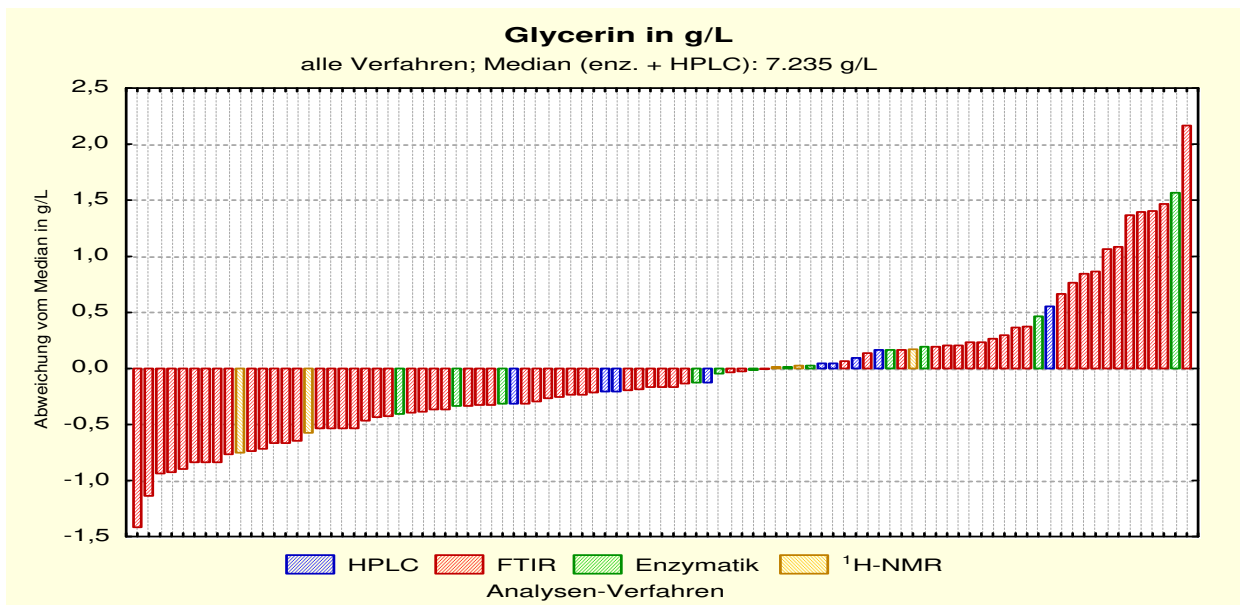
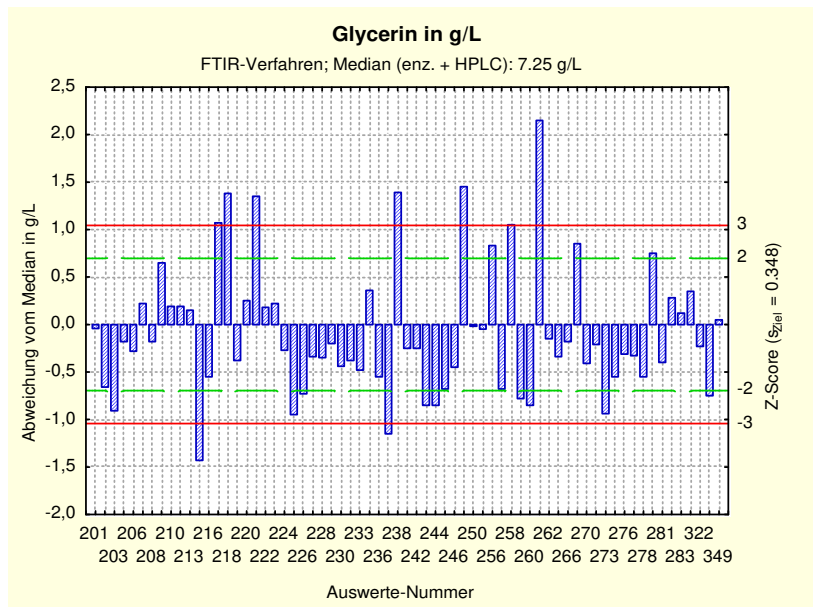
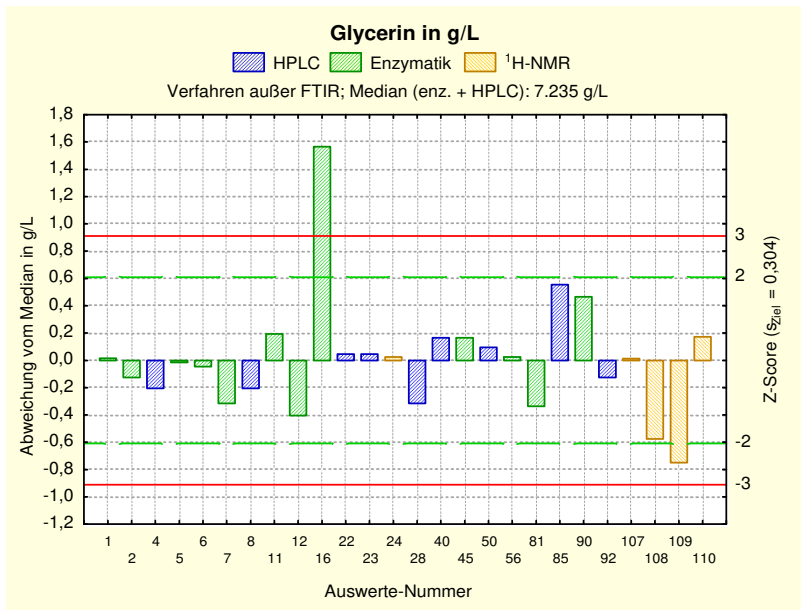
(**) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der herkömmlichen Werte ab.

4.7.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Glycerin [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	21	20
Minimalwert	6,8	6,8
Mittelwert	7,29	7,22
Median	7,25	7,23
Maximalwert	8,8	7,8
Standardabweichung (s _L)	0,424	0,253
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,093	0,057
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,304	0,304
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{Ü FTIR})	0,348	0,348
Horrat-Wert (s _L /s _H)	1,39	0,83
Quotient (s _L /s _{Ü FTIR})	1,22	0,72
Quotient (u _M /s _H)	0,30	0,19
Quotient (u _M /s _{Ü FTIR})	0,27	0,16

4.7.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	9	7,217	0,238
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert	7	7,441	0,297
enzymat. Hand	enzymatisch, manuell	5	6,992	0,176
	herkömmliche Verfahren	21	7,231	0,277
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	67	7,096	0,605
NMR	1H-Kernresonanzspektroskopie	5	7,041	0,423



4.8 pH-Wert

4.8.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
01	potentiometr.	3,57	0,000	0,00	
02	potentiometr.	3,57	0,000	0,00	
04	potentiometr.	3,51	-0,060	-1,26	
05	potentiometr.	3,63	0,060	1,26	
06	potentiometr.	3,59	0,020	0,42	
07	potentiometr.	3,56	-0,010	-0,21	
08	potentiometr.	3,61	0,040	0,84	
10	potentiometr.	3,55	-0,020	-0,42	
11	potentiometr.	3,61	0,040	0,84	
12	potentiometr.	3,61	0,040	0,84	
14	potentiometr.	3,51	-0,060	-1,26	
16	potentiometr.	3,60	0,030	0,63	
17	potentiometr.	3,50	-0,070	-1,47	
20	potentiometr.	3,52	-0,047	-0,99	
22	potentiometr.	3,65	0,080	1,68	
23	potentiometr.	3,56	-0,010	-0,21	
24	potentiometr.	3,59	0,020	0,42	
27	potentiometr.	3,53	-0,043	-0,90	
28	potentiometr.	3,62	0,050	1,05	
29	potentiometr.	3,51	-0,060	-1,26	
31	potentiometr.	3,57	0,000	0,00	
38	potentiometr.	3,52	-0,050	-1,05	
39	potentiometr.	3,57	0,000	0,00	
40	potentiometr.	3,53	-0,040	-0,84	
41	potentiometr.	3,55	-0,020	-0,42	
42	potentiometr.	3,60	0,030	0,63	
43	potentiometr.	3,70	0,130	2,73	
45	potentiometr.	3,57	0,000	0,00	
50	potentiometr.	3,58	0,010	0,21	
53	potentiometr.	3,55	-0,020	-0,42	
55	potentiometr.	3,69	0,120	2,52	
56	potentiometr.	3,61	0,040	0,84	
57	potentiometr.	3,63	0,060	1,26	
60	potentiometr.	3,64	0,070	1,47	
63	potentiometr.	3,50	-0,070	-1,47	
68	potentiometr.	3,55	-0,020	-0,42	
75	potentiometr.	3,56	-0,010	-0,21	
81	potentiometr.	3,69	0,120	2,52	
84	potentiometr.	3,61	0,040	0,84	
92	potentiometr.	3,65	0,080	1,68	

4.8.2 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	3,45	-0,120	-2,43	
202	FTIR	3,53	-0,040	-0,81	
203	FTIR	3,57	0,000	0,00	
204	FTIR	3,46	-0,110	-2,23	
206	FTIR	3,68	0,110	2,23	
207	FTIR	3,56	-0,010	-0,20	
208	FTIR	3,62	0,050	1,01	
209	FTIR	3,46	-0,110	-2,23	
210	FTIR	3,63	0,060	1,22	
212	FTIR	3,38	-0,190	-3,85	
213	FTIR	3,56	-0,010	-0,20	
214	FTIR	3,53	-0,040	-0,81	
216	FTIR	3,50	-0,070	-1,42	
217	FTIR	3,56	-0,010	-0,20	
218	FTIR	3,62	0,050	1,01	
219	FTIR	3,49	-0,080	-1,62	
220	FTIR	3,45	-0,120	-2,43	
221	FTIR	3,60	0,030	0,61	

Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse

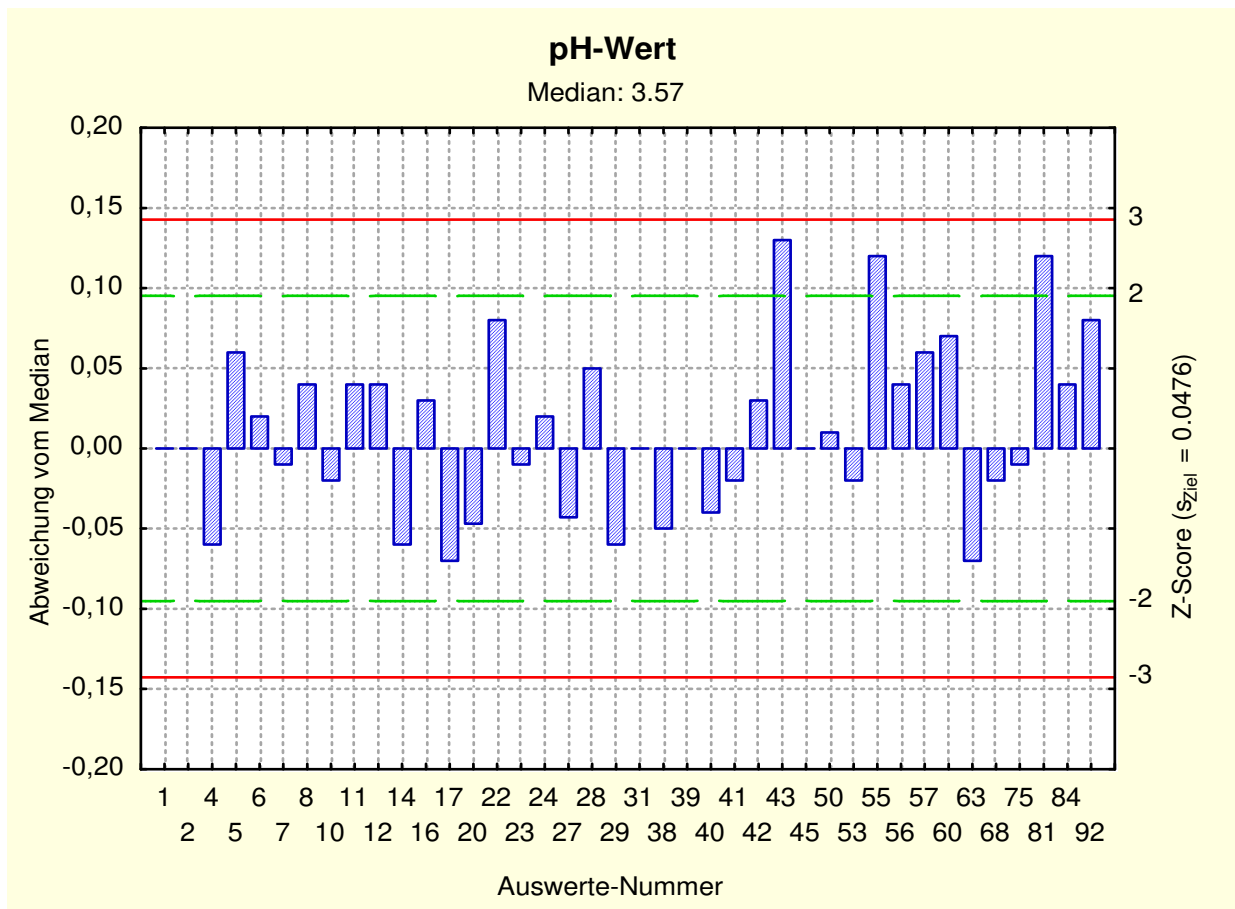
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
222	FTIR	3,51	-0,060	-1,22	
223	FTIR	3,51	-0,060	-1,22	
224	FTIR	3,59	0,020	0,41	
225	FTIR	3,54	-0,030	-0,61	
226	FTIR	3,55	-0,020	-0,41	
227	FTIR	3,46	-0,110	-2,23	
228	FTIR	3,73	0,160	3,25	
229	FTIR	3,52	-0,050	-1,01	
230	FTIR	3,51	-0,060	-1,22	
231	FTIR	3,50	-0,070	-1,42	
233	FTIR	3,49	-0,080	-1,62	
235	FTIR	3,52	-0,050	-1,01	
236	FTIR	3,54	-0,030	-0,61	
237	FTIR	3,56	-0,010	-0,20	
238	FTIR	3,57	0,000	0,00	
241	FTIR	3,54	-0,030	-0,61	
242	FTIR	3,55	-0,020	-0,41	
243	FTIR	3,44	-0,130	-2,64	
244	FTIR	3,57	0,000	0,00	
245	FTIR	3,56	-0,010	-0,20	
246	FTIR	3,55	-0,020	-0,41	
247	FTIR	3,54	-0,030	-0,61	
249	FTIR	3,49	-0,080	-1,62	
250	FTIR	3,52	-0,050	-1,01	
251	FTIR	3,68	0,110	2,23	
254	FTIR	3,52	-0,050	-1,01	
255	FTIR	3,44	-0,130	-2,64	
256	FTIR	3,65	0,080	1,62	
257	FTIR	3,52	-0,050	-1,01	
258	FTIR	3,40	-0,170	-3,45	
259	FTIR	3,45	-0,120	-2,43	
260	FTIR	3,68	0,110	2,23	
261	FTIR	3,56	-0,010	-0,20	
262	FTIR	3,67	0,100	2,03	
263	FTIR	3,62	0,050	1,01	
264	FTIR	3,59	0,020	0,41	
265	FTIR	3,39	-0,180	-3,65	
266	FTIR	3,57	0,000	0,00	
267	FTIR	3,45	-0,120	-2,43	
268	FTIR	3,45	-0,120	-2,43	
269	FTIR	3,40	-0,170	-3,45	
270	FTIR	3,39	-0,180	-3,65	
271	FTIR	3,42	-0,150	-3,04	
273	FTIR	3,53	-0,040	-0,81	
274	FTIR	3,66	0,090	1,83	
275	FTIR	3,56	-0,010	-0,20	
276	FTIR	3,45	-0,120	-2,43	
277	FTIR	3,46	-0,110	-2,23	
278	FTIR	3,62	0,050	1,01	
280	FTIR	3,58	0,010	0,20	
281	FTIR	3,40	-0,170	-3,45	
282	FTIR	3,49	-0,080	-1,62	
283	FTIR	3,49	-0,083	-1,68	
284	FTIR	3,53	-0,040	-0,81	
322	FTIR	3,36	-0,210	-4,26	
338	FTIR	3,65	0,080	1,62	
349	FTIR	3,60	0,030	0,61	
363	FTIR	3,59	0,020	0,41	

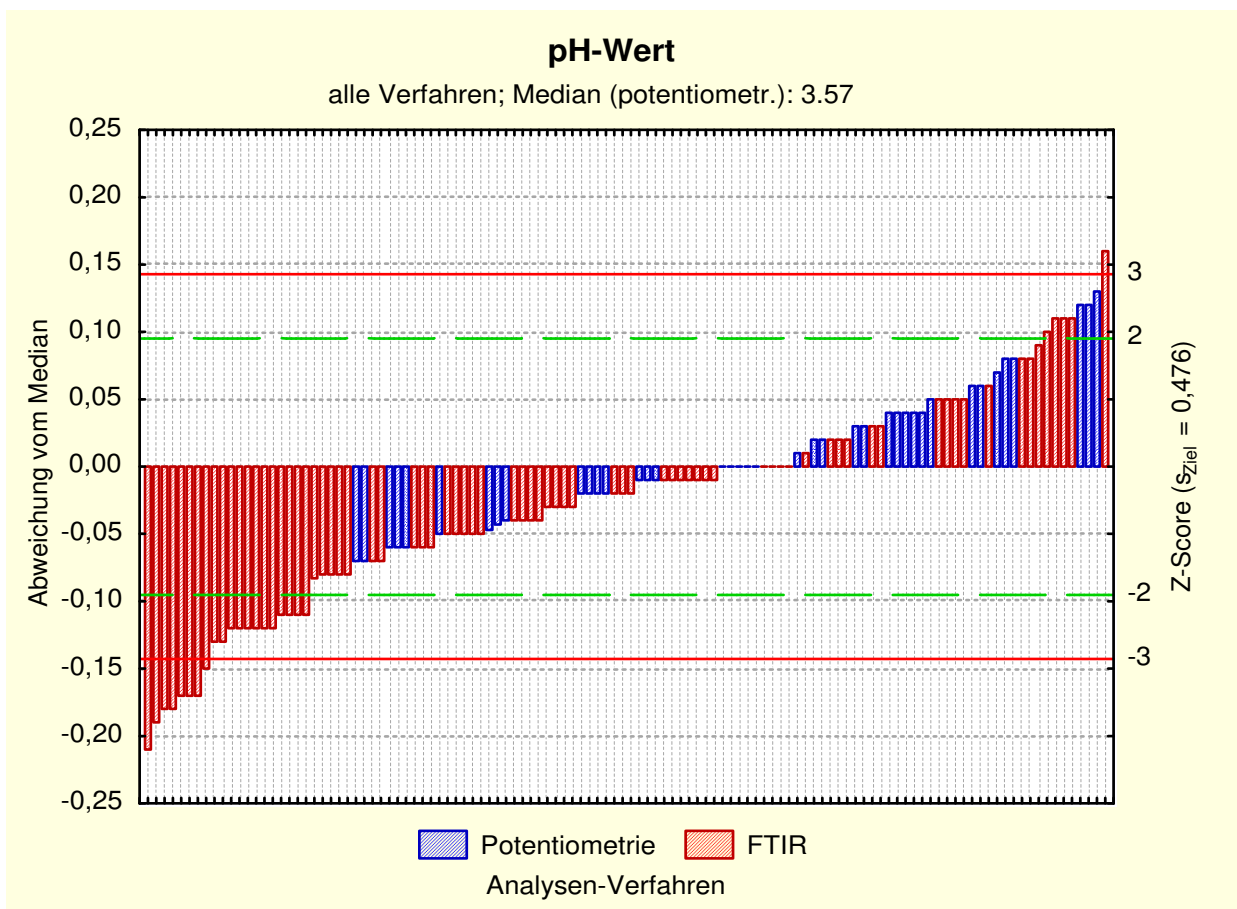
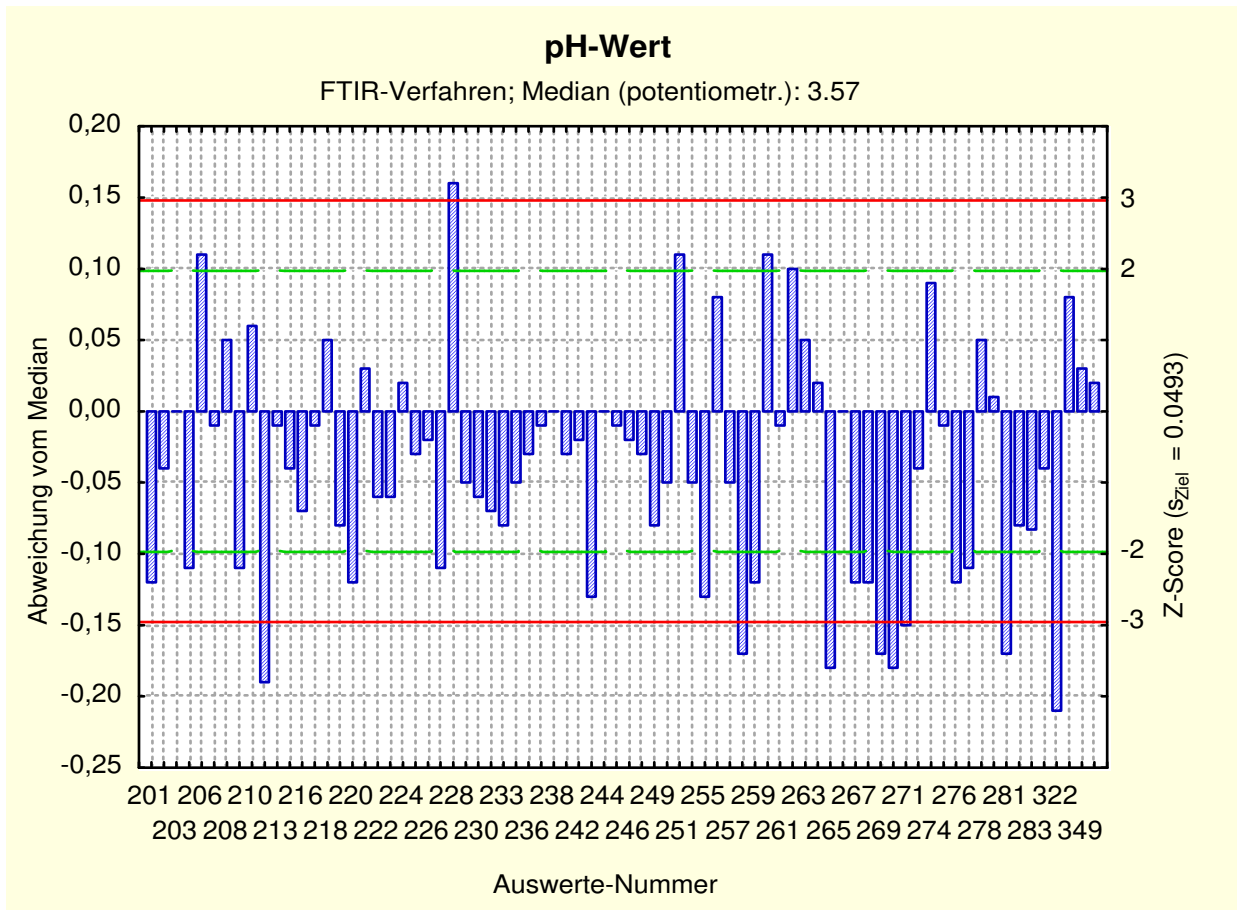
4.8.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für pH-Wert	alle Daten
Gültige Werte	40
Minimalwert	3,50
Mittelwert	3,582
Median	3,570
Maximalwert	3,70
Standardabweichung (s_L)	0,0529
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,0084
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,0476
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,0493
Horrat-Wert (s_L/s_H)	
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	1,11
Quotient ($s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	1,07
Quotient (u_M/s_H)	
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,18
Quotient ($u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,17

4.8.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
potentiometr.	potentiometrisch	40	3,579	0,055
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	76	3,530	0,084





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	6,18	-0,070	-0,26	-0,65	
02	LwK 5.2.1	6,19	-0,060	-0,22	-0,56	
05	LwK 5.2.1	6,20	-0,050	-0,19	-0,47	
06	LwK 5.1	6,17	-0,080	-0,30	-0,75	
07	LwK 5.2.1	6,20	-0,050	-0,19	-0,47	
08	LwK 5.2.1	6,39	0,140	0,52	1,31	
10	LwK 5.2.1	6,23	-0,020	-0,07	-0,19	
11	LwK 5.2.1	6,30	0,050	0,19	0,47	
12	LwK 5.1	6,13	-0,120	-0,45	-1,12	
14	LwK 5.1	6,34	0,090	0,34	0,84	
16	LwK 5.1	6,40	0,150	0,56	1,40	
17	LwK 5.2.1	6,13	-0,120	-0,45	-1,12	
20	LwK 5.2.1	6,43	0,180	0,67	1,68	
22	LwK 5.1	6,25	0,000	0,00	0,00	
23	LwK 5.1	6,22	-0,030	-0,11	-0,28	
24	LwK 5.1	6,40	0,150	0,56	1,40	
25	LwK 5.1	6,20	-0,050	-0,19	-0,47	
27	LwK 5.2.1	6,42	0,170	0,63	1,59	
28	LwK 5.1	6,03	-0,220	-0,82	-2,05	
29	LwK 5.1	6,30	0,050	0,19	0,47	
31	LwK 5.2.1	6,60	0,350	1,30	3,27	
35	LwK 5.2.1	6,20	-0,050	-0,19	-0,47	
36	k. A.	6,00	-0,250	-0,93	-2,33	
38	LwK 5.1	6,33	0,080	0,30	0,75	
39	LwK 5.1	6,20	-0,050	-0,19	-0,47	
40	LwK 5.2.1	6,28	0,030	0,11	0,28	
41	LwK 5.1	6,31	0,060	0,22	0,56	
42	LwK 5.1	6,20	-0,050	-0,19	-0,47	
43	LwK 5.1	6,18	-0,070	-0,26	-0,65	
45	LwK 5.1	6,36	0,110	0,41	1,03	
49	LwK 5.1	6,25	0,000	0,00	0,00	
50	LwK 5.1	6,20	-0,050	-0,19	-0,47	
53	LwK 5.2.1	6,20	-0,050	-0,19	-0,47	
55	LwK 5.2.1	6,40	0,150	0,56	1,40	
56	LwK 5.2.1	6,25	0,000	0,00	0,00	
57	LwK 5.1	6,28	0,030	0,11	0,28	
60	LwK 5.2.1	6,15	-0,100	-0,37	-0,93	
61	k. A.	5,90	-0,350	-1,30	-3,27	
63	LwK 5.1	6,38	0,125	0,47	1,17	
68	LwK 5.1	6,47	0,220	0,82	2,05	
74	phot.aut.	6,00	-0,250	-0,93	-2,33	
81	LwK 5.1	6,10	-0,150	-0,56	-1,40	
84	LwK 5.2.2	6,40	0,150	0,56	1,40	
87	LwK 5.2.1	6,39	0,140	0,52	1,31	
92	LwK 5.1	6,35	0,100	0,37	0,93	

4.9.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 5.3	6,23	-0,020	-0,07	-0,14	
202	LwK 5.3	6,16	-0,090	-0,34	-0,62	
203	LwK 5.3	6,27	0,020	0,07	0,14	
204	LwK 5.3	6,40	0,150	0,56	1,03	
206	LwK 5.3	5,89	-0,360	-1,34	-2,48	
207	LwK 5.3	6,24	-0,010	-0,04	-0,07	
208	LwK 5.3	5,82	-0,430	-1,60	-2,97	
209	LwK 5.3	5,70	-0,550	-2,05	-3,79	
210	LwK 5.3	6,05	-0,200	-0,75	-1,38	
212	LwK 5.3	5,61	-0,640	-2,39	-4,41	
213	LwK 5.3	6,23	-0,020	-0,07	-0,14	
214	LwK 5.3	6,37	0,120	0,45	0,83	

Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse

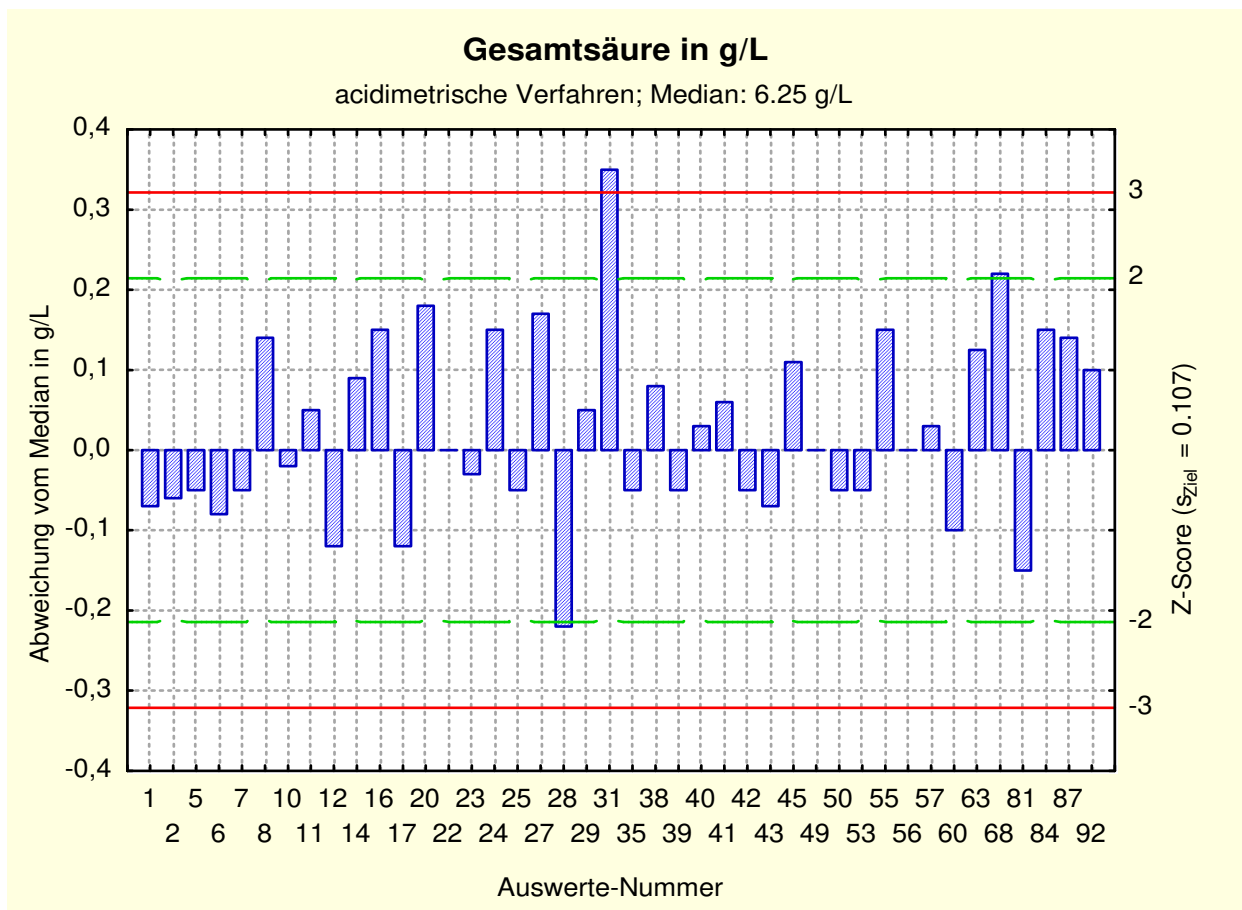
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
216	LwK 5.3	6,50	0,250	0,93	1,72	
217	LwK 5.3	6,25	0,000	0,00	0,00	
218	LwK 5.3	6,27	0,020	0,07	0,14	
219	LwK 5.3	6,41	0,160	0,60	1,10	
220	LwK 5.3	6,28	0,030	0,11	0,21	
221	LwK 5.3	6,50	0,250	0,93	1,72	
222	LwK 5.3	6,18	-0,070	-0,26	-0,48	
223	LwK 5.3	5,91	-0,340	-1,27	-2,34	
224	LwK 5.3	6,31	0,060	0,22	0,41	
225	LwK 5.3	6,20	-0,050	-0,19	-0,34	
226	LwK 5.3	6,19	-0,060	-0,22	-0,41	
227	LwK 5.3	6,24	-0,010	-0,04	-0,07	
228	LwK 5.3	5,91	-0,340	-1,27	-2,34	
229	LwK 5.3	6,36	0,110	0,41	0,76	
230	LwK 5.3	6,50	0,250	0,93	1,72	
231	LwK 5.3	6,50	0,250	0,93	1,72	
233	LwK 5.3	6,36	0,110	0,41	0,76	
235	LwK 5.3	6,20	-0,050	-0,19	-0,34	
236	LwK 5.3	6,00	-0,250	-0,93	-1,72	
237	LwK 5.3	6,40	0,150	0,56	1,03	
238	LwK 5.3	6,36	0,110	0,41	0,76	
241	LwK 5.3	6,49	0,240	0,89	1,66	
242	LwK 5.3	6,30	0,050	0,19	0,34	
243	LwK 5.3	6,00	-0,250	-0,93	-1,72	
244	LwK 5.3	6,00	-0,250	-0,93	-1,72	
245	LwK 5.3	6,39	0,140	0,52	0,97	
246	LwK 5.3	6,10	-0,150	-0,56	-1,03	
247	LwK 5.3	6,32	0,070	0,26	0,48	
248	LwK 5.3	6,68	0,430	1,60	2,97	
249	LwK 5.3	6,30	0,050	0,19	0,34	
250	LwK 5.3	6,25	0,000	0,00	0,00	
251	LwK 5.3	6,22	-0,030	-0,11	-0,21	
254	LwK 5.3	6,40	0,150	0,56	1,03	
255	LwK 5.3	6,40	0,150	0,56	1,03	
256	LwK 5.3	6,03	-0,220	-0,82	-1,52	
257	LwK 5.3	6,27	0,020	0,07	0,14	
258	LwK 5.3	6,50	0,250	0,93	1,72	
259	LwK 5.3	5,81	-0,440	-1,64	-3,03	
260	LwK 5.3	5,70	-0,550	-2,05	-3,79	
261	LwK 5.3	5,90	-0,350	-1,30	-2,41	
262	LwK 5.3	6,20	-0,050	-0,19	-0,34	
263	LwK 5.3	6,20	-0,050	-0,19	-0,34	
264	LwK 5.3	5,93	-0,320	-1,19	-2,21	
265	LwK 5.3	6,01	-0,240	-0,89	-1,66	
266	LwK 5.3	5,83	-0,420	-1,57	-2,90	
267	LwK 5.3	5,82	-0,430	-1,60	-2,97	
268	LwK 5.3	5,60	-0,650	-2,42	-4,48	
269	LwK 5.3	6,00	-0,250	-0,93	-1,72	
270	LwK 5.3	6,11	-0,140	-0,52	-0,97	
271	LwK 5.3	6,11	-0,140	-0,52	-0,97	
273	LwK 5.3	6,05	-0,200	-0,75	-1,38	
274	LwK 5.3	6,00	-0,250	-0,93	-1,72	
275	LwK 5.3	6,17	-0,080	-0,30	-0,55	
276	LwK 5.3	6,18	-0,070	-0,26	-0,48	
277	LwK 5.3	6,12	-0,130	-0,48	-0,90	
278	LwK 5.3	5,70	-0,550	-2,05	-3,79	
280	LwK 5.3	6,20	-0,050	-0,19	-0,34	
281	LwK 5.3	5,99	-0,260	-0,97	-1,79	
282	LwK 5.3	6,22	-0,030	-0,11	-0,21	
283	LwK 5.3	6,16	-0,090	-0,34	-0,62	
284	LwK 5.3	6,20	-0,050	-0,19	-0,34	
313	LwK 5.3	6,14	-0,110	-0,41	-0,76	
322	LwK 5.3	6,16	-0,090	-0,34	-0,62	
338	LwK 5.3	6,39	0,140	0,52	0,97	
349	LwK 5.3	6,40	0,150	0,56	1,03	
363	LwK 5.3	6,20	-0,050	-0,19	-0,34	

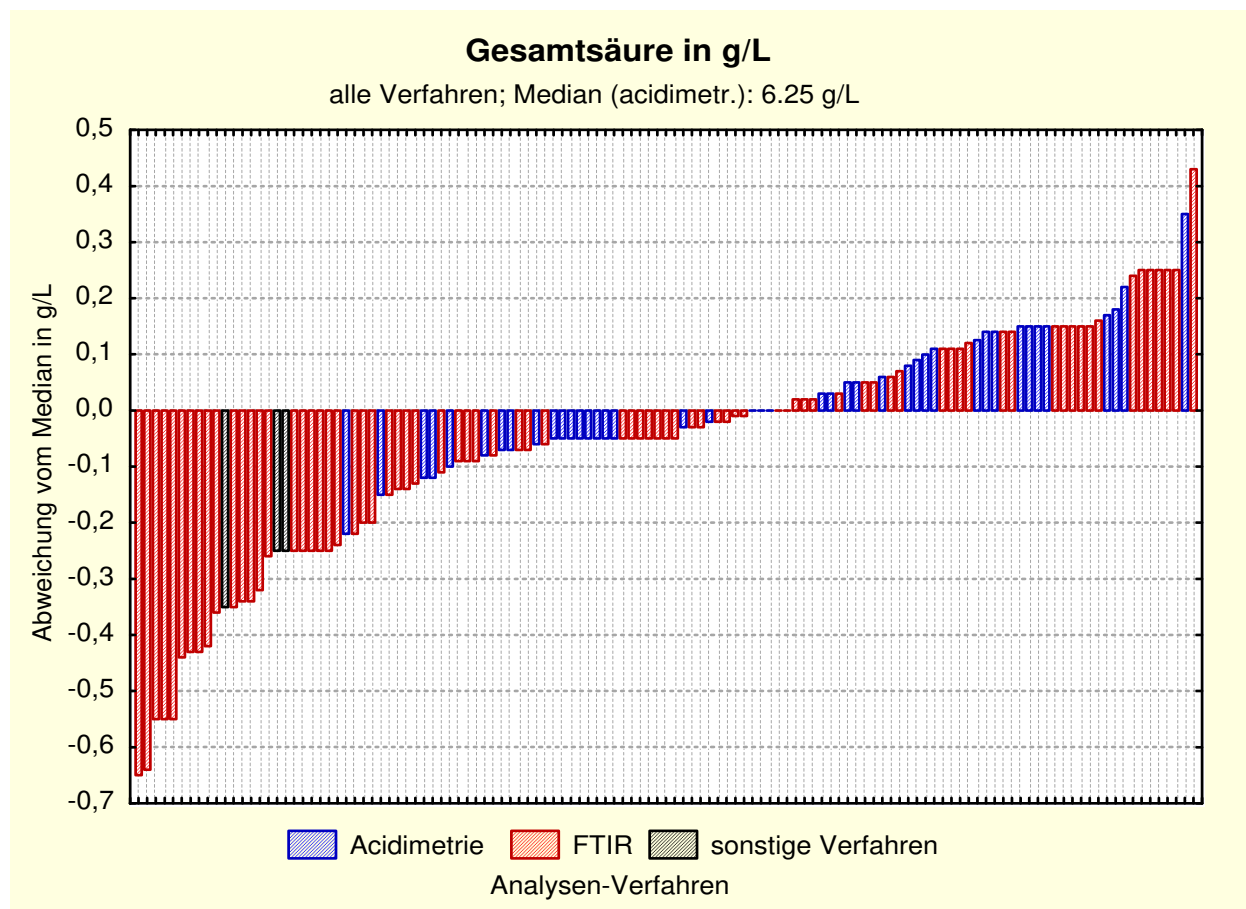
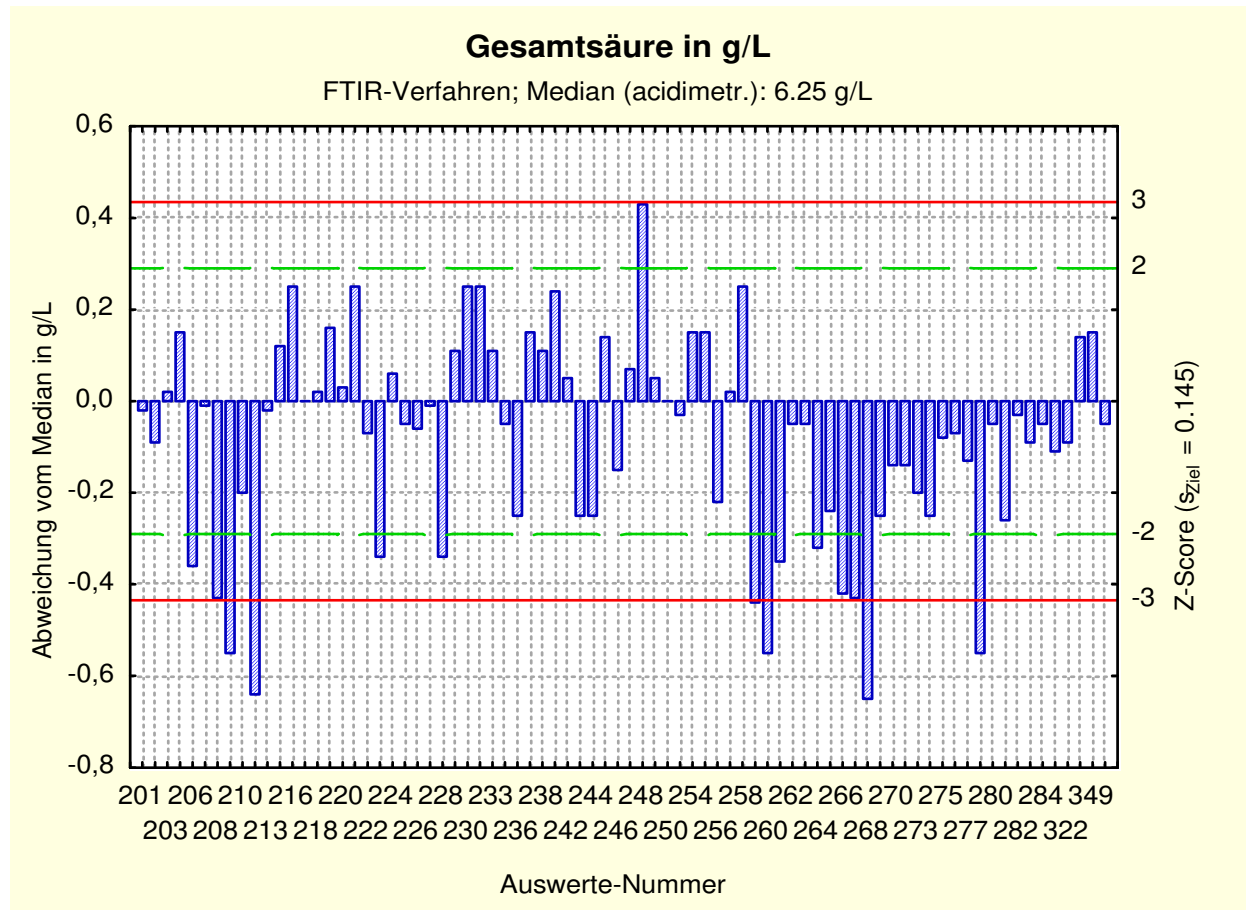
4.9.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Gesamtsäure [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	42
Minimalwert	6,03
Mittelwert	6,276
Median	6,250
Maximalwert	6,60
Standardabweichung (s_L)	0,115
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,018
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,268
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,107
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{Ü\ FTIR}$)	0,145
Horrat-Wert (s_L/s_H)	0,43
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	1,08
Quotient ($s_L/s_{Ü\ FTIR}$)	0,80
Quotient (u_M/s_H)	0,07
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,17
Quotient ($u_M/s_{Ü\ FTIR}$)	0,12

4.9.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 5.1	Potentiometrische Bestimmung n. AVV OIV-MA-AS-313-01;	25	5,400	0,174
LwK 5.2.1	Nr. 5.2, Potentiometrische Bestimmung	20	5,368	0,160
LwK 5.2.2	Nr. 5.3, Endpunktbestimmung mit Indikator	2	5,470	0,433
	herkömmliche Verfahren	47	5,390	0,176
LwK 5.3	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	87	5,551	0,233
phot.aut.	photometrisch m. Bromkresolpurpur, automatisiert	1	5,870	





4.10 Weinsäure [g/L]

4.10.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	HPLC	2,13	0,019	0,18	
03	HPLC	2,03	-0,082	-0,77	
05	photometr.	2,09	-0,021	-0,20	
06	HPLC	2,17	0,059	0,55	
07	HPLC	2,06	-0,051	-0,48	
08	IC	2,11	0,000	0,00	
11	photometr., autom.	1,98	-0,131	-1,23	
12	photometr.	2,34	0,229	2,15	
14	photometr., autom.	2,07	-0,041	-0,38	
17	photometr., autom.	1,74	-0,371	-3,48	
23	HPLC	2,15	0,039	0,37	
24	NMR	2,20	0,089	0,83	
27	photometr., autom.	2,10	-0,016	-0,15	
28	HPLC	2,21	0,099	0,93	
31	photometr., autom.	1,24	-0,871	-8,16	(**)
39	photometr., autom.	2,28	0,169	1,58	
40	HPLC	2,18	0,069	0,65	
41	photometr., autom.	2,10	-0,011	-0,10	
42	photometr., autom.	1,98	-0,130	-1,22	
43	photometr., autom.	2,11	-0,001	-0,01	
45	photometr., autom.	2,33	0,219	2,05	
50	photometr., autom.	2,02	-0,091	-0,85	
56	photometr., autom.	2,18	0,069	0,65	
57	photometr., autom.	2,25	0,139	1,30	
61	photometr., autom.	1,70	-0,411	-3,85	
68	photometr., autom.	2,15	0,039	0,37	
81	photometr.	2,57	0,459	4,30	
87	HPLC	2,10	-0,011	-0,10	
91	HPLC	2,32	0,209	1,96	
107	NMR	1,77	-0,345	-3,23	
108	NMR	1,71	-0,402	-3,77	
109	NMR	1,87	-0,244	-2,29	
110	NMR	2,19	0,083	0,78	

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

4.10.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	1,84	-0,270	-2,54	-1,19	
202	FTIR	1,64	-0,471	-4,41	-2,07	
203	FTIR	2,13	0,019	0,18	0,09	
204	FTIR	1,92	-0,191	-1,79	-0,84	
206	FTIR	1,96	-0,151	-1,41	-0,66	
208	FTIR	1,76	-0,351	-3,29	-1,54	
209	FTIR	2,10	-0,010	-0,10	-0,05	
210	FTIR	2,31	0,200	1,87	0,88	
212	FTIR	2,24	0,130	1,21	0,57	
213	FTIR	2,04	-0,071	-0,66	-0,31	
214	FTIR	2,25	0,139	1,31	0,61	
216	FTIR	1,70	-0,411	-3,85	-1,81	
217	FTIR	1,72	-0,391	-3,66	-1,72	
218	FTIR	1,90	-0,211	-1,97	-0,93	
219	FTIR	2,03	-0,081	-0,75	-0,35	
220	FTIR	1,88	-0,231	-2,16	-1,02	
221	FTIR	2,10	-0,010	-0,10	-0,05	
222	FTIR	1,84	-0,270	-2,54	-1,19	
223	FTIR	2,45	0,340	3,18	1,50	
224	FTIR	2,07	-0,041	-0,38	-0,18	
225	FTIR	1,70	-0,411	-3,85	-1,81	
226	FTIR	2,43	0,320	2,99	1,41	

Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
227	FTIR	2,19	0,079	0,75	0,35	
228	FTIR	2,20	0,090	0,84	0,39	
229	FTIR	2,05	-0,061	-0,57	-0,27	
230	FTIR	2,07	-0,041	-0,38	-0,18	
231	FTIR	2,05	-0,061	-0,57	-0,27	
233	FTIR	1,83	-0,280	-2,63	-1,24	
235	FTIR	2,15	0,039	0,37	0,17	
236	FTIR	1,70	-0,411	-3,85	-1,81	
237	FTIR	2,00	-0,111	-1,04	-0,49	
238	FTIR	1,99	-0,121	-1,13	-0,53	
241	FTIR	1,83	-0,280	-2,63	-1,24	
242	FTIR	2,00	-0,111	-1,04	-0,49	
243	FTIR	3,03	0,919	8,62	4,05	
244	FTIR	1,70	-0,411	-3,85	-1,81	
245	FTIR	2,31	0,200	1,87	0,88	
246	FTIR	2,04	-0,071	-0,66	-0,31	
247	FTIR	1,91	-0,201	-1,88	-0,88	
249	FTIR	1,80	-0,311	-2,91	-1,37	
250	FTIR	2,21	0,099	0,93	0,44	
254	FTIR	1,80	-0,311	-2,91	-1,37	
256	FTIR	1,82	-0,290	-2,72	-1,28	
257	FTIR	2,16	0,050	0,46	0,22	
258	FTIR	2,21	0,099	0,93	0,44	
259	FTIR	2,27	0,159	1,49	0,70	
260	FTIR	1,60	-0,510	-4,78	-2,25	
261	FTIR	1,70	-0,410	-3,85	-1,81	
263	FTIR	0,80	-1,311	-12,28	-5,77	(*)
264	FTIR	2,12	0,010	0,09	0,04	
265	FTIR	2,31	0,200	1,87	0,88	
266	FTIR	1,68	-0,431	-4,03	-1,90	
267	FTIR	2,03	-0,081	-0,75	-0,35	
268	FTIR	2,24	0,130	1,21	0,57	
269	FTIR	1,80	-0,311	-2,91	-1,37	
270	FTIR	2,37	0,260	2,43	1,14	
271	FTIR	1,96	-0,151	-1,41	-0,66	
273	FTIR	1,74	-0,371	-3,47	-1,63	
274	FTIR	2,20	0,090	0,84	0,39	
275	FTIR	1,90	-0,211	-1,97	-0,93	
276	FTIR	2,09	-0,021	-0,19	-0,09	
277	FTIR	2,12	0,010	0,09	0,04	
278	FTIR	2,20	0,090	0,84	0,39	
280	FTIR	2,40	0,289	2,71	1,28	
281	FTIR	2,66	0,550	5,15	2,42	
282	FTIR	2,15	0,039	0,37	0,17	
283	FTIR	2,15	0,036	0,34	0,16	
322	FTIR	2,10	-0,010	-0,10	-0,05	
338	FTIR	1,73	-0,381	-3,57	-1,68	
349	FTIR	1,70	-0,411	-3,85	-1,81	
363	FTIR	1,00	-1,111	-10,41	-4,89	

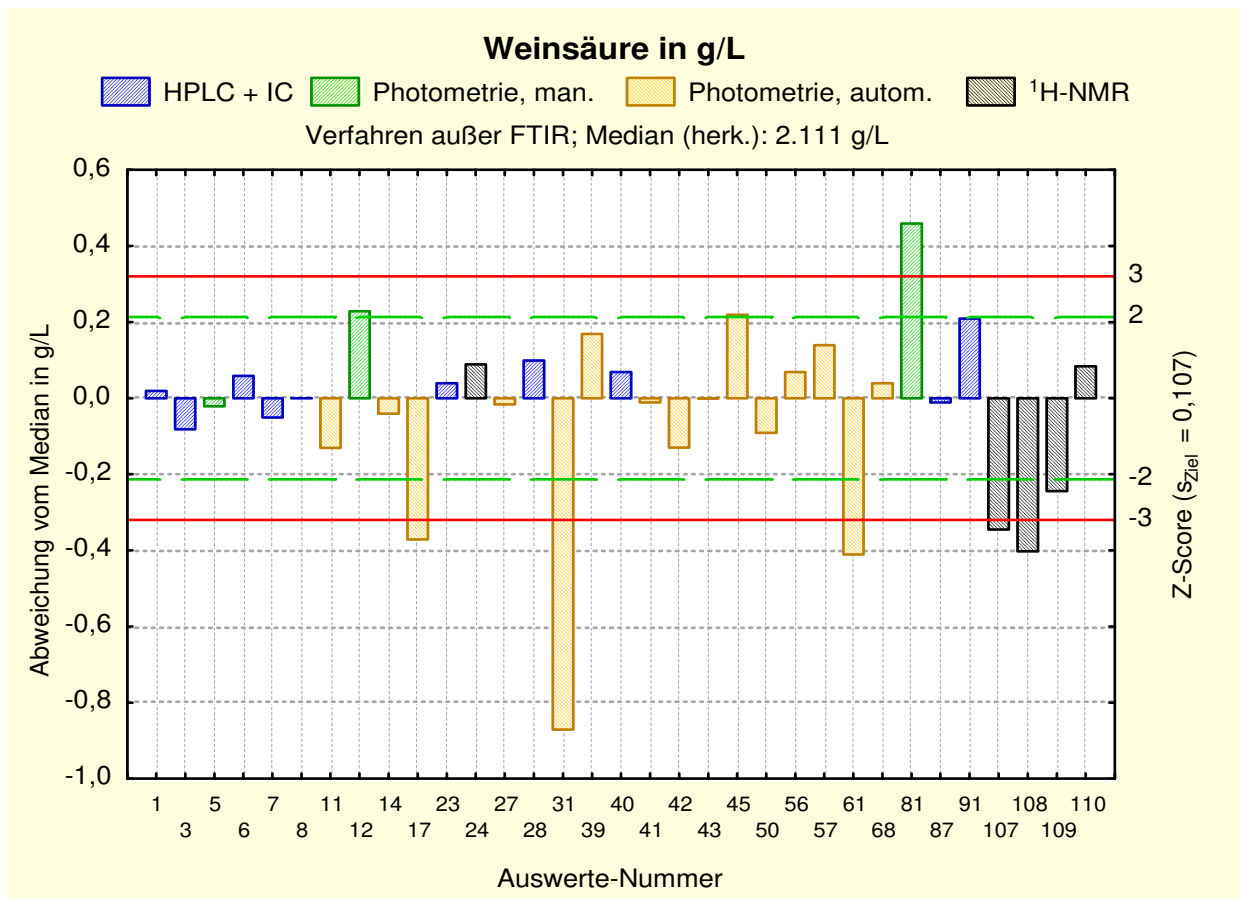
(*) Dieser Wert weicht um mehr als 50 % vom Median der herkömmlich bestimmten Werte ab.

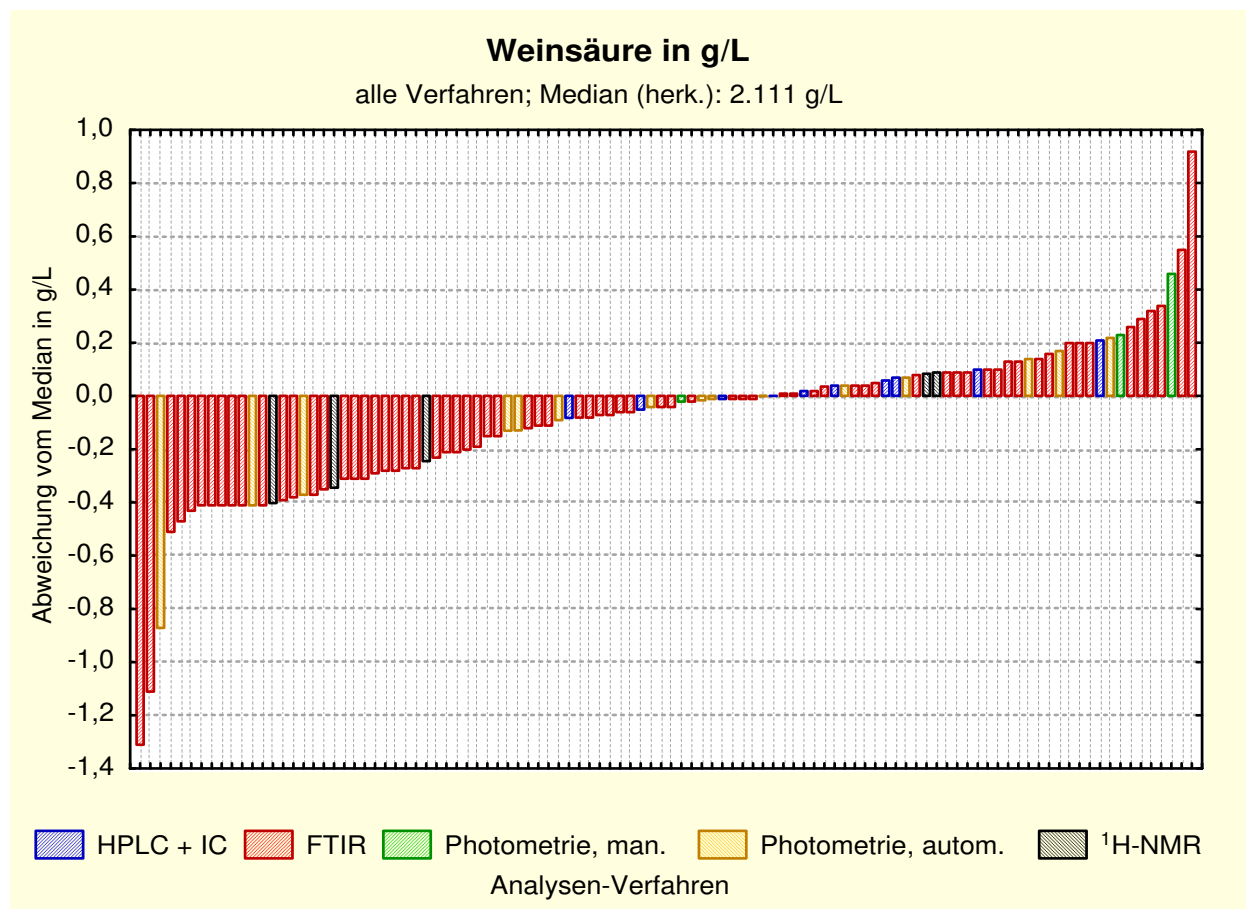
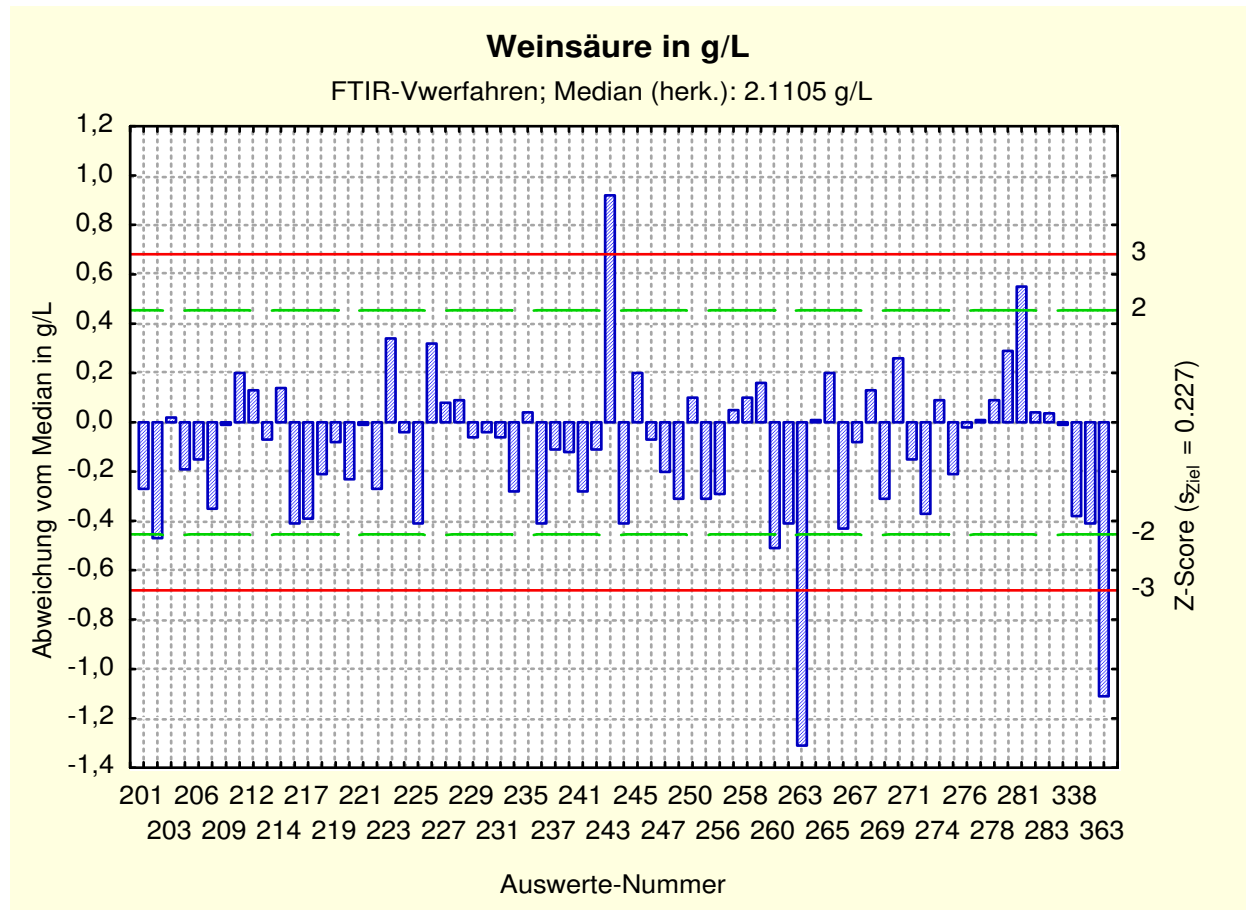
4.10.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Weinsäure [g/L]	HPLC + IC alle Daten	herkömml. Verfahren alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	10	28	27
Minimalwert	2,03	1,24	1,70
Mittelwert	2,146	2,096	2,128
Median	2,140	2,111	2,111
Maximalwert	2,32	2,57	2,57
Standardabweichung (s_L)	0,082	0,239	0,173
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,026	0,045	0,033
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,108	0,107	0,107
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)			
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,227	0,227	0,227
Horrat-Wert (s_L/s_H)	0,76	2,24	1,63
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)			
Quotient ($s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,36	1,05	0,76
Quotient (u_M/s_H)	0,24	0,42	0,31
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)			
Quotient ($u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,11	0,20	0,15

4.10.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	9	2,145	0,082
IC	Ionenchromatographie	1	2,111	
	HPLC + IC	10	2,140	0,077
photometr.	photometrisch n. Rebelein	3	2,333	0,272
phot.autom.	photometrisch, automatisiert (Vanadat)	15	2,048	0,222
	alle herkömmlichen Verfahren	28	2,124	0,144
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	71	2,008	0,261
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	5	1,947	0,267





4.11 Flüchtige Säure [g/L]

4.11.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Bewertungsbasis: Werte mit SO₂-Korrektur und experimentelle Zielstandardabweichung

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	Halbmikro SO2 unber.	1,050	0,0045	0,08	
05	OIV SO2-korr.	1,010	-0,0355	-0,60	
06	Gerhardt SO2 korr.	0,995	-0,0505	-0,86	
07	OIV SO2-korr.	1,085	0,0390	0,66	
08	OIV SO2-korr.	0,925	-0,1205	-2,05	
10	OIV SO2-korr.	1,026	-0,0195	-0,33	
11	OIV SO2-korr.	0,986	-0,0595	-1,01	
12	Halbmikro SO2 unber.	0,860	-0,1855	-3,16	
22	Gerhardt SO2 korr.	1,060	0,0145	0,25	
23	Halbmikro SO2 unber.	1,080	0,0345	0,59	
28	Gerhardt SO2 ausg.	1,075	0,0295	0,50	
29	Halbmikro SO2 unber.	1,105	0,0595	1,01	
31	Gerhardt SO2 korr.	0,900	-0,1455	-2,48	
38	Halbmikro SO2 korr.	0,826	-0,2195	-3,74	
39	Gerhardt SO2 korr.	1,060	0,0145	0,25	
40	Gerhardt SO2 korr.	1,041	-0,0045	-0,08	
41	Gerhardt SO2 ausg.	1,054	0,0085	0,14	
42	Gerhardt SO2 ausg.	1,090	0,0445	0,76	
45	Gerhardt SO2 korr.	1,090	0,0445	0,76	
49	Gerhardt SO2 korr.	1,111	0,0655	1,11	
55	Gerhardt SO2 korr.	1,070	0,0245	0,42	
56	Rentschler mod. korr.	1,016	-0,0295	-0,50	
57	Büchi SO2 korr.	1,095	0,0493	0,84	
60	Wädenswil SO2 korr.	0,710	-0,3355	-5,71	(**)
63	Halbmikro SO2 unber.	1,000	-0,0455	-0,77	
65	Wädenswil SO2 korr.	0,860	-0,1855	-3,16	
67	Wädenswil SO2 korr.	0,860	-0,1855	-3,16	
68	Gerhardt SO2 korr.	0,880	-0,1655	-2,82	
84	Halbmikro SO2 unber.	1,070	0,0245	0,42	
86	OIV SO2-korr.	1,122	0,0765	1,30	
87	OIV SO2-korr.	1,046	0,0000	0,00	
103	spezial_1	1,061	0,0155	0,26	

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

4.11.2 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	0,830	-0,2133	-3,64	-2,39	
202	FTIR	1,280	0,2368	4,04	2,66	
203	FTIR	0,933	-0,1102	-1,88	-1,24	
204	FTIR	1,120	0,0768	1,31	0,86	
206	FTIR	0,930	-0,1132	-1,93	-1,27	
208	FTIR	0,802	-0,2412	-4,11	-2,71	
209	FTIR	1,000	-0,0433	-0,74	-0,49	
210	FTIR	0,925	-0,1182	-2,02	-1,33	
212	FTIR	1,000	-0,0433	-0,74	-0,49	
214	FTIR	1,200	0,1567	2,67	1,76	
216	FTIR	0,920	-0,1232	-2,10	-1,38	
217	FTIR	0,520	-0,5232	-8,92	-5,87	(*)
218	FTIR	0,490	-0,5533	-9,43	-6,21	(*)
219	FTIR	0,690	-0,3533	-6,02	-3,96	
220	FTIR	0,700	-0,3433	-5,85	-3,85	
221	FTIR	0,890	-0,1533	-2,61	-1,72	
222	FTIR	0,710	-0,3333	-5,68	-3,74	
223	FTIR	0,820	-0,2233	-3,81	-2,51	
225	FTIR	0,730	-0,3133	-5,34	-3,52	
226	FTIR	0,890	-0,1533	-2,61	-1,72	

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

Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
227	FTIR	0,815	-0,2283	-3,89	-2,56	
228	FTIR	0,970	-0,0733	-1,25	-0,82	
229	FTIR	0,850	-0,1933	-3,30	-2,17	
230	FTIR	0,790	-0,2532	-4,32	-2,84	
231	FTIR	0,931	-0,1122	-1,91	-1,26	
233	FTIR	1,080	0,0368	0,63	0,41	
235	FTIR	0,650	-0,3932	-6,71	-4,41	
236	FTIR	0,690	-0,3533	-6,02	-3,96	
237	FTIR	0,850	-0,1933	-3,30	-2,17	
238	FTIR	0,800	-0,2432	-4,15	-2,73	
241	FTIR	0,800	-0,2432	-4,15	-2,73	
242	FTIR	1,130	0,0867	1,48	0,97	
243	FTIR	1,080	0,0368	0,63	0,41	
244	FTIR	1,060	0,0168	0,29	0,19	
245	FTIR	0,880	-0,1633	-2,78	-1,83	
246	FTIR	1,060	0,0168	0,29	0,19	
247	FTIR	1,180	0,1367	2,33	1,53	
249	FTIR	0,760	-0,2833	-4,83	-3,18	
250	FTIR	0,950	-0,0933	-1,59	-1,05	
251	FTIR	0,970	-0,0733	-1,25	-0,82	
254	FTIR	0,750	-0,2933	-5,00	-3,29	
255	FTIR	0,770	-0,2732	-4,66	-3,07	
256	FTIR	0,940	-0,1033	-1,76	-1,16	
257	FTIR	0,780	-0,2632	-4,49	-2,95	
258	FTIR	0,590	-0,4533	-7,73	-5,09	(**)
260	FTIR	0,690	-0,3533	-6,02	-3,96	
261	FTIR	0,590	-0,4533	-7,73	-5,09	(**)
262	FTIR	0,960	-0,0833	-1,42	-0,93	
263	FTIR	0,760	-0,2833	-4,83	-3,18	
264	FTIR	1,070	0,0268	0,46	0,30	
265	FTIR	0,780	-0,2632	-4,49	-2,95	
266	FTIR	0,770	-0,2732	-4,66	-3,07	
267	FTIR	0,950	-0,0933	-1,59	-1,05	
268	FTIR	1,070	0,0268	0,46	0,30	
269	FTIR	0,590	-0,4533	-7,73	-5,09	(**)
270	FTIR	0,740	-0,3033	-5,17	-3,40	
271	FTIR	0,670	-0,3732	-6,37	-4,19	
273	FTIR	0,810	-0,2332	-3,98	-2,62	
274	FTIR	0,980	-0,0633	-1,08	-0,71	
275	FTIR	0,620	-0,4233	-7,22	-4,75	
276	FTIR	0,950	-0,0933	-1,59	-1,05	
277	FTIR	0,950	-0,0933	-1,59	-1,05	
278	FTIR	0,560	-0,4832	-8,24	-5,42	(**)
280	FTIR	0,840	-0,2033	-3,47	-2,28	
281	FTIR	0,850	-0,1933	-3,30	-2,17	
282	FTIR	0,757	-0,2863	-4,88	-3,21	
284	FTIR	1,100	0,0568	0,97	0,64	
322	FTIR	0,910	-0,1332	-2,27	-1,50	
338	FTIR	0,970	-0,0733	-1,25	-0,82	
349	FTIR	1,030	-0,0132	-0,23	-0,15	
363	FTIR	0,780	-0,2632	-4,49	-2,95	

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

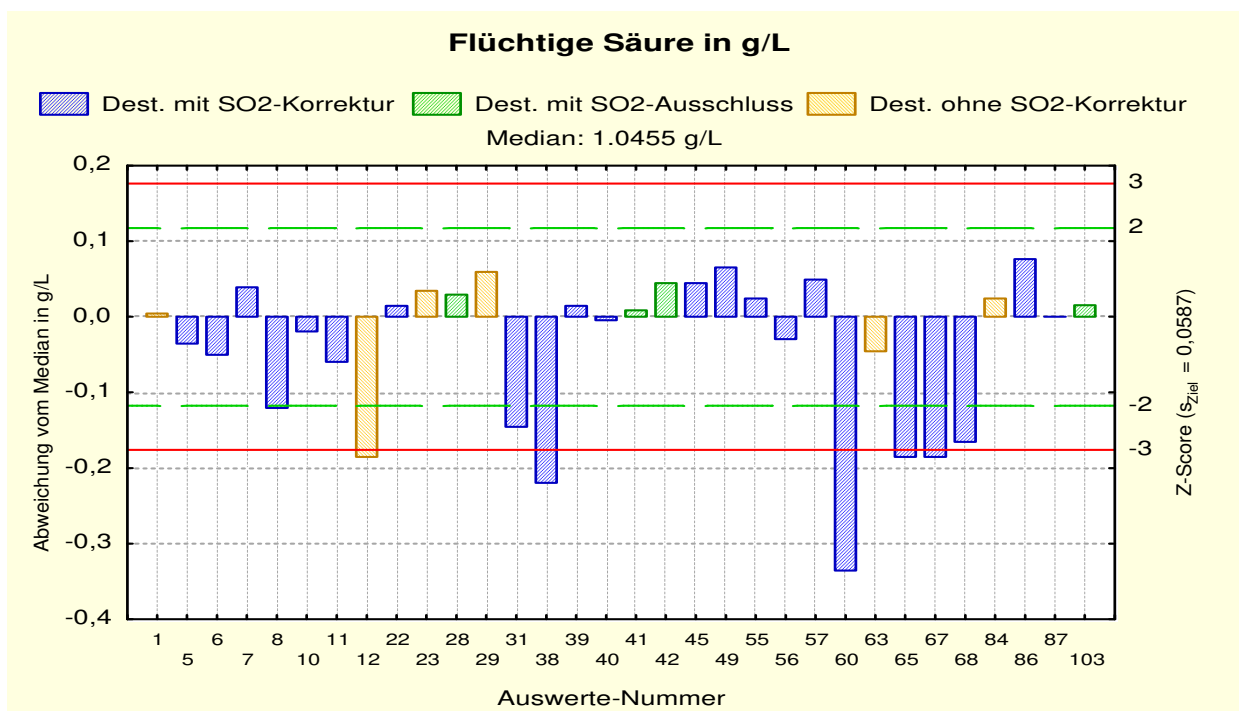
4.11.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Destillationsverfahren

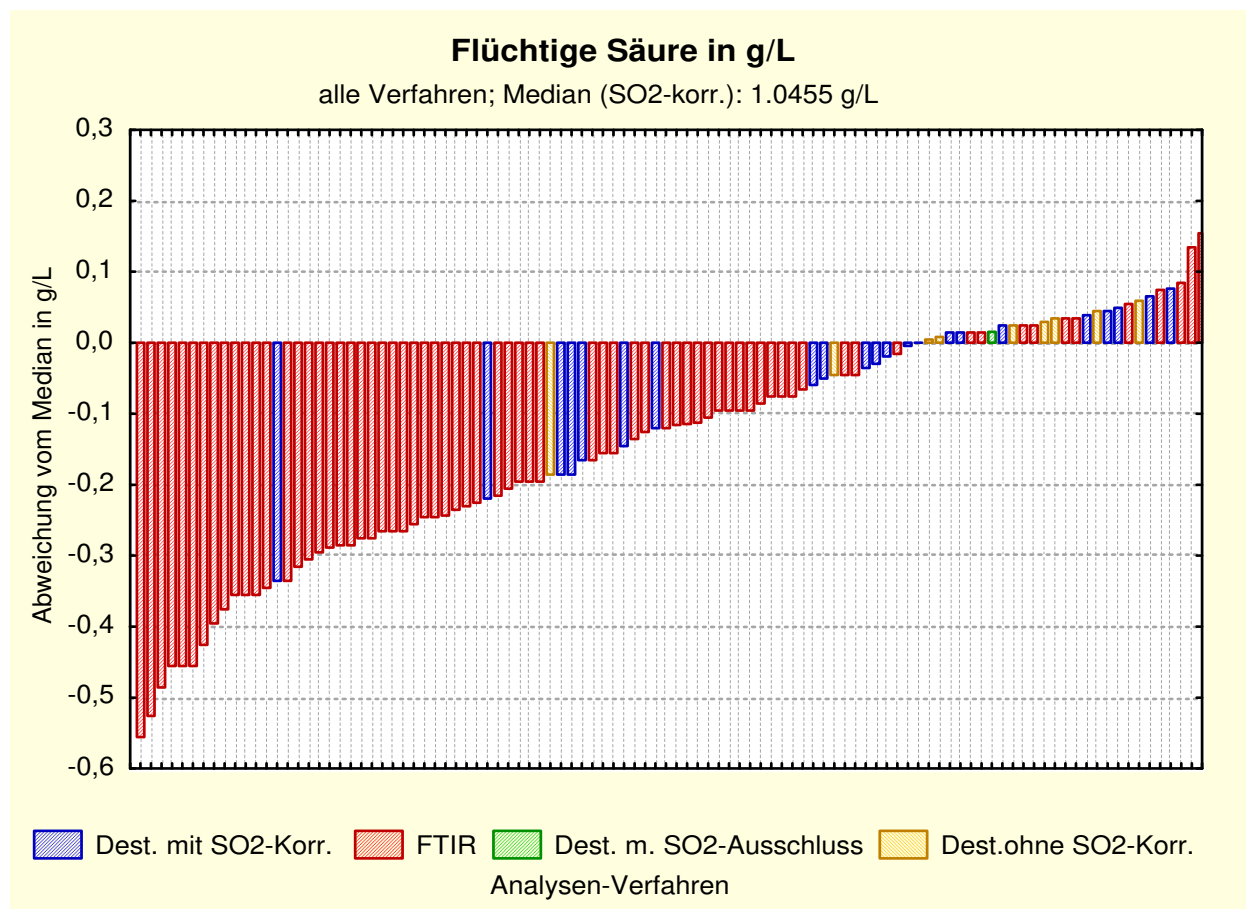
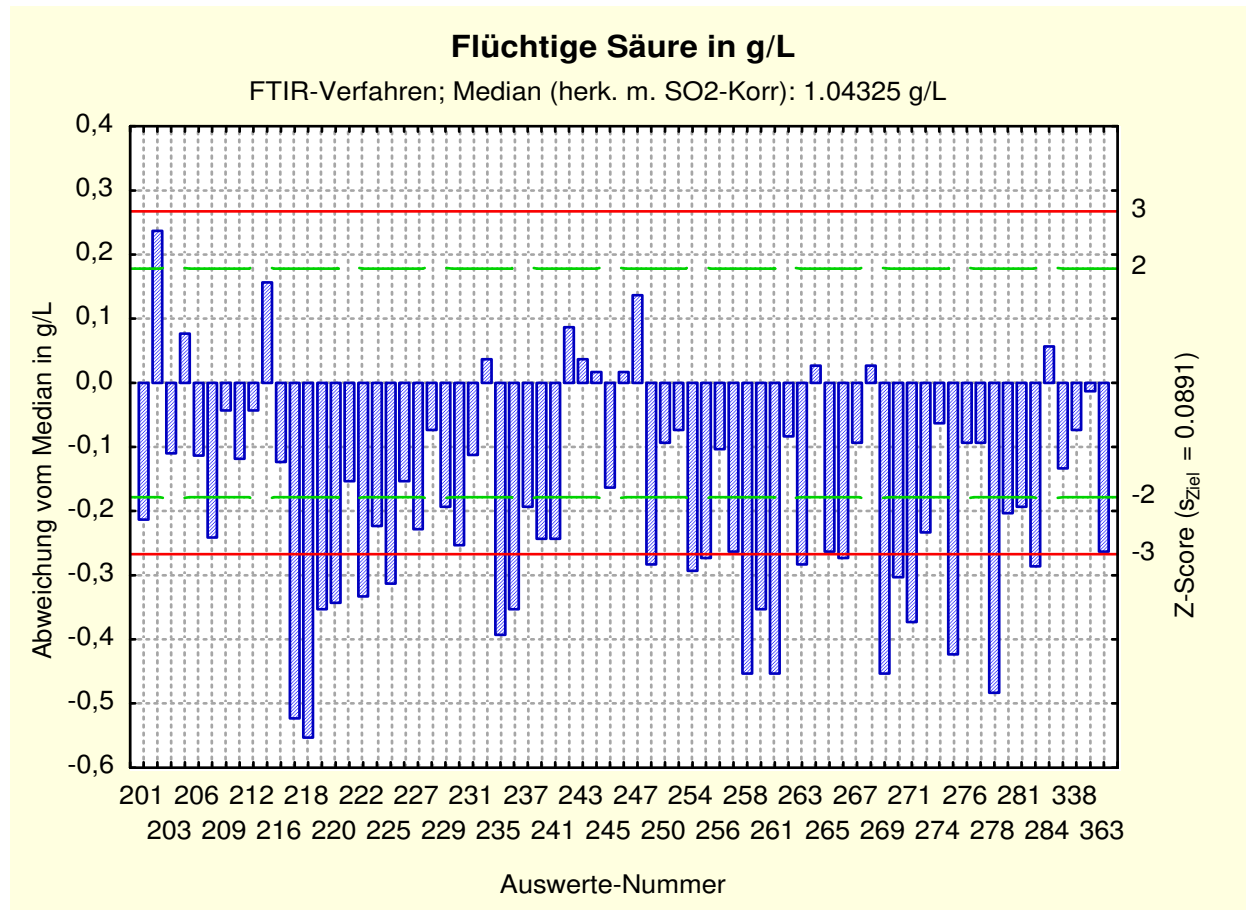
Ergebnisse für Flüchtige Säure in g/L nur Destillationsverfahren mit SO ₂ -Korrektur	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	26	25
Minimalwert	0,710	0,826
Mittelwert	1,0020	1,0137
Median	1,0433	1,0455
Maximalwert	1,122	1,122
Standardabweichung (s _L)	0,104	0,087
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,020	0,017
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,059	0,059
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp herk.}) ^{*)}	(0,029)	(0,029)
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{Ü FTIR})	0,089	0,089
Horvat-Wert (s _L /s _H)	1,78	1,49
Quotient (s _L /s _{exp herk.}) ^{*)}	(3,59)	(3,00)
Quotient (s _L /s _{Ü FTIR})	1,17	0,98
Quotient (u _M /s _H)	0,35	0,30
Quotient (u _M /s _{exp herk.}) ^{*)}	(0,69)	(0,59)
Quotient (u _M /s _{Ü FTIR})	0,23	0,19

^{*)} Die Laboregebnisse wurden mit der Zielstandardabweichung s_{Horwitz} bewertet.

4.11.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
Halbmikro SO2 unber.	Halbmikrodestillation n. AVV SO ₂ -Einfluss nicht berücksichtigt	6	1,039	0,0722
Halbmikro SO2 korr.	SO ₂ -Einfluss korrigiert	1	0,826	
Wädenswil SO2 korr.	Wädenswil-Verfahren SO ₂ -Einfluss nicht berücksichtigt	3	0,811	0,0964
Gerhardt SO2 ausg.	Destillationsapparat Gerhardt SO ₂ -Einfluss ausgeschlossen	3	1,073	0,0205
Gerhardt SO2 korr.	SO ₂ -Einfluss korrigiert	9	1,024	0,0908
OIV SO2-korr.	OIV-MA-AS-313-02 einschl. SO ₂ -Korrektur	7	1,028	0,0706
Rentschler mod. korr.	Verfahren n. Rentschler mod. Dr. Nilles SO ₂ -Einfluss korrigiert	1	1,016	
spezial_1	Verfahrensbeschreibung Teil 1 Abschnitt 6.15.2	1	1,061	
Büchi SO2 korr.	Destillationsapparat Büchi, SO ₂ korrigiert	1	1,095	
	Destillationsverfahren mit SO ₂ -Korrektur	26	1,011	0,0971
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	71	0,862	0,1755





4.12 Acetat (als Essigsäure) [g/L]**4.12.1 Herkömmliche und FTIR-Laboreergebnisse, Teil 1**

Bewertungsbasis: enzymatisch, automatisiert (verbindliche Z-Score für diese Werte)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	0,940	-0,070	-1,23	
03	HPLC	0,925	-0,085	-1,49	
06	enzymat. autom.	0,920	-0,090	-1,58	
07	enzymat. autom.	0,965	-0,045	-0,79	
12	enzymat. autom.	0,990	-0,020	-0,35	
14	enzymat. autom.	1,000	-0,010	-0,18	
16	enzymat. autom.	1,170	0,160	2,80	
17	enzymat. autom.	1,040	0,030	0,53	
20	enzymat. autom.	0,910	-0,100	-1,75	
24	NMR	0,940	-0,070	-1,23	
27	enzymat. autom.	1,000	-0,010	-0,18	
31	enzymat. autom.	1,120	0,110	1,93	
39	enzymat. autom.	1,020	0,010	0,18	
40	HPLC	0,980	-0,030	-0,53	
42	enzymat. autom.	0,990	-0,020	-0,35	
43	enzymat. autom.	1,100	0,090	1,58	
45	enzymat. autom.	1,010	0,000	0,00	
50	enzymat. autom.	1,010	0,000	0,00	
53	enzymat. autom.	1,010	0,000	0,00	
56	enzymat. autom.	1,040	0,030	0,53	
61	enzymat. autom.	1,080	0,070	1,23	
68	enzymat. autom.	0,980	-0,030	-0,53	
88	HPLC	0,922	-0,088	-1,54	
107	NMR	0,970	-0,040	-0,70	
108	NMR	0,980	-0,030	-0,53	
109	NMR	0,924	-0,086	-1,50	
110	NMR	1,078	0,068	1,19	
210	FTIR	0,970	-0,040	-0,70	
213	FTIR	0,760	-0,250	-4,38	
224	FTIR	1,020	0,010	0,18	
242	FTIR	0,960	-0,050	-0,88	
245	FTIR	0,880	-0,130	-2,28	
259	FTIR	0,720	-0,290	-5,08	(**)
260	FTIR	0,720	-0,290	-5,08	(**)
274	FTIR	0,980	-0,030	-0,53	
283	FTIR	0,794	-0,216	-3,79	

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

Zeilen in grauer Schrift dienen nur der Information. Gültige Z-Score für diese Laboregebnisse im Abschnitt.4.12.2.

4.12.2 Herkömmliche und FTIR-Laborergebnisse, Teil 2Bewertungsbasis: HPLC, enzymatisch, manuell, ¹H-Kernresonanzspektroskopie

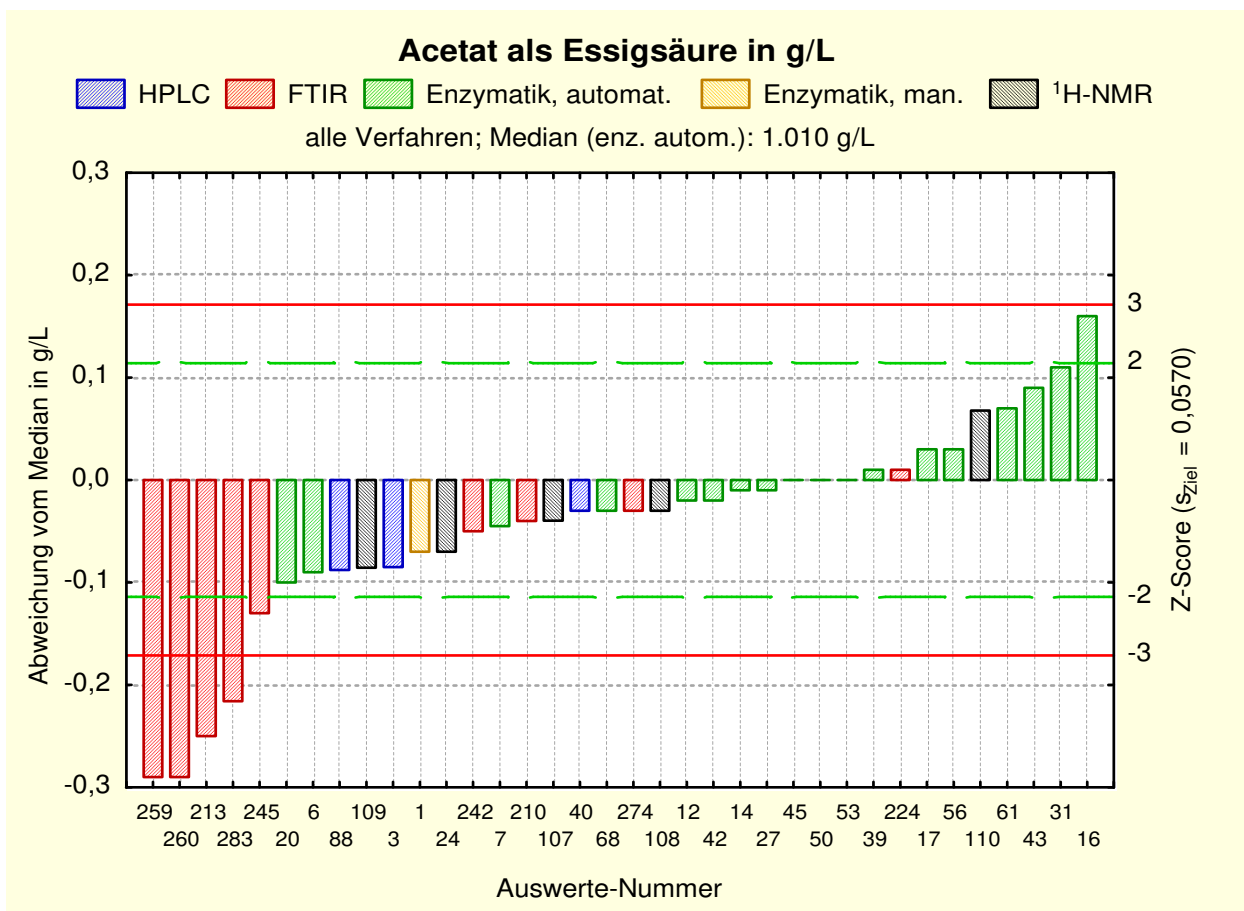
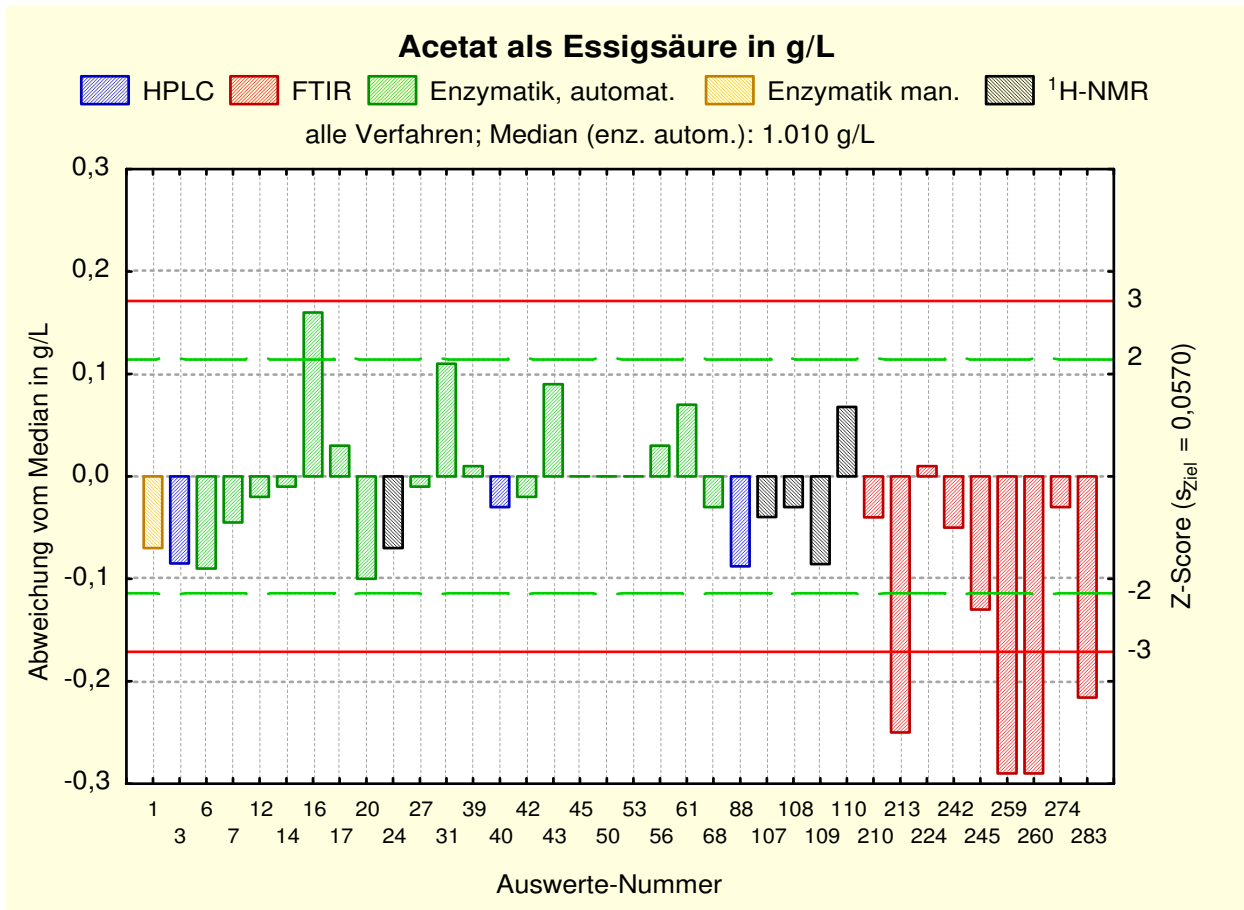
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	0,940	0,000	0,00	
03	HPLC	0,925	-0,015	-0,28	
24	NMR	0,940	0,000	0,00	
40	HPLC	0,980	0,040	0,75	
88	HPLC	0,922	-0,018	-0,34	
107	NMR	0,970	0,030	0,56	
108	NMR	0,980	0,040	0,75	
109	NMR	0,924	-0,016	-0,29	
110	NMR	1,078	0,138	2,57	
210	FTIR	0,970	0,030	0,56	
213	FTIR	0,760	-0,180	-3,35	
224	FTIR	1,020	0,080	1,49	
242	FTIR	0,960	0,020	0,37	
245	FTIR	0,880	-0,060	-1,12	
259	FTIR	0,720	-0,220	-4,10	
260	FTIR	0,720	-0,220	-4,10	
274	FTIR	0,980	0,040	0,75	
283	FTIR	0,794	-0,146	-2,72	

4.12.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Acetat (als Essigsäure) [g/L]	enzymatisch, automat. alle Daten	HPLC, enz.man., ¹ H-NMR alle Daten
Gültige Werte	18	9
Minimalwert	0,910	0,922
Mittelwert	1,020	0,962
Median	1,010	0,940
Maximalwert	1,170	1,078
Standardabweichung (s _L)	0,065	0,049
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,015	0,016
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,057	0,054
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp} herk.)		
Zielstandardabweichung, experimentell (s _Ü FTIR)		
Horvat-Wert (s _L /s _H)	1,15	0,92
Quotient (s _L /s _{exp} herk.)		
Quotient (s _L /s _Ü FTIR)		
Quotient (u _M /s _H)	0,27	0,31
Quotient (u _M /s _{exp} herk.)		
Quotient (u _M /s _Ü FTIR)		

4.12.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert	18	1,0162	0,0634
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	3	0,9388	0,0301
enzymat. Hand	enzymatisch, manuell	1	0,9400	
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie (¹ H-NMR)	5	0,9780	0,0668
	HPLC, enzymatisch manuell + ¹ H-NMR	9	0,9542	0,0346
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	9	0,8671	0,1363



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	0,970	0,000	0,00	0,00	
02	enzymat. Hand	0,952	-0,018	-0,33	-0,42	
03	HPLC	0,927	-0,043	-0,78	-1,01	
06	HPLC	0,970	0,000	0,00	0,00	
07	enzymat. autom.	1,000	0,030	0,54	0,71	
23	HPLC	0,880	-0,090	-1,63	-2,12	
24	NMR	0,910	-0,060	-1,09	-1,41	
28	HPLC	0,980	0,010	0,18	0,24	
40	HPLC	1,070	0,100	1,81	2,35	
87	HPLC	0,920	-0,050	-0,91	-1,18	
91	HPLC	0,980	0,010	0,18	0,24	
107	NMR	0,962	-0,008	-0,15	-0,20	
108	NMR	0,979	0,009	0,17	0,22	
109	NMR	0,937	-0,033	-0,59	-0,77	
110	NMR	1,059	0,089	1,61	2,08	

4.13.2 Laborergebnisse L-Äpfelsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enz.(L-) Hand	0,940	-0,035	-0,63	-0,82	
02	enz.(L-) Hand	0,902	-0,073	-1,32	-1,71	
05	enz.(L-), autom.	0,970	-0,005	-0,09	-0,12	
06	enz.(L-), autom.	0,970	-0,005	-0,09	-0,12	
07	enz.(L-), autom.	1,000	0,025	0,45	0,59	
08	enz.(L-), autom.	1,041	0,066	1,19	1,55	
11	enz.(L-), autom.	0,857	-0,118	-2,13	-2,77	
12	enz.(L-), autom.	1,020	0,045	0,81	1,05	
14	enz.(L-), autom.	0,980	0,005	0,09	0,12	
16	enz.(L-), autom.	1,060	0,085	1,54	1,99	
17	enz.(L-), autom.	0,700	-0,275	-4,97	-6,45	(**)
20	enz.(L-), autom.	0,960	-0,015	-0,27	-0,35	
27	enz.(L-), autom.	0,960	-0,015	-0,27	-0,35	
31	enz.(L-), autom.	1,045	0,070	1,26	1,64	
39	enz.(L-), autom.	1,030	0,055	0,99	1,29	
41	enz.(L-), autom.	0,965	-0,010	-0,18	-0,23	
42	enz.(L-), autom.	1,070	0,095	1,72	2,23	
43	enz.(L-), autom.	1,000	0,025	0,45	0,59	
45	enz.(L-), autom.	0,964	-0,011	-0,20	-0,26	
50	enz.(L-), autom.	1,050	0,075	1,35	1,76	
55	enz.(L-), autom.	1,000	0,025	0,45	0,59	
56	enz.(L-), autom.	0,930	-0,045	-0,81	-1,05	
57	enz.(L-), autom.	0,920	-0,055	-0,99	-1,29	
61	enz.(L-), autom.	1,290	0,315	5,69	7,38	(**)
63	enz.(L-) Hand	0,943	-0,032	-0,58	-0,75	
68	enz.(L-), autom.	1,020	0,045	0,81	1,05	
81	enz.(L-) Hand	0,943	-0,032	-0,57	-0,74	
87	enz.(L-), autom.	0,980	0,005	0,09	0,12	
89	enz.(L-) Hand	1,030	0,055	0,99	1,29	
105	k. A.	0,960	-0,015	-0,27	-0,35	

(**) Diese Werte wurden 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	1,340	0,370	6,71	1,70	
202	FTIR	1,500	0,530	9,61	2,43	
203	FTIR	0,802	-0,168	-3,05	-0,77	
204	FTIR	0,470	-0,500	-9,07	-2,29	
206	FTIR	0,910	-0,060	-1,09	-0,28	

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

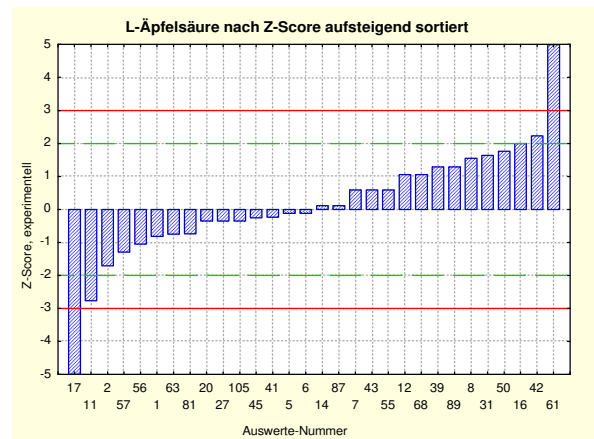
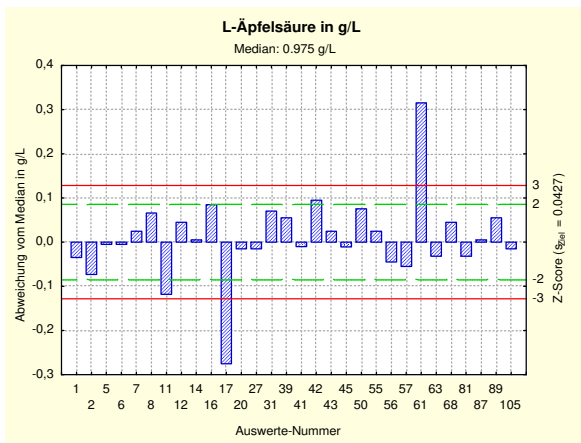
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
208	FTIR	0,910	-0,060	-1,09	-0,28	
209	FTIR	0,800	-0,170	-3,08	-0,78	
210	FTIR	1,260	0,290	5,26	1,33	
212	FTIR	0,790	-0,180	-3,27	-0,83	
213	FTIR	1,300	0,330	5,99	1,51	
214	FTIR	0,780	-0,190	-3,45	-0,87	
216	FTIR	1,600	0,630	11,43	2,89	
217	FTIR	1,390	0,420	7,62	1,93	
218	FTIR	1,120	0,150	2,72	0,69	
219	FTIR	1,370	0,400	7,26	1,83	
220	FTIR	1,210	0,240	4,35	1,10	
221	FTIR	1,200	0,230	4,17	1,06	
222	FTIR	1,210	0,240	4,35	1,10	
223	FTIR	1,100	0,130	2,36	0,60	
224	FTIR	0,970	0,000	0,00	0,00	
225	FTIR	1,400	0,430	7,80	1,97	
226	FTIR	0,750	-0,220	-3,99	-1,01	
227	FTIR	0,820	-0,150	-2,72	-0,69	
228	FTIR	1,100	0,130	2,36	0,60	
229	FTIR	1,210	0,240	4,35	1,10	
230	FTIR	0,940	-0,030	-0,54	-0,14	
231	FTIR	1,280	0,310	5,62	1,42	
233	FTIR	1,430	0,460	8,34	2,11	
235	FTIR	1,280	0,310	5,62	1,42	
237	FTIR	0,900	-0,070	-1,27	-0,32	
238	FTIR	1,250	0,280	5,08	1,28	
241	FTIR	1,460	0,490	8,89	2,25	
242	FTIR	1,100	0,130	2,36	0,60	
243	FTIR	0,550	-0,420	-7,62	-1,93	
244	FTIR	1,500	0,530	9,61	2,43	
245	FTIR	0,770	-0,200	-3,63	-0,92	
246	FTIR	1,200	0,230	4,17	1,06	
247	FTIR	1,150	0,180	3,27	0,83	
249	FTIR	1,200	0,230	4,17	1,06	
250	FTIR	0,970	0,000	0,00	0,00	
254	FTIR	1,300	0,330	5,99	1,51	
255	FTIR	1,100	0,130	2,36	0,60	
256	FTIR	0,170	-0,800	-14,51	-3,67	
257	FTIR	1,950	0,980	17,78	4,50	
258	FTIR	1,100	0,130	2,36	0,60	
259	FTIR	1,450	0,480	8,71	2,20	
260	FTIR	0,200	-0,770	-13,97	-3,53	
261	FTIR	1,300	0,330	5,99	1,51	
263	FTIR	1,000	0,030	0,54	0,14	
264	FTIR	1,880	0,910	16,51	4,17	
265	FTIR	0,750	-0,220	-3,99	-1,01	
266	FTIR	1,320	0,350	6,35	1,61	
267	FTIR	1,320	0,350	6,35	1,61	
268	FTIR	1,110	0,140	2,54	0,64	
269	FTIR	1,300	0,330	5,99	1,51	
270	FTIR	1,480	0,510	9,25	2,34	
271	FTIR	1,170	0,200	3,63	0,92	
273	FTIR	0,740	-0,230	-4,17	-1,06	
274	FTIR	1,200	0,230	4,17	1,06	
275	FTIR	0,920	-0,050	-0,91	-0,23	
276	FTIR	0,810	-0,160	-2,90	-0,73	
277	FTIR	0,890	-0,080	-1,45	-0,37	
278	FTIR	1,300	0,330	5,99	1,51	
280	FTIR	0,900	-0,070	-1,27	-0,32	
281	FTIR	0,740	-0,230	-4,17	-1,06	
282	FTIR	0,900	-0,070	-1,27	-0,32	
283	FTIR	0,975	0,005	0,09	0,02	
322	FTIR	0,340	-0,630	-11,43	-2,89	
338	FTIR	0,800	-0,170	-3,08	-0,78	
349	FTIR	0,900	-0,070	-1,27	-0,32	
363	FTIR	0,700	-0,270	-4,90	-1,24	

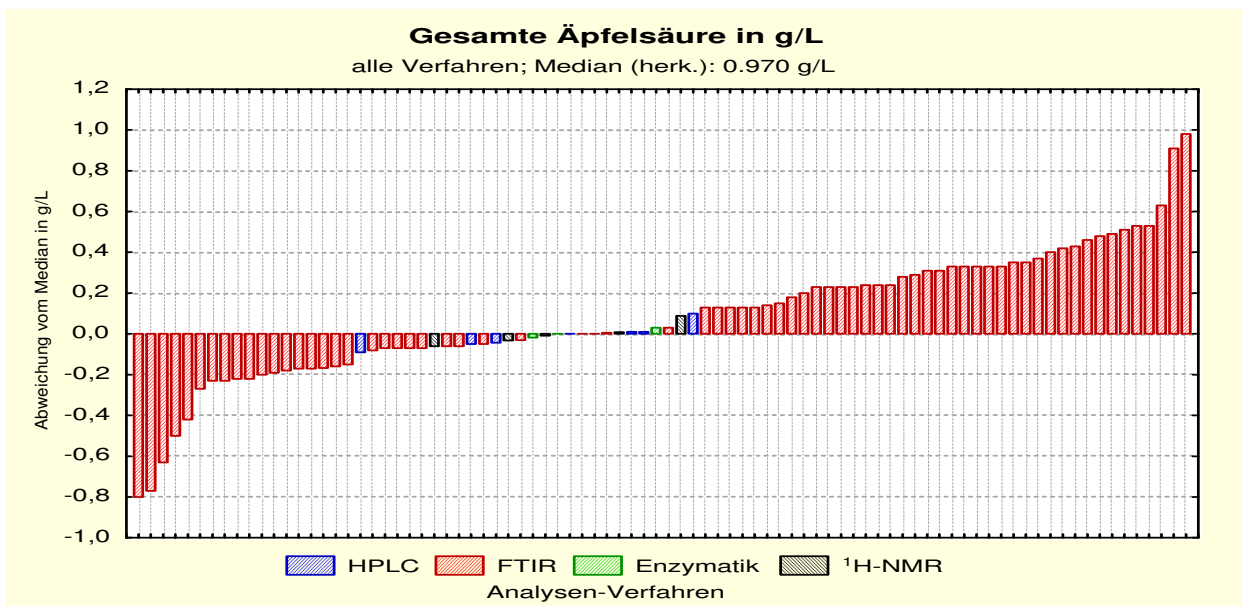
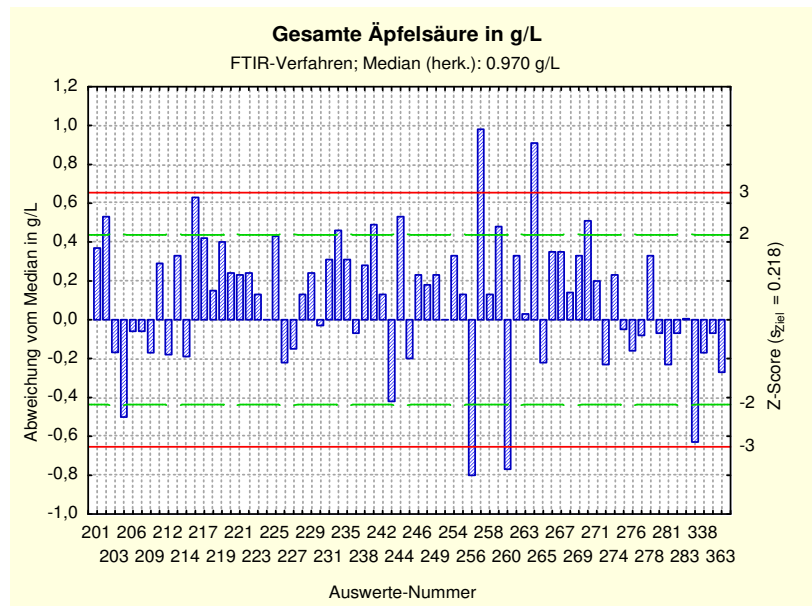
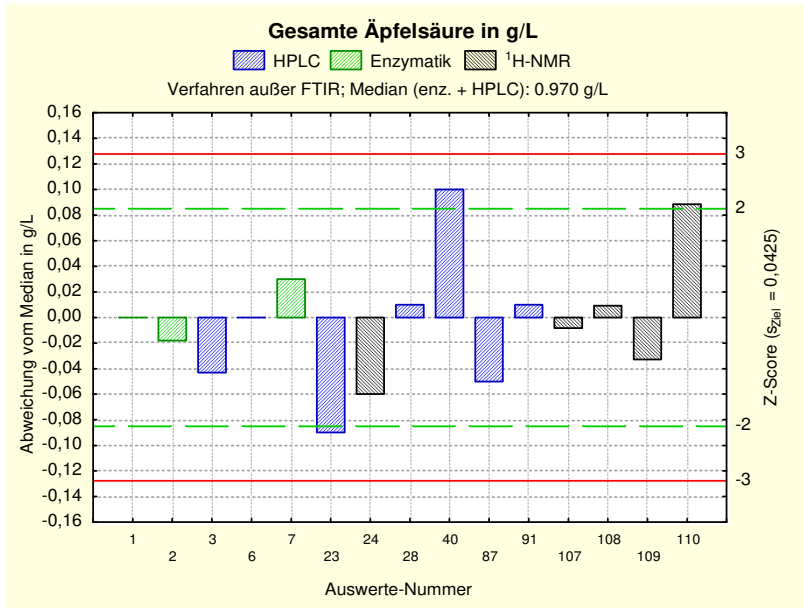
4.13.4 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse in g/L	Gesamte Äpfelsäure		L-Äpfelsäure	
	alle Daten	alle Daten	ber. Daten	
Gültige Werte	10	30	28	
Minimalwert	0,88	0,70	0,86	
Mittelwert	0,965	0,983	0,983	
Median	0,970	0,975	0,975	
Maximalwert	1,07	1,29	1,07	
Standardabweichung (s_L)	0,051	0,092	0,051	
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,016	0,017	0,010	
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,055	0,055	0,055	
Zielstandardabweichung, experimentell (s_{exp})	0,043	0,043	0,043	
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\dot{U}_{FTIR}}$)	0,218			
Horvat-Wert (s_L/s_H)	0,93	1,66	0,92	
Quotient (s_L/s_{exp})	1,20	2,15	1,19	
Quotient ($s_L/s_{\dot{U}_{FTIR}}$)	0,23			
Quotient (u_M/s_H)	0,29	0,30	0,17	
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,38	0,39	0,23	
Quotient ($u_M/s_{\dot{U}_{FTIR}}$)	0,07			

4.13.5 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	7	0,959	0,064
enzymat. autom.	D- und L-Äpfelsäure, automatisiert	1	1,000	
enzymat. Hand	D- und L-Äpfelsäure, manuell	2	0,961	0,014
	herkömmliche Verfahren Gesamte Äpfelsäure	10	0,962	0,046
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	71	1,083	0,307
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	5	0,969	0,063
enz.(L-), autom.	enzymatisch nur L-Form, automatisiert	24	0,9929	0,0562
enz.(L-), Hand	enzymatisch nur L-Form, manuell	5	0,9516	0,0527
k. A.	Verfahrensangabe fehlt	1	0,9600	
	alle Verfahren L-Äpfelsäure	30	0,9837	0,0580





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	3,17	0,080	0,54	
03	HPLC	2,85	-0,244	-1,65	
05	enzymat. autom.	2,92	-0,170	-1,15	
06	enzymat. autom.	3,09	-0,003	-0,02	
07	HPLC	3,15	0,059	0,40	
08	enzymat. autom.	3,25	0,156	1,06	
11	enzymat. autom.	3,37	0,280	1,90	
20	enzymat. autom.	3,09	0,000	0,00	
23	HPLC	2,57	-0,520	-3,53	
24	NMR	2,84	-0,250	-1,69	
28	HPLC	2,58	-0,510	-3,46	
63	enzymat. Hand	3,28	0,188	1,27	
68	enzymat. autom.	2,95	-0,140	-0,95	
81	enzymat. Hand	2,89	-0,201	-1,36	
86	enzymat. Hand	3,17	0,079	0,54	
91	HPLC	3,09	0,000	0,00	
107	NMR	2,72	-0,366	-2,48	
108	NMR	2,75	-0,337	-2,28	
109	NMR	2,60	-0,488	-3,31	
110	NMR	2,95	-0,140	-0,95	

4.14.2 Laborergebnisse L-Milchsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enz.(L-) Hand	2,05	-0,008	-0,08	-0,07	
04	enz.(L-) autom.	2,13	0,072	0,69	0,66	
05	enz.(L-) autom.	1,94	-0,118	-1,13	-1,08	
06	enz.(L-) autom.	2,04	-0,014	-0,13	-0,13	
08	enz.(L-) autom.	2,25	0,187	1,79	1,71	
11	enz.(L-) autom.	2,43	0,372	3,56	3,40	
12	enz.(L-) autom.	2,17	0,112	1,07	1,02	
14	enz.(L-) autom.	2,26	0,198	1,90	1,81	
16	enz.(L-) autom.	1,84	-0,217	-2,08	-1,98	
17	enz.(L-) autom.	1,90	-0,158	-1,51	-1,44	
20	enz.(L-) autom.	2,04	-0,018	-0,17	-0,16	
27	enz.(L-) autom.	2,02	-0,034	-0,33	-0,31	
28	enz.(L-) autom.	2,12	0,062	0,59	0,57	
31	enz.(L-) autom.	1,73	-0,332	-3,18	-3,04	
39	enz.(L-) autom.	1,97	-0,088	-0,84	-0,80	
42	enz.(L-) autom.	2,20	0,142	1,36	1,30	
43	enz.(L-) autom.	2,07	0,012	0,11	0,11	
50	enz.(L-) autom.	1,01	-1,048	-10,04	-9,58	(*)
55	enz.(L-) autom.	2,20	0,142	1,36	1,30	
56	enz.(L-) autom.	1,97	-0,088	-0,84	-0,80	
57	enz.(L-) autom.	2,23	0,172	1,65	1,57	
61	enz.(L-) autom.	1,10	-0,958	-9,17	-8,76	(**)
63	enz.(L-) Hand	2,18	0,121	1,16	1,11	
68	enz.(L-) autom.	1,93	-0,128	-1,23	-1,17	
81	enz.(L-) Hand	1,97	-0,086	-0,82	-0,79	
86	enz.(L-) Hand	2,07	0,008	0,08	0,07	

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

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

4.14.3 FTIR-Laborergebnisse Gesamte Milchsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	3,16	0,070	0,47	0,33	
202	FTIR	2,91	-0,180	-1,22	-0,86	
203	FTIR	2,79	-0,301	-2,04	-1,44	

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
204	FTIR	1,95	-1,140	-7,73	-5,45	(**)
206	FTIR	3,51	0,420	2,85	2,01	
208	FTIR	3,06	-0,030	-0,20	-0,14	
209	FTIR	3,10	0,010	0,07	0,05	
210	FTIR	2,92	-0,170	-1,15	-0,81	
212	FTIR	2,20	-0,890	-6,03	-4,26	
213	FTIR	2,71	-0,380	-2,58	-1,82	
214	FTIR	2,68	-0,410	-2,78	-1,96	
216	FTIR	2,40	-0,690	-4,68	-3,30	
217	FTIR	2,45	-0,640	-4,34	-3,06	
218	FTIR	2,37	-0,720	-4,88	-3,44	
219	FTIR	3,18	0,090	0,61	0,43	
220	FTIR	3,04	-0,050	-0,34	-0,24	
221	FTIR	2,30	-0,790	-5,36	-3,78	
222	FTIR	3,14	0,050	0,34	0,24	
223	FTIR	2,76	-0,330	-2,24	-1,58	
224	FTIR	2,66	-0,430	-2,92	-2,06	
225	FTIR	2,80	-0,290	-1,97	-1,39	
226	FTIR	2,45	-0,640	-4,34	-3,06	
227	FTIR	1,98	-1,110	-7,53	-5,31	(**)
228	FTIR	2,60	-0,490	-3,32	-2,34	
229	FTIR	2,69	-0,400	-2,71	-1,91	
230	FTIR	2,43	-0,660	-4,47	-3,16	
231	FTIR	3,24	0,150	1,02	0,72	
233	FTIR	2,89	-0,200	-1,36	-0,96	
235	FTIR	3,42	0,330	2,24	1,58	
237	FTIR	2,40	-0,690	-4,68	-3,30	
238	FTIR	2,37	-0,720	-4,88	-3,44	
241	FTIR	2,88	-0,210	-1,42	-1,00	
242	FTIR	2,30	-0,790	-5,36	-3,78	
243	FTIR	2,62	-0,470	-3,19	-2,25	
245	FTIR	2,58	-0,510	-3,46	-2,44	
246	FTIR	2,83	-0,260	-1,76	-1,24	
247	FTIR	2,36	-0,730	-4,95	-3,49	
249	FTIR	2,90	-0,190	-1,29	-0,91	
250	FTIR	2,82	-0,270	-1,83	-1,29	
254	FTIR	2,80	-0,290	-1,97	-1,39	
255	FTIR	2,80	-0,290	-1,97	-1,39	
256	FTIR	2,70	-0,390	-2,64	-1,87	
257	FTIR	2,90	-0,190	-1,29	-0,91	
258	FTIR	2,20	-0,890	-6,03	-4,26	
259	FTIR	2,38	-0,710	-4,81	-3,40	
260	FTIR	2,20	-0,890	-6,03	-4,26	
261	FTIR	2,80	-0,290	-1,97	-1,39	
263	FTIR	3,60	0,510	3,46	2,44	
264	FTIR	3,00	-0,090	-0,61	-0,43	
265	FTIR	2,22	-0,870	-5,90	-4,16	
266	FTIR	1,68	-1,410	-9,56	-6,75	(**)
267	FTIR	2,66	-0,430	-2,92	-2,06	
268	FTIR	1,47	-1,620	-10,98	-7,75	(*)
269	FTIR	2,50	-0,590	-4,00	-2,82	
270	FTIR	3,32	0,230	1,56	1,10	
271	FTIR	2,93	-0,160	-1,08	-0,77	
273	FTIR	2,41	-0,680	-4,61	-3,25	
274	FTIR	2,60	-0,490	-3,32	-2,34	
275	FTIR	2,70	-0,390	-2,64	-1,87	
276	FTIR	2,26	-0,830	-5,63	-3,97	
277	FTIR	2,39	-0,700	-4,75	-3,35	
280	FTIR	3,05	-0,040	-0,27	-0,19	
281	FTIR	1,88	-1,210	-8,20	-5,79	(**)
282	FTIR	2,38	-0,710	-4,81	-3,40	
283	FTIR	2,26	-0,826	-5,60	-3,95	
322	FTIR	2,74	-0,350	-2,37	-1,67	
338	FTIR	2,52	-0,570	-3,86	-2,73	
349	FTIR	2,30	-0,790	-5,36	-3,78	
363	FTIR	2,70	-0,390	-2,64	-1,87	

Erläuterungen zur vorseitigen Tabelle:

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

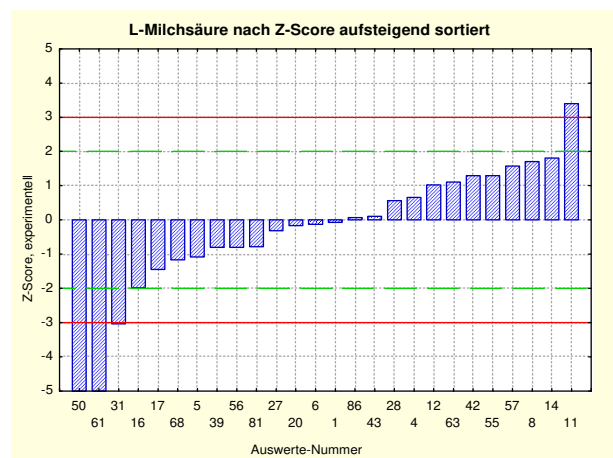
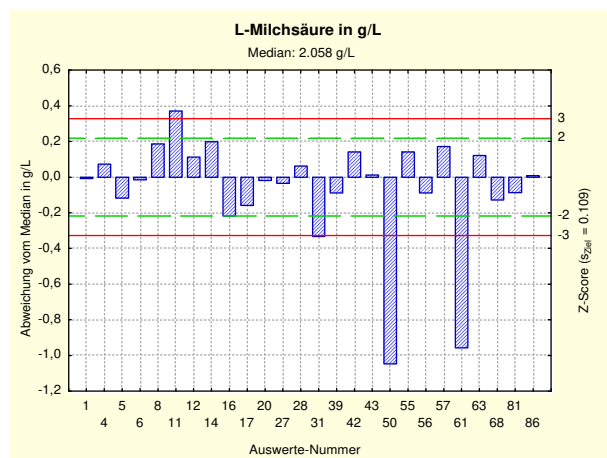
(**) Diese Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der herkömmlichen Werte ab.

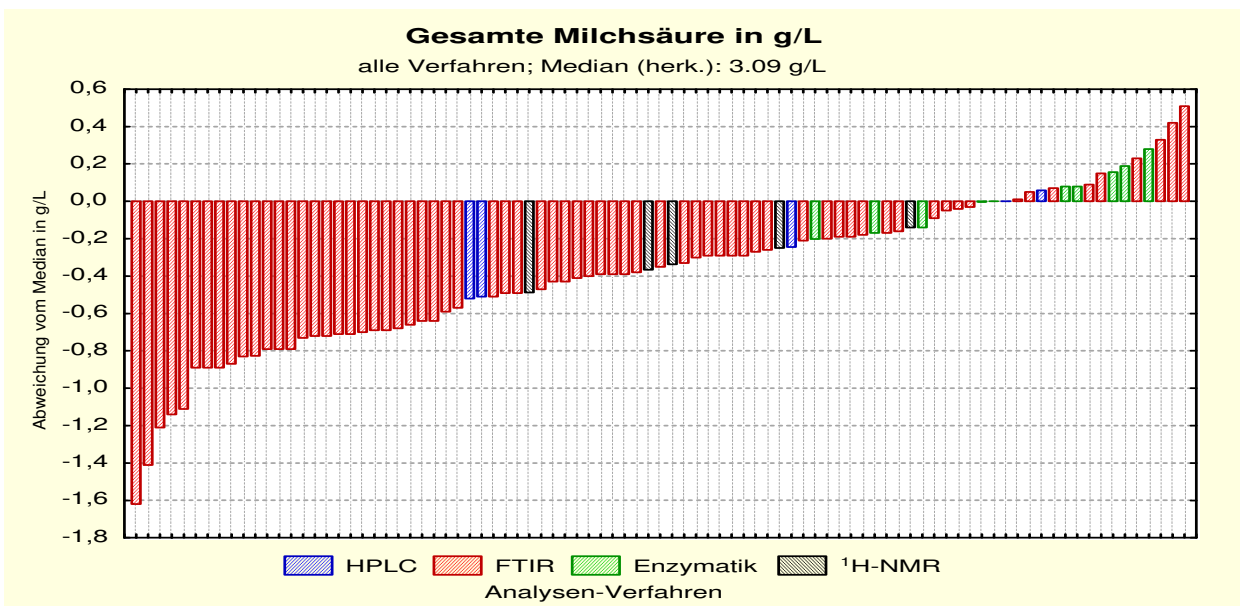
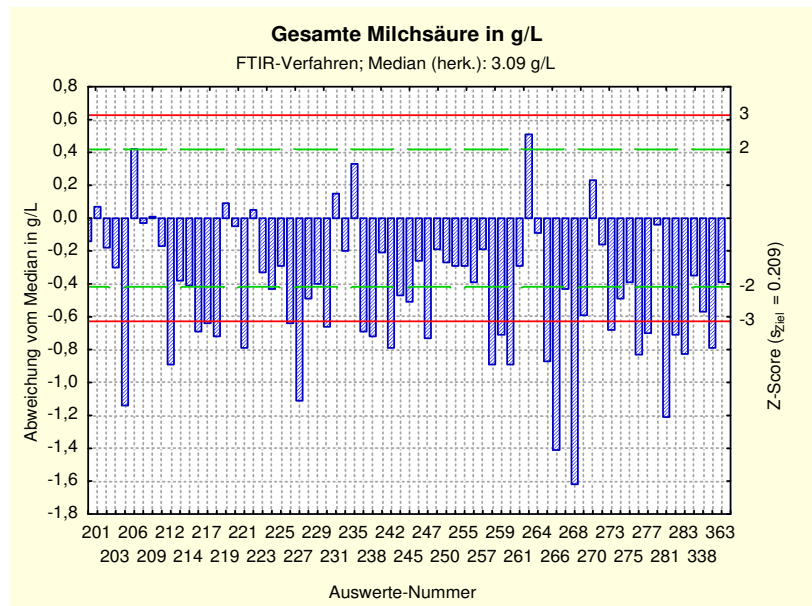
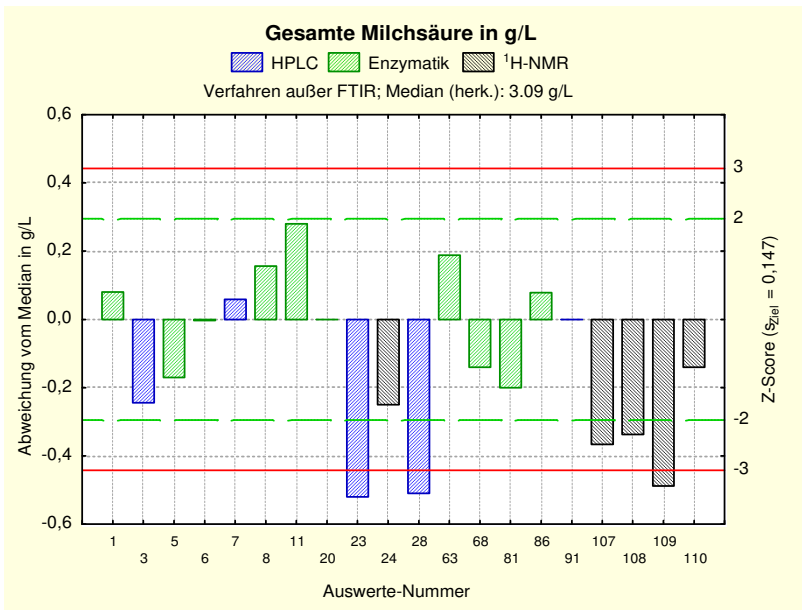
4.14.4 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse in g/L:	Gesamte	L- Milchsäure	
	alle Daten	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	15	25	24
Minimalwert	2,57	1,10	1,73
Mittelwert	3,027	2,032	2,071
Median	3,090	2,050	2,058
Maximalwert	3,37	2,43	2,43
Standardabweichung (s _L)	0,235	0,246	0,155
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,061	0,049	0,032
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,147	0,104	0,104
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp})		0,109	0,109
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{FTIR})	0,209		
Horrat-Wert (s _L /s _H)	1,59	2,37	1,48
Quotient (s _L /s _{exp})		2,26	1,42
Quotient (s _L /s _{FTIR})	1,12		
Quotient (u _M /s _H)	0,41	0,47	0,30
Quotient (u _M /s _{exp herk.})		0,45	0,29
Quotient (u _M /s _{FTIR})	0,29		

4.14.5 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	5	2,847	0,310
enzymat. autom.	D- und L-Milchsäure, enzymatisch, automatisiert	6	3,111	0,196
enzymat. Hand	D- und L-Milchsäure, enzymatisch manuell	4	3,135	0,170
	herkömmliche Verfahren Ges. Milchsäure	15	3,043	0,230
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	69	2,647	0,386
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	5	2,773	0,146
enz.(L-) autom.	enzymatisch nur L-Form, automatisiert	22	2,037	0,203
enz.(L-) Hand	enzymatisch nur L-Form, manuell	4	2,063	0,089
	alle Verfahren L-Milchsäure	26	2,047	0,174





4.15 Reduktone [mg/L]

4.15.1 Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	Glyoxal/Stärke	8,0	-8,52	-4,92	
06	Acetaldehyd/potent.	2,0	-14,52	-8,38	(*)
16	Glyoxal/potentiometr.	13,0	-3,52	-2,03	
17	Glyoxal/Stärke	21,0	4,48	2,59	
19	Glyoxal/Stärke	30,0	13,48	7,78	(*)
20	Glyoxal/potentiometr.	12,3	-4,22	-2,44	
22	Glyoxal/Stärke	20,0	3,48	2,01	
23	Glyoxal/potentiometr.	20,0	3,48	2,01	
24	Glyoxal/Stärke	20,0	3,48	2,01	
25	Glyoxal/Stärke	14,0	-2,52	-1,45	
27	Glyoxal/potentiometr.	9,5	-7,02	-4,05	
28	Propionaldehyd/Stärke	21,0	4,48	2,59	
31	Glyoxal/Stärke	13,0	-3,52	-2,03	
35	Glyoxal/Stärke	17,0	0,48	0,28	
36	Propionaldehyd/Stärke	22,0	5,48	3,16	
37	Glyoxal/Stärke	16,0	-0,52	-0,30	
38	Glyoxal/potentiometr.	18,1	1,58	0,91	
39	Glyoxal/potentiometr.	5,0	-11,52	-6,65	(*)
40	Glyoxal/potentiometr.	10,4	-6,12	-3,53	
41	Glyoxal/Stärke	10,0	-6,52	-3,76	
42	Glyoxal/Stärke	15,0	-1,52	-0,88	
43	Glyoxal/Stärke	19,0	2,48	1,43	
45	Propionaldehyd/Stärke	17,0	0,48	0,28	
49	k. A.	7,0	-9,52	-5,49	(*)
50	Glyoxal/Stärke	21,0	4,48	2,59	
56	Glyoxal/MTT	7,2	-9,32	-5,38	(*)
60	Glyoxal/potentiometr.	11,0	-5,52	-3,19	
61	photometr.	14,0	-2,52	-1,45	
63	Glyoxal/Stärke	19,0	2,48	1,43	
64	Glyoxal/Stärke	14,0	-2,52	-1,45	
65	Glyoxal/potentiometr.	17,0	0,48	0,28	
67	Glyoxal/potentiometr.	8,0	-8,52	-4,92	
68	Glyoxal/potentiometr.	16,0	-0,48	-0,28	
70	Glyoxal/Stärke	26,0	9,48	5,47	(*)
71	Glyoxal/Stärke	15,0	-1,52	-0,88	
75	Glyoxal/Stärke	22,0	5,48	3,16	
77	Glyoxal/potentiometr.	13,0	-3,52	-2,03	
78	Glyoxal/potentiometr.	19,0	2,48	1,43	
81	Acetaldehyd/Stärke	30,0	13,48	7,78	(*)
92	Glyoxal/Stärke	17,0	0,48	0,28	
105	Glyoxal/Stärke	18	1,48	0,85	

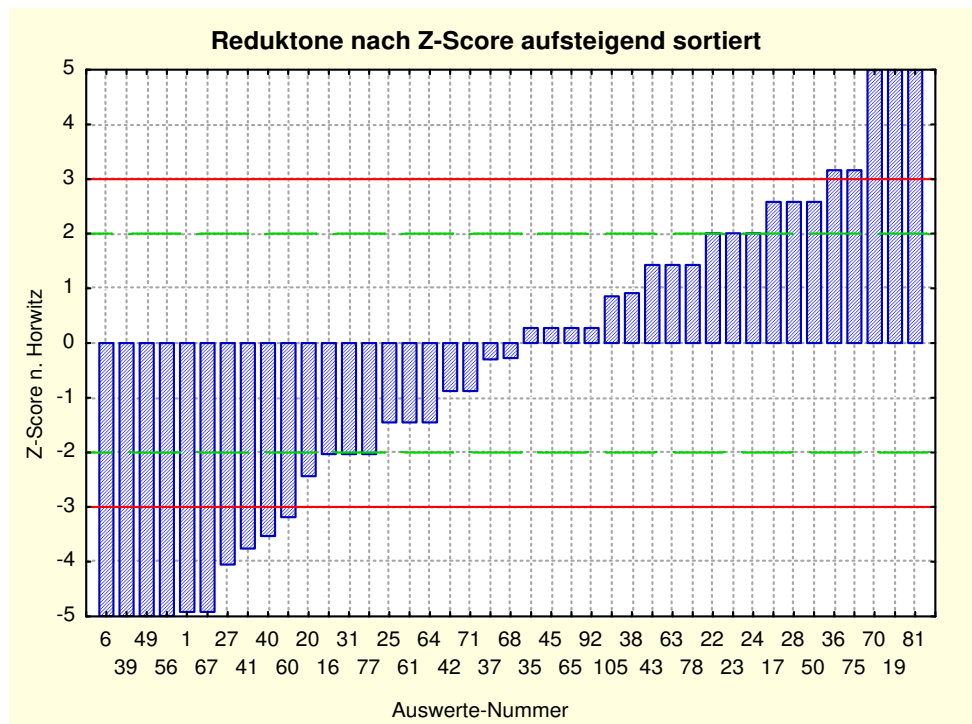
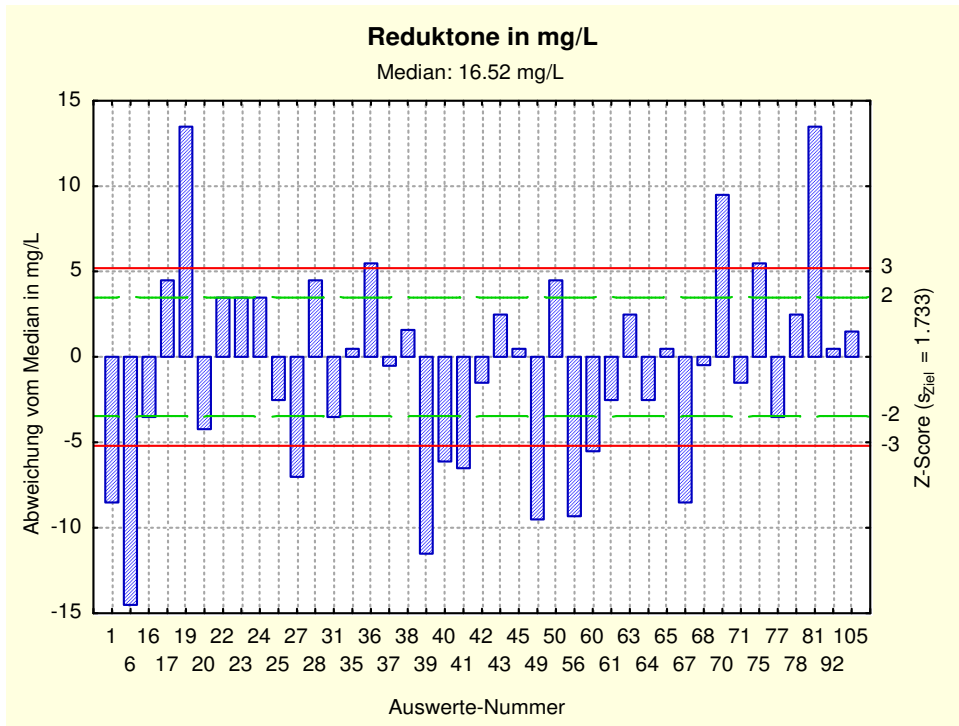
(*) Diese Werte weichen um mehr als 50 % vom Median ab und bleiben bei Berechnungen unberücksichtigt.

4.15.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Reduktone [mg/L]	alle Daten
Gültige Werte	34
Minimalwert	8,0
Mittelwert	15,89
Median	16,52
Maximalwert	22,0
Standardabweichung (s_L)	4,087
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,701
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	1,733
Zielstandardabweichung, experimentell (s_{exp})	
Horvat-Wert (s_L/s_H)	2,36
Quotient (s_L/s_{exp})	
Quotient (u_M/s_H)	0,40
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	

4.15.3 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
Acetaldehyd/Stärke		1	30,00	
Acetaldehyd/potent.	SO ₂ -Bindung mit Acetaldehyd; Platinelektrode	1	2,00	
Propionaldehyd/Stärke	SO ₂ -Bindung mit Propionaldehyd; Stärke als Indikator	3	20,26	2,50
Glyoxal/Stärke	SO ₂ -Bindung mit Glyoxal; Stärke als Indikator	20	17,56	4,59
Glyoxal/potentiometr.	SO ₂ -Bindung mit Glyoxal; Platinelektrode	13	13,32	5,03
Glyoxal/MTT	SO ₂ -Bindung mit Glyoxal; automat. phot. mit MTT	1	7,20	
photometr.	Photometrie mit MTT (Angabe zur SO ₂ -Bindung fehlt)	1	14,00	
k. A.	Verfahrensangabe fehlt	1	7,00	
alle Verfahren		41	15,66	5,92



4.16 Freie Schweflige Säure [mg/L]

4.16.1 Laborergebnisse mit Destillations-, photometrischen Verfahren und FTIR

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse aus Destillations- und photometrischen Verfahren

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
05	LwK 6.2	50,2	8,48	2,23	
06	LwK 6.2	38,0	-3,70	-0,97	
07	LwK 6.2	44,2	2,50	0,66	
08	LwK 6.2	42,6	0,90	0,24	
10	LwK 6.2	43,0	1,30	0,34	
11	LwK 6.2	44,5	2,78	0,73	
12	LwK 6.3	30,0	-11,70	-3,07	
14	LwK 6.3	31,9	-9,80	-2,58	
29	LwK 6.2	45,4	3,67	0,96	
42	LwK 6.3	37,0	-4,70	-1,24	
53	LwK 6.3	38,0	-3,70	-0,97	
55	LwK 6.4	36,0	-5,70	-1,50	
56	LwK 6.4	40,8	-0,90	-0,24	
57	LwK 6.4	43,6	1,89	0,50	
61	LwK 6.3	34,0	-7,70	-2,02	
91	LwK 6.2	48,2	6,50	1,71	
100	LwK 6.3	32,0	-9,70	-2,55	
103	LwK 6.2	44,9	3,20	0,84	
203	LwK 6.5	46,1	4,44	1,17	
206	LwK 6.5	31,0	-10,70	-2,81	
207	LwK 6.5	38,0	-3,71	-0,97	
208	LwK 6.5	33,0	-8,66	-2,28	
210	LwK 6.5	39,4	-2,30	-0,60	
212	LwK 6.5	33,0	-8,70	-2,29	
214	LwK 6.5	28,0	-13,70	-3,60	
220	LwK 6.5	35,0	-6,70	-1,76	
226	LwK 6.5	41,0	-0,70	-0,18	
238	LwK 6.5	35,0	-6,70	-1,76	
245	LwK 6.5	39,0	-2,70	-0,71	
251	LwK 6.5	42,0	0,30	0,08	
258	LwK 6.5	48,0	6,30	1,66	
262	LwK 6.5	37,0	-4,70	-1,24	
264	LwK 6.5	48,0	6,30	1,66	
280	LwK 6.5	39,0	-2,70	-0,71	
284	LwK 6.5	36,0	-5,70	-1,50	
338	LwK 6.5	35,0	-6,70	-1,76	
349	LwK 6.5	42,0	0,30	0,08	
363	LwK 6.5	44,0	2,30	0,60	

4.16.2 Laborergebnisse: jodometrisch, mitgeteilt 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.)	47,0	-3,00	-0,68	
17	LwK 6.1(incl.Red.)	47,0	-3,00	-0,68	
19	LwK 6.1(incl.Red.)	47,0	-3,00	-0,68	
22	LwK 6.1(incl.Red.)	56,0	6,00	1,35	
23	LwK 6.1(incl.Red.)	49,0	-1,00	-0,23	
24	LwK 6.1(incl.Red.)	56,0	6,00	1,35	
25	LwK 6.1(incl.Red.)	51,0	1,00	0,23	
27	LwK 6.1(incl.Red.)	42,9	-7,12	-1,60	
31	LwK 6.1(incl.Red.)	50,0	0,00	0,00	
35	LwK 6.1(incl.Red.)	55,0	5,00	1,13	
38	LwK 6.1(incl.Red.)	47,8	-2,20	-0,50	
41	LwK 6.1(incl.Red.)	48,0	-2,00	-0,45	
49	LwK 6.1(incl.Red.)	48,0	-2,00	-0,45	
50	LwK 6.1(incl.Red.)	53,0	3,00	0,68	
54	LwK 6.1(incl.Red.)	54,0	4,00	0,90	
60	LwK 6.1(incl.Red.)	48,0	-2,00	-0,45	

Fortsetzung: Laborergebnisse: jodometrisch, mitgeteilt einschließlich Reduktone

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
63	LwK 6.1 (incl.Red.)	51,0	1,00	0,23	
64	LwK 6.1 (incl.Red.)	51,0	1,00	0,23	
65	LwK 6.1 (incl.Red.)	49,0	-1,00	-0,23	
75	LwK 6.1 (incl.Red.)	50,0	0,00	0,00	
77	Redox incl.	47,0	-3,00	-0,68	(**)
78	LwK 6.1 (incl.Red.)	45,0	-5,00	-1,13	
81	LwK 6.1 (incl.Red.)	54,0	4,00	0,90	
84	LwK 6.1 (incl.Red.)	45,0	-5,00	-1,13	
92	LwK 6.1 (incl.Red.)	52,0	2,00	0,45	
105	LwK 6.1 (incl.Red.)	53	3,00	0,68	

(**) Das Ergebnis wurde ausnahmsweise bei den statistischen Berechnungen nicht berücksichtigt.

4.16.3 Laborergebnisse: jodometrisch ausschließlich Reduktone

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmung ausschließlich Reduktone.

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score S _H incl. Red.	Hinweis
01	LwK 6.1 (excl.Red.)	39,0	4,00	1,22	0,90	
16	LwK 6.1 (excl.Red.)	28,0	-7,00	-2,13	-1,58	
17	LwK 6.1 (excl.Red.)	26,0	-9,00	-2,74	-2,03	
19	LwK 6.1 (excl.Red.)	17,0	-18,00	-5,49	-4,05	
22	LwK 6.1 (excl.Red.)	36,0	1,00	0,30	0,23	
23	LwK 6.1 (excl.Red.)	29,0	-6,00	-1,83	-1,35	
24	LwK 6.1 (excl.Red.)	36,0	1,00	0,30	0,23	
25	LwK 6.1 (excl.Red.)	37,0	2,00	0,61	0,45	
27	LwK 6.1 (excl.Red.)	33,4	-1,62	-0,49	-0,36	
28	LwK 6.1 (excl.Red.)	49,0	14,00	4,27	3,15	
31	LwK 6.1 (excl.Red.)	37,0	2,00	0,61	0,45	
35	LwK 6.1 (excl.Red.)	38,0	3,00	0,91	0,68	
36	LwK 6.1 (excl.Red.)	46,0	11,00	3,35	2,48	
37	LwK 6.1 (excl.Red.)	34,0	-1,00	-0,30	-0,23	
38	LwK 6.1 (excl.Red.)	29,7	-5,30	-1,62	-1,19	
39	LwK 6.1 (excl.Red.)	37,0	2,00	0,61	0,45	
40	LwK 6.1 (excl.Red.)	38,0	3,00	0,91	0,68	
41	LwK 6.1 (excl.Red.)	38,0	3,00	0,91	0,68	
43	LwK 6.1 (excl.Red.)	39,0	4,00	1,22	0,90	
49	LwK 6.1 (excl.Red.)	41,0	6,00	1,83	1,35	
50	LwK 6.1 (excl.Red.)	32,0	-3,00	-0,91	-0,68	
60	LwK 6.1 (excl.Red.)	37,0	2,00	0,61	0,45	
63	LwK 6.1 (excl.Red.)	32,0	-3,00	-0,91	-0,68	
64	LwK 6.1 (excl.Red.)	37,0	2,00	0,61	0,45	
65	LwK 6.1 (excl.Red.)	32,0	-3,00	-0,91	-0,68	
67	LwK 6.1 (excl.Red.)	46,0	11,00	3,35	2,48	
68	LwK 6.1 (excl.Red.)	30,8	-4,16	-1,27	-0,94	
70	LwK 6.1 (excl.Red.)	29,0	-6,00	-1,83	-1,35	
71	LwK 6.1 (excl.Red.)	57,0	22,00	6,71	4,96	
75	LwK 6.1 (excl.Red.)	28,0	-7,00	-2,13	-1,58	
77	Redox excl.	34,0	-1,00	-0,30	-0,23	
78	LwK 6.1 (excl.Red.)	26,0	-9,00	-2,74	-2,03	
81	LwK 6.1 (excl.Red.)	24,0	-11,00	-3,35	-2,48	
92	LwK 6.1 (excl.Red.)	35,0	0,00	0,00	0,00	
105	LwK 6.1 (excl.Red.)	35,0	0,00	0,00	0,00	

Methodenkod in **blauer Schrift**: Wert vom Teilnehmer unter Abzug der Reduktone mitgeteilt

Methodenkod schwarze Schrift: Wert vom Auswerter nachberechnet

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

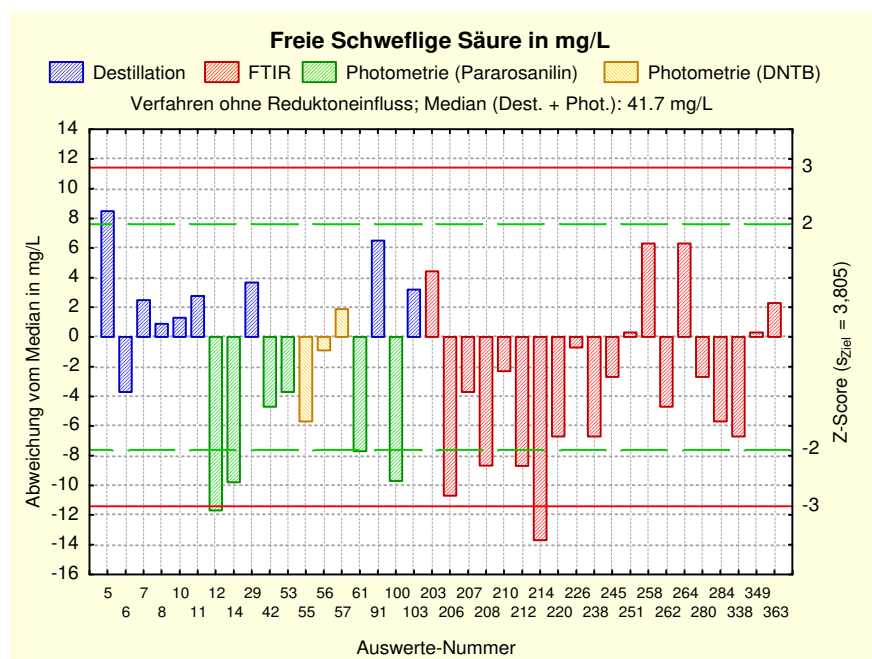
4.16.4 Deskriptive Ergebnisse

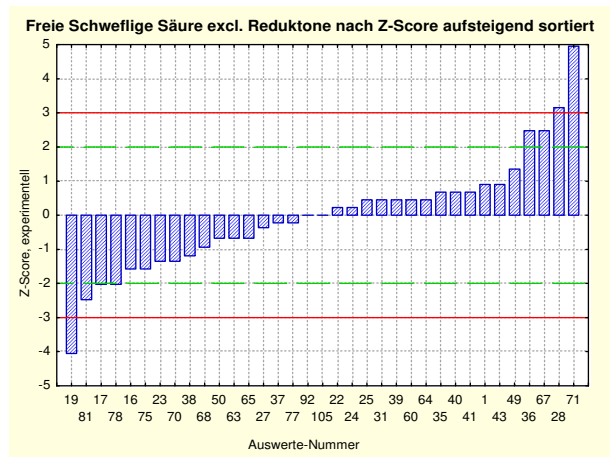
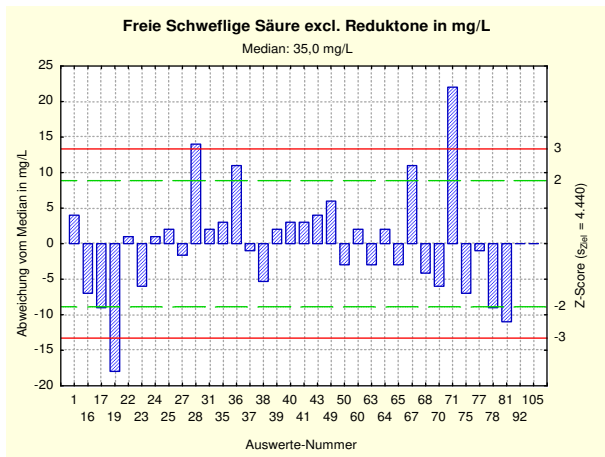
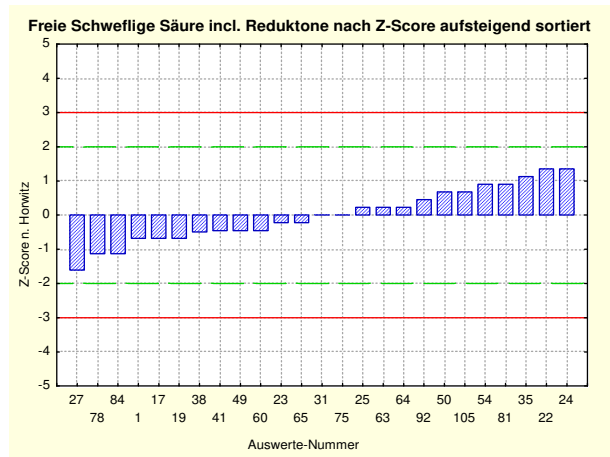
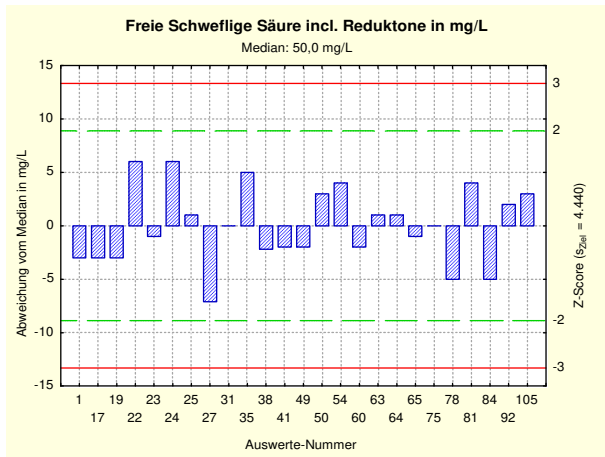
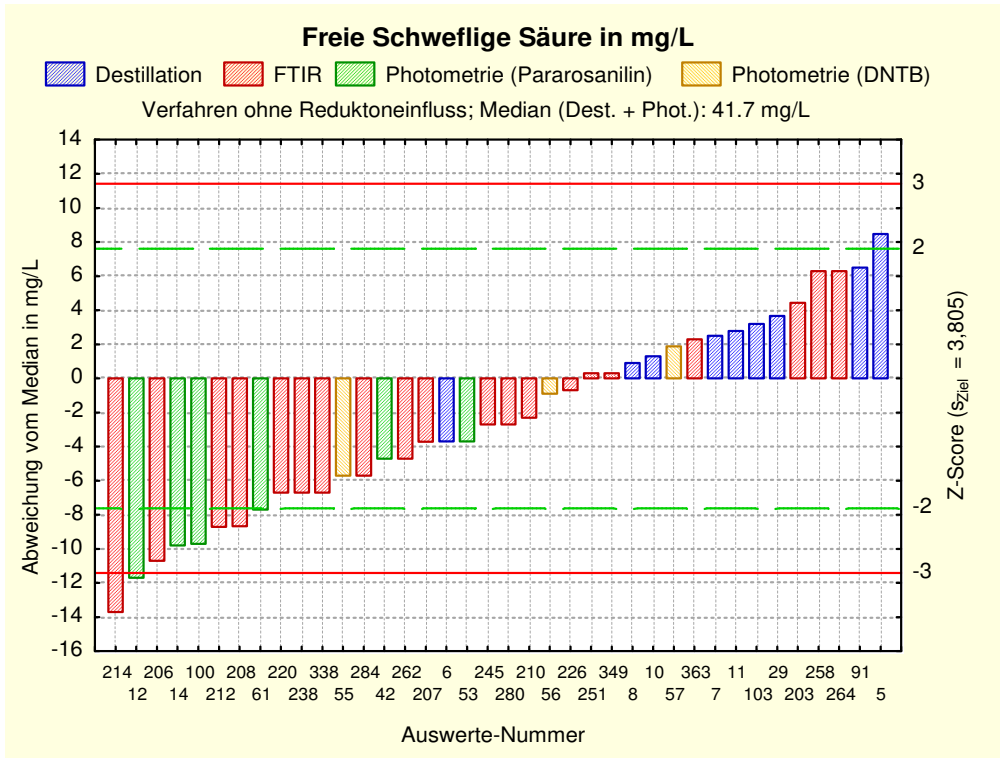
Ergebnisse für Freie Schweflige Säure in mg/L	Destillation	Destillation, Photometrie	jodometrisch Reduktone	
	alle Daten	alle Daten	inclusive alle Daten	exclusive alle Daten
Gültige Werte	9	18	25	35
Minimalwert	38,0	30,0	42,9	17,0
Mittelwert	44,55	40,23	49,99	34,94
Median	44,48	41,70	50,00	35,00
Maximalwert	50,2	50,2	56,0	57,0
Standardabweichung (s _L)	3,447	5,883	3,539	7,461
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	1,149	1,387	0,708	1,261
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H) - n. Horwitz incl. Reduktone ^{*)} (s _H incl. Red.)	4,020	3,805	4,440	3,279
Horrat-Wert (s _L /s _H)	0,86	1,55	0,80	2,28
Quotient (s _L /s _{exp})				1,68
Quotient (u _M /s _H)	0,29	0,36	0,16	0,38
Quotient (u _M /s _{exp} herk.)				0,28

^{*)} Zielstandardabweichung berechnet nach Horwitz aus Median der Werte inclusive Reduktone (s_H incl. Red.)

4.16.5 Angaben zu den Analyseverfahren

Code	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 6.1 (incl.Red.)	Direkte jodometrische Titration OIV-MA-AS323-04B ohne Abzug der Reduktone	25	50,03	3,87
Redox incl.	elektrometrische Bestimmung mit pH-Meter im mV-Modus und der Redoxelektrode ORP inclusive Reduktone	1	47,00	
	jodometrische Verfahren ohne Abzug der Reduktone	26	49,89	3,82
LwK 6.1 (excl.Red.)	Direkte jodometrische Titration OIV-MA-AS323-04B - mit Abzug der Reduktone	11	39,14	9,70
- Basis erweitert	- mit Abzug der Reduktone einschl. nachberechnete Werte	34	34,62	6,42
Redox(excl.Red.) (Basis erweitert)	elektrometrische Bestimmung mit pH-Meter im mV-Modus und der Redoxelektrode ORP exclusive Reduktone	1	34,00	
	jodometrische Verfahren, Basis erweitert	35	34,60	6,16
LwK 6.2	Methode n. Paul bzw. OIV-MA-AS323-04A	9	44,62	3,18
LwK 6.3	Pararosanilinnmethode	6	33,74	3,43
LwK 6.4	DNTB-Verfahren, z.B. FOSS FIAstar	3	40,13	4,35
	Destillations- und photometrische Verfahren	18	40,44	6,23
LwK 6.5	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der Gasphase	20	38,50	5,93
	Destillations-, photometrische + FTIR-Verfahren	38	30,32	6,24





4.17 Gesamte Schweflige Säure [mg/L]

4.17.1 Laborergebnisse

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse aus Destillationsverfahren.

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 7.4.2	90,0	10,00	1,51	1,87	
02	LwK 7.3	74,4	-5,60	-0,85	-1,05	
05	LwK 7.3	88,6	8,64	1,31	1,61	
06	LwK 7.3	80,0	0,00	0,00	0,00	
07	LwK 7.3	83,2	3,20	0,48	0,60	
08	LwK 7.3	81,0	1,00	0,15	0,19	
10	LwK 7.3	78,9	-1,10	-0,17	-0,21	
11	LwK 7.3	74,6	-5,44	-0,82	-1,02	
12	LwK 7.4.2	79,0	-1,00	-0,15	-0,19	
14	LwK 7.4.2	84,0	4,00	0,60	0,75	
16	LwK 7.5.1(excl. Red.)	80,0	0,00	0,00	0,00	
17	LwK 7.5.1(incl. Red.)	77,0	-3,00	-0,45	-0,56	
19	LwK 7.5.1(incl. Red.)	81,0	1,00	0,15	0,19	
22	LwK 7.4.2	81,0	1,00	0,15	0,19	
23	LwK 7.5.1(incl. Red.)	101,0	21,00	3,17	3,92	
24	LwK 7.4.2m	78,0	-2,00	-0,30	-0,37	
25	LwK 7.5.1(incl. Red.)	84,0	4,00	0,60	0,75	
27	LwK 7.5.1(incl. Red.)	91,2	11,15	1,68	2,08	
28	LwK 7.5.1(excl. Red.)	83,0	3,00	0,45	0,56	
29	LwK 7.3	94,2	14,18	2,14	2,65	
31	LwK 7.4.1	82,0	2,00	0,30	0,37	
35	LwK 7.4.1	79,0	-1,00	-0,15	-0,19	
36	LwK 7.5.2(incl. Red.)	94,0	14,00	2,12	2,61	
37	LwK 7.5.1(excl. Red.)	90,0	10,00	1,51	1,87	
38	LwK 7.4.1	79,0	-1,00	-0,15	-0,19	
39	LwK 7.7	88,0	8,00	1,21	1,49	
40	LwK 7.4.2	79,0	-1,00	-0,15	-0,19	
41	LwK 7.4.1	78,5	-1,50	-0,23	-0,28	
42	LwK 7.7	93,0	13,00	1,96	2,43	
43	LwK 7.4.2	84,0	4,00	0,60	0,75	
45	LwK 7.4.2	86,0	6,00	0,91	1,12	
49	LwK 7.4.2	79,0	-1,00	-0,15	-0,19	
50	LwK 7.7	92,0	12,00	1,81	2,24	
52	LwK 7.4.1	81,0	1,00	0,15	0,19	
53	LwK 7.7	86,0	6,00	0,91	1,12	
54	LwK 7.8	84,0	4,00	0,60	0,75	
55	LwK 7.7	84,0	4,00	0,60	0,75	
56	LwK 7.7	82,5	2,50	0,38	0,47	
57	LwK 7.4.2	76,0	-4,00	-0,60	-0,75	
60	LwK 7.5.2(incl. Red.)	89,0	9,00	1,36	1,68	
61	LwK 7.6	90,0	10,00	1,51	1,87	
63	LwK 7.4.2	84,0	4,00	0,60	0,75	
64	LwK 7.5.3(incl. Red.)	83,0	3,00	0,45	0,56	
65	LwK 7.5.1(incl. Red.)	96,0	16,00	2,42	2,99	
67	LwK 7.5.1(excl. Red.)	93,0	13,00	1,96	2,43	
68	LwK 7.5.1(excl. Red.)	85,6	5,59	0,84	1,04	
70	LwK 7.5.3(excl. Red.)	69,0	-11,00	-1,66	-2,05	
71	LwK 7.4.2	87,0	7,00	1,06	1,31	
75	LwK 7.5.1(incl. Red.)	88,0	8,00	1,21	1,49	
77	LwK 7.5.1(incl. Red.)	83,0	3,00	0,45	0,56	
78	LwK 7.5.3(incl. Red.)	84,0	4,00	0,60	0,75	
81	LwK 7.4.1	77,0	-3,00	-0,45	-0,56	
84	LwK 7.5.3(incl. Red.)	115,0	35,00	5,29	6,53	(**)
88	LwK 7.4.2	78,0	-2,00	-0,30	-0,37	
91	LwK 7.3	79,2	-0,80	-0,12	-0,15	
92	LwK 7.5.1(incl. Red.)	82,0	2,00	0,30	0,37	
93	LwK 7.4.2	82,0	2,00	0,30	0,37	
96	LwK 7.5.1(incl. Red.)	82,0	2,00	0,30	0,37	
99	LwK 7.4.2	78,0	-2,00	-0,30	-0,37	
100	LwK 7.7	81,0	1,00	0,15	0,19	

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

Fortsetzung Laborergebnisse

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse aus Destillationsverfahren.

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
103	LwK 7.3	85,6	5,60	0,85	1,05	
105	LwK 7.4.2	80	0,00	0,00	0,00	
203	LwK 7.8	81,8	1,85	0,28	0,35	
206	LwK 7.8	95,0	15,00	2,27	2,80	
207	LwK 7.8	86,0	5,98	0,90	1,12	
208	LwK 7.8	83,6	3,62	0,55	0,68	
209	FTIR(direkt)	<35				
210	LwK 7.8	91,9	11,90	1,80	2,22	
212	LwK 7.8	87,0	7,00	1,06	1,31	
214	LwK 7.8	93,0	13,00	1,96	2,43	
220	LwK 7.8	85,0	5,00	0,76	0,93	
226	LwK 7.8	100,0	20,00	3,02	3,73	
238	LwK 7.8	82,0	2,00	0,30	0,37	
245	LwK 7.8	91,0	11,00	1,66	2,05	
251	LwK 7.8	81,0	1,00	0,15	0,19	
258	LwK 7.8	102,0	22,00	3,32	4,11	
262	LwK 7.8	82,0	2,00	0,30	0,37	
264	LwK 7.8	99,0	19,00	2,87	3,55	
280	LwK 7.8	76,0	-4,00	-0,60	-0,75	
284	LwK 7.8	122,0	42,00	6,35	7,84	(*)
338	LwK 7.8	81,0	1,00	0,15	0,19	
349	LwK 7.8	95,0	15,00	2,27	2,80	
363	LwK 7.8	94,0	14,00	2,12	2,61	

(*) Dieser Wert weicht um mehr als 50 % vom Median der Werte aus Destillationsverfahren ab.
Für Ergebnisse von FTIR-Verfahren sind die Z-Score_{Horwitz} gültig. Die Z-Score_{exper.} in grauer Schrift sind nur zur Information wiedergegeben.

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
17	LwK 7.5.1(incl. Red.)	77,0	-7,00	-1,01	-1,31	
19	LwK 7.5.1(incl. Red.)	81,0	-3,00	-0,43	-0,56	
23	LwK 7.5.1(incl. Red.)	101,0	17,00	2,46	3,17	
25	LwK 7.5.1(incl. Red.)	84,0	0,00	0,00	0,00	
27	LwK 7.5.1(incl. Red.)	91,2	7,15	1,04	1,33	
36	LwK 7.5.2(incl. Red.)	94,0	10,00	1,45	1,87	
60	LwK 7.5.2(incl. Red.)	89,0	5,00	0,72	0,93	
64	LwK 7.5.3(incl. Red.)	83,0	-1,00	-0,14	-0,19	
65	LwK 7.5.1(incl. Red.)	96,0	12,00	1,74	2,24	
75	LwK 7.5.1(incl. Red.)	88,0	4,00	0,58	0,75	
77	LwK 7.5.1(incl. Red.)	83,0	-1,00	-0,14	-0,19	
78	LwK 7.5.3(incl. Red.)	84,0	0,00	0,00	0,00	
84	LwK 7.5.3(incl. Red.)	115,0	31,00	4,49	5,79	(**)
92	LwK 7.5.1(incl. Red.)	82,0	-2,00	-0,29	-0,37	
96	LwK 7.5.1(incl. Red.)	82,0	-2,00	-0,29	-0,37	

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

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
16	LwK 7.5.1(excl. Red.)	80,0	8,00	1,32	1,49	
17	LwK 7.5.1(excl. Red.)	56,0	-16,00	-2,64	-2,99	
19	LwK 7.5.1(excl. Red.)	51,0	-21,00	-3,47	-3,92	
23	LwK 7.5.1(excl. Red.)	81,0	9,00	1,49	1,68	
25	LwK 7.5.1(excl. Red.)	70,0	-2,00	-0,33	-0,37	
27	LwK 7.5.1(excl. Red.)	81,7	9,65	1,59	1,80	
28	LwK 7.5.1(excl. Red.)	83,0	11,00	1,82	2,05	

Fortsetzung 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
36	LwK 7.5.2(excl. Red.)	72,0	0,00	0,00	0,00	
37	LwK 7.5.1(excl. Red.)	90,0	18,00	2,97	3,36	
60	LwK 7.5.2(excl. Red.)	78,0	6,00	0,99	1,12	
64	LwK 7.5.3(excl. Red.)	69,0	-3,00	-0,50	-0,56	
65	LwK 7.5.1(excl. Red.)	79,0	7,00	1,16	1,31	
67	LwK 7.5.1(excl. Red.)	93,0	21,00	3,47	3,92	
68	LwK 7.5.1(excl. Red.)	85,6	13,59	2,25	2,54	
70	LwK 7.5.3(excl. Red.)	69,0	-3,00	-0,50	-0,56	
75	LwK 7.5.1(excl. Red.)	66,0	-6,00	-0,99	-1,12	
77	LwK 7.5.1(excl. Red.)	70,0	-2,00	-0,33	-0,37	
78	LwK 7.5.3(excl. Red.)	65,0	-7,00	-1,16	-1,31	
92	LwK 7.5.1(excl. Red.)	65,0	-7,00	-1,16	-1,31	

Methodenkode in **blauer Schrift**: Wert vom Teilnehmer unter Abzug der Reduktone mitgeteilt

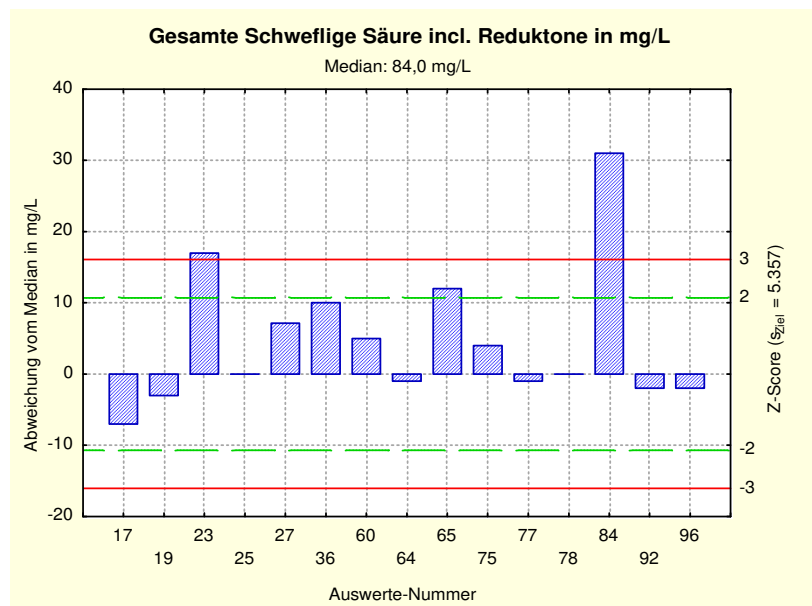
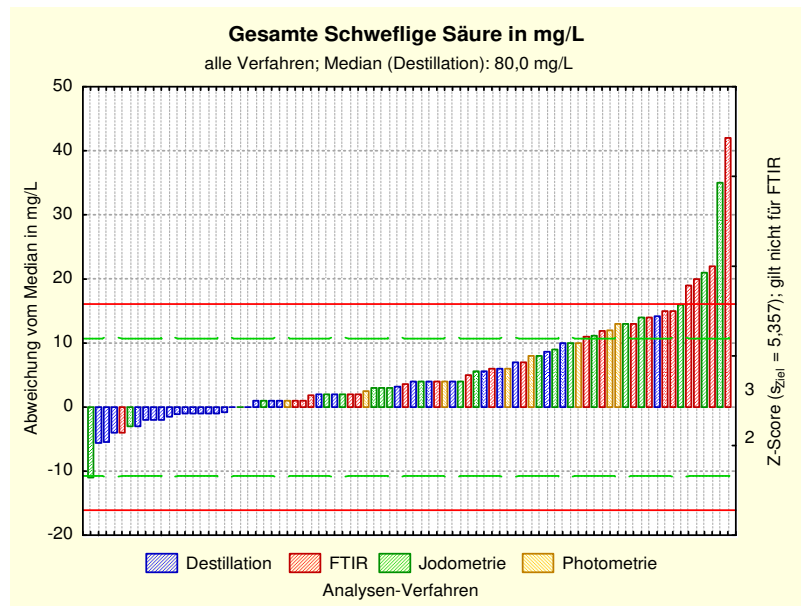
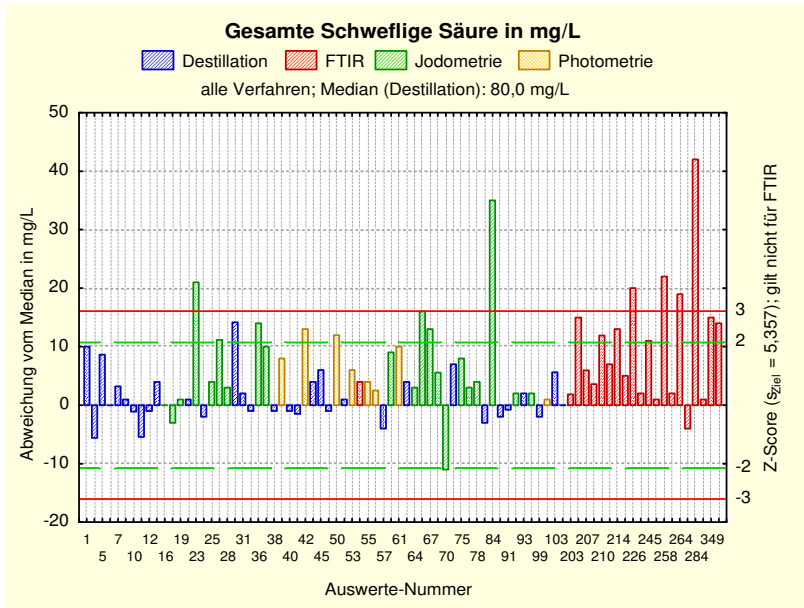
Methodenkode schwarze Schrift: Wert vom Auswerter nachberechnet

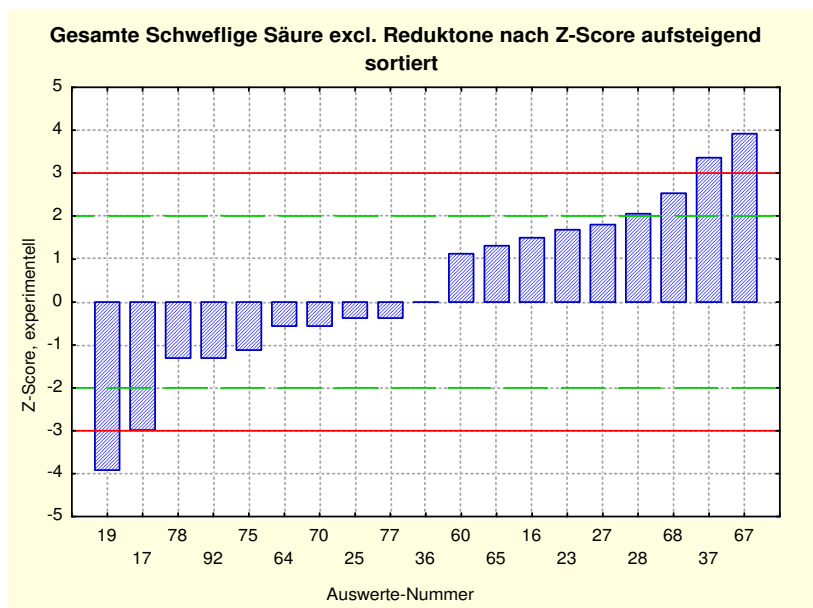
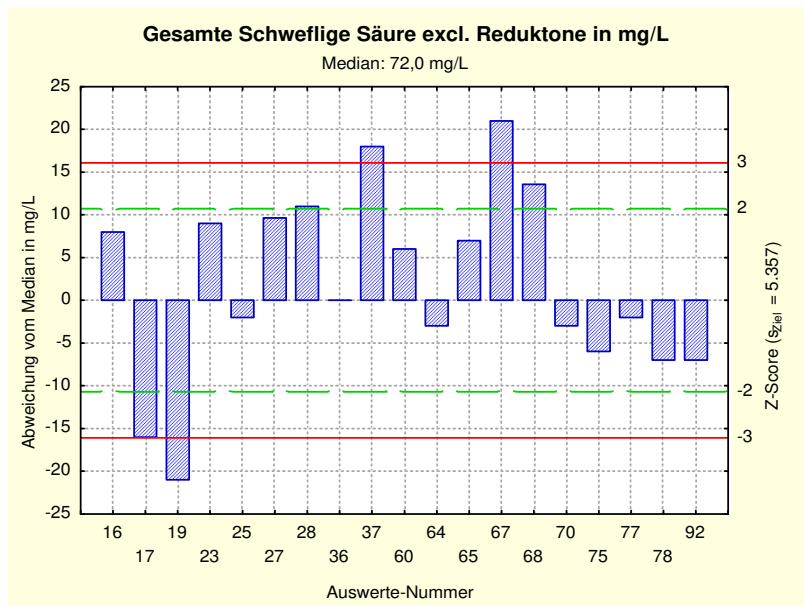
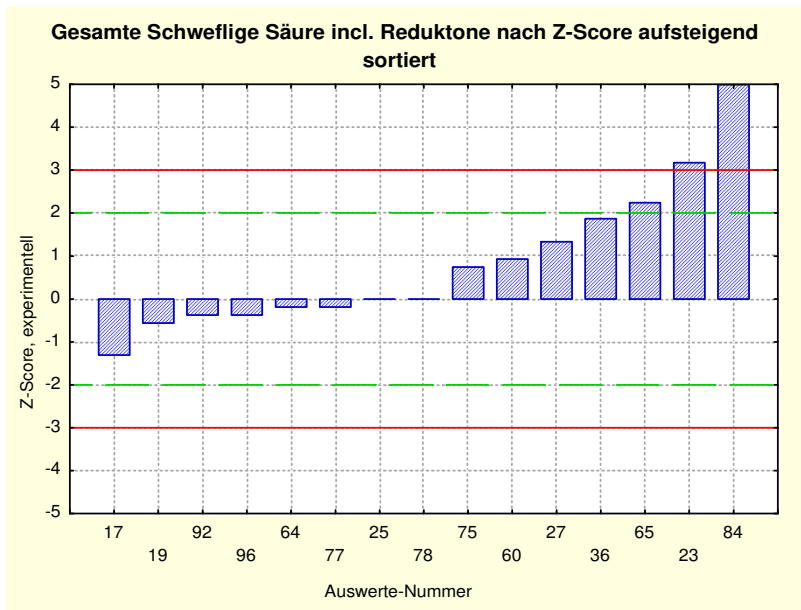
4.17.4 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Gesamte Schweflige Säure [mg/L]	Destillations- verfahren alle Daten	Jodometrie		
		incl. Reduktone alle Daten	ber. Daten	excl. Reduktone alle Daten
Gültige Werte	32	15	14	19
Minimalwert	74,4	77,0	77,0	51,0
Mittelwert	81,29	88,68	86,80	73,91
Median	80,00	84,00	84,00	72,00
Maximalwert	94,2	115,0	101,0	93,0
Standardabweichung (s_L)	4,455	9,732	6,700	11,009
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,788	2,513	1,791	2,526
Zielstandardabweichung				
- n. Horwitz (s_H)	6,619	6,899	6,899	6,052
- experimentell (s_{exp})	5,357	5,357	5,357	5,357
Horrat-Wert (s_L/s_H)	0,67	1,41	0,97	1,82
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	0,83	1,82	1,25	2,06
Quotient (u_M/s_H)	0,12	0,36	0,26	0,42
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,15	0,47	0,33	0,47

4.17.5 Angaben zu den Analyseverfahren

Code	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 7.3	Methode n. Paul bzw. OIV-MA-AS323-04A	10	81,65	6,27
LwK 7.4.1	Destillationsmethode n. Dr. Jakob	6	79,38	1,97
LwK 7.4.2	Destillationsmethode n. Dr. Rebelein	15	81,66	4,13
LwK 7.4.2m	Destillationsmethode n. Dr. Rebelein, modifiziert	1	78,00	
	Destillationsverfahren	32	80,82	4,07
LwK 7.5.1 (incl. Red.)	jodometrisch n. einf. Hydrolyse ohne Reduktonabzug	10	86,08	7,54
LwK 7.5.2 (incl. Red.)	jodometrisch n. dopp. Hydrolyse ohne Reduktonabzug	2	91,50	4,01
LwK 7.5.3 (incl. Red.)	Hydrolyse nach Dr. Rebelein ohne Abzug der Reduktone	3	92,33	17,35
	jodometrische Verfahren ohne Reduktonabzug	15	87,36	7,61
	wie mitgeteilt			
LwK 7.5.1 (excl. Red.)	jodometrisch n. einf. Hydrolyse mit Reduktonabzug	5	86,32	5,94
LwK 7.5.3 (excl. Red.)	Hydrolyse nach Dr. Rebelein mit Abzug der Reduktone	1	69,00	
	jodometrische Verfahren mit Reduktonabzug	6	83,45	9,58
	Basis erweitert			
LwK 7.5.1 (excl. Red.)	jodometrisch n. einf. Hydrolyse mit Reduktonabzug	14	75,47	13,28
LwK 7.5.2 (excl. Red.)	jodometrisch n. dopp. Hydrolyse mit Reduktonabzug	2	75,00	4,81
LwK 7.5.3 (excl. Red.)	Hydrolyse nach Dr. Rebelein mit Abzug der Reduktone	3	67,69	2,57
	jodometrische Verfahren mit Reduktonabzug	19	74,07	11,10
LwK 7.6	photometrisch mit Pararosanilin	1	90,00	
LwK 7.7	DNTB-Verfahren	7	86,64	5,22
LwK 7.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der Gasphase	21	89,18	8,84
FTIR(direkt)	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der fl. Phase	1	< 35	





5 Ergebnisse zu den einzelnen Parametern der Probe FT18P05

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	0,99349	-0,000095	-0,72	
02	LwK 8.1	0,99379	0,000205	1,55	
03	LwK 8.1	0,99350	-0,000085	-0,64	
04	LwK 8.4	0,99359	0,000005	0,04	
05	LwK 8.4	0,99347	-0,000115	-0,87	
06	LwK 8.4	0,99370	0,000115	0,87	
07	LwK 8.4	0,99355	-0,000035	-0,27	
08	LwK 8.1	0,99310	-0,000485	-3,67	
10	LwK 8.1	0,99342	-0,000165	-1,25	
11	LwK 8.4	0,99367	0,000085	0,64	
12	LwK 8.4	0,99359	0,000005	0,04	
14	LwK 8.4	0,99353	-0,000055	-0,42	
16	LwK 8.4	0,99350	-0,000085	-0,64	
17	LwK 8.4	0,99362	0,000035	0,27	
19	LwK 8.4	0,99340	-0,000185	-1,40	
20	LwK 8.4	0,99350	-0,000085	-0,64	
22	LwK 8.4	0,99349	-0,000095	-0,72	
23	LwK 8.4	0,99380	0,000215	1,63	
24	LwK 8.4	0,99344	-0,000145	-1,10	
25	LwK 8.4	0,99355	-0,000035	-0,27	
26	LwK 8.4	0,99353	-0,000055	-0,42	
27	LwK 8.4	0,99354	-0,000045	-0,34	
28	LwK 8.4	0,99340	-0,000185	-1,40	
29	LwK 8.4	0,99358	-0,000005	-0,04	
31	LwK 8.4	0,99356	-0,000025	-0,19	
35	LwK 8.4	0,99360	0,000015	0,11	
37	LwK 8.4	0,99370	0,000115	0,87	
39	LwK 8.4	0,99360	0,000015	0,11	
40	LwK 8.4	0,99356	-0,000025	-0,19	
41	LwK 8.4	0,99355	-0,000035	-0,27	
42	LwK 8.4	0,99360	0,000015	0,11	
43	LwK 8.4	0,99359	0,000005	0,04	
45	LwK 8.4	0,99360	0,000015	0,11	
46	LwK 8.4	0,99350	-0,000085	-0,64	
50	LwK 8.4	0,99359	0,000005	0,04	
53	LwK 8.4	0,99370	0,000115	0,87	
55	LwK 8.4	0,99362	0,000035	0,27	
56	LwK 8.4	0,99341	-0,000175	-1,33	
58	LwK 8.4	0,99350	-0,000085	-0,64	
60	LwK 8.4	0,99340	-0,000185	-1,40	
61	LwK 8.4	0,99380	0,000215	1,63	
63	LwK 8.4	0,99360	0,000015	0,11	
64	LwK 8.4	0,99370	0,000115	0,87	
66	LwK 8.4	0,99380	0,000215	1,63	
68	LwK 8.4	0,99366	0,000075	0,57	
74	LwK 8.4	0,99390	0,000315	2,39	
81	LwK 8.4	0,99453	0,000945	7,16	(**)
84	LwK 8.2	0,99210	-0,001485	-11,25	(**)
86	LwK 8.4	0,99374	0,000155	1,17	
92	LwK 8.4	0,99348	-0,000105	-0,80	
98	LwK 8.4	0,99380	0,000215	1,63	
105	LwK 8.4	0,99370	0,000115	0,87	

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

5.1.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	0,99380	0,000210	1,11	
202	FTIR	0,99384	0,000250	1,32	
203	FTIR	0,99349	-0,000100	-0,53	
204	FTIR	0,99400	0,000410	2,16	
205	FTIR	0,99380	0,000210	1,11	
206	FTIR	0,99380	0,000210	1,11	
207	FTIR	0,99345	-0,000140	-0,74	
208	FTIR	0,99337	-0,000220	-1,16	
209	FTIR	0,99370	0,000110	0,58	
210	FTIR	0,99473	0,001140	6,00	(**)
211	FTIR	0,99391	0,000320	1,68	
212	FTIR	0,99349	-0,000100	-0,53	
213	FTIR	0,99390	0,000310	1,63	
214	FTIR	0,99380	0,000210	1,11	
216	FTIR	0,99330	-0,000290	-1,53	
217	FTIR	0,99370	0,000110	0,58	
218	FTIR	0,99370	0,000110	0,58	
219	FTIR	0,99370	0,000110	0,58	
220	FTIR	0,99386	0,000270	1,42	
221	FTIR	0,99370	0,000110	0,58	
222	FTIR	0,99350	-0,000090	-0,47	
223	FTIR	0,99359	0,000000	0,00	
224	FTIR	0,99328	-0,000310	-1,63	
225	FTIR	0,99380	0,000210	1,11	
226	FTIR	0,99370	0,000110	0,58	
227	FTIR	0,99385	0,000260	1,37	
228	FTIR	0,99370	0,000110	0,58	
229	FTIR	0,99388	0,000290	1,53	
230	FTIR	0,99370	0,000110	0,58	
231	FTIR	0,99338	-0,000210	-1,11	
233	FTIR	0,99370	0,000110	0,58	
235	FTIR	0,99362	0,000030	0,16	
236	FTIR	0,99410	0,000510	2,68	
237	FTIR	0,99392	0,000330	1,74	
238	FTIR	0,99407	0,000480	2,53	
241	FTIR	0,99874	0,005150	27,11	(**)
242	FTIR	0,99400	0,000410	2,16	
243	FTIR	0,99367	0,000080	0,42	
244	FTIR	0,99360	0,000010	0,05	
245	FTIR	0,99390	0,000310	1,63	
246	FTIR	0,99380	0,000210	1,11	
247	FTIR	0,99380	0,000210	1,11	
249	FTIR	0,99380	0,000210	1,11	
250	FTIR	0,99400	0,000410	2,16	
251	FTIR	0,99340	-0,000190	-1,00	
254	FTIR	0,99460	0,001010	5,32	(**)
255	FTIR	0,99390	0,000310	1,63	
256	FTIR	0,99364	0,000050	0,26	
257	FTIR	0,99410	0,000510	2,68	
258	FTIR	0,99320	-0,000390	-2,05	
259	FTIR	0,99377	0,000180	0,95	
260	FTIR	0,99340	-0,000190	-1,00	
261	FTIR	0,99380	0,000210	1,11	
262	FTIR	0,99350	-0,000090	-0,47	
263	FTIR	0,99370	0,000110	0,58	
264	FTIR	0,99410	0,000510	2,68	
265	FTIR	0,99400	0,000410	2,16	
266	FTIR	0,99393	0,000340	1,79	
267	FTIR	0,99380	0,000210	1,11	
268	FTIR	0,99365	0,000060	0,32	
269	FTIR	0,99410	0,000510	2,68	
270	FTIR	0,99330	-0,000290	-1,53	
271	FTIR	0,99391	0,000320	1,68	
273	FTIR	0,99412	0,000530	2,79	

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

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
274	FTIR	0,99320	-0,000390	-2,05	
275	FTIR	0,99370	0,000110	0,58	
276	FTIR	0,99430	0,000710	3,74	
277	FTIR	0,99410	0,000510	2,68	
278	FTIR	0,99410	0,000510	2,68	
280	FTIR	0,99290	-0,000690	-3,63	
281	FTIR	0,99360	0,000010	0,05	
282	FTIR	0,99380	0,000210	1,11	
283	FTIR	0,99306	-0,000535	-2,82	
284	FTIR	0,99220	-0,001390	-7,32	(**)
322	FTIR	0,99400	0,000410	2,16	
338	FTIR	0,99424	0,000650	3,42	
349	FTIR	0,99410	0,000510	2,68	
363	FTIR	0,99400	0,000410	2,16	

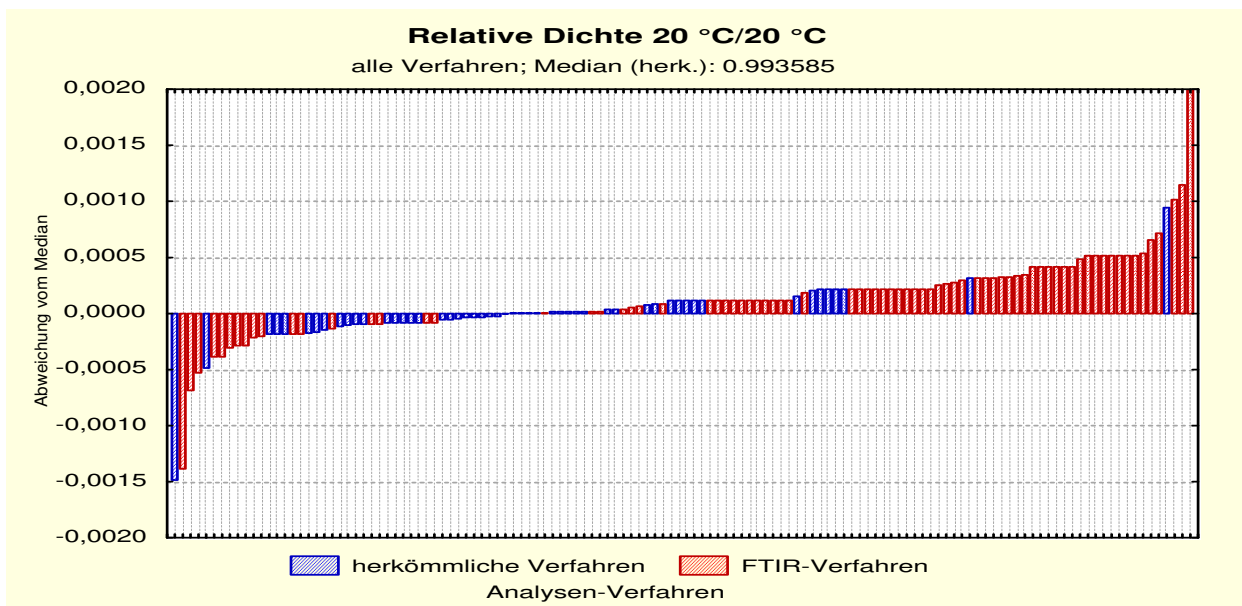
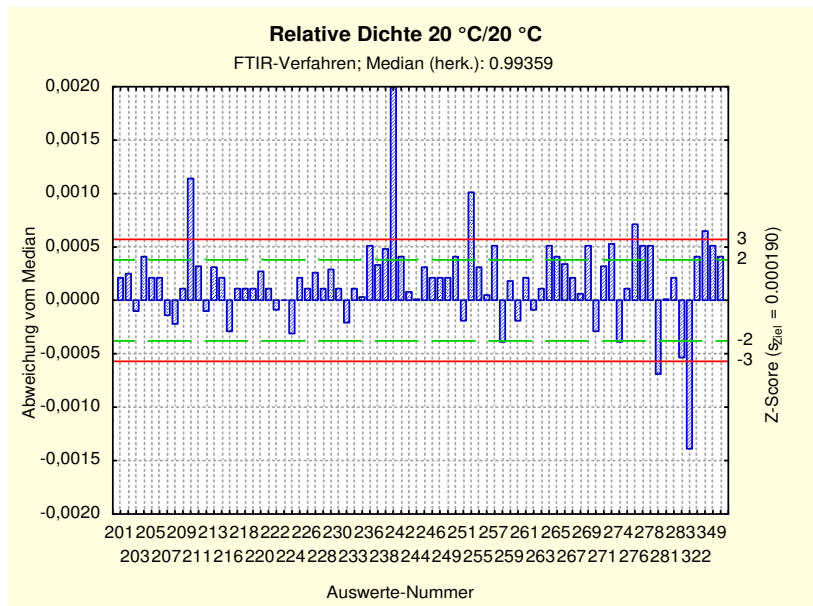
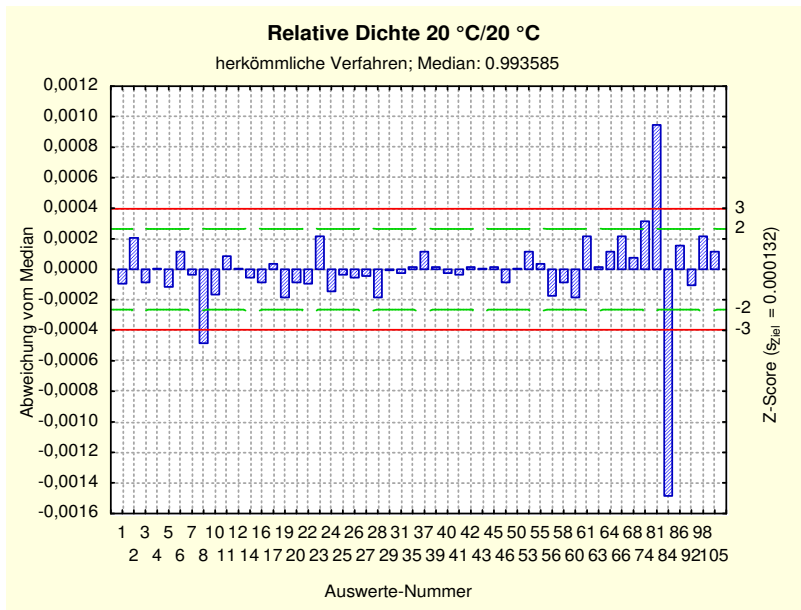
(**) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom maßgeblichen Median ab.

5.1.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Relative Dichte 20 °C/20 °C	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	52	50
Minimalwert	0,99210	0,99310
Mittelwert	0,993570	0,993580
Median	0,993585	0,993585
Maximalwert	0,99453	0,99390
Standardabweichung (s_L)	0,000281	0,000138
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,000039	0,000020
Zielstandardabweichung n. Horwitz (S_H)		
Zielstandardabweichung, experimentell ($S_{exp\ herk.}$)	0,000132	0,000132
Zielstandardabweichung, experimentell ($S_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,000190	0,000190
Horrat-Wert (s_L/S_H)		
Quotient ($s_L/S_{exp\ herk.}$)	2,13	1,05
Quotient ($s_L/S_{\bar{U}\ FTIR}$)	1,48	0,72
Quotient (u_M/S_H)		
Quotient ($u_M/S_{exp\ herk.}$)	0,30	0,15
Quotient ($u_M/S_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,21	0,10

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	5	0,99346	0,000265
LwK 8.2	Bestimmung mit dem Aräometer; OIV-MA-AS2-01B	1	0,99210	
LwK 8.4	Bestimmung mit dem Biegeschwinger	46	0,99359	0,000128
	herkömmliche Verfahren	52	0,99358	0,000139
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	78	0,99377	0,000295



5.2 Vorhandener Alkohol [g/L]

5.2.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 2.1	99,90	0,250	0,09	0,47	
02	LwK 2.1	100,01	0,360	0,13	0,67	
03	LwK 2.4	99,50	-0,150	-0,05	-0,28	
04	LwK 2.9	100,66	1,010	0,36	1,89	
05	LwK 2.1	99,05	-0,600	-0,21	-1,12	
06	LwK 2.4	99,05	-0,600	-0,21	-1,12	
07	LwK 2.9	99,92	0,270	0,10	0,50	
08	LwK 2.4	100,08	0,430	0,15	0,80	
10	LwK 2.4	100,69	1,040	0,37	1,94	
11	LwK 2.1	100,30	0,650	0,23	1,21	
12	LwK 2.1	99,10	-0,550	-0,20	-1,03	
14	LwK 2.1	99,20	-0,450	-0,16	-0,84	
16	LwK 2.9	100,29	0,640	0,23	1,20	
17	LwK 2.9	100,60	0,950	0,34	1,78	
19	LwK 2.9	101,00	1,350	0,48	2,52	
20	LwK 2.1	101,49	1,840	0,65	3,44	
22	LwK 2.7	99,04	-0,610	-0,22	-1,14	
23	LwK 2.7	100,18	0,530	0,19	0,99	
24	LwK 2.9	100,30	0,650	0,23	1,21	
25	LwK 2.5	100,00	0,350	0,12	0,65	
26	LwK 2.9	99,60	-0,050	-0,02	-0,09	
27	LwK 2.1	100,17	0,520	0,18	0,97	
28	LwK 2.4	101,80	2,150	0,76	4,02	
29	LwK 2.5	98,80	-0,850	-0,30	-1,59	
31	LwK 2.1	98,72	-0,930	-0,33	-1,74	
36	LwK 2.9	101,10	1,450	0,51	2,71	
39	LwK 2.9	101,20	1,550	0,55	2,90	
40	LwK 2.1	99,80	0,150	0,05	0,28	
41	LwK 2.4	100,05	0,400	0,14	0,75	
42	LwK 2.5	99,08	-0,570	-0,20	-1,07	
43	LwK 2.4	99,30	-0,350	-0,12	-0,65	
45	LwK 2.1	99,00	-0,650	-0,23	-1,21	
46	LwK 2.9	99,90	0,250	0,09	0,47	
50	LwK 2.9	100,40	0,750	0,27	1,40	
53	LwK 2.9	97,30	-2,350	-0,83	-4,39	
55	LwK 2.1	99,44	-0,210	-0,07	-0,39	
56	LwK 2.9	100,50	0,850	0,30	1,59	
60	LwK 2.1	100,90	1,250	0,44	2,34	
61	LwK 2.9	99,60	-0,050	-0,02	-0,09	
63	LwK 2.5	100,25	0,600	0,21	1,12	
64	LwK 2.9	100,30	0,650	0,23	1,21	
66	LwK 2.1	99,90	0,250	0,09	0,47	
68	LwK 2.9	100,26	0,610	0,22	1,14	
72	LwK 2.1	93,81	-5,840	-2,07	-10,92	(**)
74	LwK 2.9	99,68	0,030	0,01	0,06	
75	LwK 2.4	98,37	-1,278	-0,45	-2,39	
81	LwK 2.1	97,80	-1,850	-0,66	-3,46	
84	LwK 2.2	101,90	2,250	0,80	4,21	
86	LwK 2.5	98,30	-1,350	-0,48	-2,52	
88	LwK 2.4	99,48	-0,170	-0,06	-0,32	
92	LwK 2.7	99,34	-0,310	-0,11	-0,58	
94	LwK 2.5	99,40	-0,250	-0,09	-0,47	
96	LwK 2.9	100,58	0,930	0,33	1,74	
98	LwK 2.9	99,90	0,250	0,09	0,47	
100	LwK 2.9	99,80	0,150	0,05	0,28	
102	LwK 2.4	97,83	-1,820	-0,65	-3,40	
105	LwK 2.5	98,90	-0,750	-0,27	-1,40	
106	LwK 2.4	100,73	1,080	0,38	2,02	
107	NMR	98,64	-1,006	-0,36	-1,88	
108	NMR	98,25	-1,404	-0,50	-2,62	
109	NMR	98,03	-1,616	-0,57	-3,02	
110	NMR	100,49	0,842	0,30	1,57	

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

5.2.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 2.8	100,63	0,980	0,35	1,11	
202	LwK 2.8	100,58	0,930	0,33	1,05	
203	LwK 2.8	101,14	1,490	0,53	1,68	
204	LwK 2.8	99,50	-0,150	-0,05	-0,17	
205	LwK 2.8	99,60	-0,048	-0,02	-0,05	
206	LwK 2.8	99,51	-0,140	-0,05	-0,16	
207	LwK 2.8	100,03	0,380	0,13	0,43	
208	LwK 2.8	100,91	1,260	0,45	1,42	
209	LwK 2.8	99,00	-0,650	-0,23	-0,73	
210	LwK 2.8	100,00	0,350	0,12	0,40	
211	LwK 2.8	100,50	0,850	0,30	0,96	
212	LwK 2.8	99,30	-0,350	-0,12	-0,40	
213	LwK 2.8	100,00	0,350	0,12	0,40	
214	LwK 2.8	101,99	2,340	0,83	2,64	
216	LwK 2.8	101,60	1,950	0,69	2,20	
217	LwK 2.8	100,70	1,050	0,37	1,19	
218	LwK 2.8	101,57	1,920	0,68	2,17	
219	LwK 2.8	103,90	4,250	1,51	4,80	
220	LwK 2.8	101,50	1,850	0,66	2,09	
221	LwK 2.8	100,00	0,350	0,12	0,40	
222	LwK 2.8	99,90	0,250	0,09	0,28	
223	LwK 2.8	99,73	0,080	0,03	0,09	
224	LwK 2.8	99,54	-0,110	-0,04	-0,12	
225	LwK 2.8	100,00	0,350	0,12	0,40	
226	LwK 2.8	100,10	0,450	0,16	0,51	
227	LwK 2.8	100,02	0,370	0,13	0,42	
228	LwK 2.8	100,30	0,650	0,23	0,73	
229	LwK 2.8	100,64	0,990	0,35	1,12	
230	LwK 2.8	99,30	-0,350	-0,12	-0,40	
231	LwK 2.8	101,74	2,090	0,74	2,36	
233	LwK 2.8	101,70	2,050	0,73	2,31	
235	LwK 2.8	100,90	1,250	0,44	1,41	
236	LwK 2.8	98,80	-0,850	-0,30	-0,96	
237	LwK 2.8	100,50	0,850	0,30	0,96	
238	LwK 2.8	98,88	-0,770	-0,27	-0,87	
241	LwK 2.8	89,90	-9,750	-3,46	-11,00	(**)
242	LwK 2.8	98,40	-1,250	-0,44	-1,41	
243	LwK 2.8	100,27	0,620	0,22	0,70	
244	LwK 2.8	100,21	0,560	0,20	0,63	
245	LwK 2.8	101,27	1,620	0,57	1,83	
246	LwK 2.8	99,10	-0,550	-0,20	-0,62	
247	LwK 2.8	99,75	0,100	0,04	0,11	
248	LwK 2.8	101,59	1,940	0,69	2,19	
249	LwK 2.8	99,80	0,150	0,05	0,17	
250	LwK 2.8	101,47	1,820	0,65	2,05	
251	LwK 2.8	99,30	-0,350	-0,12	-0,40	
254	LwK 2.8	97,10	-2,550	-0,90	-2,88	
255	LwK 2.8	99,30	-0,350	-0,12	-0,40	
256	LwK 2.8	100,30	0,650	0,23	0,73	
257	LwK 2.8	99,10	-0,550	-0,20	-0,62	
258	LwK 2.8	99,90	0,250	0,09	0,28	
259	LwK 2.8	100,26	0,610	0,22	0,69	
260	LwK 2.8	98,50	-1,150	-0,41	-1,30	
261	LwK 2.8	101,30	1,650	0,59	1,86	
262	LwK 2.8	100,10	0,450	0,16	0,51	
263	LwK 2.8	99,90	0,250	0,09	0,28	
264	LwK 2.8	99,75	0,100	0,04	0,11	
265	LwK 2.8	99,20	-0,450	-0,16	-0,51	
266	LwK 2.8	99,02	-0,630	-0,22	-0,71	
267	LwK 2.8	100,00	0,350	0,12	0,40	
268	LwK 2.8	100,64	0,990	0,35	1,12	
269	LwK 2.8	101,40	1,750	0,62	1,98	
270	LwK 2.8	100,50	0,850	0,30	0,96	

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

Rot markierte Werte wurden in der Einheit %vol mitgeteilt und vom Auswerter mit dem Faktor 7,8924 umgerechnet.

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
271	LwK 2.8	99,72	0,070	0,02	0,08	
273	LwK 2.8	100,50	0,850	0,30	0,96	
274	LwK 2.8	100,70	1,050	0,37	1,19	
275	LwK 2.8	99,71	0,064	0,02	0,07	
276	LwK 2.8	97,94	-1,710	-0,61	-1,93	
277	LwK 2.8	97,12	-2,530	-0,90	-2,86	
278	LwK 2.8	101,60	1,950	0,69	2,20	
280	LwK 2.8	102,36	2,714	0,96	3,06	
281	LwK 2.8	98,80	-0,850	-0,30	-0,96	
282	LwK 2.8	100,40	0,750	0,27	0,85	
283	LwK 2.8	98,44	-1,210	-0,43	-1,37	
284	LwK 2.8	99,81	0,160	0,06	0,18	
313	LwK 2.8	100,20	0,550	0,20	0,62	
322	LwK 2.8	99,10	-0,550	-0,20	-0,62	
338	LwK 2.8	99,40	-0,250	-0,09	-0,28	
349	LwK 2.8	99,80	0,150	0,05	0,17	
363	LwK 2.8	99,50	-0,150	-0,05	-0,17	

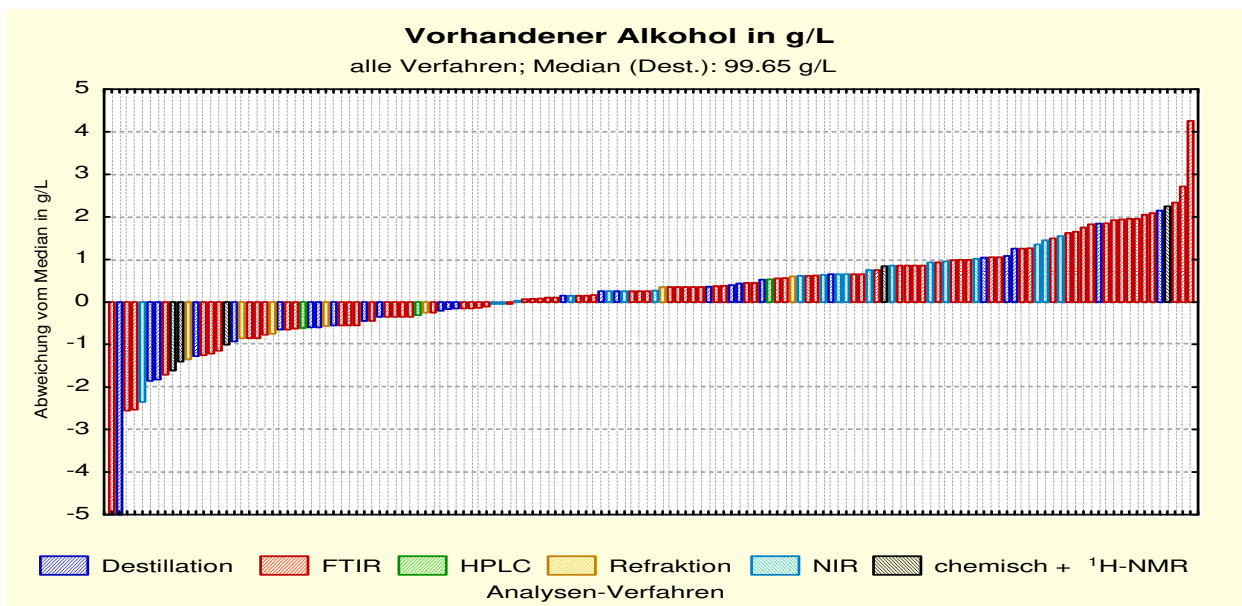
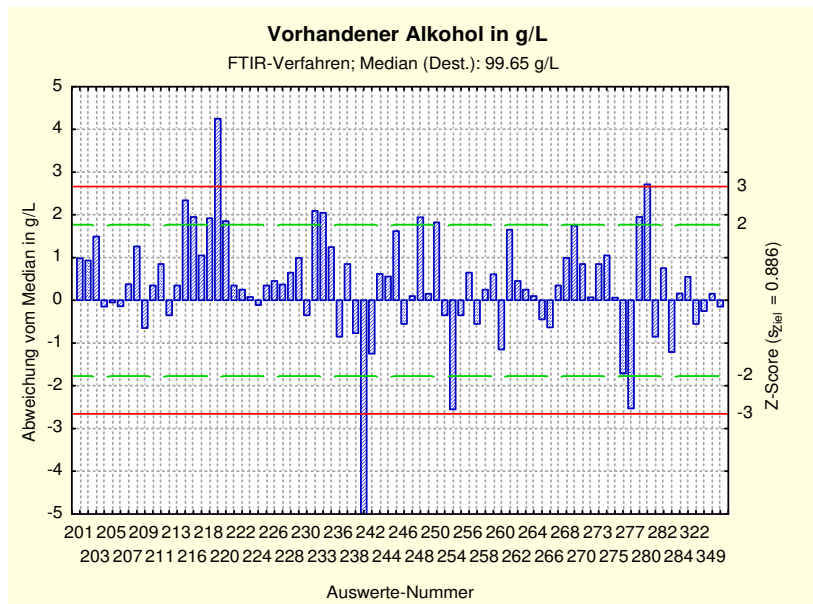
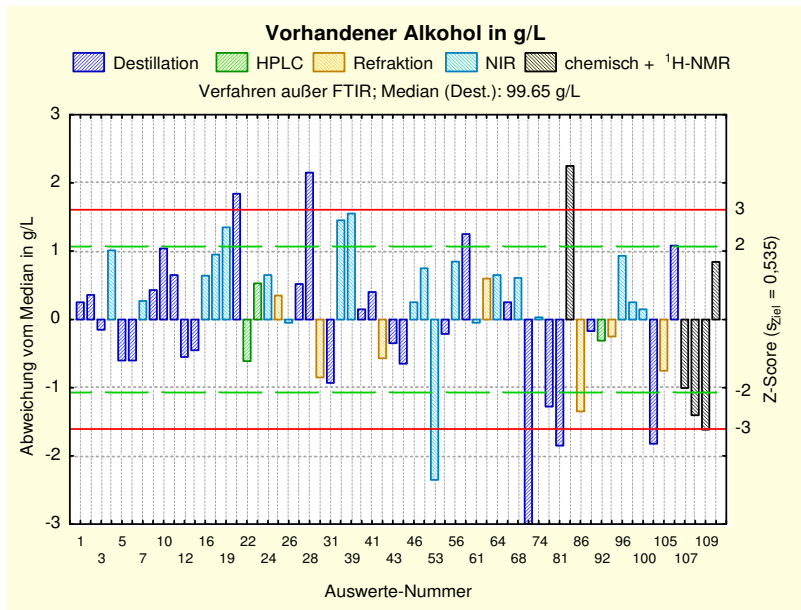
Rot markierte Werte wurden in der Einheit %vol mitgeteilt und vom Auswerter mit dem Faktor 7,8924 umgerechnet.

5.2.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Vorhandenen Alkohol in g/L nur Destillationsverfahren	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	27	26
Minimalwert	93,81	97,80
Mittelwert	99,462	99,679
Median	99,500	99,650
Maximalwert	101,80	101,80
Standardabweichung (s_L)	1,486	0,984
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,286	0,193
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	2,816	2,820
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,535	0,535
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,886	0,886
Horrat-Wert (s_L/s_H)	0,53	0,35
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	2,78	1,84
Quotient ($s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	1,68	1,11
Quotient (u_M/s_H)	0,10	0,07
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,53	0,36
Quotient ($u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,32	0,22

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	16	99,536	0,989
LwK 2.4	Einfache direkte Destillation n. AVV V2 Destillationsverfahren	11 27	99,695 99,592	1,202 1,010
LwK 2.2	Chemische Alkoholbestimmung n. Dr. Jakob	1	101,900	
LwK 2.5	Berechnung aus relativer Dichte und Refraktion	7	99,221	0,710
LwK 2.7	HPLC n. Heidger	3	99,462	0,562
LwK 2.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	80	100,058	1,055
LwK 2.9	Nah-Infrarotspektrometrie	20	100,244	0,584
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	4	98,839	1,238



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	25,1	-1,00	-1,11	-1,68	
02	LwK 3.3	26,9	0,80	0,89	1,35	
03	LwK 3.3	25,8	-0,30	-0,33	-0,51	
04	LwK 3.3	26,6	0,55	0,61	0,93	
06	LwK 3.3	26,2	0,10	0,11	0,17	
07	LwK 3.3	26,2	0,10	0,11	0,17	
08	LwK 3.1	25,0	-1,10	-1,22	-1,85	
10	LwK 3.1	26,1	0,00	0,00	0,00	
11	LwK 3.3	26,7	0,60	0,66	1,01	
12	LwK 3.3	26,0	-0,10	-0,11	-0,17	
14	LwK 3.3	25,9	-0,20	-0,22	-0,34	
16	LwK 3.3	26,5	0,40	0,44	0,67	
17	LwK 3.3	26,6	0,50	0,55	0,84	
19	LwK 3.3	26,2	0,10	0,11	0,17	
20	LwK 3.2	26,6	0,50	0,55	0,84	
22	LwK 3.3	25,7	-0,40	-0,44	-0,67	
23	LwK 3.3	26,4	0,30	0,33	0,51	
24	LwK 3.3	26,0	-0,10	-0,11	-0,17	
25	LwK 3.3	26,2	0,10	0,11	0,17	
26	LwK 3.3	26,0	-0,10	-0,11	-0,17	
27	LwK 3.3	26,2	0,10	0,11	0,17	
28	LwK 3.3	26,4	0,30	0,33	0,51	
29	LwK 3.3	26,0	-0,10	-0,11	-0,17	
31	LwK 3.2	25,8	-0,30	-0,33	-0,51	
36	LwK 3.3	28,0	1,90	2,10	3,20	
39	LwK 3.3	26,7	0,60	0,66	1,01	
40	LwK 3.3	26,2	0,10	0,11	0,17	
41	LwK 3.3	26,1	0,00	0,00	0,00	
42	LwK 3.3	26,1	0,00	0,00	0,00	
43	LwK 3.3	26,0	-0,10	-0,11	-0,17	
45	LwK 3.3	26,0	-0,10	-0,11	-0,17	
46	LwK 3.3	26,0	-0,10	-0,11	-0,17	
50	LwK 3.3	26,4	0,30	0,33	0,51	
53	LwK 3.3	25,6	-0,50	-0,55	-0,84	
55	LwK 3.2	26,2	0,10	0,11	0,17	
56	LwK 3.3	26,0	-0,10	-0,11	-0,17	
60	LwK 3.2	26,0	-0,10	-0,11	-0,17	
63	FTIR	26,3	0,20	0,22	0,34	
66	LwK 3.2	26,7	0,60	0,66	1,01	
81	LwK 3.3	27,4	1,30	1,44	2,19	
84	LwK 3.3	22,9	-3,20	-3,54	-5,39	(**)
86	LwK 3.3	26,1	-0,04	-0,04	-0,07	
92	LwK 3.3	25,8	-0,30	-0,33	-0,51	
98	LwK 3.3	26,7	0,60	0,66	1,01	
105	FTIR	26,3	0,20	0,22	0,34	

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

5.3.2 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 3.1	Indirekt pyknometrisch n. AVV	2	25,550	0,882
LwK 3.2	Berechnung n. Tabarie auf Basis Alkohol nach LwK 2.1; OIV-MA-AS2-03B	6	26,068	0,661
LwK 3.3	Berechnung n. Tabarie auf Basis anderer Alkoholbest. herkömmliche Verfahren	36 44	26,191 26,164	0,410 0,434
FTIR (gemessen)	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie unmittelbar aus Spektrum ermittelt	50	26,615	0,729
FTIR-Basis	Berechnung nach Tabarie auf der Basis von FTIR-Dichte + FTIR-Alkohol	4	26,075	1,097

5.3.3 FTIR-Laborergebnisse

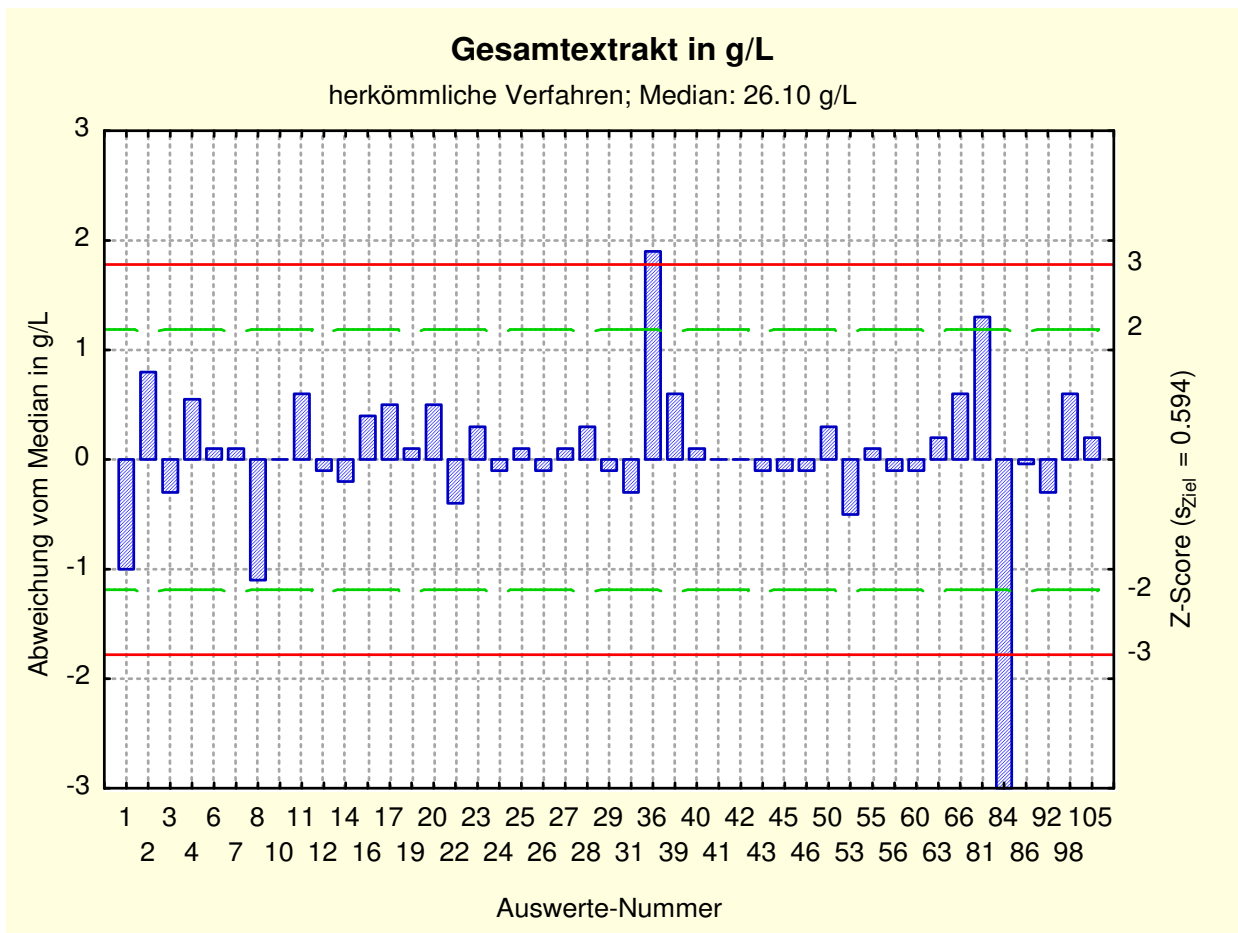
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR (gemessen)	25,1	-0,98	-1,08	-1,65	
202	FTIR (gemessen)	26,2	0,08	0,09	0,13	
203	FTIR (gemessen)	25,9	-0,20	-0,22	-0,34	
204	FTIR (gemessen)	27,7	1,60	1,77	2,69	
206	FTIR (gemessen)	25,1	-0,99	-1,10	-1,67	
208	FTIR (gemessen)	26,6	0,52	0,58	0,88	
210	FTIR (gemessen)	29,3	3,20	3,54	5,39	(**)
212	FTIR (gemessen)	25,8	-0,30	-0,33	-0,51	
217	FTIR (gemessen)	26,9	0,80	0,89	1,35	
218	FTIR (gemessen)	27,2	1,09	1,21	1,84	
219	FTIR (gemessen)	27,3	1,20	1,33	2,02	
220	FTIR (gemessen)	26,6	0,50	0,55	0,84	
221	FTIR (gemessen)	26,5	0,40	0,44	0,67	
222	FTIR (gemessen)	25,9	-0,20	-0,22	-0,34	
223	FTIR (gemessen)	29,1	3,00	3,32	5,05	(**)
224	FTIR-Basis	25,3	-0,80	-0,89	-1,35	
225	FTIR (gemessen)	27,0	0,90	1,00	1,52	
227	FTIR (gemessen)	26,4	0,29	0,32	0,49	
228	FTIR (gemessen)	27,2	1,10	1,22	1,85	
229	FTIR (gemessen)	26,9	0,85	0,94	1,43	
230	FTIR (gemessen)	26,8	0,70	0,77	1,18	
231	FTIR (gemessen)	26,7	0,63	0,70	1,06	
233	FTIR (gemessen)	26,7	0,62	0,69	1,04	
237	FTIR (gemessen)	26,7	0,60	0,66	1,01	
238	FTIR (gemessen)	26,3	0,19	0,21	0,32	
241	FTIR (gemessen)	35,8	9,70	10,73	16,33	(**)
247	FTIR (gemessen)	26,5	0,40	0,44	0,67	
249	FTIR (gemessen)	27,0	0,90	1,00	1,52	
251	FTIR (gemessen)	27,2	1,10	1,22	1,85	
254	FTIR (gemessen)	27,5	1,40	1,55	2,36	
255	FTIR-Basis	27,1	1,00	1,11	1,68	
258	LwK 3.3	25,3	-0,80	-0,89	-1,35	
259	FTIR-Basis	26,7	0,60	0,66	1,01	
260	FTIR-Basis	25,2	-0,90	-1,00	-1,52	
261	FTIR (gemessen)	26,8	0,70	0,77	1,18	
262	FTIR (gemessen)	26,4	0,30	0,33	0,51	
263	FTIR (gemessen)	26,3	0,20	0,22	0,34	
265	FTIR (gemessen)	25,5	-0,60	-0,66	-1,01	
266	FTIR (gemessen)	27,0	0,91	1,01	1,53	
267	FTIR (gemessen)	25,9	-0,20	-0,22	-0,34	
268	FTIR (gemessen)	26,6	0,47	0,52	0,79	
269	FTIR (gemessen)	25,7	-0,40	-0,44	-0,67	
270	FTIR (gemessen)	26,0	-0,10	-0,11	-0,17	
271	FTIR (gemessen)	26,4	0,35	0,39	0,59	
273	FTIR (gemessen)	27,5	1,40	1,55	2,36	
274	FTIR (gemessen)	45,3	19,20	21,25	32,32	(*)
276	FTIR (gemessen)	25,6	-0,51	-0,56	-0,86	
277	FTIR (gemessen)	25,7	-0,40	-0,44	-0,67	
278	FTIR (gemessen)	26,1	0,00	0,00	0,00	
281	FTIR (gemessen)	26,5	0,40	0,44	0,67	
284	FTIR (gemessen)	27,2	1,10	1,22	1,85	
322	FTIR (gemessen)	26,4	0,30	0,33	0,51	
338	FTIR (gemessen)	27,1	0,96	1,06	1,62	

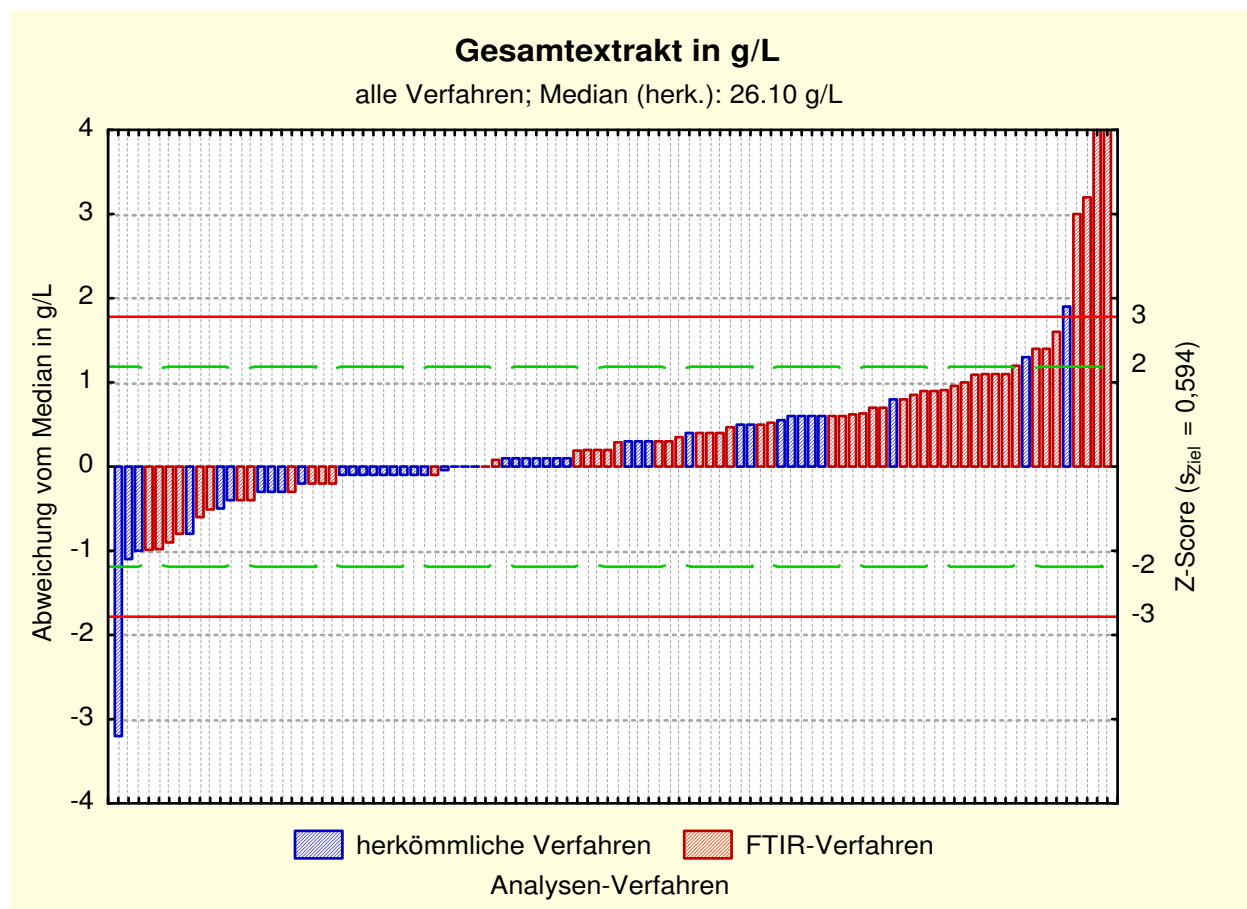
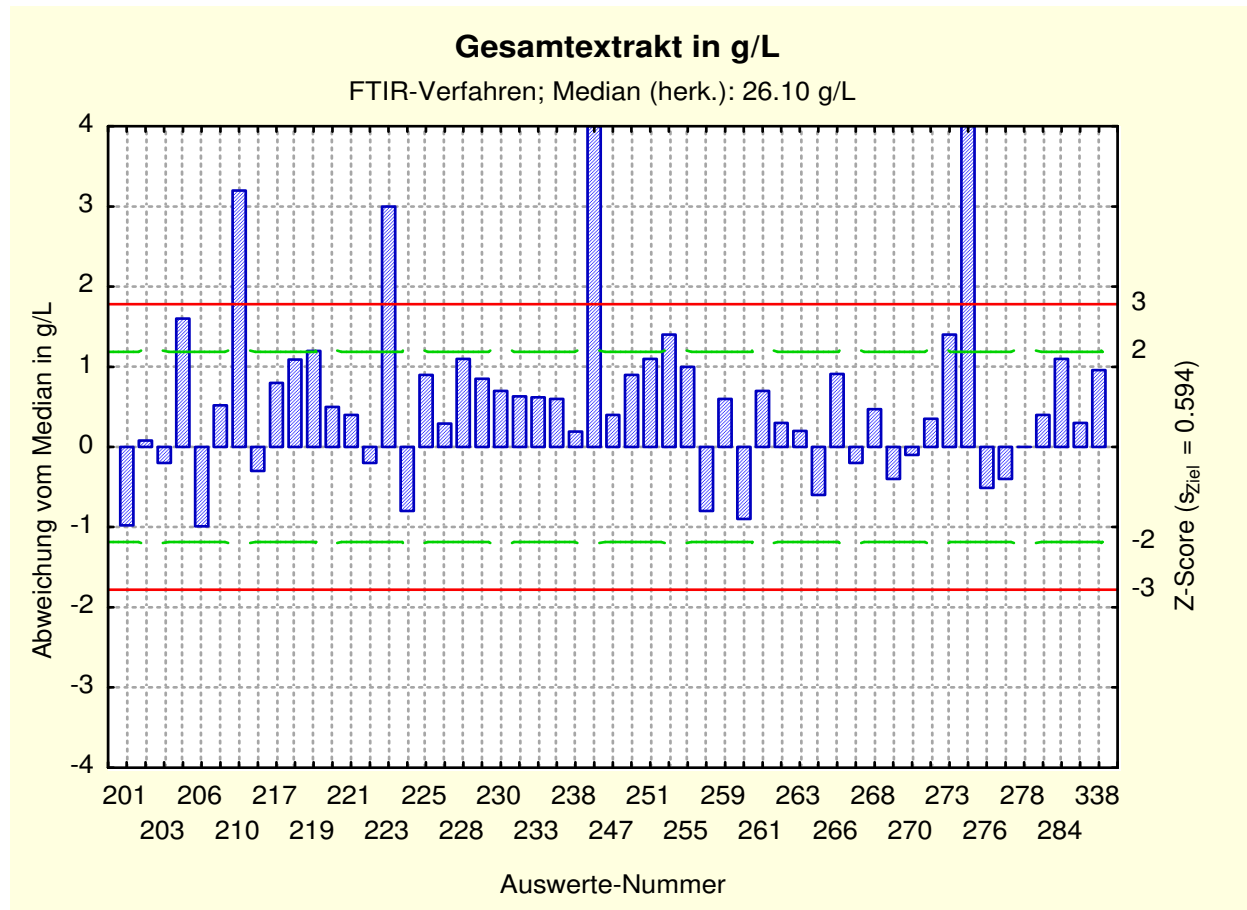
(**) Diese Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der herkömmlichen Werte ab.

5.3.4 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Gesamtextrakt [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	44	43
Minimalwert	22,9	25,0
Mittelwert	26,12	26,20
Median	26,10	26,10
Maximalwert	28,0	28,0
Standardabweichung (s_L)	0,724	0,533
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,109	0,081
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,904	0,904
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,594	0,594
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\ddot{U}\ FTIR}$) ^{*)}	(0,565)	(0,565)
Horrat-Wert (s_L/s_H)	0,80	0,59
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	1,22	0,90
Quotient ($s_L/s_{\ddot{U}\ FTIR}$) ^{*)}	(1,28)	(0,94)
Quotient (u_M/s_H)	0,12	0,09
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,18	0,14
Quotient ($u_M/s_{\ddot{U}\ FTIR}$) ^{*)}	(0,19)	(0,14)

^{*)} Die FTIR-Laborergebnisse wurden mit der Zielstandardabweichung $s_{exp\ herk.}$ bewertet.





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	8,79	-0,140	-0,39	-0,49	
07	LwK 4.5	8,77	-0,160	-0,44	-0,56	
08	LwK 4.7	9,13	0,200	0,55	0,70	
10	LwK 4.5	8,86	-0,070	-0,19	-0,25	
11	LwK 4.7	8,79	-0,140	-0,39	-0,49	
12	LwK 4.1	8,36	-0,570	-1,57	-2,01	
14	LwK 4.5	9,00	0,070	0,19	0,25	
16	LwK 4.5	8,90	-0,030	-0,08	-0,11	
17	LwK 4.5	9,30	0,370	1,02	1,30	
20	LwK 4.5	8,67	-0,260	-0,72	-0,92	
22	LwK 4.7	8,91	-0,020	-0,06	-0,07	
23	LwK 4.7	9,32	0,390	1,07	1,37	
24	NMR	8,94	0,010	0,03	0,04	
25	LwK 4.4	10,20	1,270	3,50	4,47	
26	LwK 4.4	9,40	0,470	1,29	1,65	
27	LwK 4.5	9,05	0,120	0,33	0,42	
28	LwK 4.7	9,70	0,770	2,12	2,71	
29	LwK 4.4	10,10	1,170	3,22	4,12	
31	LwK 4.5	9,50	0,570	1,57	2,01	
36	LwK 4.5	8,30	-0,630	-1,73	-2,22	
39	LwK 4.5	9,20	0,270	0,74	0,95	
40	LwK 4.7	9,00	0,070	0,19	0,25	
41	LwK 4.5	9,10	0,170	0,47	0,60	
42	LwK 4.5	8,87	-0,060	-0,17	-0,21	
43	LwK 4.5	9,00	0,068	0,19	0,24	
45	LwK 4.5	8,88	-0,050	-0,14	-0,18	
46	LwK 4.5	8,60	-0,330	-0,91	-1,16	
50	LwK 4.5	8,90	-0,030	-0,08	-0,11	
53	LwK 4.5	9,70	0,770	2,12	2,71	
55	LwK 4.5	8,80	-0,130	-0,36	-0,46	
56	LwK 4.5	8,95	0,020	0,06	0,07	
60	LwK 4.4	9,70	0,770	2,12	2,71	
61	LwK 4.5	8,90	-0,030	-0,08	-0,11	
63	LwK 4.4	9,05	0,120	0,33	0,42	
66	LwK 4.4	9,20	0,270	0,74	0,95	
68	LwK 4.5	9,02	0,090	0,25	0,32	
72	LwK 4.4	9,70	0,770	2,12	2,71	
74	LwK 4.5	9,20	0,270	0,74	0,95	
75	LwK 4.4	8,40	-0,530	-1,46	-1,87	
81	LwK 4.5	8,09	-0,840	-2,31	-2,96	
84	LwK 4.3	11,47	2,540	6,99	8,94	(**)
92	LwK 4.7	9,07	0,140	0,39	0,49	
98	LwK 4.7	8,90	-0,030	-0,08	-0,11	
105	LwK 4.4	9,20	0,270	0,74	0,95	
107	NMR	8,38	-0,546	-1,50	-1,92	
108	NMR	8,40	-0,528	-1,45	-1,86	
109	NMR	8,57	-0,355	-0,98	-1,25	
110	NMR	9,25	0,318	0,88	1,12	

(**) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der enzymatischen und HPLC-Ergebnisse 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	9,63	0,700	1,93	1,20	
203	LwK 4.8	8,82	-0,110	-0,30	-0,19	
204	LwK 4.8	9,53	0,600	1,65	1,03	
206	LwK 4.8	8,46	-0,470	-1,29	-0,80	
207	LwK 4.8	8,90	-0,030	-0,08	-0,05	
209	LwK 4.8	10,20	1,270	3,50	2,17	
210	LwK 4.8	8,72	-0,210	-0,58	-0,36	
211	LwK 4.8	8,05	-0,880	-2,42	-1,51	

Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse für Vergärbare Zucker

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
212	LwK 4.8	8,98	0,050	0,14	0,09	
213	LwK 4.8	9,51	0,580	1,60	0,99	
214	LwK 4.8	9,63	0,700	1,93	1,20	
216	LwK 4.8	8,60	-0,330	-0,91	-0,57	
217	LwK 4.8	8,80	-0,130	-0,36	-0,22	
218	LwK 4.8	8,01	-0,920	-2,53	-1,58	
219	LwK 4.8	9,23	0,300	0,83	0,51	
220	LwK 4.8	9,40	0,470	1,29	0,80	
221	LwK 4.8	11,40	2,470	6,80	4,23	
222	LwK 4.8	8,33	-0,600	-1,65	-1,03	
224	LwK 4.8	9,14	0,210	0,58	0,36	
225	LwK 4.8	10,20	1,270	3,50	2,17	
226	LwK 4.8	9,74	0,810	2,23	1,39	
227	LwK 4.8	9,46	0,530	1,46	0,91	
228	LwK 4.8	8,20	-0,730	-2,01	-1,25	
229	LwK 4.8	10,30	1,370	3,77	2,35	
230	LwK 4.8	9,17	0,240	0,66	0,41	
231	LwK 4.8	9,17	0,240	0,66	0,41	
233	LwK 4.8	8,57	-0,360	-0,99	-0,62	
235	LwK 4.8	9,57	0,640	1,76	1,10	
236	LwK 4.8	8,10	-0,830	-2,28	-1,42	
237	LwK 4.8	8,90	-0,030	-0,08	-0,05	
238	LwK 4.8	9,43	0,500	1,38	0,86	
241	LwK 4.8	15,34	6,410	17,64	10,98	(*)
242	LwK 4.8	9,40	0,470	1,29	0,80	
243	LwK 4.8	9,19	0,260	0,72	0,45	
244	LwK 4.8	10,90	1,970	5,42	3,37	
245	LwK 4.8	8,64	-0,290	-0,80	-0,50	
246	LwK 4.8	9,68	0,750	2,06	1,28	
247	LwK 4.8	9,39	0,460	1,27	0,79	
248	LwK 4.8	9,31	0,380	1,05	0,65	
249	LwK 4.8	11,00	2,070	5,70	3,54	
250	LwK 4.8	9,10	0,170	0,47	0,29	
251	LwK 4.8	8,25	-0,680	-1,87	-1,16	
254	LwK 4.8	10,40	1,470	4,05	2,52	
255	LwK 4.8	9,30	0,370	1,02	0,63	
256	LwK 4.8	10,10	1,170	3,22	2,00	
257	LwK 4.8	9,02	0,090	0,25	0,15	
258	LwK 4.8	9,50	0,570	1,57	0,98	
259	LwK 4.8	9,43	0,500	1,38	0,86	
260	LwK 4.8	8,70	-0,230	-0,63	-0,39	
261	LwK 4.8	9,30	0,370	1,02	0,63	
262	LwK 4.8	7,70	-1,230	-3,39	-2,11	
263	LwK 4.8	8,50	-0,430	-1,18	-0,74	
264	LwK 4.8	9,58	0,650	1,79	1,11	
265	LwK 4.8	9,22	0,290	0,80	0,50	
266	LwK 4.8	9,44	0,510	1,40	0,87	
267	LwK 4.8	8,83	-0,100	-0,28	-0,17	
268	LwK 4.8	10,08	1,150	3,17	1,97	
269	LwK 4.8	8,60	-0,330	-0,91	-0,57	
270	LwK 4.8	9,54	0,610	1,68	1,04	
271	LwK 4.8	9,20	0,270	0,74	0,46	
273	LwK 4.8	9,77	0,840	2,31	1,44	
274	LwK 4.8	9,30	0,370	1,02	0,63	
275	LwK 4.8	9,50	0,570	1,57	0,98	
276	LwK 4.8	7,50	-1,430	-3,94	-2,45	
277	LwK 4.8	7,50	-1,430	-3,94	-2,45	
278	LwK 4.8	9,20	0,270	0,74	0,46	
281	LwK 4.8	9,47	0,540	1,49	0,92	
282	LwK 4.8	8,57	-0,360	-0,99	-0,62	
284	LwK 4.8	11,40	2,470	6,80	4,23	
322	LwK 4.8	8,33	-0,600	-1,65	-1,03	
338	LwK 4.8	9,84	0,910	2,50	1,56	
349	LwK 4.8	8,80	-0,130	-0,36	-0,22	
363	LwK 4.8	9,10	0,170	0,47	0,29	

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

5.4.3 Reduktometrische Laborergebnisse

(Bewertungsbasis: reduktometrische Verfahren; informative Bewertung)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
12	LwK 4.1	8,36	-0,940	-2,50	-3,20	
25	LwK 4.4	10,20	0,900	2,39	3,06	
26	LwK 4.4	9,40	0,100	0,27	0,34	
29	LwK 4.4	10,10	0,800	2,13	2,72	
60	LwK 4.4	9,70	0,400	1,06	1,36	
63	LwK 4.4	9,05	-0,250	-0,66	-0,85	
66	LwK 4.4	9,20	-0,100	-0,27	-0,34	
72	LwK 4.4	9,70	0,400	1,06	1,36	
75	LwK 4.4	8,40	-0,900	-2,39	-3,06	
84	LwK 4.3	11,47	2,170	5,77	7,38	(**)
105	LwK 4.4	9,20	-0,100	-0,27	-0,34	

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

5.4.4 FTIR-Laboregebnisse 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	9,63	0,230	0,61	0,39	
203	LwK 4.8	8,82	-0,580	-1,53	-0,99	
204	LwK 4.8	9,53	0,130	0,34	0,22	
206	LwK 4.8	8,46	-0,940	-2,48	-1,61	
207	LwK 4.8	8,90	-0,500	-1,32	-0,86	
209	LwK 4.8	10,20	0,800	2,11	1,37	
210	LwK 4.8	8,72	-0,680	-1,79	-1,16	
211	LwK 4.8	8,05	-1,350	-3,56	-2,31	
212	LwK 4.8	8,98	-0,420	-1,11	-0,72	
213	LwK 4.8	9,51	0,110	0,29	0,19	
214	LwK 4.8	9,63	0,230	0,61	0,39	
216	LwK 4.8	8,60	-0,800	-2,11	-1,37	
217	LwK 4.8	8,80	-0,600	-1,58	-1,03	
218	LwK 4.8	8,01	-1,390	-3,66	-2,38	
219	LwK 4.8	9,23	-0,170	-0,45	-0,29	
220	LwK 4.8	9,40	0,000	0,00	0,00	
221	LwK 4.8	11,40	2,000	5,27	3,42	
222	LwK 4.8	8,33	-1,070	-2,82	-1,83	
224	LwK 4.8	9,14	-0,260	-0,69	-0,45	
225	LwK 4.8	10,20	0,800	2,11	1,37	
226	LwK 4.8	9,74	0,340	0,90	0,58	
227	LwK 4.8	9,46	0,060	0,16	0,10	
228	LwK 4.8	8,20	-1,200	-3,16	-2,05	
229	LwK 4.8	10,30	0,900	2,37	1,54	
230	LwK 4.8	9,17	-0,230	-0,61	-0,39	
231	LwK 4.8	9,17	-0,230	-0,61	-0,39	
233	LwK 4.8	8,57	-0,830	-2,19	-1,42	
235	LwK 4.8	9,57	0,170	0,45	0,29	
236	LwK 4.8	8,10	-1,300	-3,43	-2,23	
237	LwK 4.8	8,90	-0,500	-1,32	-0,86	
238	LwK 4.8	9,43	0,030	0,08	0,05	
241	LwK 4.8	15,34	5,940	15,65	10,17	(*)
242	LwK 4.8	9,40	0,000	0,00	0,00	
243	LwK 4.8	9,19	-0,210	-0,55	-0,36	
244	LwK 4.8	10,90	1,500	3,95	2,57	
245	LwK 4.8	8,64	-0,760	-2,00	-1,30	
246	LwK 4.8	9,68	0,280	0,74	0,48	
247	LwK 4.8	9,39	-0,010	-0,03	-0,02	
248	LwK 4.8	9,31	-0,090	-0,24	-0,15	
249	LwK 4.8	11,00	1,600	4,22	2,74	
250	LwK 4.8	9,10	-0,300	-0,79	-0,51	
251	LwK 4.8	8,25	-1,150	-3,03	-1,97	
254	LwK 4.8	10,40	1,000	2,63	1,71	
255	LwK 4.8	9,30	-0,100	-0,26	-0,17	

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

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker (r)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
256	LwK 4.8	10,10	0,700	1,84	1,20	
257	LwK 4.8	9,02	-0,380	-1,00	-0,65	
258	LwK 4.8	9,50	0,100	0,26	0,17	
259	LwK 4.8	9,43	0,030	0,08	0,05	
260	LwK 4.8	8,70	-0,700	-1,84	-1,20	
261	LwK 4.8	9,30	-0,100	-0,26	-0,17	
262	LwK 4.8	7,70	-1,700	-4,48	-2,91	
263	LwK 4.8	8,50	-0,900	-2,37	-1,54	
264	LwK 4.8	9,58	0,180	0,47	0,31	
265	LwK 4.8	9,22	-0,180	-0,47	-0,31	
266	LwK 4.8	9,44	0,040	0,11	0,07	
267	LwK 4.8	8,83	-0,570	-1,50	-0,98	
268	LwK 4.8	10,08	0,680	1,79	1,16	
269	LwK 4.8	8,60	-0,800	-2,11	-1,37	
270	LwK 4.8	9,54	0,140	0,37	0,24	
271	LwK 4.8	9,20	-0,200	-0,53	-0,34	
273	LwK 4.8	9,77	0,370	0,97	0,63	
274	LwK 4.8	9,30	-0,100	-0,26	-0,17	
275	LwK 4.8	9,50	0,100	0,26	0,17	
276	LwK 4.8	7,50	-1,900	-5,01	-3,25	
277	LwK 4.8	7,50	-1,900	-5,01	-3,25	
278	LwK 4.8	9,20	-0,200	-0,53	-0,34	
281	LwK 4.8	9,47	0,070	0,18	0,12	
282	LwK 4.8	8,57	-0,830	-2,19	-1,42	
284	LwK 4.8	11,40	2,000	5,27	3,42	
322	LwK 4.8	8,33	-1,070	-2,82	-1,83	
338	LwK 4.8	9,84	0,440	1,16	0,75	
349	LwK 4.8	8,80	-0,600	-1,58	-1,03	
363	LwK 4.8	9,10	-0,300	-0,79	-0,51	

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	9,21	0,280	0,77	0,48	
202	LwK 4.8	9,63	0,700	1,93	1,20	
203	LwK 4.8	8,82	-0,110	-0,30	-0,19	
204	LwK 4.8	9,51	0,580	1,60	0,99	
205	LwK 4.8	8,62	-0,310	-0,85	-0,53	
206	LwK 4.8	8,46	-0,470	-1,29	-0,80	
207	LwK 4.8	8,80	-0,130	-0,36	-0,22	
208	LwK 4.8	8,52	-0,410	-1,13	-0,70	
209	LwK 4.8	9,70	0,770	2,12	1,32	
210	LwK 4.8	8,72	-0,210	-0,58	-0,36	
211	LwK 4.8	8,05	-0,880	-2,42	-1,51	
212	LwK 4.8	8,98	0,050	0,14	0,09	
213	LwK 4.8	9,75	0,820	2,26	1,40	
214	LwK 4.8	10,97	2,040	5,61	3,49	
216	LwK 4.8	8,70	-0,230	-0,63	-0,39	
217	LwK 4.8	8,81	-0,120	-0,33	-0,21	
218	LwK 4.8	7,28	-1,650	-4,54	-2,83	
219	LwK 4.8	9,04	0,110	0,30	0,19	
220	LwK 4.8	8,62	-0,310	-0,85	-0,53	
221	LwK 4.8	11,50	2,570	7,07	4,40	
222	LwK 4.8	8,74	-0,190	-0,52	-0,33	
223	LwK 4.8	8,89	-0,040	-0,11	-0,07	
224	LwK 4.8	9,54	0,610	1,68	1,04	
225	LwK 4.8	10,30	1,370	3,77	2,35	
226	LwK 4.8	8,78	-0,150	-0,41	-0,26	
227	LwK 4.8	9,50	0,570	1,57	0,98	
228	LwK 4.8	8,80	-0,130	-0,36	-0,22	
229	LwK 4.8	9,62	0,690	1,90	1,18	
230	LwK 4.8	8,65	-0,280	-0,77	-0,48	
231	LwK 4.8	9,69	0,760	2,09	1,30	
233	LwK 4.8	8,57	-0,360	-0,99	-0,62	

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker(S)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
235	LwK 4.8	9,32	0,390	1,07	0,67	
236	LwK 4.8	8,10	-0,830	-2,28	-1,42	
237	LwK 4.8	9,70	0,770	2,12	1,32	
238	LwK 4.8	10,48	1,550	4,27	2,65	
241	LwK 4.8	8,79	-0,140	-0,39	-0,24	
242	LwK 4.8	8,60	-0,330	-0,91	-0,57	
243	LwK 4.8	8,80	-0,130	-0,36	-0,22	
244	LwK 4.8	9,43	0,500	1,38	0,86	
245	LwK 4.8	8,89	-0,040	-0,11	-0,07	
246	LwK 4.8	8,20	-0,730	-2,01	-1,25	
247	LwK 4.8	9,70	0,770	2,12	1,32	
248	LwK 4.8	9,76	0,830	2,28	1,42	
249	LwK 4.8	10,90	1,970	5,42	3,37	
250	LwK 4.8	9,35	0,420	1,16	0,72	
251	LwK 4.8	8,24	-0,690	-1,90	-1,18	
254	LwK 4.8	9,10	0,170	0,47	0,29	
256	LwK 4.8	9,60	0,670	1,84	1,15	
257	LwK 4.8	8,85	-0,080	-0,22	-0,14	
258	LwK 4.8	10,10	1,170	3,22	2,00	
259	LwK 4.8	10,66	1,730	4,76	2,96	
260	LwK 4.8	9,10	0,170	0,47	0,29	
261	LwK 4.8	8,70	-0,230	-0,63	-0,39	
262	LwK 4.8	7,80	-1,130	-3,11	-1,93	
263	LwK 4.8	9,60	0,670	1,84	1,15	
264	LwK 4.8	9,58	0,650	1,79	1,11	
265	LwK 4.8	15,60	6,670	18,36	11,42	(*)
266	LwK 4.8	8,78	-0,150	-0,41	-0,26	
267	LwK 4.8	10,09	1,160	3,19	1,99	
269	LwK 4.8	8,60	-0,330	-0,91	-0,57	
270	LwK 4.8	9,32	0,390	1,07	0,67	
271	LwK 4.8	10,04	1,110	3,06	1,90	
273	LwK 4.8	9,70	0,770	2,12	1,32	
274	LwK 4.8	8,20	-0,730	-2,01	-1,25	
275	LwK 4.8	9,50	0,570	1,57	0,98	
276	LwK 4.8	10,15	1,220	3,36	2,09	
277	LwK 4.8	10,18	1,250	3,44	2,14	
278	LwK 4.8	8,40	-0,530	-1,46	-0,91	
280	LwK 4.8	9,28	0,350	0,96	0,60	
281	LwK 4.8	9,81	0,880	2,42	1,51	
282	LwK 4.8	8,45	-0,480	-1,32	-0,82	
283	LwK 4.8	7,77	-1,155	-3,18	-1,98	
313	LwK 4.8	7,82	-1,110	-3,06	-1,90	
322	LwK 4.8	7,59	-1,340	-3,69	-2,29	
338	LwK 4.8	10,47	1,540	4,24	2,64	
349	LwK 4.8	10,90	1,970	5,42	3,37	
363	LwK 4.8	9,90	0,970	2,67	1,66	

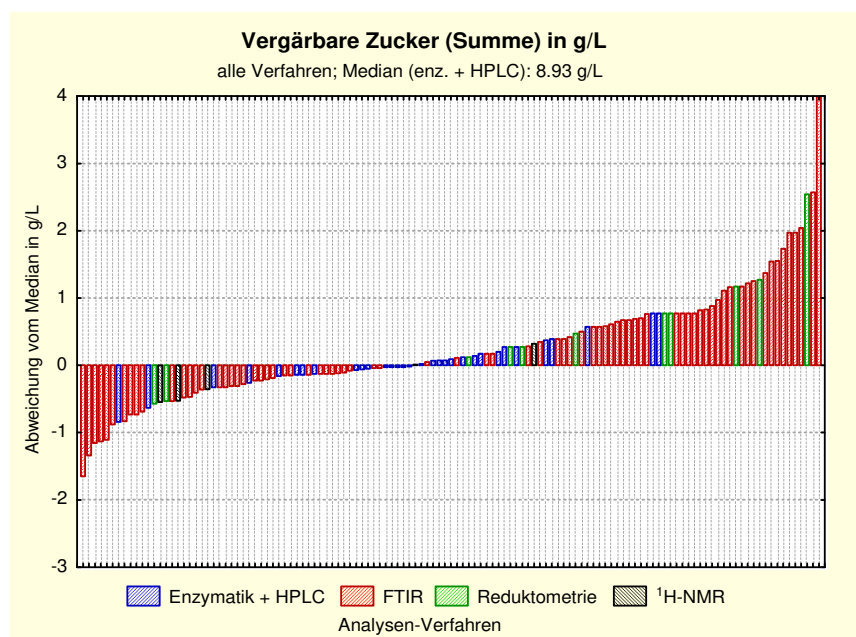
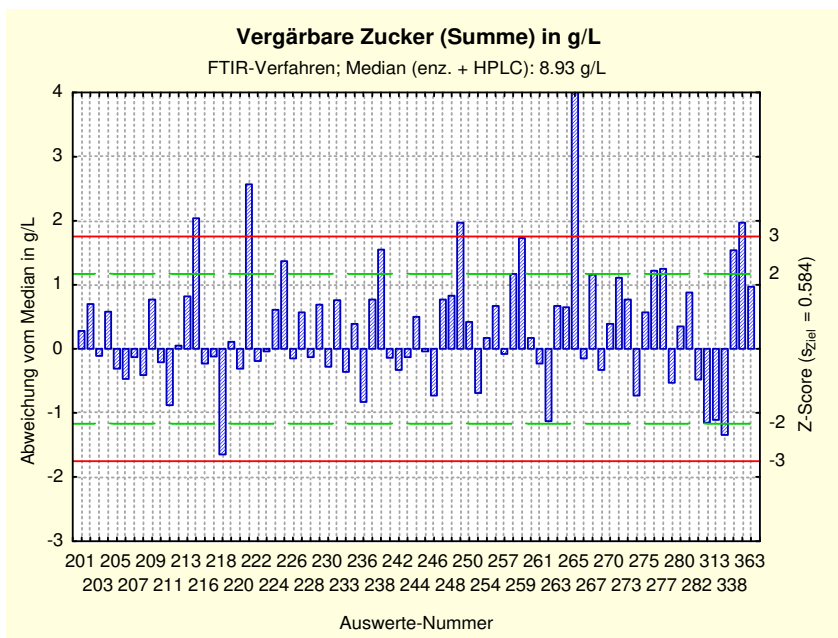
(*) Dieser Wert weicht um mehr als 50 % vom Median der herkömmlichen Wert ab.

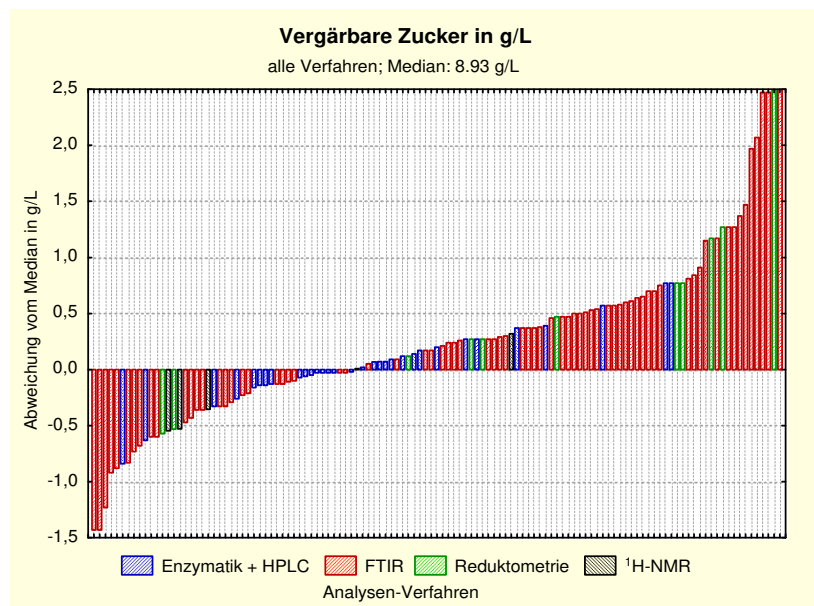
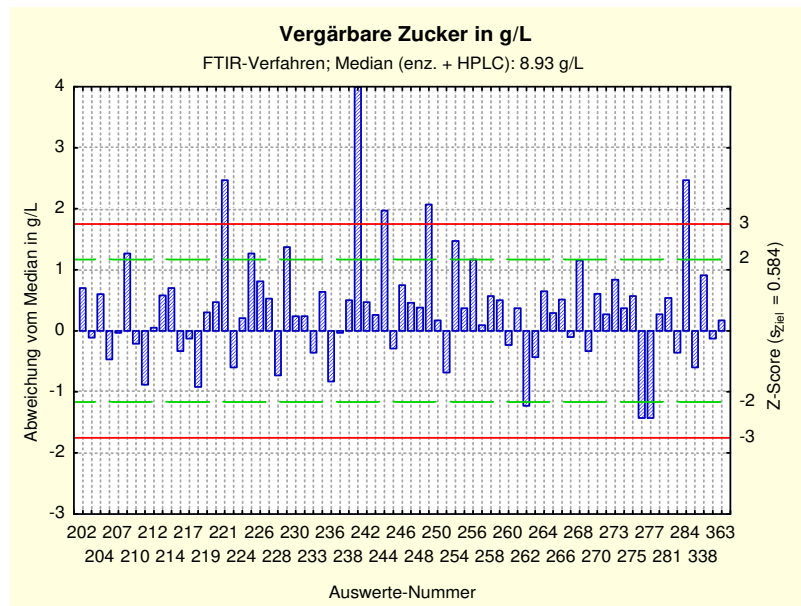
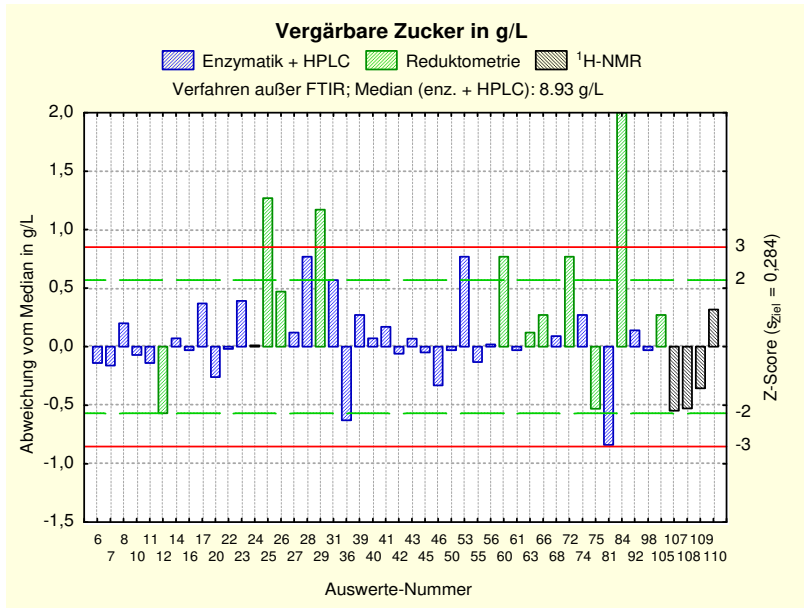
5.4.6 Angaben zu den Analyseverfahren

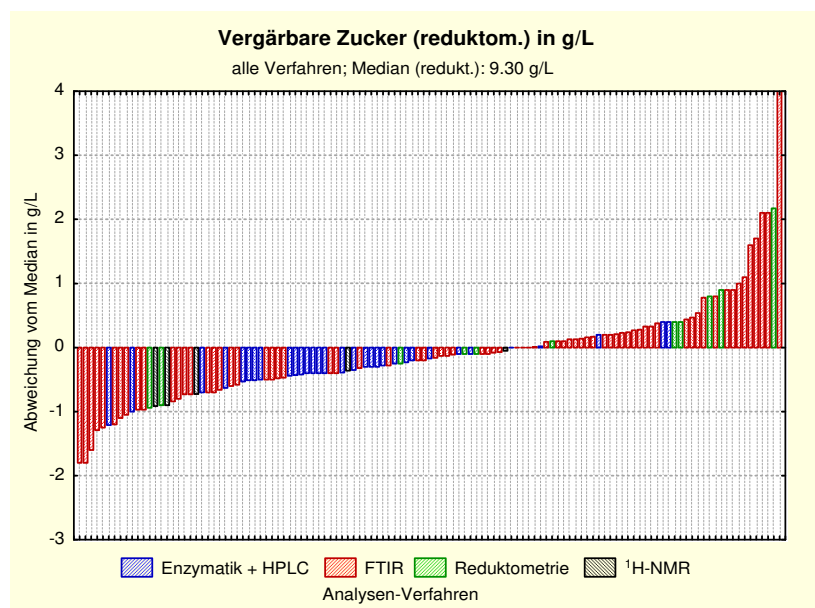
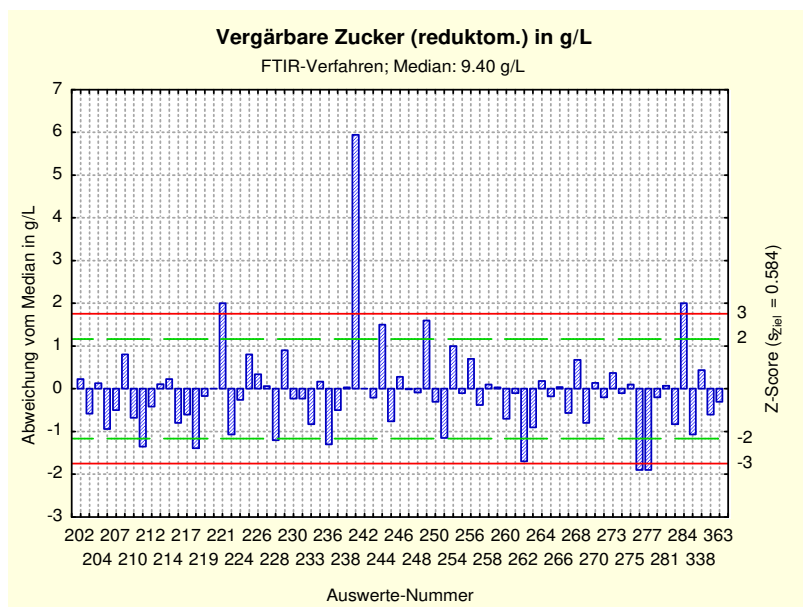
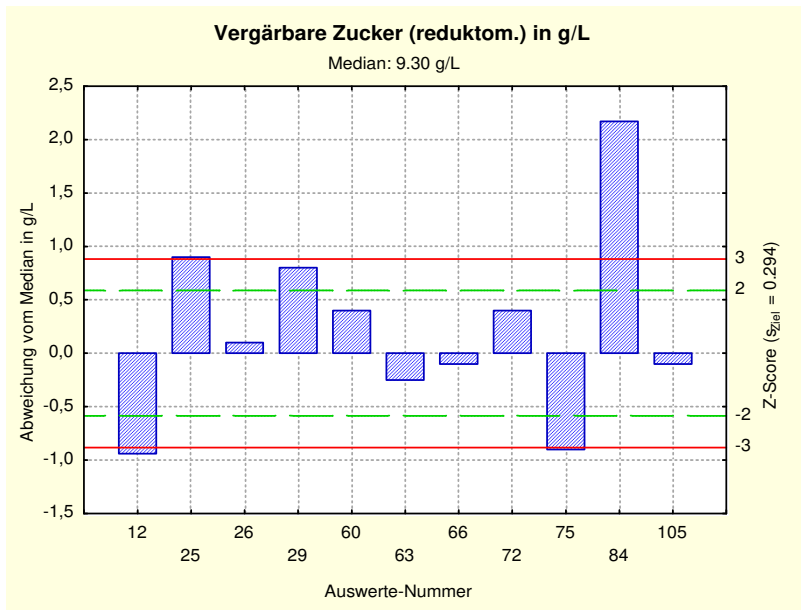
Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 4.1	Bestimmung n. Luff-Schoorl; OIV-MA-AS311-01A	1	8,360	
LwK 4.3	Schnellmethode n. Dr. Jakob	1	11,470	
LwK 4.4	Schnellmethode n. Dr. Rebelein	9	9,446	0,545
	reduktometrische Verfahren	11	9,464	0,771
LwK 4.5	Enzymatische Methode; OIV-MA-AS311-02	24	8,936	0,251
LwK 4.7	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; OIV-MA-AS311-03	8	9,071	0,253
	enzymatische und HPLC-Verfahren	32	8,972	0,251
LwK 4.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie			
	Basis: Vergärbare Zucker (r)	73	9,209	0,716
	Basis: Vergärbare Zucker (S)	77	9,199	0,853
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	5	8,692	0,390

5.4.7 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Vergärbare Zucker [g/L]	HPLC + enzymatisch	reduktometrisch	
	alle Daten	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	32	11	10
Minimalwert	8,09	8,36	8,36
Mittelwert	8,974	9,525	9,331
Median	8,930	9,400	9,300
Maximalwert	9,70	11,47	10,20
Standardabweichung (s_L)	0,330	0,878	0,628
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,058	0,265	0,199
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,363	0,380	0,376
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,284	0,297	0,294
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\ddot{U}\ FTIR}$)	0,584	0,584	0,584
Horrat-Wert (s_L/s_H)	0,91	2,31	1,67
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	1,16	2,96	2,14
Quotient ($s_L/s_{\ddot{U}\ FTIR}$)	0,57	1,50	1,07
Quotient (u_M/s_H)	0,16	0,70	0,53
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,21	0,89	0,68
Quotient ($u_M/s_{\ddot{U}\ FTIR}$)	0,10	0,45	0,34







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	3,76	0,050	0,29	0,35	
02	enzymat. Hand	3,62	-0,090	-0,52	-0,63	
04	HPLC	3,52	-0,190	-1,10	-1,33	
05	enzymat., autom.	4,03	0,320	1,86	2,24	
06	enzymat., autom.	3,69	-0,020	-0,12	-0,14	
07	enzymat. Hand	3,78	0,070	0,41	0,49	
08	HPLC	3,89	0,180	1,04	1,26	
10	enzymat. Hand	3,69	-0,020	-0,12	-0,14	
11	HPLC	3,71	0,000	0,00	0,00	
12	enzymat., autom.	3,72	0,010	0,06	0,07	
14	enzymat., autom.	3,78	0,070	0,41	0,49	
16	enzymat., autom.	3,78	0,070	0,41	0,49	
17	enzymat., autom.	3,67	-0,036	-0,21	-0,25	
20	enzymat., autom.	3,59	-0,120	-0,70	-0,84	
22	HPLC	3,61	-0,100	-0,58	-0,70	
23	HPLC	3,81	0,100	0,58	0,70	
24	NMR	3,78	0,070	0,41	0,49	
27	enzymat., autom.	3,77	0,060	0,35	0,42	
28	HPLC	3,79	0,080	0,46	0,56	
31	enzymat., autom.	3,78	0,070	0,41	0,49	
36	enzymat., autom.	3,00	-0,710	-4,12	-4,96	
39	enzymat., autom.	3,80	0,090	0,52	0,63	
40	HPLC	3,60	-0,110	-0,64	-0,77	
41	enzymat., autom.	3,77	0,060	0,35	0,42	
42	enzymat., autom.	3,73	0,020	0,12	0,14	
43	enzymat., autom.	3,60	-0,109	-0,63	-0,76	
45	enzymat., autom.	3,83	0,120	0,70	0,84	
46	enzymat., autom.	3,60	-0,110	-0,64	-0,77	
50	enzymat., autom.	3,69	-0,020	-0,12	-0,14	
53	enzymat., autom.	3,84	0,130	0,75	0,91	
56	enzymat., autom.	3,70	-0,010	-0,06	-0,07	
68	enzymat., autom.	3,76	0,050	0,29	0,35	
81	enzymat. Hand	3,41	-0,305	-1,77	-2,13	
85	HPLC	3,54	-0,170	-0,99	-1,19	
92	HPLC	3,65	-0,060	-0,35	-0,42	
98	HPLC	3,60	-0,110	-0,64	-0,77	
107	NMR	3,69	-0,020	-0,12	-0,14	
108	NMR	3,76	0,047	0,27	0,33	
109	NMR	3,76	0,048	0,28	0,33	
110	NMR	4,06	0,353	2,05	2,47	

5.5.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	3,96	0,250	1,45	0,61	
202	FTIR	3,98	0,270	1,57	0,66	
203	FTIR	3,76	0,050	0,29	0,12	
204	FTIR	4,10	0,390	2,26	0,96	
205	FTIR	3,99	0,280	1,63	0,69	
206	FTIR	3,73	0,020	0,12	0,05	
207	FTIR	4,20	0,490	2,84	1,20	
208	FTIR	3,59	-0,120	-0,70	-0,29	
209	FTIR	4,70	0,990	5,75	2,43	
210	FTIR	3,41	-0,300	-1,74	-0,74	
211	FTIR	3,55	-0,160	-0,93	-0,39	
212	FTIR	3,55	-0,160	-0,93	-0,39	
213	FTIR	4,20	0,490	2,84	1,20	
214	FTIR	4,60	0,890	5,17	2,18	
216	FTIR	4,00	0,290	1,68	0,71	
217	FTIR	4,24	0,530	3,08	1,30	
218	FTIR	3,14	-0,570	-3,31	-1,40	
219	FTIR	3,98	0,270	1,57	0,66	
220	FTIR	3,51	-0,200	-1,16	-0,49	

Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
221	FTIR	6,20	2,490	14,45	6,10	(*)
222	FTIR	3,59	-0,120	-0,70	-0,29	
223	FTIR	4,24	0,530	3,08	1,30	
224	FTIR	3,60	-0,110	-0,64	-0,27	
225	FTIR	4,50	0,790	4,59	1,94	
226	FTIR	3,28	-0,430	-2,50	-1,05	
227	FTIR	4,15	0,440	2,55	1,08	
228	FTIR	3,90	0,190	1,10	0,47	
229	FTIR	4,84	1,130	6,56	2,77	
230	FTIR	3,79	0,080	0,46	0,20	
231	FTIR	4,16	0,450	2,61	1,10	
233	FTIR	3,36	-0,350	-2,03	-0,86	
235	FTIR	4,10	0,390	2,26	0,96	
236	FTIR	3,80	0,090	0,52	0,22	
237	FTIR	4,60	0,890	5,17	2,18	
238	FTIR	5,62	1,910	11,09	4,68	
241	FTIR	3,79	0,080	0,46	0,20	
242	FTIR	3,80	0,090	0,52	0,22	
243	FTIR	3,20	-0,510	-2,96	-1,25	
244	FTIR	4,40	0,690	4,00	1,69	
245	FTIR	3,53	-0,180	-1,04	-0,44	
246	FTIR	3,40	-0,310	-1,80	-0,76	
247	FTIR	4,15	0,440	2,55	1,08	
248	FTIR	4,52	0,810	4,70	1,99	
249	FTIR	4,70	0,990	5,75	2,43	
250	FTIR	3,91	0,200	1,16	0,49	
251	FTIR	3,22	-0,490	-2,84	-1,20	
254	FTIR	4,20	0,490	2,84	1,20	
256	FTIR	3,70	-0,010	-0,06	-0,02	
257	FTIR	3,82	0,110	0,64	0,27	
258	FTIR	4,40	0,690	4,00	1,69	
259	FTIR	4,60	0,890	5,17	2,18	
260	FTIR	4,40	0,690	4,00	1,69	
261	FTIR	3,60	-0,110	-0,64	-0,27	
262	FTIR	3,50	-0,210	-1,22	-0,51	
263	FTIR	3,70	-0,010	-0,06	-0,02	
264	FTIR	3,75	0,040	0,23	0,10	
265	FTIR	10,22	6,510	37,79	15,96	(*)
266	FTIR	3,71	0,000	0,00	0,00	
267	FTIR	4,14	0,430	2,50	1,05	
269	FTIR	4,30	0,590	3,42	1,45	
270	FTIR	3,30	-0,410	-2,38	-1,00	
271	FTIR	4,35	0,640	3,71	1,57	
273	FTIR	3,35	-0,360	-2,09	-0,88	
274	FTIR	3,70	-0,010	-0,06	-0,02	
275	FTIR	4,28	0,570	3,31	1,40	
276	FTIR	4,94	1,230	7,14	3,01	
277	FTIR	4,95	1,240	7,20	3,04	
278	FTIR	3,50	-0,210	-1,22	-0,51	
280	FTIR	4,24	0,530	3,08	1,30	
281	FTIR	4,89	1,180	6,85	2,89	
282	FTIR	4,08	0,370	2,15	0,91	
283	FTIR	3,00	-0,705	-4,09	-1,73	
313	FTIR	2,98	-0,730	-4,24	-1,79	
322	FTIR	2,56	-1,150	-6,67	-2,82	
338	FTIR	3,91	0,200	1,16	0,49	
349	FTIR	4,80	1,090	6,33	2,67	
363	FTIR	3,70	-0,010	-0,06	-0,02	

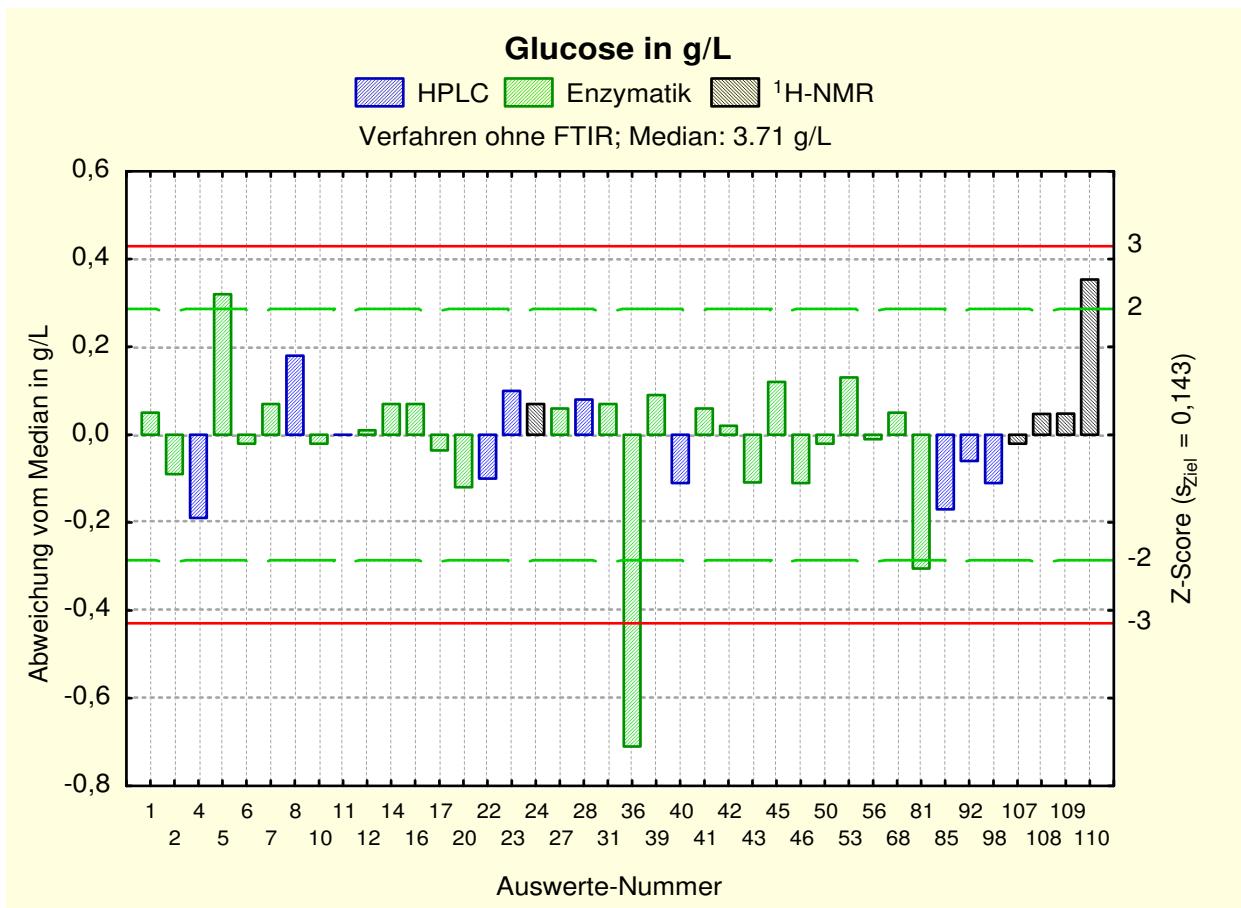
(*) Diese Werte weichen um mehr als 50 % vom Median der herkömmlichen Werte ab.

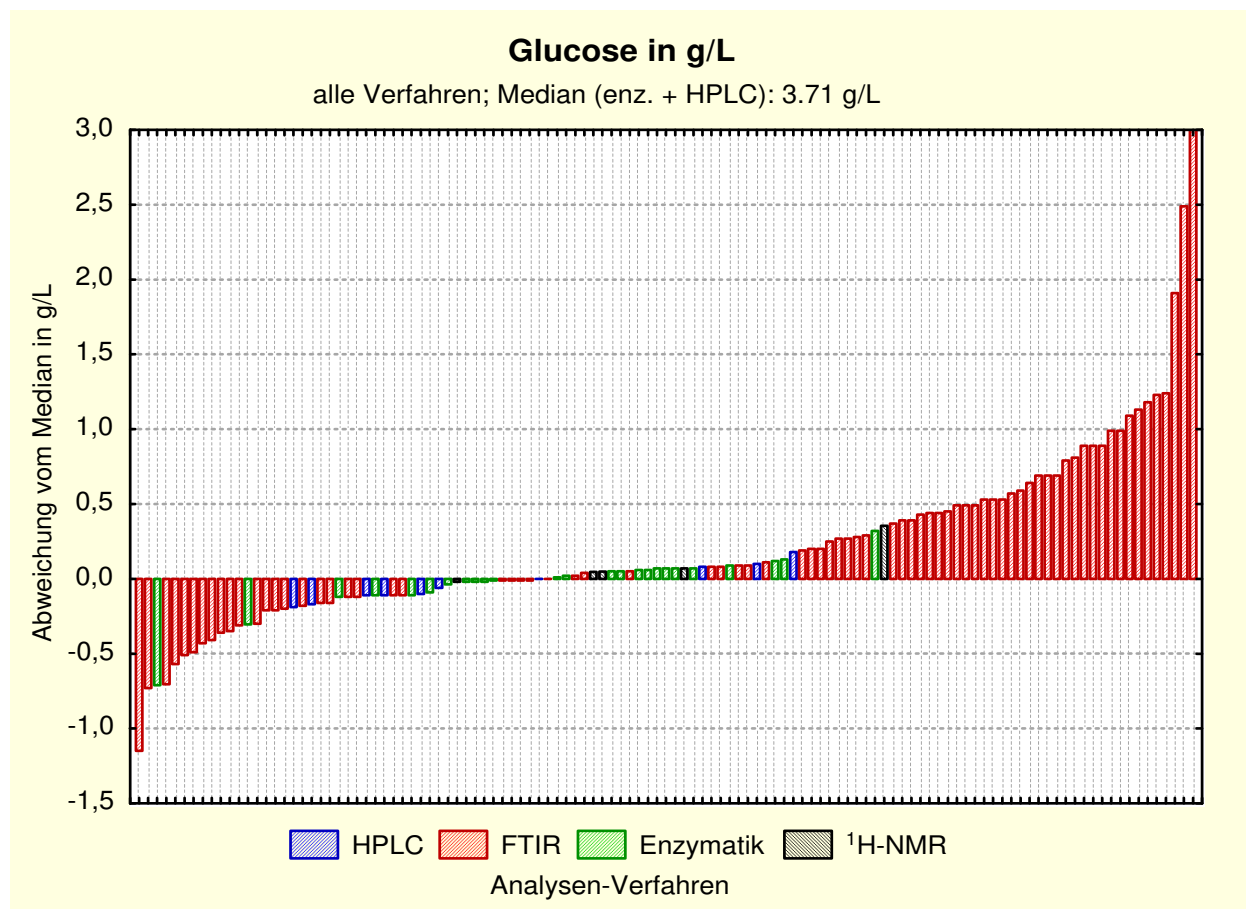
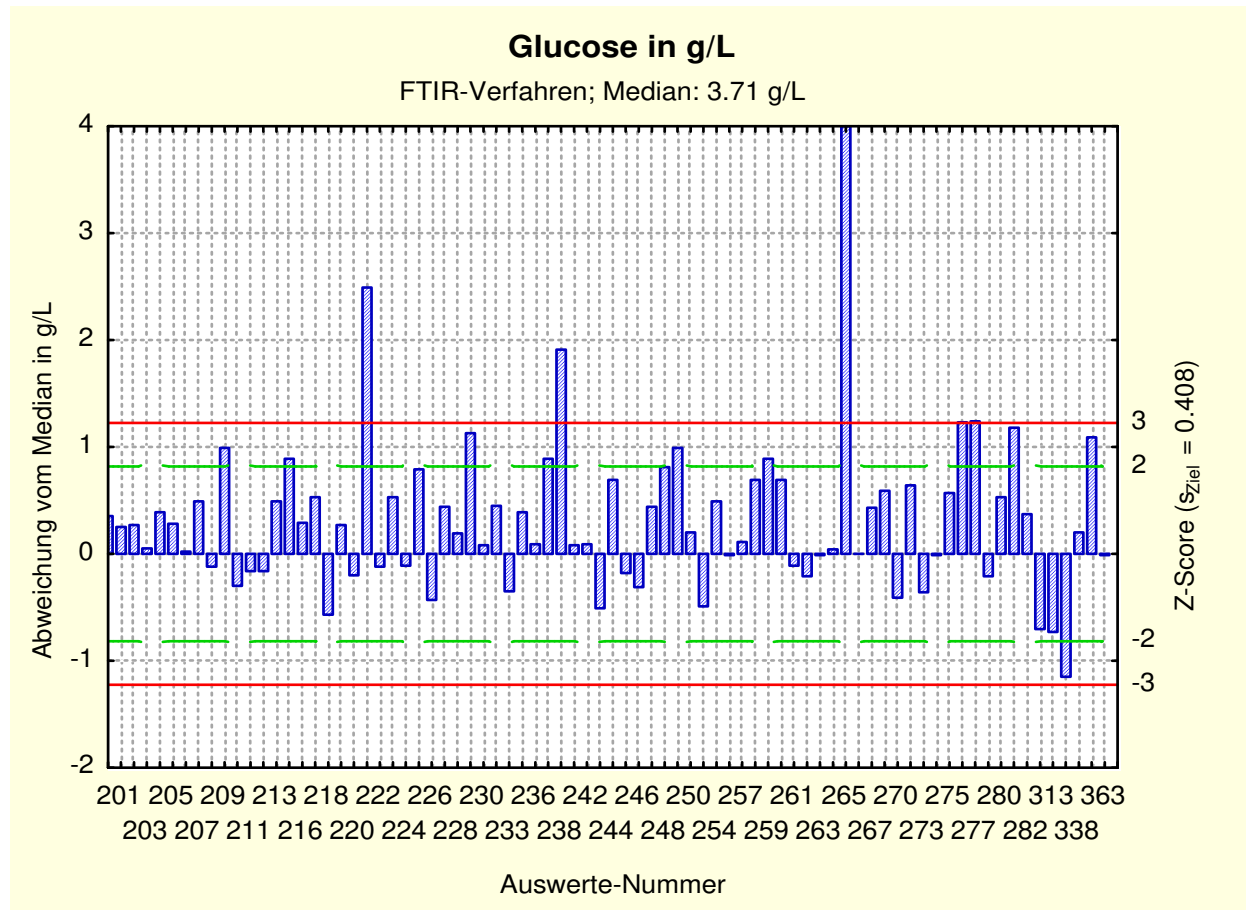
5.5.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Glucose [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	35
Minimalwert	3,00
Mittelwert	3,689
Median	3,710
Maximalwert	4,03
Standardabweichung (s_L)	0,168
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,028
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,172
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,143
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,408
Horrat-Wert (s_L/s_H)	0,97
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	1,17
Quotient ($s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,41
Quotient (u_M/s_H)	0,16
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,20
Quotient ($u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,07

5.5.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; OIV-MA-AS311-03	10	3,671	0,137
enzymat. autom.	enzymatisch; OIV-MA-AS311-02, automatisiert	20	3,728	0,097
enzymat. Hand	enzymatisch; OIV-MA-AS311-02, manuell	5	3,652	0,168
	herkömmliche Verfahren	35	3,703	0,116
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	77	3,974	0,562
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	5	3,789	0,108





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	5,09	-0,155	-0,67	-0,84	
02	enzymat. Hand	5,06	-0,185	-0,80	-1,00	
05	enzymat., autom.	5,35	0,105	0,45	0,57	
06	enzymat., autom.	5,10	-0,145	-0,63	-0,79	
07	enzymat. Hand	5,19	-0,055	-0,24	-0,30	
08	HPLC	5,24	-0,005	-0,02	-0,03	
10	enzymat. Hand	5,17	-0,075	-0,32	-0,41	
11	HPLC	5,08	-0,165	-0,71	-0,89	
12	enzymat., autom.	5,25	0,005	0,02	0,03	
14	enzymat., autom.	5,25	0,005	0,02	0,03	
16	enzymat., autom.	5,10	-0,145	-0,63	-0,79	
17	enzymat., autom.	5,58	0,333	1,44	1,80	
20	enzymat., autom.	5,08	-0,165	-0,71	-0,89	
22	HPLC	5,30	0,055	0,24	0,30	
23	HPLC	5,51	0,265	1,15	1,44	
24	NMR	5,16	-0,085	-0,37	-0,46	
27	enzymat., autom.	5,28	0,035	0,15	0,19	
28	HPLC	5,90	0,655	2,83	3,55	
31	enzymat., autom.	5,71	0,465	2,01	2,52	
36	enzymat., autom.	5,30	0,055	0,24	0,30	
39	enzymat., autom.	5,40	0,155	0,67	0,84	
40	HPLC	5,40	0,155	0,67	0,84	
41	enzymat., autom.	5,30	0,052	0,22	0,28	
42	enzymat., autom.	5,13	-0,110	-0,48	-0,60	
43	enzymat., autom.	5,40	0,153	0,66	0,83	
45	enzymat., autom.	5,05	-0,195	-0,84	-1,06	
46	enzymat., autom.	5,10	-0,145	-0,63	-0,79	
50	enzymat., autom.	5,19	-0,055	-0,24	-0,30	
53	enzymat., autom.	5,31	0,065	0,28	0,35	
56	enzymat., autom.	5,25	0,005	0,02	0,03	
68	enzymat., autom.	5,23	-0,015	-0,06	-0,08	
81	enzymat. Hand	4,68	-0,565	-2,44	-3,06	
85	HPLC	4,97	-0,275	-1,19	-1,49	
87	enzymat., autom.	4,97	-0,275	-1,19	-1,49	
92	HPLC	5,42	0,175	0,76	0,95	
107	NMR	4,69	-0,551	-2,38	-2,99	
108	NMR	4,64	-0,600	-2,60	-3,25	
109	NMR	4,82	-0,428	-1,85	-2,32	
110	NMR	5,18	-0,060	-0,26	-0,33	

5.6.2 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	5,25	0,005	0,02	0,02	
202	FTIR	5,65	0,405	1,75	1,23	
203	FTIR	5,06	-0,185	-0,80	-0,56	
204	FTIR	5,41	0,165	0,71	0,50	
205	FTIR	4,63	-0,615	-2,66	-1,86	
206	FTIR	4,73	-0,515	-2,23	-1,56	
207	FTIR	4,60	-0,645	-2,79	-1,95	
208	FTIR	4,93	-0,315	-1,36	-0,95	
209	FTIR	5,00	-0,245	-1,06	-0,74	
210	FTIR	5,31	0,065	0,28	0,20	
211	FTIR	4,50	-0,745	-3,22	-2,26	
212	FTIR	5,43	0,185	0,80	0,56	
213	FTIR	5,55	0,305	1,32	0,92	
214	FTIR	6,37	1,125	4,87	3,41	
216	FTIR	4,70	-0,545	-2,36	-1,65	
217	FTIR	4,57	-0,675	-2,92	-2,05	
218	FTIR	4,14	-1,105	-4,78	-3,35	
219	FTIR	5,06	-0,185	-0,80	-0,56	
220	FTIR	5,11	-0,135	-0,58	-0,41	

Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse

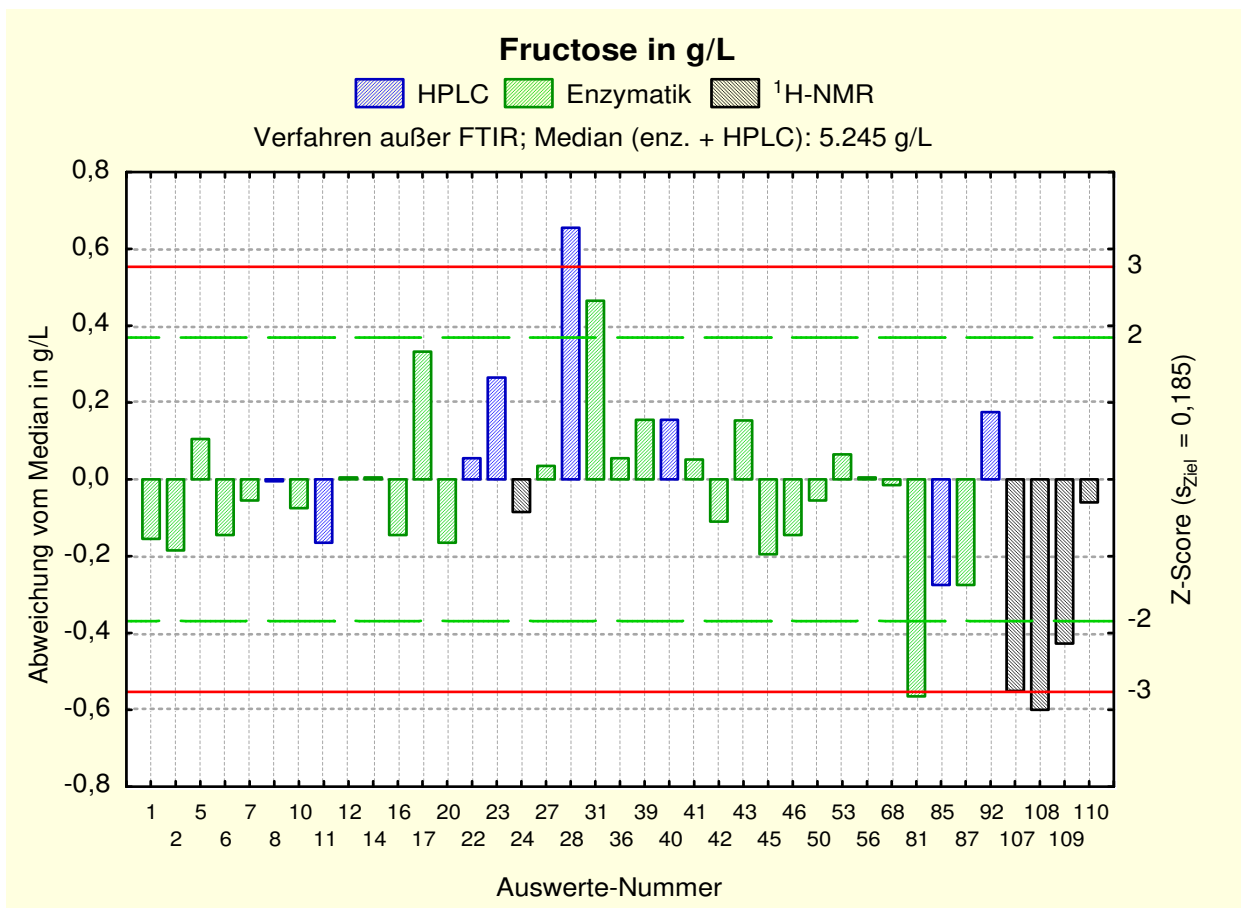
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
221	FTIR	5,30	0,055	0,24	0,17	
222	FTIR	5,15	-0,095	-0,41	-0,29	
223	FTIR	4,65	-0,595	-2,57	-1,80	
224	FTIR	5,94	0,695	3,01	2,11	
225	FTIR	5,80	0,555	2,40	1,68	
226	FTIR	5,50	0,255	1,10	0,77	
227	FTIR	5,35	0,105	0,45	0,32	
228	FTIR	4,90	-0,345	-1,49	-1,05	
229	FTIR	4,78	-0,465	-2,01	-1,41	
230	FTIR	4,86	-0,385	-1,67	-1,17	
231	FTIR	5,53	0,285	1,23	0,86	
233	FTIR	5,21	-0,035	-0,15	-0,11	
235	FTIR	5,22	-0,025	-0,11	-0,08	
236	FTIR	4,30	-0,945	-4,09	-2,86	
237	FTIR	5,10	-0,145	-0,63	-0,44	
238	FTIR	4,86	-0,385	-1,67	-1,17	
241	FTIR	5,00	-0,245	-1,06	-0,74	
242	FTIR	4,80	-0,445	-1,92	-1,35	
243	FTIR	5,60	0,355	1,54	1,08	
244	FTIR	5,03	-0,215	-0,93	-0,65	
245	FTIR	5,36	0,115	0,50	0,35	
246	FTIR	4,80	-0,445	-1,92	-1,35	
247	FTIR	5,55	0,305	1,32	0,92	
248	FTIR	5,24	-0,005	-0,02	-0,02	
249	FTIR	6,20	0,955	4,13	2,89	
250	FTIR	5,44	0,195	0,84	0,59	
251	FTIR	5,02	-0,225	-0,97	-0,68	
254	FTIR	4,90	-0,345	-1,49	-1,05	
256	FTIR	5,90	0,655	2,83	1,98	
257	FTIR	5,03	-0,215	-0,93	-0,65	
258	FTIR	5,70	0,455	1,97	1,38	
259	FTIR	6,06	0,815	3,53	2,47	
260	FTIR	4,70	-0,545	-2,36	-1,65	
261	FTIR	5,10	-0,145	-0,63	-0,44	
262	FTIR	4,30	-0,945	-4,09	-2,86	
263	FTIR	5,90	0,655	2,83	1,98	
264	FTIR	5,83	0,585	2,53	1,77	
265	FTIR	5,38	0,135	0,58	0,41	
266	FTIR	5,07	-0,175	-0,76	-0,53	
267	FTIR	5,95	0,705	3,05	2,14	
269	FTIR	4,30	-0,945	-4,09	-2,86	
270	FTIR	6,02	0,775	3,35	2,35	
271	FTIR	5,69	0,445	1,92	1,35	
273	FTIR	6,35	1,105	4,78	3,35	
274	FTIR	4,50	-0,745	-3,22	-2,26	
275	FTIR	5,22	-0,025	-0,11	-0,08	
276	FTIR	5,21	-0,035	-0,15	-0,11	
277	FTIR	5,23	-0,015	-0,06	-0,05	
278	FTIR	4,90	-0,345	-1,49	-1,05	
280	FTIR	5,04	-0,205	-0,89	-0,62	
281	FTIR	4,92	-0,325	-1,41	-0,98	
282	FTIR	4,37	-0,875	-3,78	-2,65	
283	FTIR	4,77	-0,475	-2,05	-1,44	
313	FTIR	4,84	-0,405	-1,75	-1,23	
322	FTIR	5,03	-0,215	-0,93	-0,65	
338	FTIR	6,56	1,315	5,69	3,98	
349	FTIR	6,10	0,855	3,70	2,59	
363	FTIR	6,20	0,955	4,13	2,89	

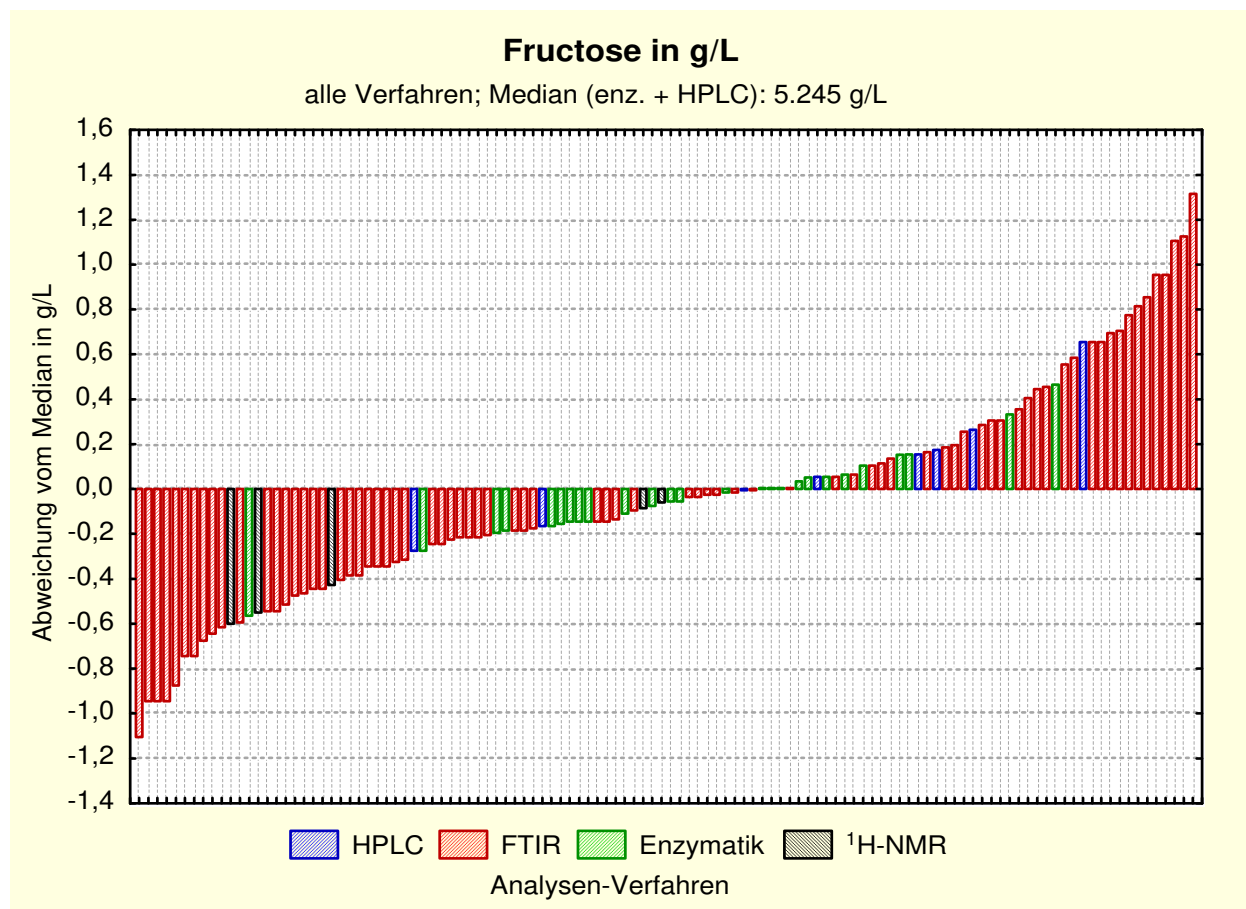
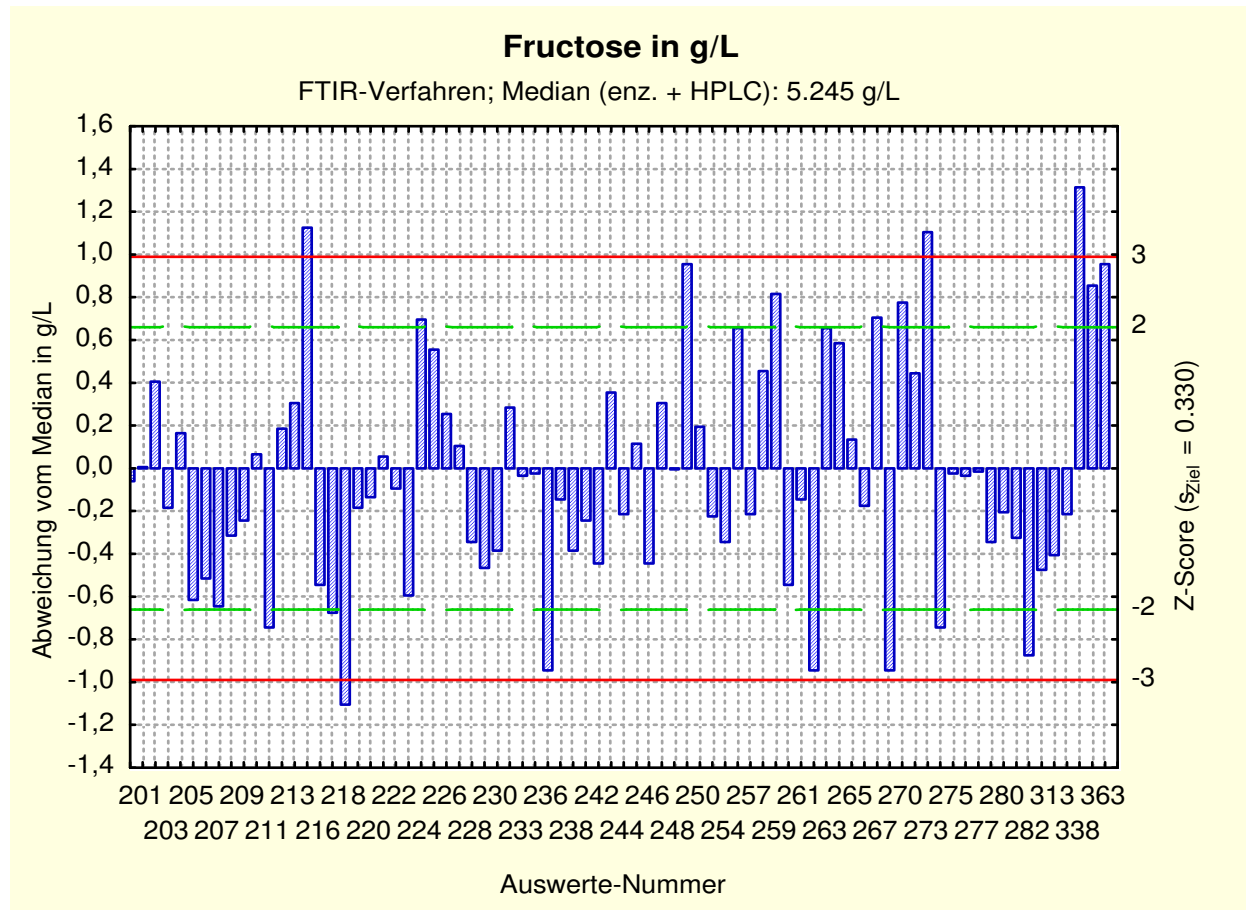
5.6.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Fructose [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	34
Minimalwert	4,68
Mittelwert	5,245
Median	5,245
Maximalwert	5,90
Standardabweichung (s_L)	0,224
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,038
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,231
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,185
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ FTIR}$) ¹⁾	0,330
Horrat-Wert (s_L/s_H)	0,97
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	1,22
Quotient ($s_L/s_{exp\ FTIR}$)	0,68
Quotient (u_M/s_H)	0,17
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,21
Quotient (u_M/s_{FTIR})	0,12

5.6.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; OIV-MA-AS311-03	8	5,335	0,276
enzymat. autom.	OIV-MA-AS311-02, enzymatisch, automatisiert	21	5,239	0,155
enzymat. Hand	OIV-MA-AS311-02, enzymatisch, manuell	5	5,054	0,196
	herkömmliche Verfahren	34	5,234	0,185
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	77	5,196	0,547
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	5	4,900	0,291





5.7 Glycerin [g/L]

5.7.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	5,03	-0,03	-0,16	
02	enzymat. Hand	5,02	-0,04	-0,20	
04	HPLC	4,74	-0,32	-1,45	
05	enzymat. autom.	5,24	0,18	0,78	
06	enzymat. autom.	5,12	0,06	0,25	
07	enzymat. Hand	4,84	-0,22	-1,00	
08	HPLC	5,24	0,18	0,78	
11	enzymat. autom.	5,41	0,35	1,54	
12	enzymat. Hand	4,99	-0,07	-0,33	
16	enzymat. autom.	6,67	1,61	7,15	(**)
22	HPLC	4,96	-0,10	-0,47	
23	HPLC	4,93	-0,13	-0,60	
24	NMR	5,50	0,44	1,94	
28	HPLC	4,58	-0,48	-2,16	
40	HPLC	5,10	0,04	0,16	
45	enzymat. autom.	5,34	0,28	1,23	
56	enzymat. autom.	5,21	0,15	0,65	
58	enzymat. autom.	5,10	0,04	0,16	
81	enzymat. Hand	4,99	-0,07	-0,33	
85	HPLC	5,53	0,47	2,07	
90	enzymat. autom.	5,43	0,37	1,63	
92	HPLC	4,67	-0,39	-1,76	
107	NMR	5,21	0,15	0,65	
108	NMR	4,72	-0,35	-1,56	
109	NMR	5,19	0,13	0,56	
110	NMR	5,47	0,41	1,82	

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

5.7.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	5,50	0,40	1,77	1,15	
202	FTIR	5,17	0,07	0,31	0,20	
203	FTIR	5,18	0,08	0,35	0,23	
204	FTIR	5,55	0,45	1,99	1,29	
206	FTIR	5,28	0,18	0,80	0,52	
207	FTIR	5,55	0,45	1,99	1,29	
208	FTIR	5,36	0,26	1,15	0,75	
209	FTIR	5,70	0,60	2,66	1,72	
210	FTIR	5,72	0,62	2,75	1,78	
212	FTIR	5,70	0,60	2,66	1,72	
213	FTIR	5,32	0,22	0,97	0,63	
214	FTIR	5,36	0,26	1,15	0,75	
216	FTIR	5,40	0,30	1,33	0,86	
217	FTIR	5,61	0,51	2,26	1,47	
218	FTIR	5,73	0,63	2,79	1,81	
219	FTIR	4,05	-1,05	-4,65	-3,02	
220	FTIR	4,90	-0,20	-0,89	-0,57	
221	FTIR	5,50	0,40	1,77	1,15	
222	FTIR	5,77	0,67	2,97	1,93	
223	FTIR	5,79	0,69	3,06	1,98	
224	FTIR	5,42	0,32	1,42	0,92	
225	FTIR	4,60	-0,50	-2,21	-1,44	
226	FTIR	5,27	0,17	0,75	0,49	
227	FTIR	5,37	0,27	1,20	0,78	
228	FTIR	5,80	0,70	3,10	2,01	
229	FTIR	5,38	0,28	1,24	0,80	
230	FTIR	5,02	-0,08	-0,35	-0,23	
231	FTIR	5,08	-0,02	-0,09	-0,06	
233	FTIR	5,25	0,15	0,66	0,43	
235	FTIR	5,70	0,60	2,66	1,72	

Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
236	FTIR	4,90	-0,20	-0,89	-0,57	
237	FTIR	4,90	-0,20	-0,89	-0,57	
238	FTIR	5,38	0,28	1,24	0,80	
241	FTIR	5,60	0,50	2,21	1,44	
242	FTIR	5,70	0,60	2,66	1,72	
243	FTIR	5,30	0,20	0,89	0,57	
244	FTIR	5,59	0,49	2,17	1,41	
245	FTIR	5,39	0,29	1,28	0,83	
246	FTIR	5,22	0,12	0,53	0,34	
249	FTIR	5,90	0,80	3,54	2,30	
250	FTIR	5,60	0,50	2,21	1,44	
254	FTIR	5,60	0,50	2,21	1,44	
256	FTIR	6,38	1,28	5,67	3,68	
257	FTIR	4,98	-0,12	-0,53	-0,34	
258	FTIR	5,30	0,20	0,89	0,57	
259	FTIR	5,32	0,22	0,97	0,63	
260	FTIR	5,40	0,30	1,33	0,86	
261	FTIR	7,50	2,40	10,63	6,90	(**)
262	FTIR	5,50	0,40	1,77	1,15	
265	FTIR	5,71	0,61	2,70	1,75	
266	FTIR	5,55	0,45	1,99	1,29	
269	FTIR	6,00	0,90	3,99	2,59	
270	FTIR	5,70	0,60	2,66	1,72	
271	FTIR	5,22	0,12	0,53	0,34	
273	FTIR	5,17	0,07	0,31	0,20	
274	FTIR	5,00	-0,10	-0,44	-0,29	
276	FTIR	5,52	0,42	1,86	1,21	
277	FTIR	5,51	0,41	1,82	1,18	
278	FTIR	5,80	0,70	3,10	2,01	
280	FTIR	6,00	0,90	3,99	2,59	
281	FTIR	5,18	0,08	0,35	0,23	
282	FTIR	4,88	-0,22	-0,97	-0,63	
283	FTIR	5,29	0,20	0,86	0,56	
284	FTIR	6,30	1,20	5,32	3,45	
322	FTIR	5,41	0,31	1,37	0,89	
338	FTIR	5,31	0,21	0,93	0,60	
349	FTIR	5,00	-0,10	-0,44	-0,29	

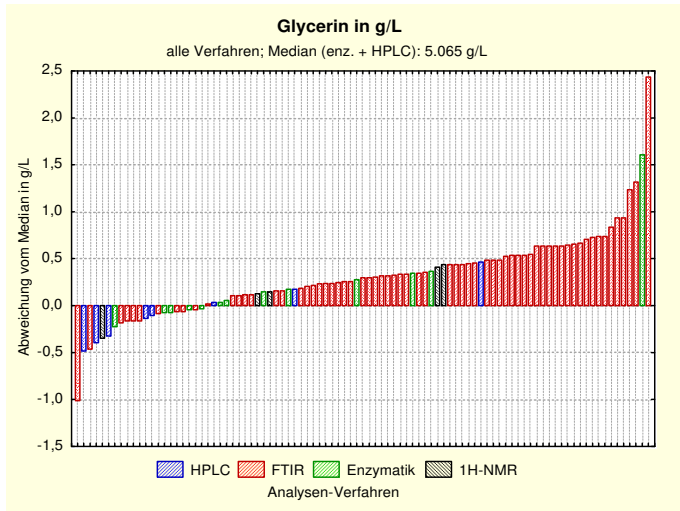
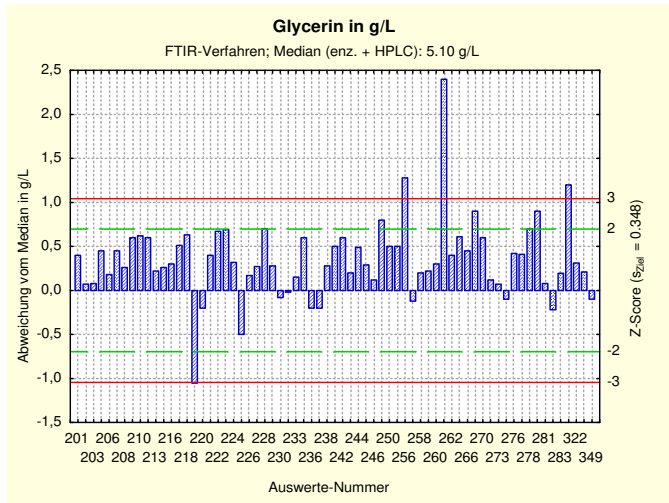
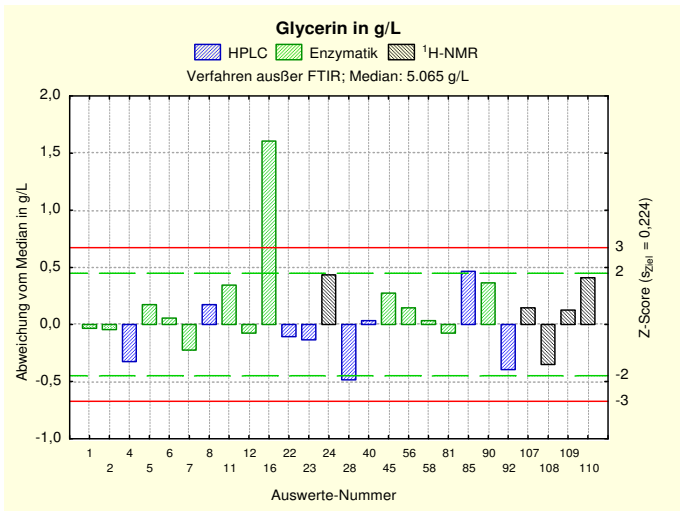
(**) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der herkömmlichen Ergebnisse ab.

5.7.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Glycerin [g/L]	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	21	20
Minimalwert	4,6	4,6
Mittelwert	5,15	5,07
Median	5,10	5,06
Maximalwert	6,7	5,5
Standardabweichung (s_L)	0,427	0,254
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,093	0,057
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,226	0,224
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)		
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,348	0,348
Horrat-Wert (s_L/s_H)	1,89	1,13
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)		
Quotient ($s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	1,23	0,73
Quotient (u_M/s_H)	0,41	0,25
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)		
Quotient ($u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$)	0,27	0,16

5.7.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	8	4,962	0,344
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert	8	5,305	0,192
enzymat. Hand	enzymatisch, manuell	5	4,983	0,065
herkömmliche Verfahren		21	5,101	0,288
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	67	5,430	0,333
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	5	5,218	0,358



5.8 pH-Wert

5.8.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
01	potentiometr.	3,35	0,000	0,00	
02	potentiometr.	3,34	-0,010	-0,21	
03	potentiometr.	3,28	-0,070	-1,47	
04	potentiometr.	3,29	-0,060	-1,26	
05	potentiometr.	3,41	0,060	1,26	
06	potentiometr.	3,36	0,010	0,21	
07	potentiometr.	3,34	-0,010	-0,21	
08	potentiometr.	3,37	0,020	0,42	
10	potentiometr.	3,29	-0,060	-1,26	
11	potentiometr.	3,38	0,030	0,63	
12	potentiometr.	3,39	0,040	0,84	
14	potentiometr.	3,30	-0,050	-1,05	
16	potentiometr.	3,38	0,030	0,63	
17	potentiometr.	3,27	-0,080	-1,68	
20	potentiometr.	3,30	-0,052	-1,09	
22	potentiometr.	3,35	0,000	0,00	
23	potentiometr.	3,35	0,000	0,00	
24	potentiometr.	3,35	0,000	0,00	
26	potentiometr.	3,43	0,080	1,68	
27	potentiometr.	3,20	-0,150	-3,15	
28	potentiometr.	3,40	0,050	1,05	
29	potentiometr.	3,42	0,070	1,47	
31	potentiometr.	3,34	-0,010	-0,21	
39	potentiometr.	3,32	-0,030	-0,63	
40	potentiometr.	3,32	-0,030	-0,63	
41	potentiometr.	3,32	-0,030	-0,63	
42	potentiometr.	3,40	0,050	1,05	
43	potentiometr.	3,42	0,070	1,47	
45	potentiometr.	3,32	-0,030	-0,63	
46	potentiometr.	3,31	-0,040	-0,84	
50	potentiometr.	3,35	0,002	0,04	
53	potentiometr.	3,35	0,000	0,00	
55	potentiometr.	3,28	-0,070	-1,47	
56	potentiometr.	3,37	0,020	0,42	
58	potentiometr.	3,36	0,010	0,21	
60	potentiometr.	3,40	0,050	1,05	
63	potentiometr.	3,25	-0,105	-2,21	
66	potentiometr.	3,60	0,250	5,25	(**)
68	potentiometr.	3,31	-0,040	-0,84	
72	potentiometr.	3,29	-0,060	-1,26	
75	potentiometr.	3,34	-0,010	-0,21	
81	potentiometr.	3,37	0,020	0,42	
84	potentiometr.	3,36	0,010	0,21	
92	potentiometr.	3,35	0,000	0,00	
98	potentiometr.	3,30	-0,050	-1,05	

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

5.8.2 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	3,38	0,030	0,61	
202	FTIR	3,45	0,100	2,03	
203	FTIR	3,40	0,050	1,01	
204	FTIR	3,36	0,010	0,20	
205	FTIR	3,41	0,060	1,22	
206	FTIR	3,39	0,040	0,81	
207	FTIR	3,39	0,040	0,81	
208	FTIR	3,32	-0,030	-0,61	
209	FTIR	3,36	0,010	0,20	
210	FTIR	3,36	0,010	0,20	
211	FTIR	3,41	0,060	1,22	

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

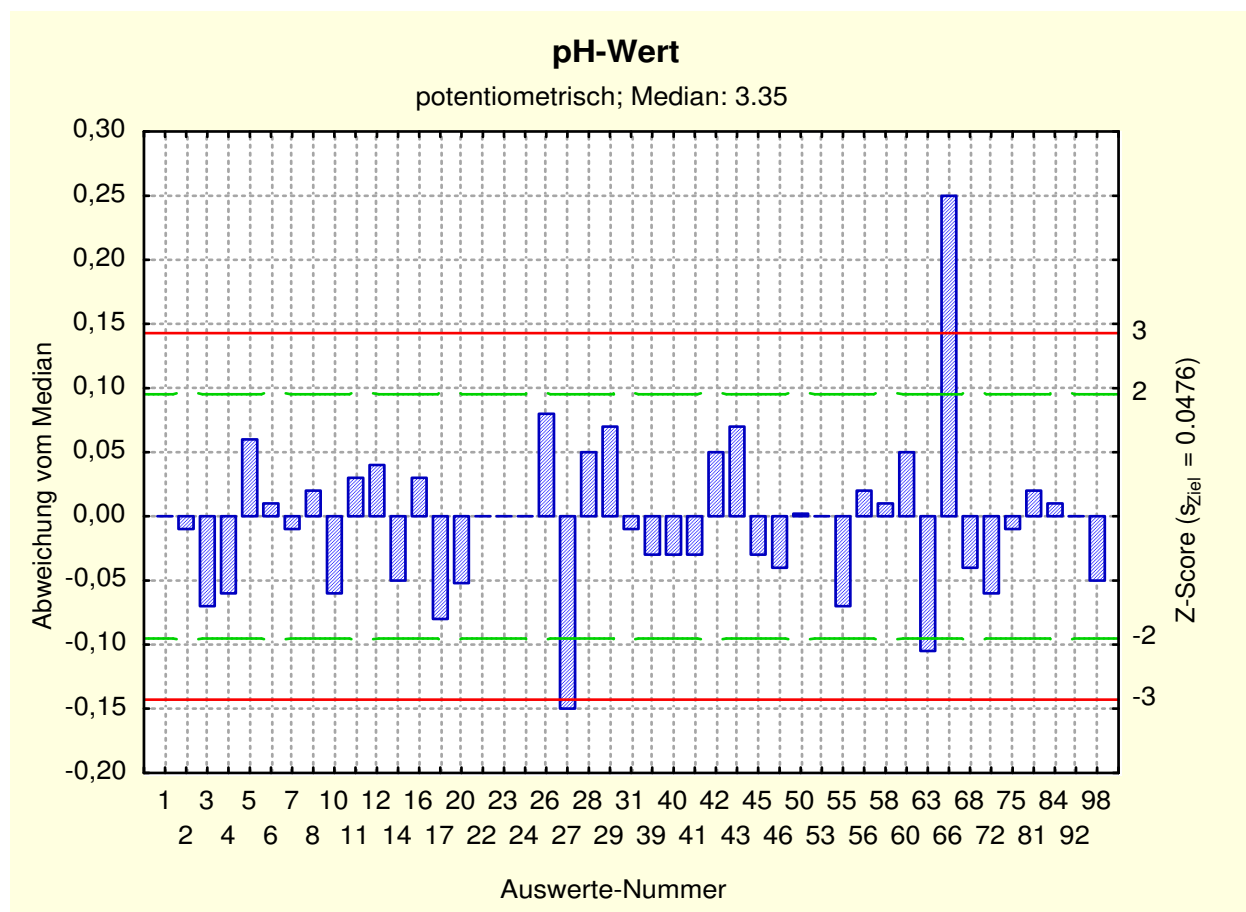
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
212	FTIR	3,30	-0,050	-1,01	
213	FTIR	3,44	0,090	1,83	
214	FTIR	3,35	0,000	0,00	
216	FTIR	3,42	0,070	1,42	
217	FTIR	3,34	-0,010	-0,20	
218	FTIR	3,53	0,180	3,65	
219	FTIR	3,37	0,020	0,41	
220	FTIR	3,38	0,030	0,61	
221	FTIR	3,49	0,140	2,84	
222	FTIR	3,41	0,060	1,22	
223	FTIR	3,33	-0,020	-0,41	
224	FTIR	3,39	0,040	0,81	
225	FTIR	3,33	-0,020	-0,41	
226	FTIR	3,38	0,030	0,61	
227	FTIR	3,34	-0,010	-0,20	
228	FTIR	3,56	0,210	4,26	
229	FTIR	3,44	0,090	1,83	
230	FTIR	3,50	0,150	3,04	
231	FTIR	3,38	0,030	0,61	
233	FTIR	3,52	0,170	3,45	
235	FTIR	3,45	0,100	2,03	
236	FTIR	3,26	-0,090	-1,83	
237	FTIR	3,39	0,040	0,81	
238	FTIR	3,46	0,110	2,23	
241	FTIR	3,45	0,100	2,03	
242	FTIR	3,47	0,120	2,43	
243	FTIR	3,31	-0,040	-0,81	
244	FTIR	3,43	0,080	1,62	
245	FTIR	3,39	0,040	0,81	
246	FTIR	3,32	-0,030	-0,61	
247	FTIR	3,42	0,070	1,42	
249	FTIR	3,41	0,060	1,22	
250	FTIR	3,40	0,050	1,01	
251	FTIR	3,38	0,030	0,61	
254	FTIR	3,43	0,080	1,62	
255	FTIR	3,36	0,010	0,20	
256	FTIR	3,52	0,170	3,45	
257	FTIR	3,43	0,080	1,62	
258	FTIR	3,32	-0,030	-0,61	
259	FTIR	3,43	0,080	1,62	
260	FTIR	3,54	0,190	3,85	
261	FTIR	3,41	0,060	1,22	
262	FTIR	3,38	0,030	0,61	
263	FTIR	3,50	0,150	3,04	
264	FTIR	3,42	0,070	1,42	
265	FTIR	3,25	-0,100	-2,03	
266	FTIR	3,46	0,110	2,23	
267	FTIR	3,36	0,010	0,20	
268	FTIR	3,29	-0,060	-1,22	
269	FTIR	3,50	0,150	3,04	
270	FTIR	3,19	-0,160	-3,25	
271	FTIR	3,35	0,000	0,00	
273	FTIR	3,36	0,010	0,20	
274	FTIR	3,55	0,200	4,06	
275	FTIR	3,46	0,110	2,23	
276	FTIR	3,38	0,030	0,61	
277	FTIR	3,39	0,040	0,81	
278	FTIR	3,16	-0,190	-3,85	
280	FTIR	3,40	0,050	1,01	
281	FTIR	3,34	-0,010	-0,20	
282	FTIR	3,26	-0,090	-1,83	
283	FTIR	3,28	-0,069	-1,40	
284	FTIR	3,37	0,020	0,41	
322	FTIR	3,39	0,040	0,81	
338	FTIR	3,49	0,140	2,84	
349	FTIR	3,38	0,030	0,61	
363	FTIR	3,47	0,120	2,43	

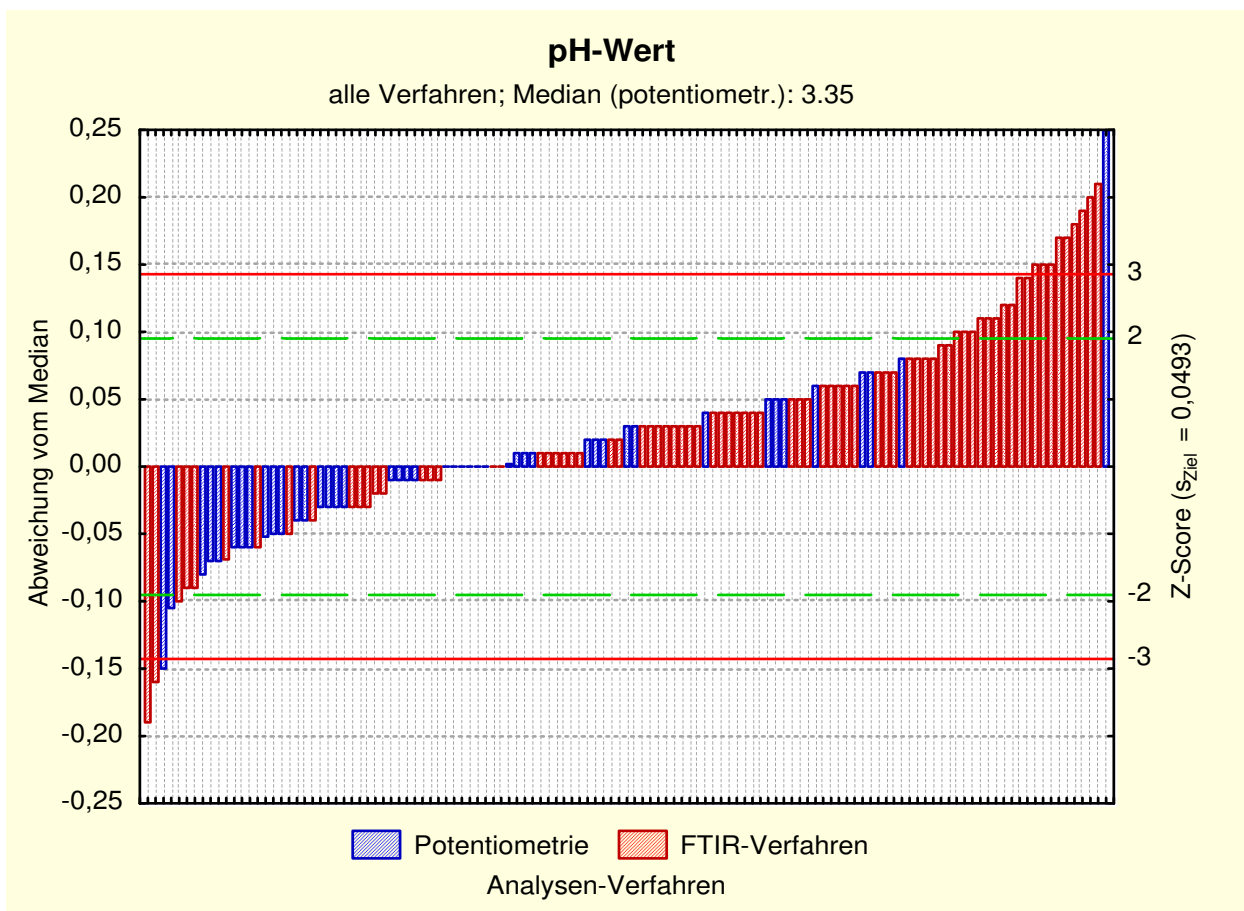
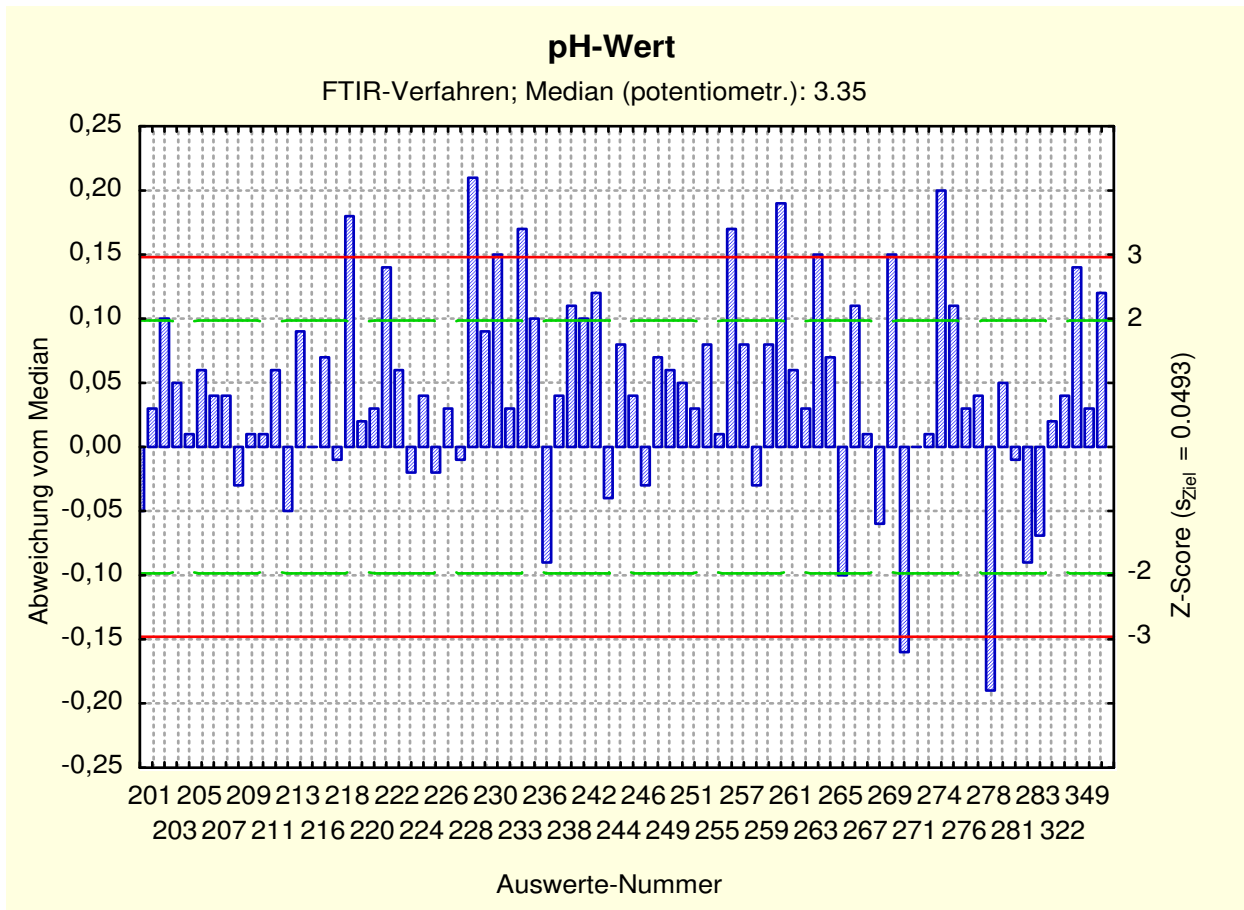
5.8.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für pH-Wert	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	45	44
Minimalwert	3,20	3,20
Mittelwert	3,346	3,340
Median	3,350	3,350
Maximalwert	3,60	3,43
Standardabweichung (s_L)	0,0621	0,0491
Standardfehler des Mittelwertes (u_M)	0,0093	0,0074
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)		
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{exp\ herk.}$)	0,0476	0,0476
Zielstandardabweichung, experimentell ($s_{Ü\ FTIR}$)	0,0493	0,0493
Horvat-Wert (s_L/s_H)		
Quotient ($s_L/s_{exp\ herk.}$)	1,30	1,03
Quotient ($s_L/s_{Ü\ FTIR}$)	1,26	1,00
Quotient (u_M/s_H)		
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	0,19	0,16
Quotient ($u_M/s_{Ü\ FTIR}$)	0,19	0,15

5.8.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
elektrom.	elektrometrisch	45	3,344	0,051
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	78	3,396	0,071





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	4,27	-0,130	-0,65	-1,21	
02	LwK 5.2.1	4,37	-0,030	-0,15	-0,28	
03	LwK 5.2.1	4,35	-0,050	-0,25	-0,47	
05	LwK 5.2.1	4,33	-0,070	-0,35	-0,65	
06	LwK 5.1	4,32	-0,080	-0,40	-0,75	
07	LwK 5.2.1	4,34	-0,060	-0,30	-0,56	
08	LwK 5.2.1	4,56	0,160	0,80	1,49	
09	LwK 5.2.1	5,12	0,720	3,62	6,72	(**)
10	LwK 5.2.1	4,36	-0,040	-0,20	-0,37	
11	LwK 5.2.1	4,40	0,000	0,00	0,00	
12	LwK 5.1	4,27	-0,130	-0,65	-1,21	
14	LwK 5.1	4,56	0,160	0,80	1,49	
16	LwK 5.1	4,58	0,180	0,90	1,68	
17	LwK 5.2.1	4,28	-0,120	-0,60	-1,12	
20	LwK 5.2.1	4,53	0,130	0,65	1,21	
22	LwK 5.1	4,40	0,000	0,00	0,00	
23	LwK 5.1	4,49	0,090	0,45	0,84	
24	LwK 5.1	4,60	0,200	1,00	1,87	
25	LwK 5.1	4,50	0,100	0,50	0,93	
26	LwK 5.1	4,53	0,130	0,65	1,21	
27	LwK 5.2.1	4,82	0,420	2,11	3,92	
28	LwK 5.1	4,42	0,020	0,10	0,19	
29	LwK 5.1	4,40	0,000	0,00	0,00	
31	LwK 5.2.1	4,40	0,000	0,00	0,00	
35	LwK 5.2.1	4,30	-0,100	-0,50	-0,93	
39	LwK 5.1	4,40	0,000	0,00	0,00	
40	LwK 5.2.1	4,43	0,030	0,15	0,28	
41	LwK 5.1	4,34	-0,060	-0,30	-0,56	
42	LwK 5.1	4,40	0,000	0,00	0,00	
43	LwK 5.1	4,36	-0,040	-0,20	-0,37	
45	LwK 5.1	4,50	0,100	0,50	0,93	
46	LwK 5.1	4,50	0,100	0,50	0,93	
50	LwK 5.1	4,34	-0,060	-0,30	-0,56	
53	LwK 5.2.1	4,30	-0,100	-0,50	-0,93	
55	LwK 5.2.1	4,70	0,300	1,51	2,80	
56	LwK 5.2.1	4,42	0,020	0,10	0,19	
60	LwK 5.2.1	4,60	0,200	1,00	1,87	
61	k. A.	4,60	0,200	1,00	1,87	
63	LwK 5.1	4,45	0,045	0,23	0,42	
66	LwK 5.1	4,40	0,000	0,00	0,00	
68	LwK 5.1	4,44	0,040	0,20	0,37	
72	LwK 5.1	4,54	0,140	0,70	1,31	
74	phot.aut.	4,60	0,200	1,00	1,87	
81	LwK 5.1	4,25	-0,150	-0,75	-1,40	
84	LwK 5.2.2	4,60	0,200	1,00	1,87	
87	LwK 5.2.1	4,49	0,090	0,45	0,84	
92	LwK 5.1	4,45	0,050	0,25	0,47	
98	LwK 5.1	4,40	0,000	0,00	0,00	

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

5.9.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 5.3	4,35	-0,060	-0,30	-0,41	
202	LwK 5.3	4,34	-0,070	-0,35	-0,48	
203	LwK 5.3	4,41	0,000	0,00	0,00	
204	LwK 5.3	4,26	-0,150	-0,75	-1,03	
205	LwK 5.3	4,66	0,250	1,25	1,72	
206	LwK 5.3	4,36	-0,050	-0,25	-0,34	
207	LwK 5.3	4,43	0,020	0,10	0,14	
208	LwK 5.3	4,26	-0,150	-0,75	-1,03	
209	LwK 5.3	4,80	0,390	1,95	2,69	

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
210	LwK 5.3	4,39	-0,020	-0,10	-0,14	
211	LwK 5.3	4,55	0,140	0,70	0,97	
212	LwK 5.3	4,44	0,030	0,15	0,21	
213	LwK 5.3	4,56	0,150	0,75	1,03	
214	LwK 5.3	4,56	0,150	0,75	1,03	
216	LwK 5.3	4,60	0,190	0,95	1,31	
217	LwK 5.3	4,60	0,190	0,95	1,31	
218	LwK 5.3	4,47	0,060	0,30	0,41	
219	LwK 5.3	4,64	0,230	1,15	1,59	
220	LwK 5.3	4,49	0,080	0,40	0,55	
221	LwK 5.3	4,80	0,390	1,95	2,69	
222	LwK 5.3	4,47	0,060	0,30	0,41	
223	LwK 5.3	4,63	0,220	1,10	1,52	
224	LwK 5.3	4,65	0,240	1,20	1,66	
225	LwK 5.3	4,80	0,390	1,95	2,69	
226	LwK 5.3	4,83	0,420	2,10	2,90	
227	LwK 5.3	4,58	0,170	0,85	1,17	
228	LwK 5.3	4,47	0,060	0,30	0,41	
229	LwK 5.3	4,66	0,250	1,25	1,72	
230	LwK 5.3	5,01	0,600	3,01	4,14	
231	LwK 5.3	4,74	0,330	1,65	2,28	
233	LwK 5.3	4,65	0,240	1,20	1,66	
235	LwK 5.3	4,36	-0,050	-0,25	-0,34	
236	LwK 5.3	4,40	-0,010	-0,05	-0,07	
237	LwK 5.3	4,70	0,290	1,45	2,00	
238	LwK 5.3	4,53	0,120	0,60	0,83	
241	LwK 5.3	4,75	0,340	1,70	2,34	
242	LwK 5.3	4,70	0,290	1,45	2,00	
243	LwK 5.3	4,61	0,200	1,00	1,38	
244	LwK 5.3	4,30	-0,110	-0,55	-0,76	
245	LwK 5.3	4,55	0,140	0,70	0,97	
246	LwK 5.3	4,50	0,090	0,45	0,62	
247	LwK 5.3	4,51	0,100	0,50	0,69	
248	LwK 5.3	4,93	0,520	2,61	3,59	
249	LwK 5.3	4,60	0,190	0,95	1,31	
250	LwK 5.3	4,54	0,130	0,65	0,90	
251	LwK 5.3	4,64	0,230	1,15	1,59	
254	LwK 5.3	4,70	0,290	1,45	2,00	
255	LwK 5.3	4,60	0,190	0,95	1,31	
256	LwK 5.3	4,62	0,210	1,05	1,45	
257	LwK 5.3	4,58	0,170	0,85	1,17	
258	LwK 5.3	4,80	0,390	1,95	2,69	
259	LwK 5.3	4,56	0,150	0,75	1,03	
260	LwK 5.3	4,50	0,090	0,45	0,62	
261	LwK 5.3	4,60	0,190	0,95	1,31	
262	LwK 5.3	4,50	0,090	0,45	0,62	
263	LwK 5.3	4,80	0,390	1,95	2,69	
264	LwK 5.3	4,53	0,120	0,60	0,83	
265	LwK 5.3	4,63	0,220	1,10	1,52	
266	LwK 5.3	4,64	0,230	1,15	1,59	
267	LwK 5.3	4,13	-0,280	-1,40	-1,93	
268	LwK 5.3	4,44	0,030	0,15	0,21	
269	LwK 5.3	4,60	0,190	0,95	1,31	
270	LwK 5.3	4,51	0,100	0,50	0,69	
271	LwK 5.3	4,34	-0,070	-0,35	-0,48	
273	LwK 5.3	4,46	0,050	0,25	0,34	
274	LwK 5.3	4,20	-0,210	-1,05	-1,45	
275	LwK 5.3	4,46	0,050	0,25	0,34	
276	LwK 5.3	4,45	0,040	0,20	0,28	
277	LwK 5.3	4,21	-0,200	-1,00	-1,38	
278	LwK 5.3	4,40	-0,010	-0,05	-0,07	
280	LwK 5.3	4,50	0,090	0,45	0,62	
281	LwK 5.3	4,54	0,130	0,65	0,90	
282	LwK 5.3	4,57	0,160	0,80	1,10	
283	LwK 5.3	3,94	-0,469	-2,35	-3,23	
284	LwK 5.3	4,80	0,390	1,95	2,69	

Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse

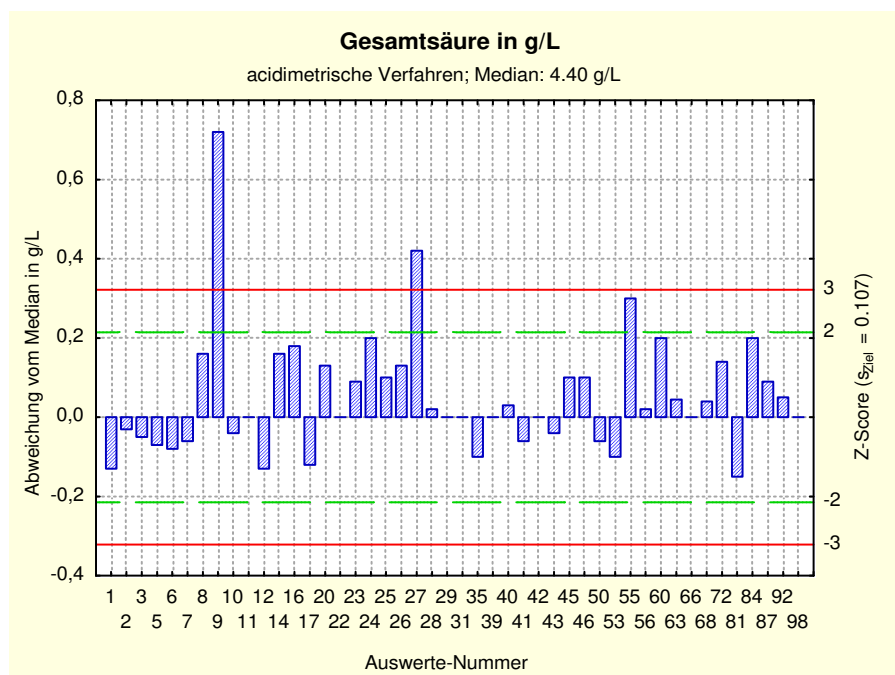
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
313	LwK 5.3	4,48	0,070	0,35	0,48	
322	LwK 5.3	4,56	0,150	0,75	1,03	
338	LwK 5.3	4,53	0,120	0,60	0,83	
349	LwK 5.3	4,70	0,290	1,45	2,00	
363	LwK 5.3	4,80	0,390	1,95	2,69	

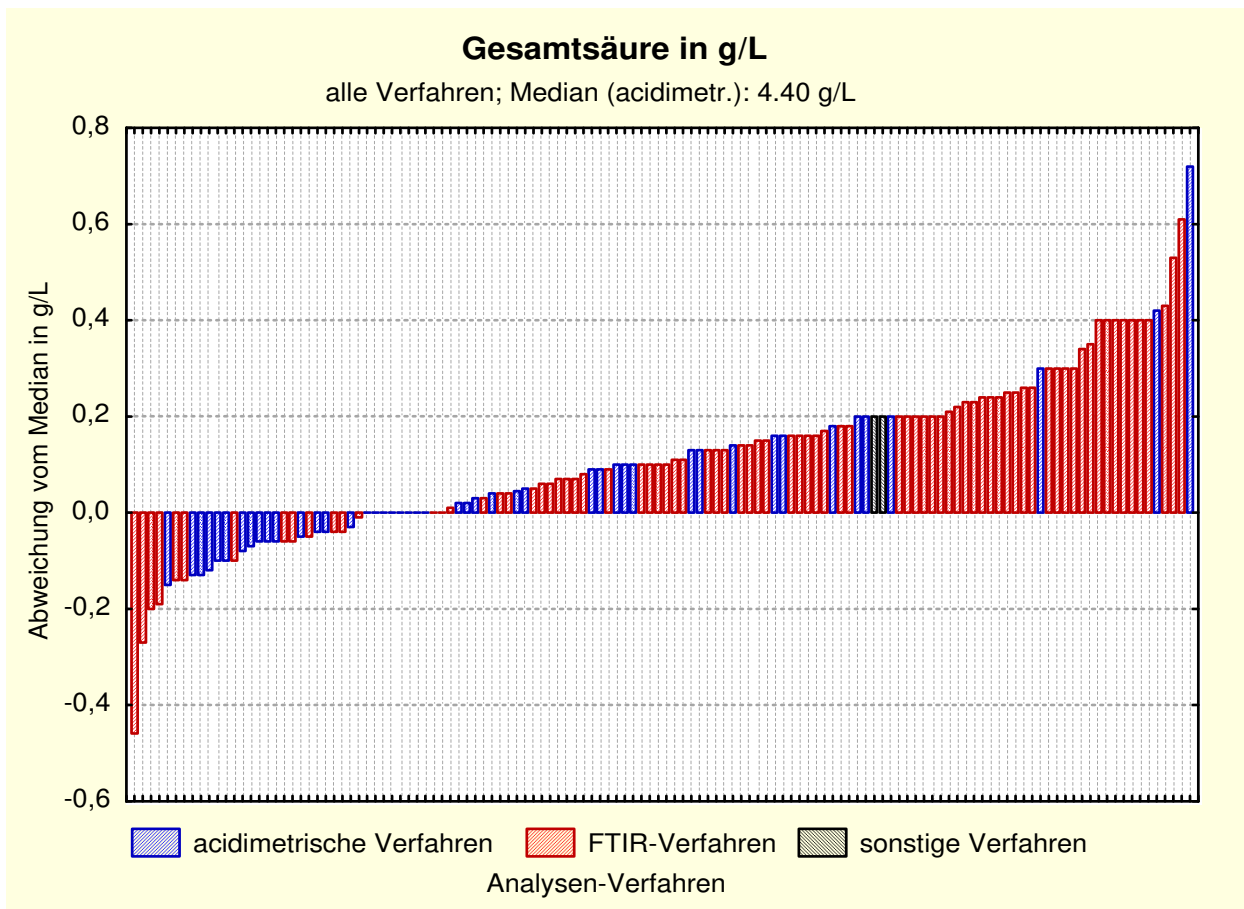
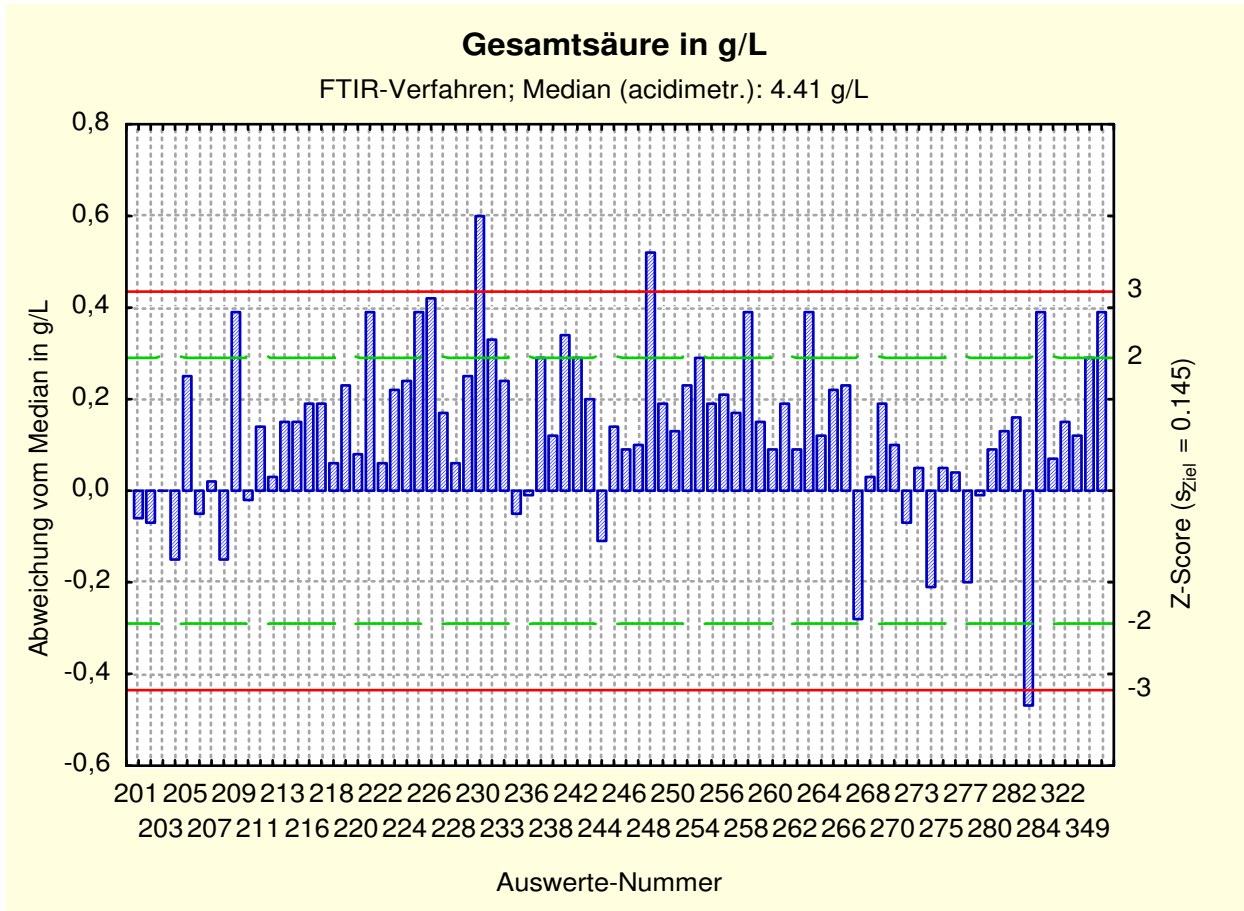
5.9.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Gesamtsäure [g/L]	alle Daten	
Gültige Werte	46	45
Minimalwert	4,25	4,25
Mittelwert	4,452	4,437
Median	4,410	4,400
Maximalwert	5,12	4,82
Standardabweichung (s _L)	0,156	0,120
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,023	0,018
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,200	0,199
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp herk.})	0,107	0,107
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{Ü FTIR})	0,145	0,145
Horrat-Wert (s _L /s _H)	0,78	0,60
Quotient (s _L /s _{exp herk.})	1,45	1,12
Quotient (s _L /s _{Ü FTIR})	1,07	0,83
Quotient (u _M /s _H)	0,11	0,09
Quotient (u _M /s _{exp herk.})	0,21	0,17
Quotient (u _M /s _{Ü FTIR})	0,16	0,12

5.9.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 5.1	Potentiometrische Bestimmung n. AVV	25	4,435	0,099
LwK 5.2.1	OIV-MA-AS-313-01, - Nr. 5.2, Potentiometrische Bestimmung	20	4,436	0,151
LwK 5.2.2	- Nr. 5.3, Endpunktbestimmung mit Indikator herkömmliche Verfahren	1 46	4,600 4,434	0,119
LwK 5.3	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	80	4,553	0,167
phot.aut.	photometrisch m. Bromkresolpurpur, automatisiert	1	4,600	
k. A.	Verfahrensangabe fehlt	1	4,600	





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

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	HPLC	1,82	0,000	0,00	
03	HPLC	1,79	-0,029	-0,31	
05	photometr.	1,85	0,030	0,32	
06	HPLC	1,75	-0,070	-0,74	
07	HPLC	1,70	-0,120	-1,28	
08	IC	1,91	0,088	0,94	
09	HPLC	1,82	0,000	0,00	
11	photometr., autom.	1,86	0,040	0,43	
12	photometr.	1,98	0,160	1,70	
14	photometr., autom.	1,91	0,090	0,96	
17	photometr., autom.	1,63	-0,190	-2,02	
20	photometr., autom.	1,79	-0,030	-0,32	
23	HPLC	1,71	-0,110	-1,17	
24	NMR	1,96	0,140	1,49	
26	HPLC	1,87	0,050	0,53	
27	photometr., autom.	1,83	0,005	0,05	
28	HPLC	1,80	-0,020	-0,21	
31	photometr., autom.	1,67	-0,150	-1,59	
39	photometr., autom.	2,03	0,210	2,23	
40	HPLC	1,79	-0,030	-0,32	
41	photometr., autom.	1,83	0,010	0,11	
42	photometr., autom.	1,71	-0,110	-1,17	
43	photometr., autom.	1,58	-0,240	-2,55	
46	photometr., autom.	2,00	0,180	1,91	
50	photometr., autom.	1,91	0,090	0,96	
53	photometr., autom.	1,90	0,080	0,85	
56	photometr., autom.	2,05	0,230	2,44	
58	photometr., autom.	1,83	0,010	0,11	
61	photometr., autom.	1,70	-0,120	-1,28	
68	photometr., autom.	1,76	-0,060	-0,64	
81	photometr.	2,06	0,240	2,55	
87	HPLC	1,76	-0,060	-0,64	
91	HPLC	1,90	0,080	0,85	
98	HPLC	1,80	-0,020	-0,21	
107	NMR	1,80	-0,015	-0,16	
108	NMR	1,94	0,119	1,26	
109	NMR	1,65	-0,168	-1,78	
110	NMR	2,10	0,279	2,97	

5.10.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	1,70	-0,120	-1,28	-0,53	
202	FTIR	1,52	-0,300	-3,19	-1,32	
203	FTIR	1,73	-0,090	-0,96	-0,40	
204	FTIR	2,00	0,180	1,91	0,79	
205	FTIR	1,81	-0,010	-0,11	-0,04	
206	FTIR	1,97	0,150	1,59	0,66	
208	FTIR	1,81	-0,010	-0,11	-0,04	
209	FTIR	2,00	0,180	1,91	0,79	
210	FTIR	1,76	-0,060	-0,64	-0,26	
211	FTIR	2,00	0,180	1,91	0,79	
212	FTIR	1,75	-0,070	-0,74	-0,31	
213	FTIR	1,87	0,050	0,53	0,22	
214	FTIR	1,84	0,020	0,21	0,09	
216	FTIR	1,80	-0,020	-0,21	-0,09	
217	FTIR	1,82	0,000	0,00	0,00	
218	FTIR	1,95	0,130	1,38	0,57	
219	FTIR	2,04	0,220	2,34	0,97	
220	FTIR	1,88	0,060	0,64	0,26	
221	FTIR	2,20	0,380	4,04	1,67	
222	FTIR	1,76	-0,060	-0,64	-0,26	

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
223	FTIR	0,84	-0,980	-10,42	-4,32	
224	FTIR	1,77	-0,050	-0,53	-0,22	
225	FTIR	1,70	-0,120	-1,28	-0,53	
226	FTIR	1,94	0,120	1,28	0,53	
227	FTIR	1,75	-0,070	-0,74	-0,31	
228	FTIR	1,70	-0,120	-1,28	-0,53	
229	FTIR	2,01	0,190	2,02	0,84	
230	FTIR	2,26	0,440	4,68	1,94	
231	FTIR	1,98	0,160	1,70	0,70	
233	FTIR	1,69	-0,130	-1,38	-0,57	
235	FTIR	2,06	0,240	2,55	1,06	
236	FTIR	0,90	-0,920	-9,78	-4,05	
237	FTIR	2,40	0,580	6,16	2,56	
238	FTIR	2,26	0,440	4,68	1,94	
241	FTIR	1,76	-0,060	-0,64	-0,26	
242	FTIR	1,80	-0,020	-0,21	-0,09	
243	FTIR	2,26	0,440	4,68	1,94	
244	FTIR	1,60	-0,220	-2,34	-0,97	
245	FTIR	1,90	0,080	0,85	0,35	
246	FTIR	2,09	0,270	2,87	1,19	
247	FTIR	1,92	0,100	1,06	0,44	
249	FTIR	1,90	0,080	0,85	0,35	
250	FTIR	1,73	-0,090	-0,96	-0,40	
254	FTIR	1,70	-0,120	-1,28	-0,53	
256	FTIR	1,33	-0,490	-5,21	-2,16	
257	FTIR	2,08	0,260	2,76	1,15	
258	FTIR	2,23	0,410	4,36	1,81	
259	FTIR	1,94	0,120	1,28	0,53	
260	FTIR	1,50	-0,320	-3,40	-1,41	
261	FTIR	1,70	-0,120	-1,28	-0,53	
263	FTIR	0,80	-1,020	-10,84	-4,49	
264	FTIR	1,66	-0,160	-1,70	-0,70	
265	FTIR	1,80	-0,020	-0,21	-0,09	
266	FTIR	1,89	0,070	0,74	0,31	
267	FTIR	1,99	0,170	1,81	0,75	
268	FTIR	2,29	0,470	5,00	2,07	
269	FTIR	2,20	0,380	4,04	1,67	
270	FTIR	169,00	167,180	1776,98	736,48	(*)
271	FTIR	1,86	0,040	0,43	0,18	
273	FTIR	1,65	-0,170	-1,81	-0,75	
274	FTIR	2,20	0,380	4,04	1,67	
275	FTIR	1,89	0,070	0,74	0,31	
276	FTIR	2,26	0,440	4,68	1,94	
277	FTIR	2,18	0,360	3,83	1,59	
278	FTIR	1,50	-0,320	-3,40	-1,41	
280	FTIR	1,93	0,110	1,17	0,48	
281	FTIR	2,21	0,390	4,15	1,72	
282	FTIR	1,84	0,020	0,21	0,09	
283	FTIR	1,20	-0,616	-6,55	-2,71	
322	FTIR	2,47	0,650	6,91	2,86	
338	FTIR	1,32	-0,500	-5,31	-2,20	
349	FTIR	2,40	0,580	6,16	2,56	
363	FTIR	0,90	-0,920	-9,78	-4,05	

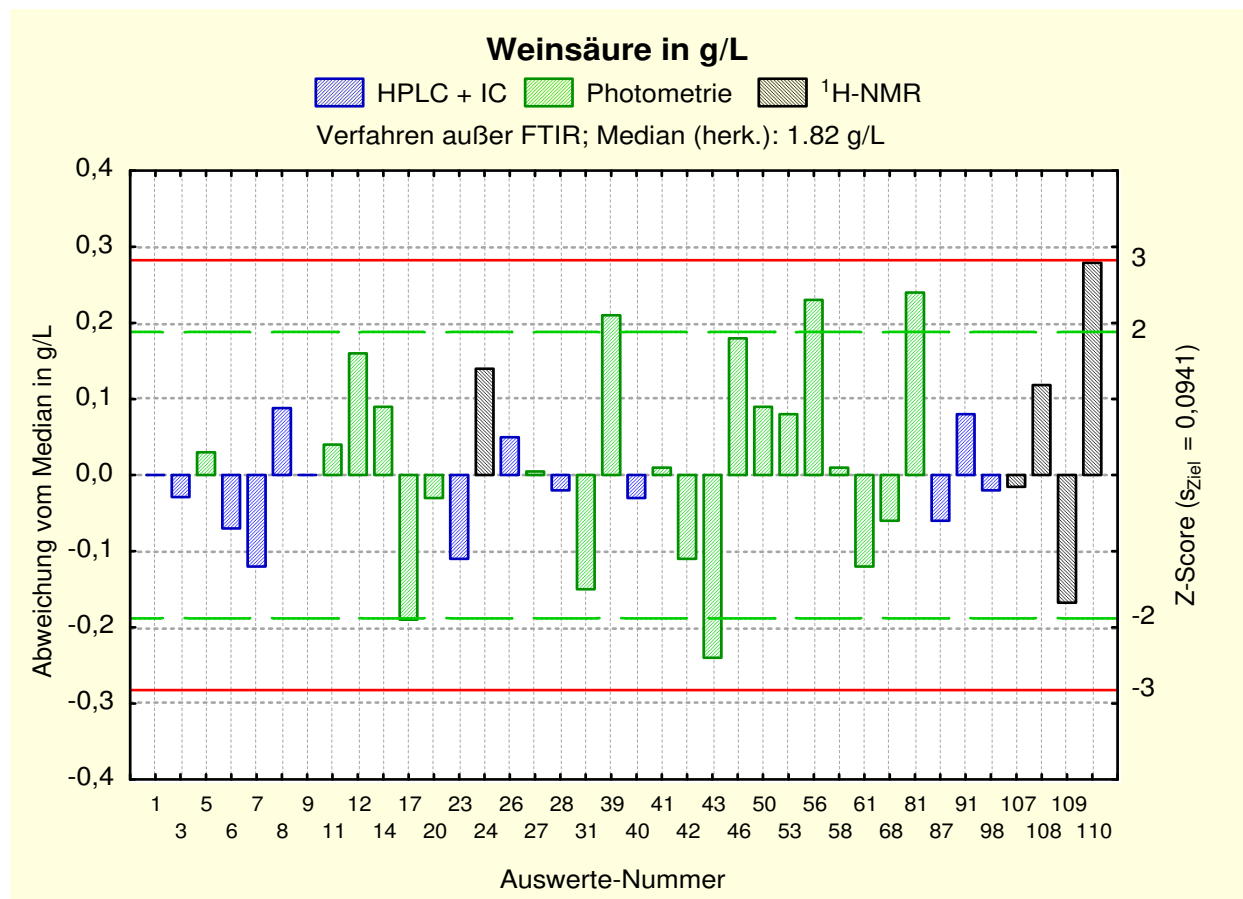
(*) Dieser Wert weicht um mehr als 50 % vom Median der herkömmlichen Werte ab.

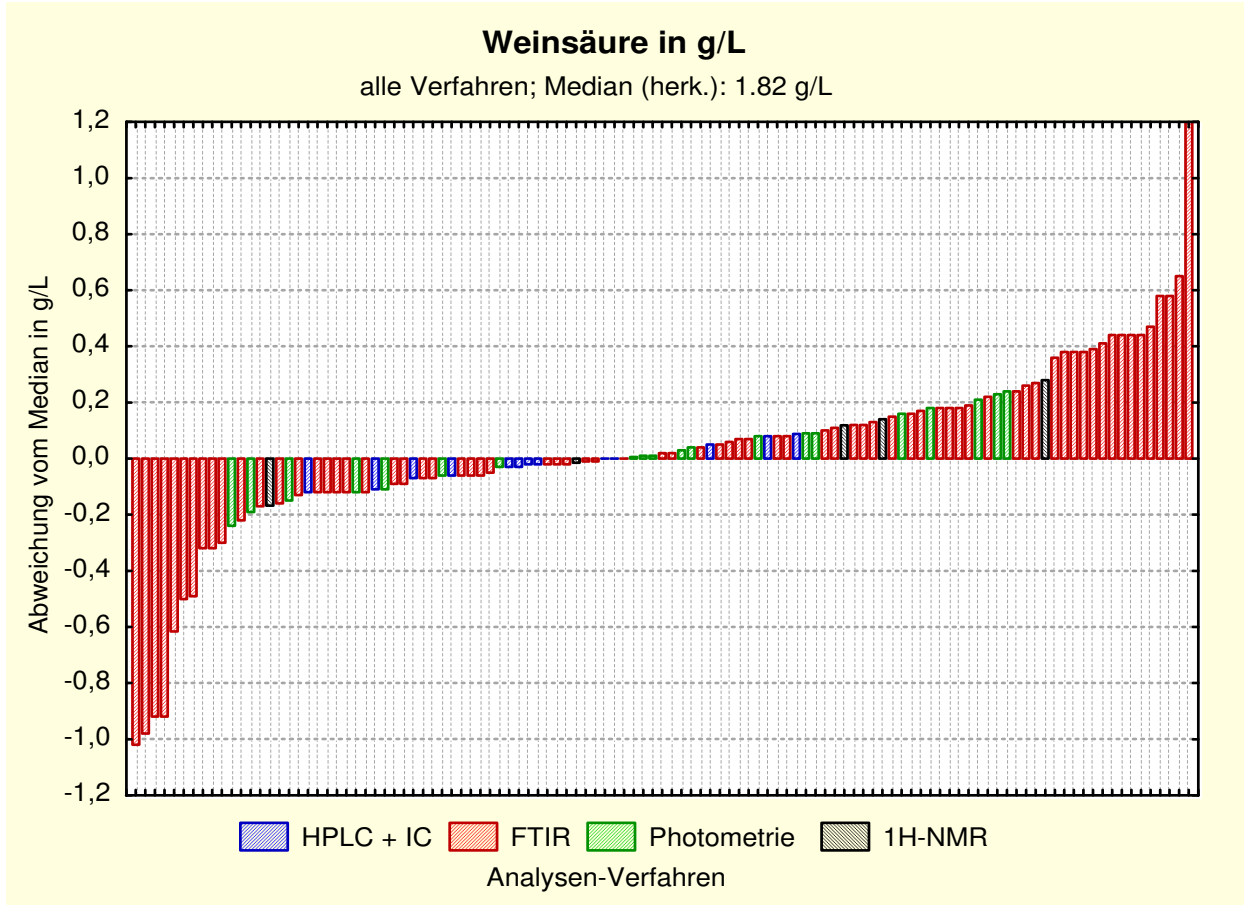
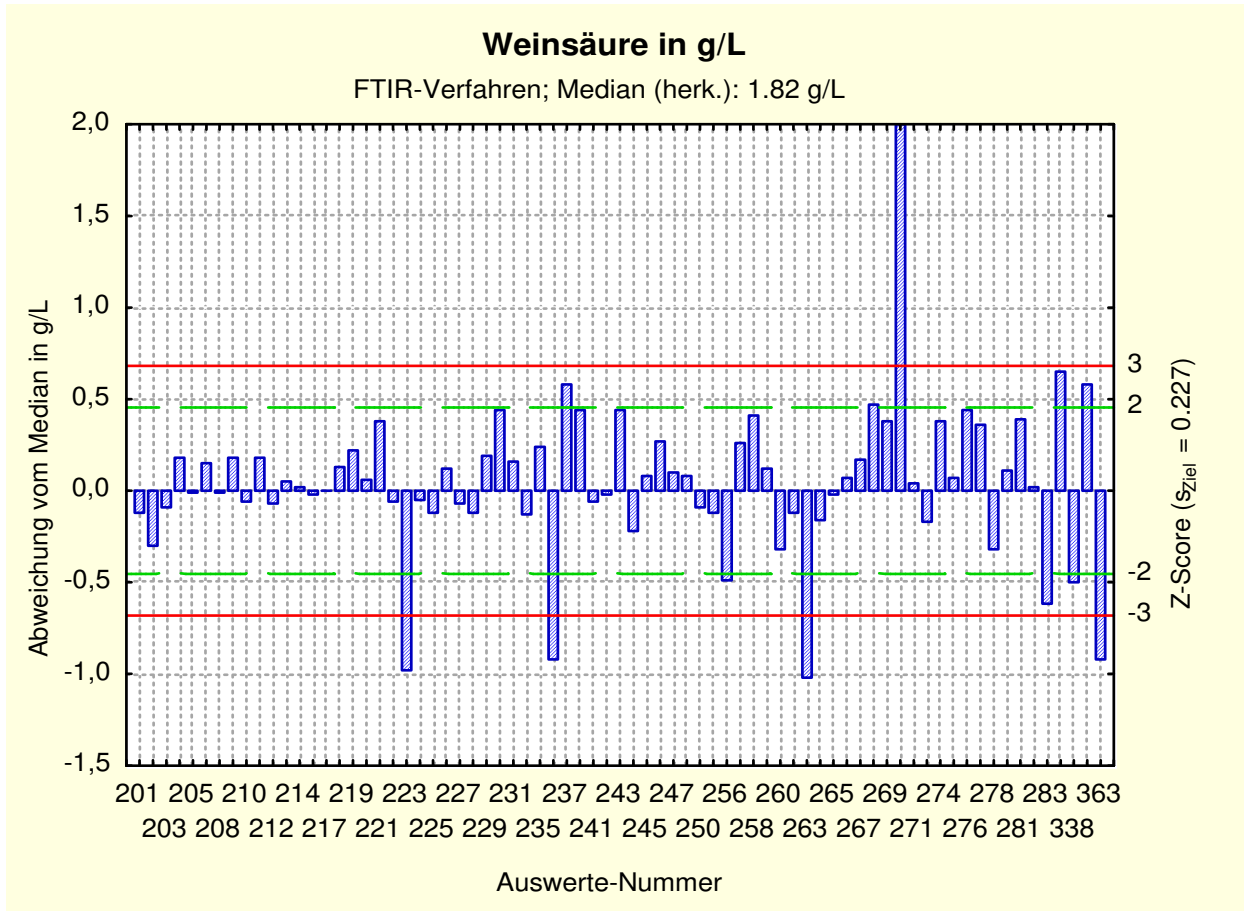
5.10.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Weinsäure [g/L]	HPLC + IC alle Daten	herk. Verfahren alle Daten
Gültige Werte	13	33
Minimalwert	1,70	1,58
Mittelwert	1,801	1,827
Median	1,800	1,820
Maximalwert	1,91	2,06
Standardabweichung (s _L)	0,064	0,117
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,018	0,020
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,093	0,094
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp herk.})		
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{Ü FTIR})	0,227	0,227
Horrat-Wert (s _L /s _H)	0,69	1,24
Quotient (s _L /s _{exp herk.})		
Quotient (s _L /s _{Ü FTIR})	0,28	0,52
Quotient (u _M /s _H)	0,19	0,22
Quotient (u _M /s _{exp herk.})		
Quotient (u _M /s _{Ü FTIR})	0,08	0,09

5.10.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	12	1,792	0,062
IC	Ionenchromatographie	1	1,908	
	HPLC + IC	13	1,801	0,069
photometr.	photometrisch n. Rebelein	3	1,963	0,120
phot. autom.	photometrisch, automatisiert (Vanadat)	17	1,824	0,148
	alle herkömmlichen Verfahren	33	1,826	0,118
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	73	1,878	0,286
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	5	1,891	0,192





5.11 Flüchtige Säure [g/L]

5.11.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Bewertungsbasis Werte mit SO₂-Korrektur oder Ausschluss und experimentelle Zielstandardabweichung

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	Halbmikro SO2 unber.	0,440	0,0800	3,37	2,80	
03	OIV SO2-korr.	0,321	-0,0390	-1,64	-1,36	
05	OIV SO2-korr.	0,370	0,0100	0,42	0,35	
06	Gerhardt SO2 korr.	0,329	-0,0310	-1,31	-1,08	
07	OIV SO2-korr.	0,468	0,1080	4,55	3,78	
08	OIV SO2-korr.	0,295	-0,0650	-2,74	-2,27	
09	OIV sonst. mod. SO2 korr.	0,314	-0,0460	-1,94	-1,61	
10	OIV SO2-korr.	0,351	-0,0090	-0,38	-0,32	
11	OIV SO2-korr.	0,320	-0,0400	-1,68	-1,40	
12	Halbmikro SO2 unber.	0,370	0,0100	0,42	0,35	
22	Gerhardt SO2 korr.	0,430	0,0700	2,95	2,45	
23	Halbmikro SO2 unber.	0,470	0,1100	4,63	3,85	
28	Gerhardt SO2 ausg.	0,325	-0,0350	-1,47	-1,22	
29	Halbmikro SO2 unber.	0,465	0,1051	4,43	3,68	
31	Gerhardt SO2 korr.	0,380	0,0200	0,84	0,70	
39	Gerhardt SO2 korr.	0,360	0,0000	0,00	0,00	
40	Gerhardt SO2 korr.	0,373	0,0130	0,55	0,46	
41	Gerhardt SO2 ausg.	0,392	0,0320	1,35	1,12	
42	Gerhardt SO2 ausg.	0,370	0,0100	0,42	0,35	
46	Halbmikro SO2 korr.	0,330	-0,0300	-1,26	-1,05	
55	Gerhardt SO2 korr.	0,450	0,0900	3,79	3,15	
56	Rentschler mod. korr.	0,382	0,0220	0,93	0,77	
58	OIV SO2-korr.	0,360	0,0000	0,00	0,00	
60	Wädenswil SO2 korr.	0,360	0,0000	0,00	0,00	
63	Halbmikro SO2 unber.	0,525	0,1650	6,95	5,78	(**)
65	Wädenswil SO2 korr.	0,360	0,0000	0,00	0,00	
66	Halbmikro SO2 unber.	0,430	0,0700	2,95	2,45	
67	Wädenswil SO2 korr.	0,340	-0,0200	-0,84	-0,70	
68	Gerhardt SO2 korr.	0,420	0,0600	2,53	2,10	
72	Wädenswil SO2 korr.	0,297	-0,0631	-2,66	-2,21	
81	Halbmikro SO2 korr.	0,325	-0,0350	-1,47	-1,22	
84	Halbmikro SO2 unber.	0,500	0,1400	5,89	4,90	
86	OIV SO2-korr.	0,378	0,0180	0,76	0,63	
87	OIV SO2-korr.	0,379	0,0190	0,80	0,67	
98	Gerhardt SO2 korr.	0,470	0,1100	4,63	3,85	
103	spezial_1	0,384	0,0240	1,01	0,84	

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

5.11.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	0,370	0,0100	0,42	0,11	
202	FTIR	0,320	-0,0400	-1,68	-0,45	
203	FTIR	0,464	0,1040	4,38	1,17	
204	FTIR	0,500	0,1400	5,89	1,57	
205	FTIR	0,390	0,0300	1,26	0,34	
206	FTIR	0,380	0,0200	0,84	0,22	
208	FTIR	0,384	0,0240	1,01	0,27	
209	FTIR	0,210	-0,1500	-6,32	-1,68	
210	FTIR	0,370	0,0100	0,42	0,11	
211	FTIR	0,410	0,0500	2,11	0,56	
212	FTIR	0,500	0,1400	5,89	1,57	
214	FTIR	0,370	0,0100	0,42	0,11	
216	FTIR	0,310	-0,0500	-2,11	-0,56	
217	FTIR	0,230	-0,1300	-5,47	-1,46	
218	FTIR	0,300	-0,0600	-2,53	-0,67	
219	FTIR	0,380	0,0200	0,84	0,22	
220	FTIR	0,360	0,0000	0,00	0,00	
221	FTIR	0,620	0,2600	10,95	2,92	

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

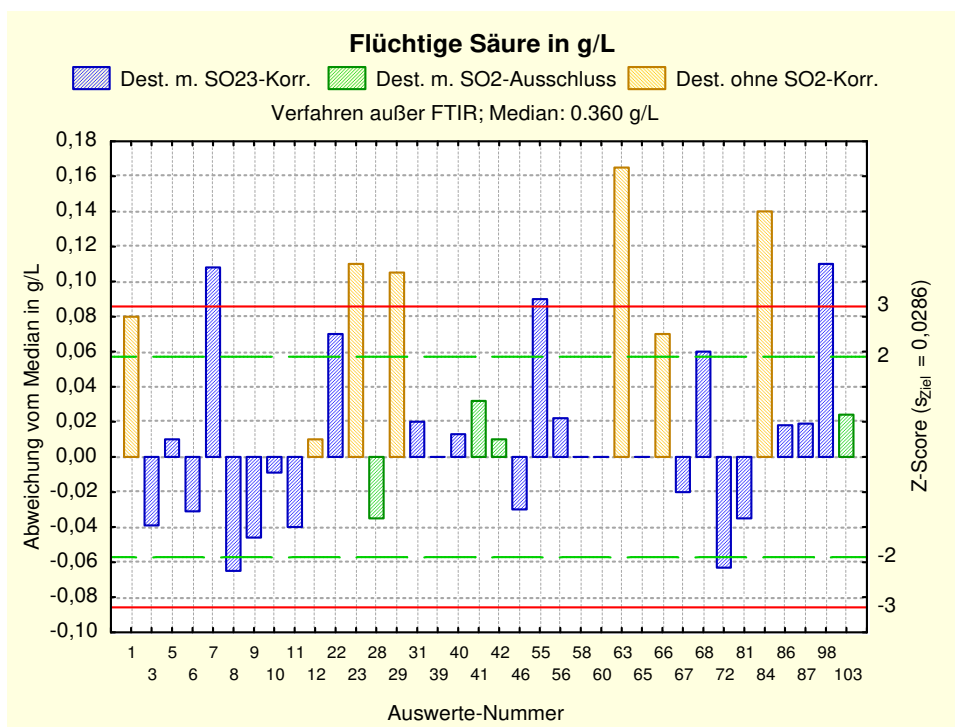
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
222	FTIR	0,320	-0,0400	-1,68	-0,45	
223	FTIR	0,450	0,0900	3,79	1,01	
225	FTIR	0,380	0,0200	0,84	0,22	
226	FTIR	0,280	-0,0800	-3,37	-0,90	
227	FTIR	0,308	-0,0520	-2,19	-0,58	
228	FTIR	0,290	-0,0700	-2,95	-0,79	
229	FTIR	0,500	0,1400	5,89	1,57	
230	FTIR	0,330	-0,0300	-1,26	-0,34	
231	FTIR	0,528	0,1680	7,07	1,89	
233	FTIR	0,490	0,1300	5,47	1,46	
235	FTIR	0,300	-0,0600	-2,53	-0,67	
236	FTIR	0,490	0,1300	5,47	1,46	
237	FTIR	0,400	0,0400	1,68	0,45	
238	FTIR	0,530	0,1700	7,16	1,91	
241	FTIR	0,440	0,0800	3,37	0,90	
242	FTIR	0,400	0,0400	1,68	0,45	
243	FTIR	0,410	0,0500	2,11	0,56	
244	FTIR	0,410	0,0500	2,11	0,56	
245	FTIR	0,300	-0,0600	-2,53	-0,67	
246	FTIR	0,550	0,1900	8,00	2,13	
247	FTIR	0,420	0,0600	2,53	0,67	
249	FTIR	0,460	0,1000	4,21	1,12	
250	FTIR	0,070	-0,2900	-12,21	-3,25	
251	FTIR	0,480	0,1200	5,05	1,35	
254	FTIR	0,380	0,0200	0,84	0,22	
255	FTIR	0,430	0,0700	2,95	0,79	
256	FTIR	0,210	-0,1500	-6,32	-1,68	
257	FTIR	0,420	0,0600	2,53	0,67	
258	FTIR	0,280	-0,0800	-3,37	-0,90	
260	FTIR	0,490	0,1300	5,47	1,46	
261	FTIR	0,240	-0,1200	-5,05	-1,35	
262	FTIR	0,470	0,1100	4,63	1,23	
263	FTIR	0,340	-0,0200	-0,84	-0,22	
264	FTIR	0,460	0,1000	4,21	1,12	
265	FTIR	0,340	-0,0200	-0,84	-0,22	
266	FTIR	0,390	0,0300	1,26	0,34	
267	FTIR	0,390	0,0300	1,26	0,34	
268	FTIR	0,470	0,1100	4,63	1,23	
269	FTIR	0,380	0,0200	0,84	0,22	
270	FTIR	0,280	-0,0800	-3,37	-0,90	
271	FTIR	0,350	-0,0100	-0,42	-0,11	
273	FTIR	0,380	0,0200	0,84	0,22	
274	FTIR	0,480	0,1200	5,05	1,35	
275	FTIR	0,290	-0,0700	-2,95	-0,79	
276	FTIR	0,440	0,0800	3,37	0,90	
277	FTIR	0,410	0,0500	2,11	0,56	
278	FTIR	0,440	0,0800	3,37	0,90	
280	FTIR	0,280	-0,0800	-3,37	-0,90	
281	FTIR	0,390	0,0300	1,26	0,34	
282	FTIR	0,415	0,0550	2,32	0,62	
284	FTIR	0,530	0,1700	7,16	1,91	
322	FTIR	0,380	0,0200	0,84	0,22	
338	FTIR	0,390	0,0300	1,26	0,34	
349	FTIR	0,350	-0,0100	-0,42	-0,11	
363	FTIR	0,330	-0,0300	-1,26	-0,34	

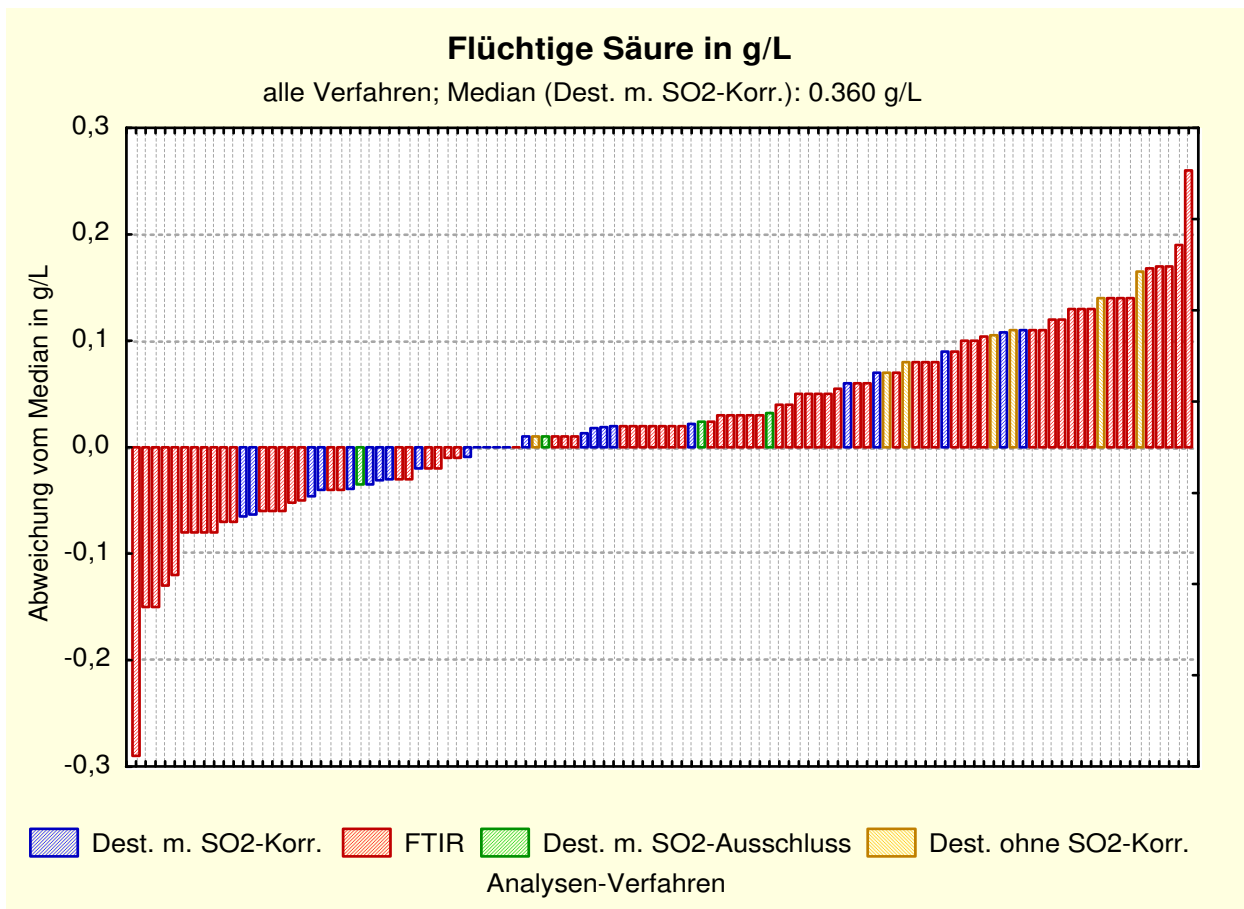
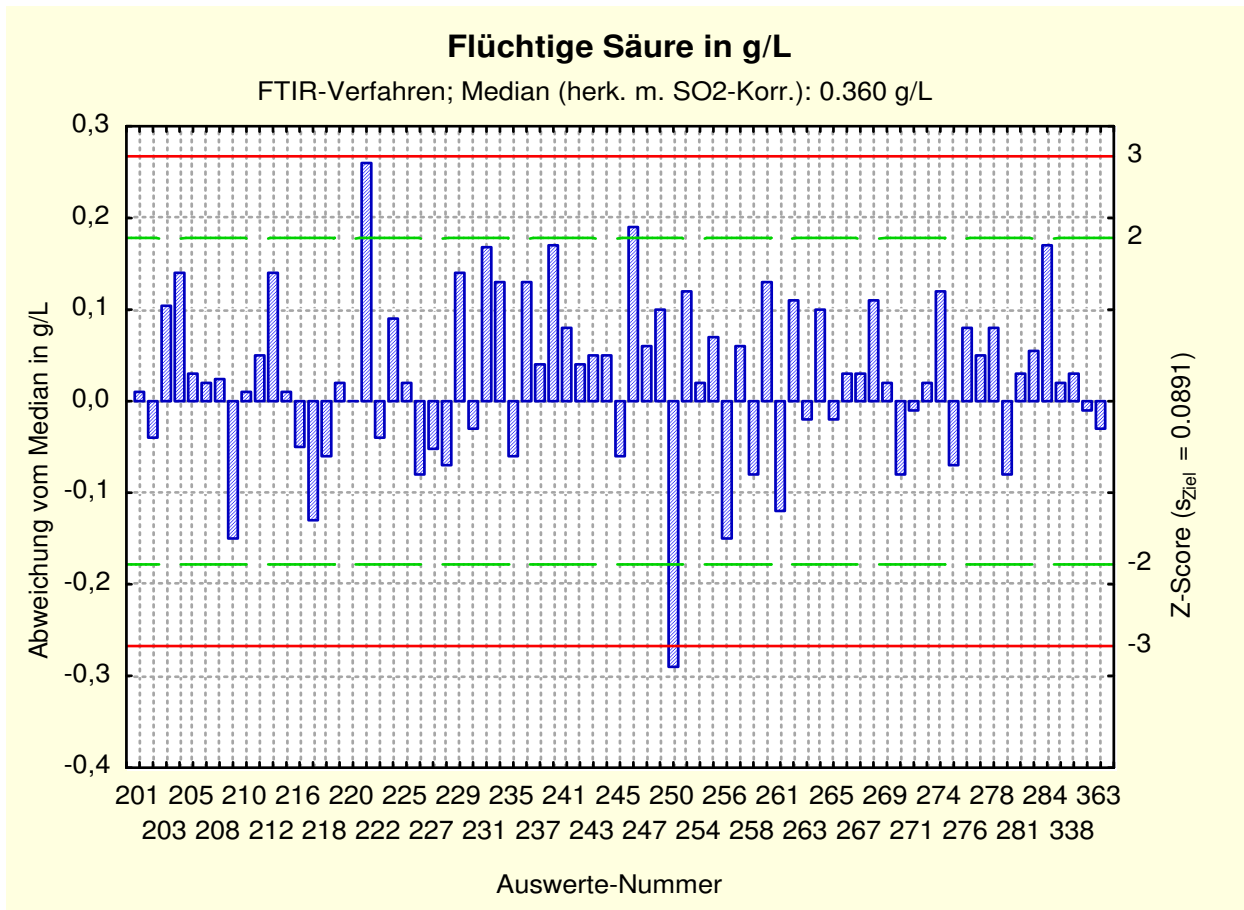
5.11.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Destillationsverfahren

Ergebnisse für Flüchtige Säure in g/L nur Destillationsverfahren mit SO ₂ -Korrektur oder Ausschluss	alle Daten
Gültige Werte	29
Minimalwert	0,295
Mittelwert	0,3667
Median	0,3600
Maximalwert	0,470
Standardabweichung (s _L)	0,047
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,009
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,024
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp herk.})	0,029
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{Ü FTIR})	0,089
Horrat-Wert (s _L /s _H)	1,96
Quotient (s _L /s _{exp herk.})	1,63
Quotient (s _L /s _{Ü FTIR})	0,52
Quotient (u _M /s _H)	0,36
Quotient (u _M /s _{exp herk.})	0,30
Quotient (u _M /s _{Ü FTIR})	0,10

5.11.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
Halbmikro	Halbmikrodestillation n. AVV,			
SO2 unber.	SO ₂ -Einfluss nicht berücksichtigt	7	0,4577	0,0561
SO2 korr.	SO ₂ -Einfluss korrigiert	2	0,3275	0,0040
Wädenswil SO2 korr.	Wädenswil-Verfahren, SO ₂ -Einfluss korrigiert	4	0,3412	0,0296
Gerhardt	Destillationsapparat Gerhardt,			
SO2 ausg.	SO ₂ -Einfluss ausgeschlossen	3	0,3623	0,0387
SO2 korr.	SO ₂ -Einfluss korrigiert	8	0,4015	0,0550
OIV SO2-korr.	OIV-MA-AS-313-02			
	einschl. SO ₂ -Korrektur	9	0,3549	0,0422
OIV sonst. mod. SO2 korr.	sonstig modifiziert mit SO ₂ -Korrektur	1	0,3140	
Rentschler mod.	Verfahren n. Rentschler mod. Dr. Nilles,			
SO2-korr.	SO ₂ -Einfluss korrigiert	1	0,3820	
spezial_1	Verfahrensbeschreibung Teil 1 Abschnitt 6.15.2	1	0,3840	
	Destillationsverfahren mit SO ₂ -Korrektur	29	0,3634	0,0456
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	73	0,3891	0,0884





5.12 Acetat (als Essigsäure) [g/L]**5.12.1 Herkömmliche und FTIR-Laborergebnisse, Teil 1**

Bewertungsbasis: enzymatisch, automatisiert (verbindliche Z-Score für diese Werte)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	0,290	-0,075	-3,12	
03	HPLC	0,273	-0,092	-3,83	
06	enzymat. autom.	0,351	-0,014	-0,58	
07	enzymat. autom.	0,310	-0,055	-2,29	
12	enzymat. autom.	0,360	-0,005	-0,21	
14	enzymat. autom.	0,410	0,045	1,87	
16	enzymat. autom.	0,410	0,045	1,87	
17	enzymat. autom.	0,350	-0,015	-0,62	
20	enzymat. autom.	0,320	-0,045	-1,87	
24	NMR	0,280	-0,085	-3,54	
26	HPLC	0,370	0,005	0,21	
27	enzymat. autom.	0,320	-0,045	-1,87	
31	enzymat. autom.	0,450	0,085	3,54	
39	enzymat. autom.	0,280	-0,085	-3,54	
40	HPLC	0,330	-0,035	-1,46	
42	enzymat. autom.	0,350	-0,015	-0,62	
43	enzymat. autom.	0,350	-0,015	-0,62	
45	enzymat. autom.	0,370	0,005	0,21	
46	enzymat. autom.	0,460	0,095	3,95	
50	enzymat. autom.	0,370	0,005	0,21	
53	enzymat. autom.	0,370	0,005	0,21	
56	enzymat. autom.	0,340	-0,025	-1,04	
58	enzymat. autom.	0,370	0,005	0,21	
61	enzymat. autom.	0,370	0,005	0,21	
68	enzymat. autom.	0,380	0,015	0,62	
88	HPLC	0,290	-0,075	-3,12	
107	NMR	0,307	-0,058	-2,41	
108	NMR	0,280	-0,085	-3,55	
109	NMR	0,297	-0,068	-2,83	
110	NMR	0,330	-0,035	-1,45	
210	FTIR	0,440	0,075	3,12	
213	FTIR	0,390	0,025	1,04	
224	FTIR	0,400	0,035	1,46	
242	FTIR	0,310	-0,055	-2,29	
245	FTIR	0,300	-0,065	-2,70	
259	FTIR	0,550	0,185	7,70	(*)
260	FTIR	0,450	0,085	3,54	
274	FTIR	0,480	0,115	4,79	
283	FTIR	0,368	0,003	0,12	

(*) Dieser Wert weicht um mehr als 50 % vom Median der automatisiert enzymatischen Werte ab.
 Zeilen in grauer Schrift dienen nur der Information. Gültige Z-Score für diese Laborergebnisse im Abschnitt.5.12.2.

5.12.2 Herkömmliche und FTIR-Laboreergebnisse, Teil 2

Bewertungsbasis: HPLC, enzymatisch, manuell, ¹H-Kernresonanzspektroskopie

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	0,290	-0,004	-0,18	
03	HPLC	0,273	-0,021	-1,03	
24	NMR	0,280	-0,014	-0,68	
26	HPLC	0,370	0,076	3,83	
40	HPLC	0,330	0,036	1,83	
88	HPLC	0,290	-0,004	-0,18	
107	NMR	0,307	0,014	0,68	
108	NMR	0,280	-0,014	-0,69	
109	NMR	0,297	0,004	0,18	
110	NMR	0,330	0,037	1,84	
210	FTIR	0,440	0,146	7,34	(**)
213	FTIR	0,390	0,096	4,83	
224	FTIR	0,400	0,106	5,33	(**)
242	FTIR	0,310	0,016	0,83	
245	FTIR	0,300	0,006	0,32	
259	FTIR	0,550	0,256	12,84	(*)
260	FTIR	0,450	0,156	7,84	(*)
274	FTIR	0,480	0,186	9,34	(*)
283	FTIR	0,368	0,074	3,73	

(*) Diese Werte weichen um mehr als 50 % vom maßgeblichen Median ab.

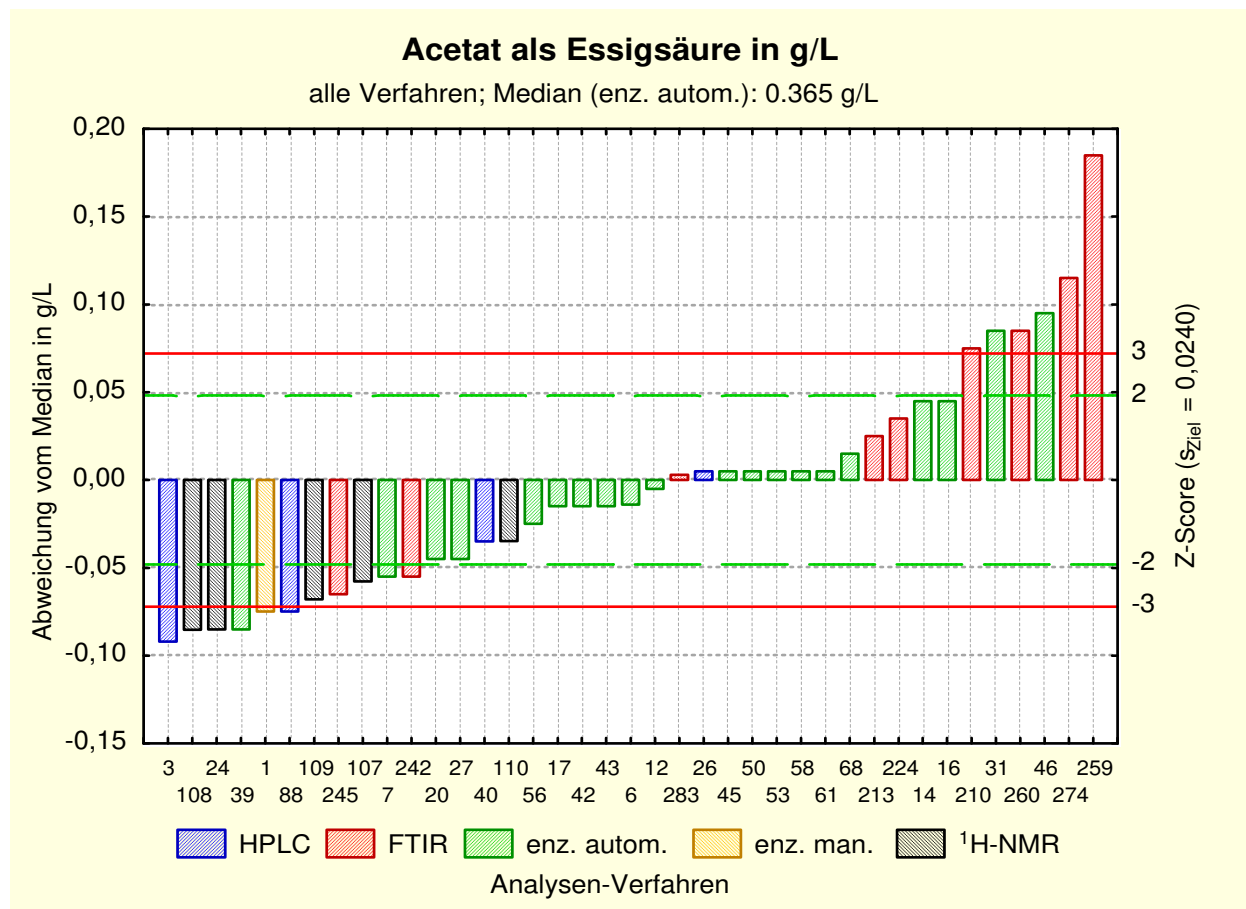
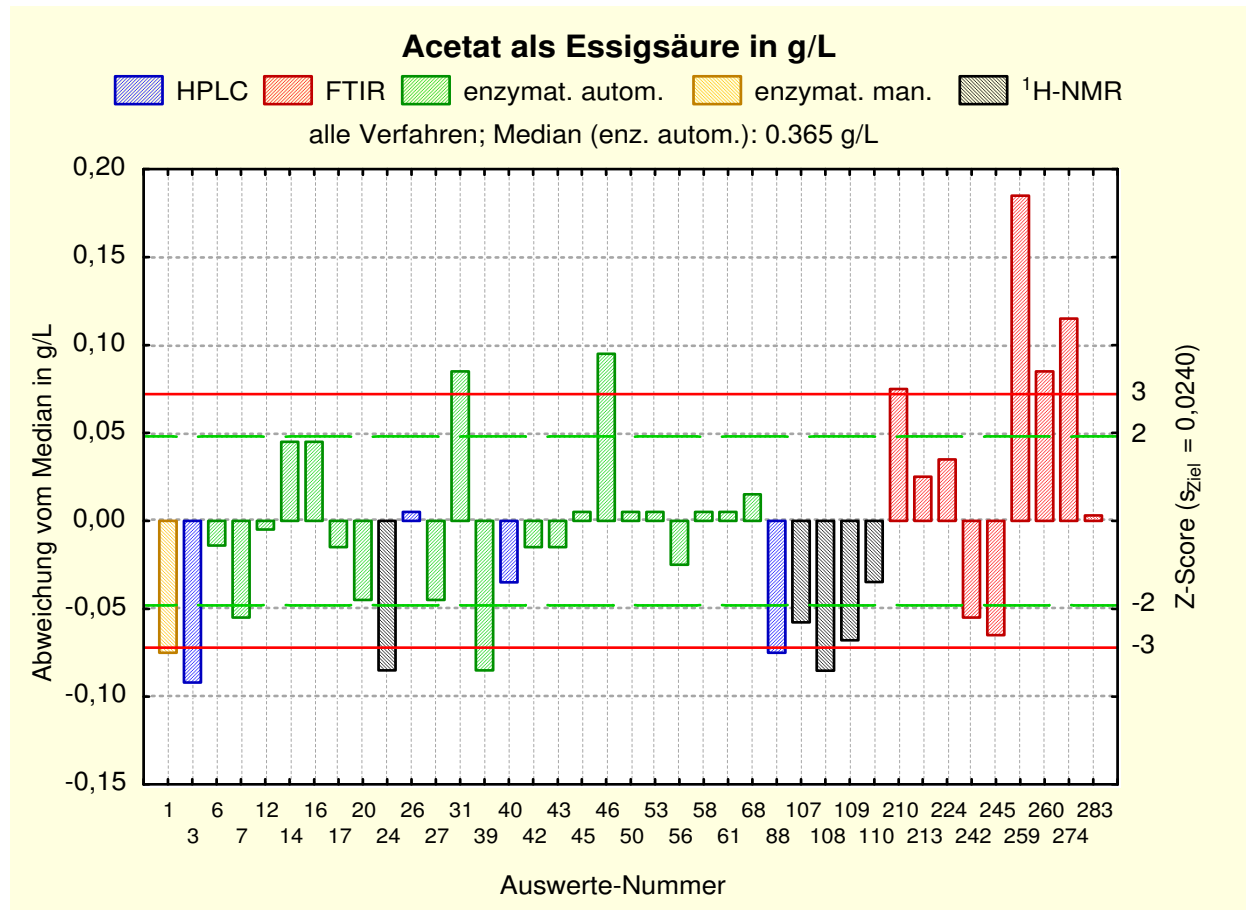
(**) Diese Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom maßgeblichen Median ab.

5.12.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Acetat (als Essigsäure) [g/L]	enzymatisch, automat. alle Daten	HPLC, enz.man., ¹ H-NMR alle Daten
Gültige Werte	20	10
Minimalwert	0,280	0,273
Mittelwert	0,365	0,305
Median	0,365	0,294
Maximalwert	0,460	0,370
Standardabweichung (s _L)	0,044	0,030
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,010	0,010
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,024	0,020
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp herk.})		
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{FTIR})		
Horrat-Wert (s _L /s _H)	1,82	1,52
Quotient (s _L /s _{exp herk.})		
Quotient (s _L /s _{FTIR})		
Quotient (u _M /s _H)	0,41	0,48
Quotient (u _M /s _{exp herk.})		
Quotient (u _M /s _{FTIR})		

5.12.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert	20	0,3626	0,0379
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	4	0,3158	0,0492
enzymat. Hand	enzymatisch, manuell	1	0,2900	
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie (¹ H-NMR)	5	0,2988	0,0239
	HPLC, enzymatisch manuell + ¹ H-NMR	10	0,3003	0,0250
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	9	0,4089	0,0889



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	1,27	0,000	0,00	0,00	
02	enzymat. Hand	1,24	-0,030	-0,43	-0,60	
03	HPLC	1,35	0,082	1,18	1,63	
06	HPLC	1,25	-0,020	-0,29	-0,40	
07	enzymat. autom.	1,25	-0,021	-0,30	-0,42	
09	HPLC	1,31	0,040	0,58	0,80	
23	HPLC	1,18	-0,090	-1,30	-1,79	
24	NMR	1,28	0,010	0,14	0,20	
26	HPLC	1,29	0,020	0,29	0,40	
28	HPLC	1,32	0,050	0,72	1,00	
40	HPLC	1,43	0,160	2,31	3,19	
87	HPLC	1,21	-0,060	-0,87	-1,20	
91	HPLC	1,26	-0,010	-0,14	-0,20	
98	HPLC	1,40	0,130	1,88	2,59	
107	NMR	1,25	-0,020	-0,29	-0,40	
108	NMR	1,26	-0,014	-0,21	-0,29	
109	NMR	1,35	0,084	1,21	1,67	
110	NMR	1,33	0,063	0,91	1,26	

5.13.2 Laborergebnisse L-Äpfelsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enz.(L-) Hand	1,09	-0,060	-0,94	-1,27	
02	enz.(L-) Hand	1,07	-0,085	-1,33	-1,79	
05	enz.(L-), autom.	1,08	-0,070	-1,10	-1,49	
06	enz.(L-), autom.	1,12	-0,030	-0,47	-0,64	
07	enz.(L-), autom.	1,09	-0,060	-0,94	-1,27	
08	enz.(L-), autom.	1,27	0,123	1,93	2,61	
09	enz.(L-) Hand	1,10	-0,050	-0,78	-1,06	
11	enz.(L-), autom.	1,03	-0,120	-1,88	-2,55	
12	enz.(L-), autom.	1,25	0,100	1,57	2,12	
14	enz.(L-), autom.	1,14	-0,010	-0,16	-0,21	
16	enz.(L-), autom.	1,23	0,080	1,26	1,70	
17	enz.(L-), autom.	0,80	-0,350	-5,49	-7,43	(**)
20	enz.(L-), autom.	1,10	-0,050	-0,78	-1,06	
27	enz.(L-), autom.	1,16	0,010	0,16	0,21	
31	enz.(L-), autom.	1,20	0,050	0,78	1,06	
39	enz.(L-), autom.	1,15	0,000	0,00	0,00	
41	enz.(L-), autom.	1,15	0,000	0,00	0,00	
42	enz.(L-), autom.	1,21	0,060	0,94	1,27	
43	enz.(L-), autom.	1,16	0,010	0,16	0,21	
45	enz.(L-), autom.	1,08	-0,069	-1,08	-1,46	
46	enz.(L-), autom.	1,15	0,000	0,00	0,00	
50	enz.(L-), autom.	1,22	0,070	1,10	1,49	
55	enz.(L-), autom.	1,70	0,550	8,63	11,67	(**)
56	enz.(L-), autom.	1,09	-0,060	-0,94	-1,27	
58	enz.(L-), autom.	1,18	0,030	0,47	0,64	
61	enz.(L-), autom.	1,26	0,110	1,73	2,33	
63	enz.(L-) Hand	1,10	-0,051	-0,80	-1,08	
68	enz.(L-), autom.	1,20	0,050	0,78	1,06	
81	enz.(L-) Hand	1,08	-0,074	-1,16	-1,57	
87	enz.(L-), autom.	1,22	0,070	1,10	1,49	
89	enz.(L-) Hand	1,14	-0,010	-0,16	-0,21	
105	k. A.	1,16	0,010	0,16	0,21	

(**) Diese Werte blieben bei der wiederholten Berechnung unberücksichtigt.

5.13.3 FTIR-Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	1,52	0,250	3,61	1,15	
202	FTIR	1,58	0,310	4,47	1,42	
203	FTIR	1,35	0,076	1,10	0,35	
204	FTIR	1,12	-0,150	-2,16	-0,69	
205	FTIR	1,14	-0,130	-1,88	-0,60	
206	FTIR	1,09	-0,180	-2,60	-0,83	
208	FTIR	1,04	-0,230	-3,32	-1,06	
209	FTIR	0,90	-0,370	-5,34	-1,70	
210	FTIR	1,31	0,040	0,58	0,18	
211	FTIR	1,20	-0,070	-1,01	-0,32	
212	FTIR	1,53	0,260	3,75	1,19	
213	FTIR	2,07	0,800	11,54	3,67	
214	FTIR	1,30	0,030	0,43	0,14	
216	FTIR	2,40	1,130	16,31	5,18	(*)
217	FTIR	1,42	0,150	2,16	0,69	
218	FTIR	1,38	0,110	1,59	0,50	
219	FTIR	1,64	0,370	5,34	1,70	
220	FTIR	1,56	0,290	4,18	1,33	
221	FTIR	1,30	0,030	0,43	0,14	
222	FTIR	1,39	0,120	1,73	0,55	
223	FTIR	1,63	0,360	5,19	1,65	
224	FTIR	1,45	0,180	2,60	0,83	
225	FTIR	1,50	0,230	3,32	1,06	
226	FTIR	1,29	0,020	0,29	0,09	
227	FTIR	1,35	0,080	1,15	0,37	
228	FTIR	1,70	0,430	6,20	1,97	
229	FTIR	1,28	0,010	0,14	0,05	
230	FTIR	1,68	0,410	5,92	1,88	
231	FTIR	1,38	0,110	1,59	0,50	
233	FTIR	1,56	0,290	4,18	1,33	
235	FTIR	1,48	0,210	3,03	0,96	
237	FTIR	1,40	0,130	1,88	0,60	
238	FTIR	1,44	0,170	2,45	0,78	
241	FTIR	1,62	0,350	5,05	1,61	
242	FTIR	1,50	0,230	3,32	1,06	
243	FTIR	1,37	0,100	1,44	0,46	
244	FTIR	1,75	0,480	6,93	2,20	
245	FTIR	1,27	0,000	0,00	0,00	
246	FTIR	1,28	0,010	0,14	0,05	
247	FTIR	1,58	0,310	4,47	1,42	
249	FTIR	1,40	0,130	1,88	0,60	
250	FTIR	1,95	0,680	9,81	3,12	
254	FTIR	1,40	0,130	1,88	0,60	
255	FTIR	1,30	0,030	0,43	0,14	
256	FTIR	1,30	0,030	0,43	0,14	
257	FTIR	2,13	0,860	12,41	3,94	
258	FTIR	1,50	0,230	3,32	1,06	
259	FTIR	1,12	-0,150	-2,16	-0,69	
260	FTIR	0,80	-0,470	-6,78	-2,16	
261	FTIR	1,40	0,130	1,88	0,60	
263	FTIR	1,20	-0,070	-1,01	-0,32	
264	FTIR	2,38	1,110	16,02	5,09	(*)
265	FTIR	1,12	-0,150	-2,16	-0,69	
266	FTIR	1,19	-0,080	-1,15	-0,37	
267	FTIR	1,65	0,380	5,48	1,74	
268	FTIR	1,21	-0,060	-0,87	-0,28	
269	FTIR	1,60	0,330	4,76	1,51	
270	FTIR	2,04	0,770	11,11	3,53	
271	FTIR	1,27	0,000	0,00	0,00	
273	FTIR	1,52	0,250	3,61	1,15	
274	FTIR	1,20	-0,070	-1,01	-0,32	
275	FTIR	1,31	0,040	0,58	0,18	
276	FTIR	1,28	0,010	0,14	0,05	
277	FTIR	1,42	0,150	2,16	0,69	

(*) Diese Werte weichen um mehr als 50 % vom Median der enzymatischen und HPLC-Werte ab.

Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse

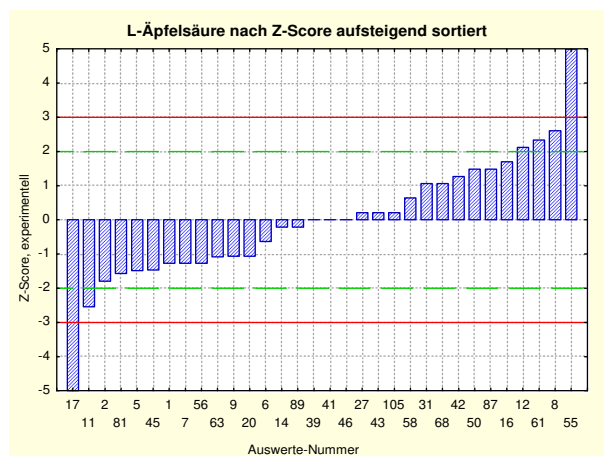
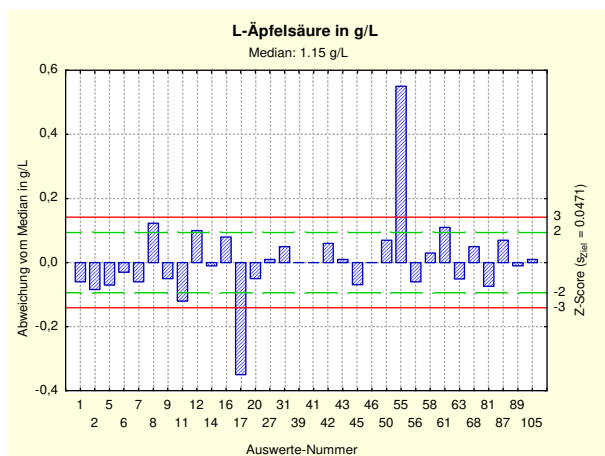
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
278	FTIR	2,00	0,730	10,53	3,35	
280	FTIR	1,34	0,070	1,01	0,32	
281	FTIR	1,41	0,140	2,02	0,64	
282	FTIR	1,62	0,350	5,05	1,61	
283	FTIR	0,74	-0,533	-7,69	-2,44	
322	FTIR	1,15	-0,120	-1,73	-0,55	
338	FTIR	1,20	-0,070	-1,01	-0,32	
349	FTIR	1,00	-0,270	-3,90	-1,24	
363	FTIR	1,00	-0,270	-3,90	-1,24	

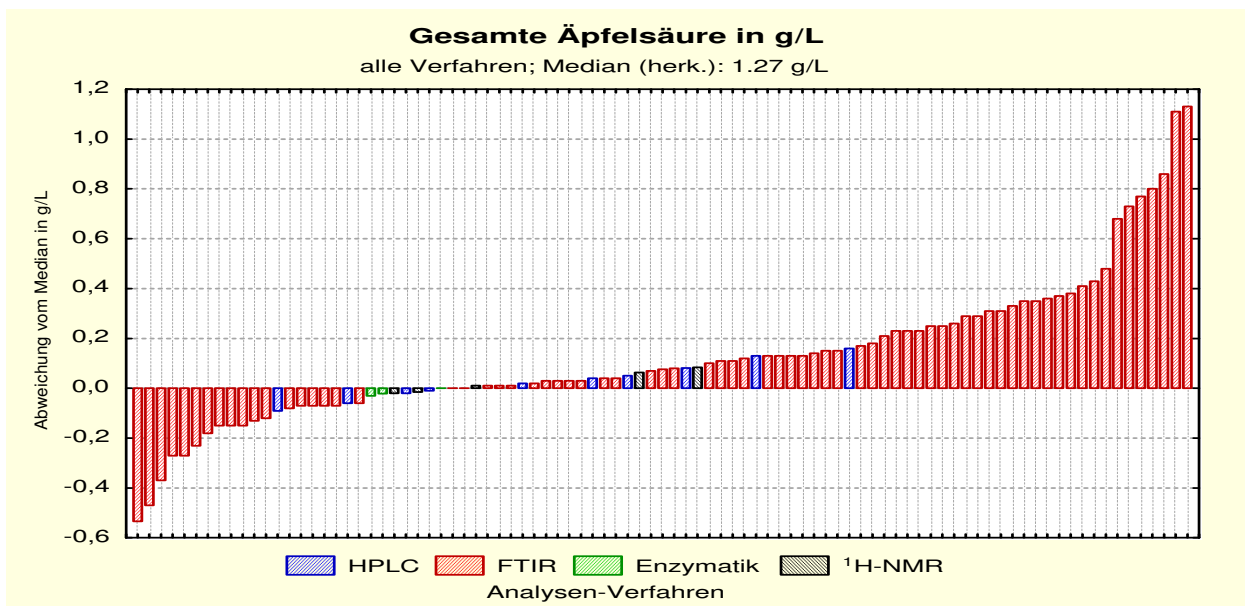
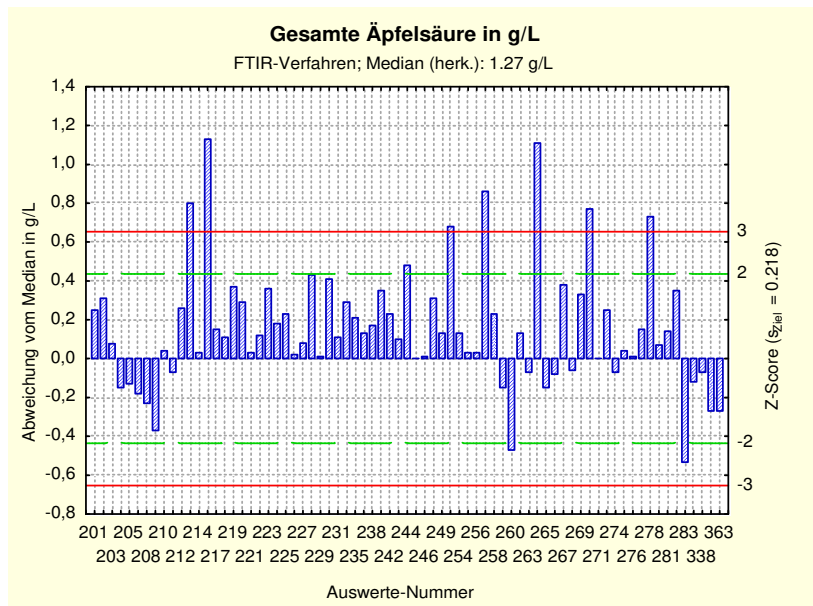
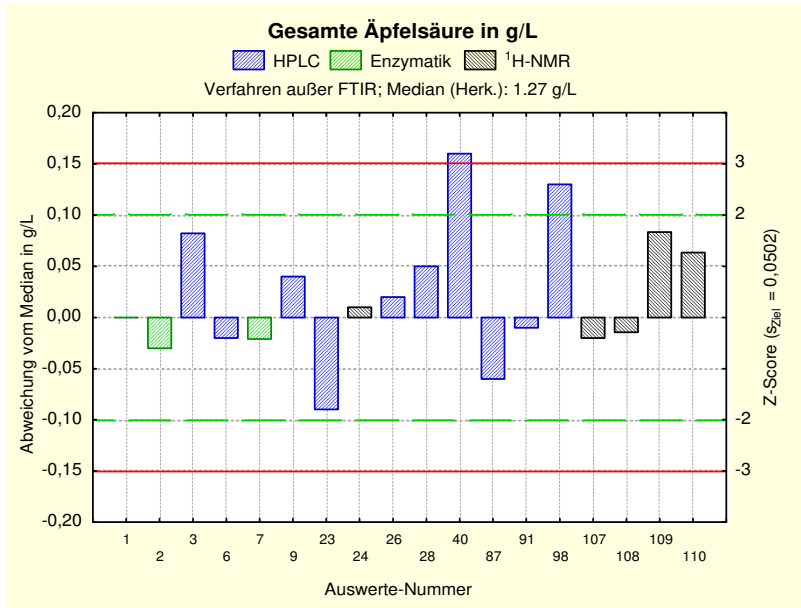
5.13.4 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse [g/L]	Gesamte Äpfelsäure		L-Äpfelsäure	
	alle Daten	alle Daten	ber. Daten	
Gültige Werte	13	32	30	
Minimalwert	1,18	0,80	1,03	
Mittelwert	1,289	1,155	1,149	
Median	1,270	1,150	1,150	
Maximalwert	1,43	1,70	1,27	
Standardabweichung (s _L)	0,072	0,132	0,064	
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,020	0,023	0,012	
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,069	0,064	0,064	
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp})	0,050	0,047	0,047	
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{Ü FTIR})	0,218			
Horvat-Wert (s _L /s _H)	1,04	2,08	1,01	
Quotient (s _L /s _{exp})	1,44	2,81	1,36	
Quotient (s _L /s _{Ü FTIR})	0,33			
Quotient (u _M /s _H)	0,29	0,37	0,18	
Quotient (u _M /s _{exp herk.})	0,40	0,50	0,25	
Quotient (u _M /s _{Ü FTIR})	0,09			

5.13.5 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	10	1,301	0,0884
enzymat. autom.	D- und L-Äpfelsäure, enzymatisch automatisiert	1	1,249	
enzymat. Hand	D- und L-Äpfelsäure, enzymatisch manuell	2	1,255	0,0241
	herkömmliche Verfahren Gesamte Äpfelsäure	13	1,287	0,0763
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	73	1,397	0,2484
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	5	1,293	0,0515
enz.(L-), autom.	enzymatisch nur L-Form, automatisiert	25	1,163	0,0801
enz.(L-) Hand	enzymatisch nur L-Form, manuell	6	1,094	0,0261
k. A.	Verfahrensangabe fehlt	1	1,160	
	alle Verfahren L-Äpfelsäure	32	1,149	0,0771





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	0,370	0,023	0,98	
03	HPLC	0,384	0,037	1,58	
05	enzymat. autom.	0,500	0,153	6,62	(**)
06	enzymat. autom.	0,360	0,013	0,54	
07	HPLC	0,327	-0,020	-0,89	
08	enzymat. autom.	0,355	0,008	0,33	
09	enzymat. Hand	0,333	-0,014	-0,63	
11	enzymat. autom.	0,365	0,018	0,76	
20	enzymat. autom.	0,370	0,023	0,98	
23	HPLC	0,250	-0,097	-4,23	
24	NMR	0,370	0,023	0,98	
26	HPLC	0,280	-0,067	-2,93	
28	HPLC	0,270	-0,077	-3,36	
40	HPLC	0,300	-0,047	-2,06	
63	enzymat. Hand	0,411	0,064	2,76	
68	enzymat. autom.	0,350	0,003	0,11	
81	enzymat. Hand	0,327	-0,021	-0,90	
86	enzymat. Hand	0,345	-0,003	-0,11	
91	HPLC	0,370	0,023	0,98	
98	HPLC	0,300	-0,047	-2,06	
107	NMR	0,338	-0,010	-0,43	
108	NMR	0,309	-0,039	-1,69	
109	NMR	0,341	-0,007	-0,29	
110	NMR	0,354	0,007	0,29	

(**) Dieser Wert blieb bei der wiederholten Berechnung unberücksichtigt.

5.14.2 Laborergebnisse L-Milchsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enz.(L-) Hand	0,270	0,007	0,38	0,24	
04	enz.(L-) autom.	0,270	0,007	0,38	0,24	
05	enz.(L-) autom.	0,240	-0,023	-1,26	-0,78	
06	enz.(L-) autom.	0,262	-0,001	-0,05	-0,03	
08	enz.(L-) autom.	0,264	0,001	0,05	0,03	
09	enz.(L-) Hand	0,237	-0,026	-1,43	-0,89	
11	enz.(L-) autom.	0,278	0,015	0,82	0,51	
12	enz.(L-) autom.	0,260	-0,003	-0,16	-0,10	
14	enz.(L-) autom.	0,409	0,146	8,03	4,98	
16	enz.(L-) autom.	0,588	0,325	17,87	11,08	(*)
17	enz.(L-) autom.	0,200	-0,063	-3,46	-2,15	
20	enz.(L-) autom.	0,270	0,007	0,38	0,24	
27	enz.(L-) autom.	0,225	-0,038	-2,09	-1,30	
28	enz.(L-) autom.	0,263	0,000	0,00	0,00	
31	enz.(L-) autom.	0,219	-0,044	-2,42	-1,50	
39	enz.(L-) autom.	0,090	-0,173	-9,51	-5,90	(*)
42	enz.(L-) autom.	0,270	0,007	0,38	0,24	
43	enz.(L-) autom.	0,270	0,007	0,38	0,24	
45	enz.(L-) autom.	0,263	0,000	0,00	0,00	
46	enz.(L-) autom.	0,360	0,097	5,33	3,31	
50	enz.(L-) autom.	0,350	0,087	4,78	2,97	
55	enz.(L-) autom.	0,300	0,037	2,03	1,26	
56	enz.(L-) autom.	0,230	-0,033	-1,81	-1,13	
58	enz.(L-) autom.	0,250	-0,013	-0,71	-0,44	
61	enz.(L-) autom.	0,300	0,037	2,03	1,26	
63	enz.(L-) Hand	0,282	0,019	1,04	0,65	
68	enz.(L-) autom.	0,250	-0,013	-0,71	-0,44	
81	enz.(L-) Hand	0,241	-0,022	-1,21	-0,75	
86	enz.(L-) Hand	0,243	-0,020	-1,10	-0,68	

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

5.14.3 FTIR-Laborergebnisse Gesamte Milchsäure**Keine Berechnung von Z-Score, da Gehalt geringer als untere Grenze des Anwendungsbereichs.**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	0,790	0,443			(*)
202	FTIR	0,470	0,123			(**)
203	FTIR	0,407	0,059			
204	FTIR	0,350	0,003			
205	FTIR	n.n.<0,5				
206	FTIR	0,320	-0,027			
208	FTIR	0,090	-0,257			(*)
209	FTIR	<0,4				
210	FTIR	0,210	-0,137			(**)
211	FTIR	0,450	0,103			
212	FTIR	0,500	0,153			(**)
213	FTIR	0,530	0,183			(*)
214	FTIR	0,220	-0,127			(**)
216	FTIR	0,700	0,352			(*)
217	FTIR	0,660	0,313			(*)
218	FTIR	0,190	-0,157			(**)
219	FTIR	0,670	0,323			(*)
220	FTIR	0,670	0,323			(*)
221	FTIR	0,100	-0,247			(*)
222	FTIR	0,810	0,463			(*)
223	FTIR	0,860	0,512			(*)
224	FTIR	0,610	0,263			(*)
225	FTIR	0,400	0,053			
226	FTIR	0,040	-0,308			(*)
227	FTIR	0,690	0,342			(*)
228	FTIR	0,200	-0,147			(**)
229	FTIR	0,440	0,093			
230	FTIR	0,770	0,423			(*)
231	FTIR	0,730	0,383			(*)
233	FTIR	0,500	0,153			(**)
235	FTIR	0,760	0,413			(*)
237	FTIR	0,300	-0,047			
238	FTIR	0,080	-0,267			(*)
241	FTIR	0,560	0,213			(*)
242	FTIR	0,200	-0,147			(**)
243	FTIR	0,920	0,573			(*)
245	FTIR	0,160	-0,187			(*)
246	FTIR	0,240	-0,107			
247	FTIR	0,800	0,453			(*)
249	FTIR	0,700	0,352			(*)
250	FTIR	0,750	0,403			(*)
254	FTIR	0,600	0,253			(*)
255	FTIR	0,500	0,153			(**)
256	FTIR	0,800	0,453			(*)
257	FTIR	0,710	0,362			(*)
258	FTIR	0,400	0,053			
259	FTIR	0,380	0,033			
260	FTIR	0,100	-0,247			(*)
261	FTIR	0,400	0,053			
263	FTIR	<= 0				
264	FTIR	0,570	0,222			(*)
265	FTIR	0,610	0,263			(*)
266	FTIR	1,890	1,543			(*)
267	FTIR	0,510	0,163			(**)
268	FTIR	0,740	0,393			(*)
269	FTIR	0,800	0,453			(*)
270	FTIR	0,570	0,222			(*)
271	FTIR	0,500	0,153			(**)
273	FTIR	0,670	0,323			(*)
274	FTIR	0,300	-0,047			
275	FTIR	0,540	0,193			(*)
276	FTIR	0,510	0,163			(**)

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

(**) Diese Werte weichen 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
277	FTIR	0,570	0,222			(*)
280	FTIR	0,470	0,123			(**)
281	FTIR	0,590	0,242			(*)
282	FTIR	0,330	-0,017			
283	FTIR	0,500	0,152			(**)
322	FTIR	0,420	0,073			
338	FTIR	0,190	-0,157			(**)
349	FTIR	0,700	0,352			(*)
363	FTIR	<= 0				

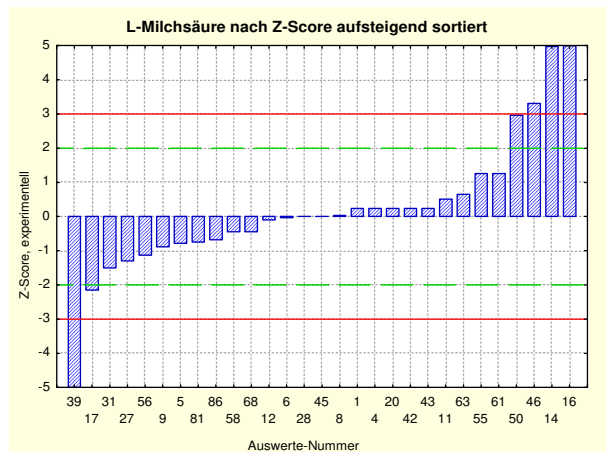
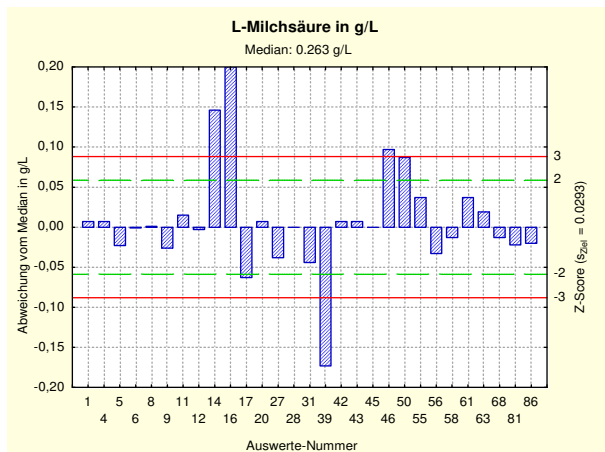
(*) Diese Werte weichen um mehr als 50 % vom Median der Werte herkömmlicher Methoden ab.
 (**) Diese Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der herkömmlichen Werte ab.
 <= 0: nicht normgerechte Angabe "0" vom Auswerter ersetzt; korrekt < BG/NG (Wert der Grenze)

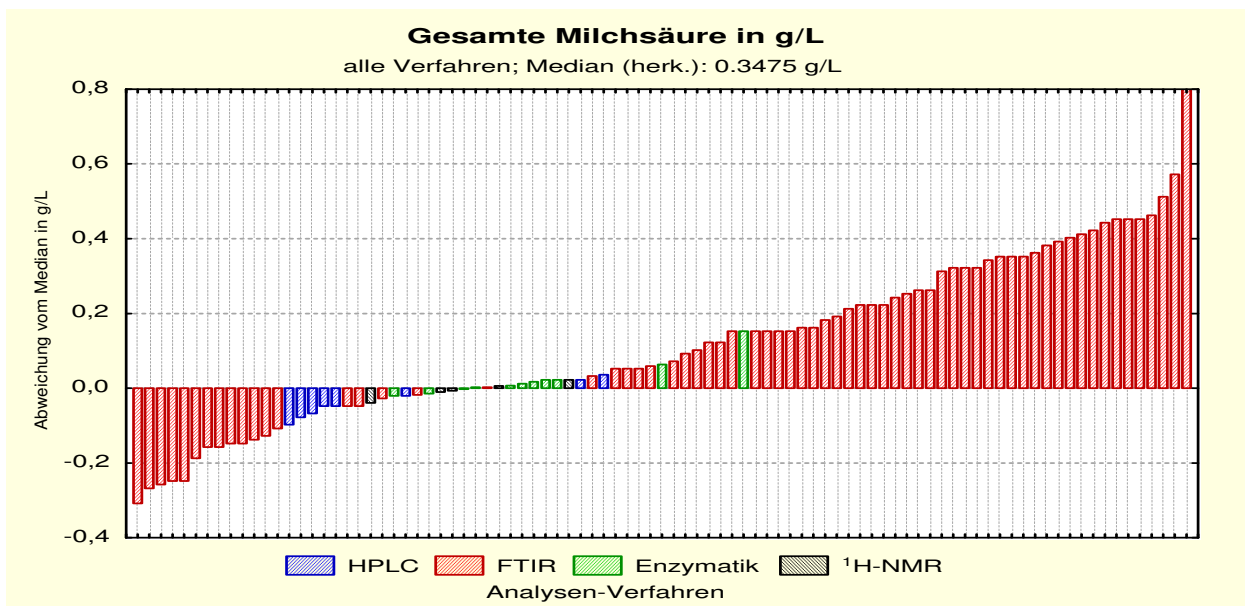
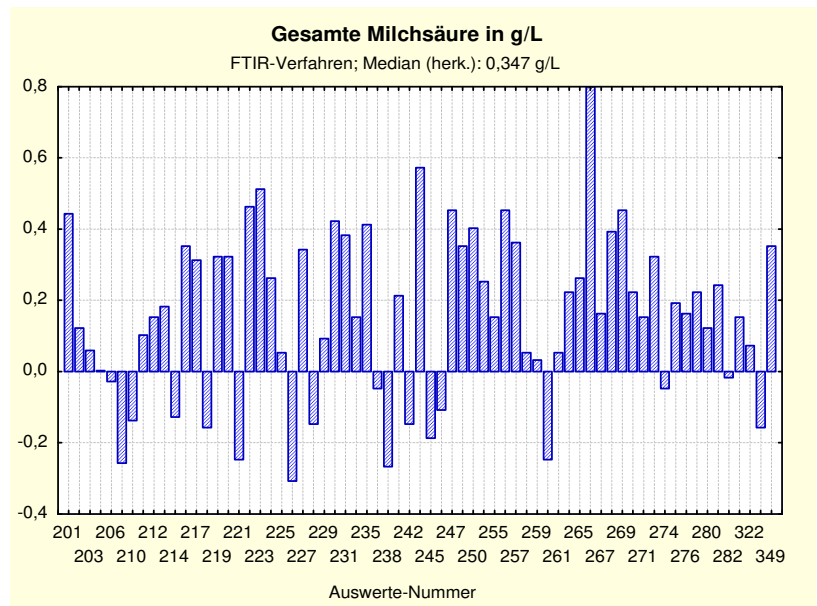
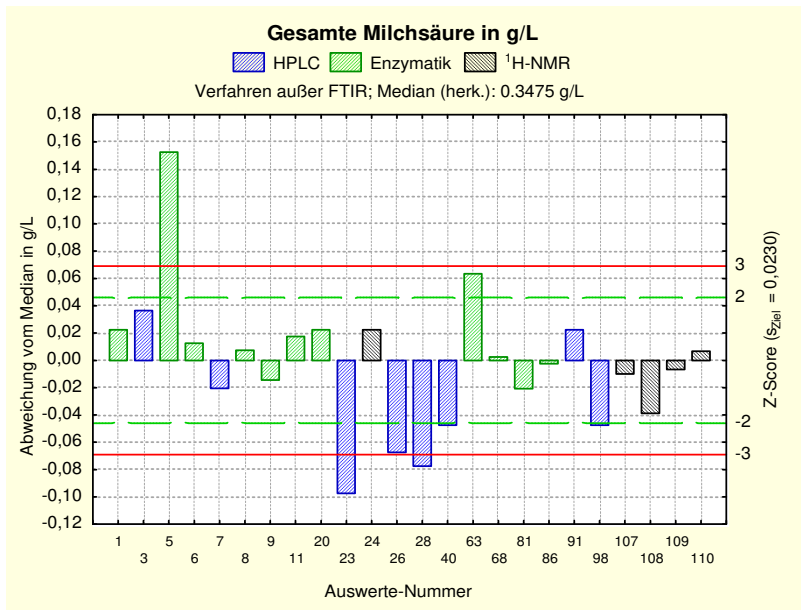
5.14.4 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse in g/L:	Gesamte Milchsäure		L- Milchsäure
	alle Daten	ber. Daten	alle Daten
Gültige Werte	19	18	27
Minimalwert	0,25	0,25	0,20
Mittelwert	0,346	0,337	0,269
Median	0,350	0,347	0,263
Maximalwert	0,50	0,41	0,41
Standardabweichung (s _L)	0,056	0,043	0,045
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,013	0,010	0,009
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s _H)	0,023	0,023	0,018
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{exp})			0,029
Zielstandardabweichung, experimentell (s _{FTIR})	(0,209)	(0,209)	
Horvat-Wert (s _L /s _H)	2,41	1,86	2,45
Quotient (s _L /s _{exp})			1,52
Quotient (s _L /s _{FTIR})	(0,27)	(0,21)	
Quotient (u _M /s _H)	0,55	0,44	0,47
Quotient (u _M /s _{exp herk.})			0,29
Quotient (u _M /s _{FTIR})	(0,06)	(0,05)	

5.14.5 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	8	0,3085	0,0507
enzymat. autom.	D- und L-Milchsäure, enzymatisch, automatisiert	6	0,3643	0,0145
enzymat. Hand	D- und L-Milchsäure, enzymatisch, manuell	5	0,3565	0,0374
	herkömmliche Verfahren Ges. Milchsäure	19	0,342	0,0481
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	67	0,5063	0,2488
NMR	¹ H-Kernresonanzspektroskopie	5	0,3428	0,0246
enz.(L-) autom.	enzymatisch nur L-Form, automatisiert	24	0,2680	0,0456
enz.(L-) Hand	enzymatisch nur L-Form	5	0,2541	0,0218
	alle Verfahren L-Milchsäure	29	0,2637	0,0358





5.15 Reduktone [mg/L]

5.15.1 Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	Glyoxal/Stärke	4,0	-1,00	-1,59	
06	Acetaldehyd/potent.	3,0	-2,00	-3,19	
17	Glyoxal/Stärke	9,0	4,00	6,37	(*)
27	Glyoxal/potentiometr.	5,3	0,31	0,49	
28	Propionaldehyd/Stärke	9,0	4,00	6,37	(*)
31	Glyoxal/Stärke	3,0	-2,00	-3,19	
40	Glyoxal/potentiometr.	3,7	-1,30	-2,07	
50	Glyoxal/Stärke	5,0	0,00	0,00	
56	Glyoxal/MTT	1,1	-3,90	-6,21	(*)
61	photometr.	2,0	-3,00	-4,78	
64	Glyoxal/Stärke	5,0	0,00	0,00	
65	Glyoxal/potentiometr.	8,0	3,00	4,78	
66	Glyoxal/Stärke	5,0	0,00	0,00	
67	Glyoxal/potentiometr.	3,0	-2,00	-3,19	
68	Glyoxal/potentiometr.	8,1	3,07	4,89	
70	Glyoxal/Stärke	10,0	5,00	7,96	(*)
71	Glyoxal/Stärke	5,0	0,00	0,00	

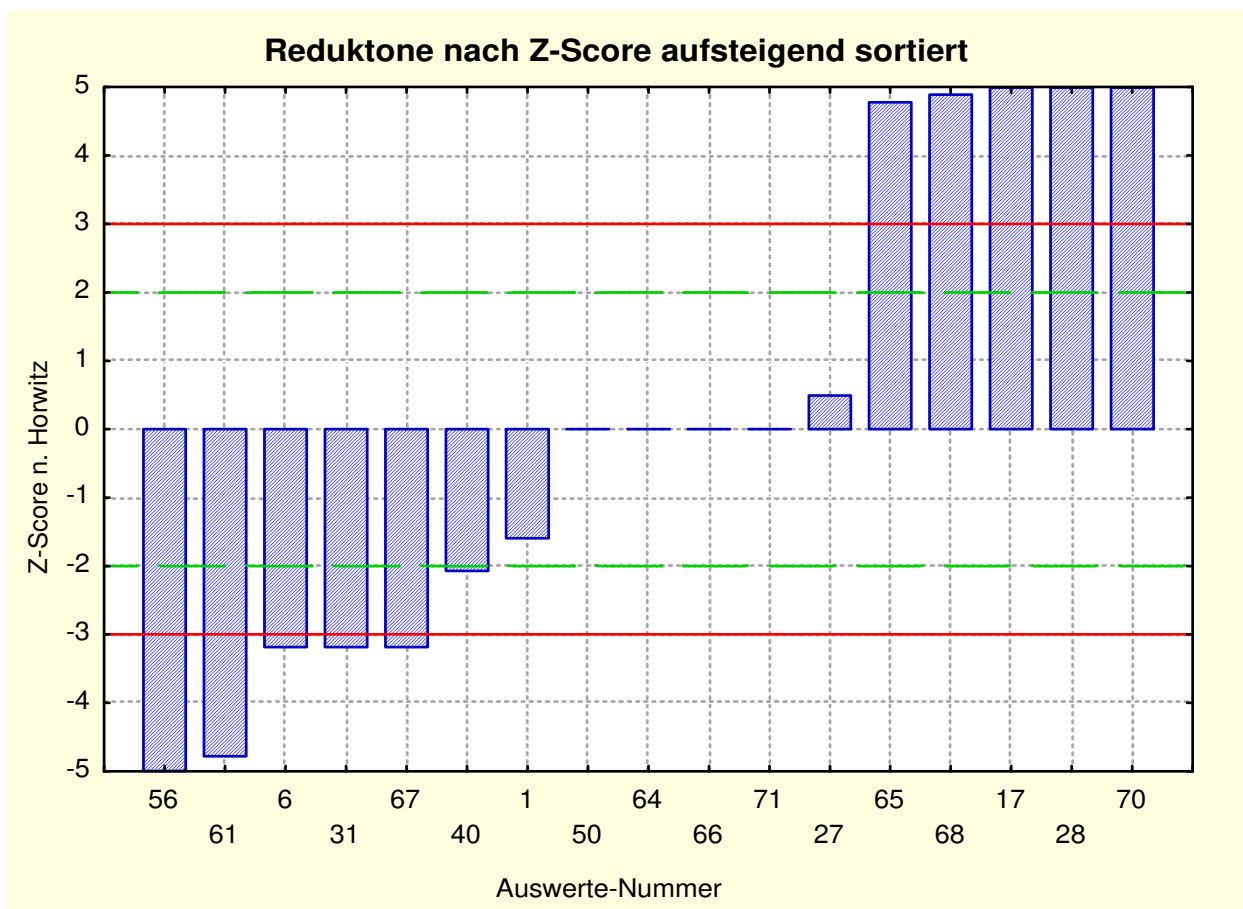
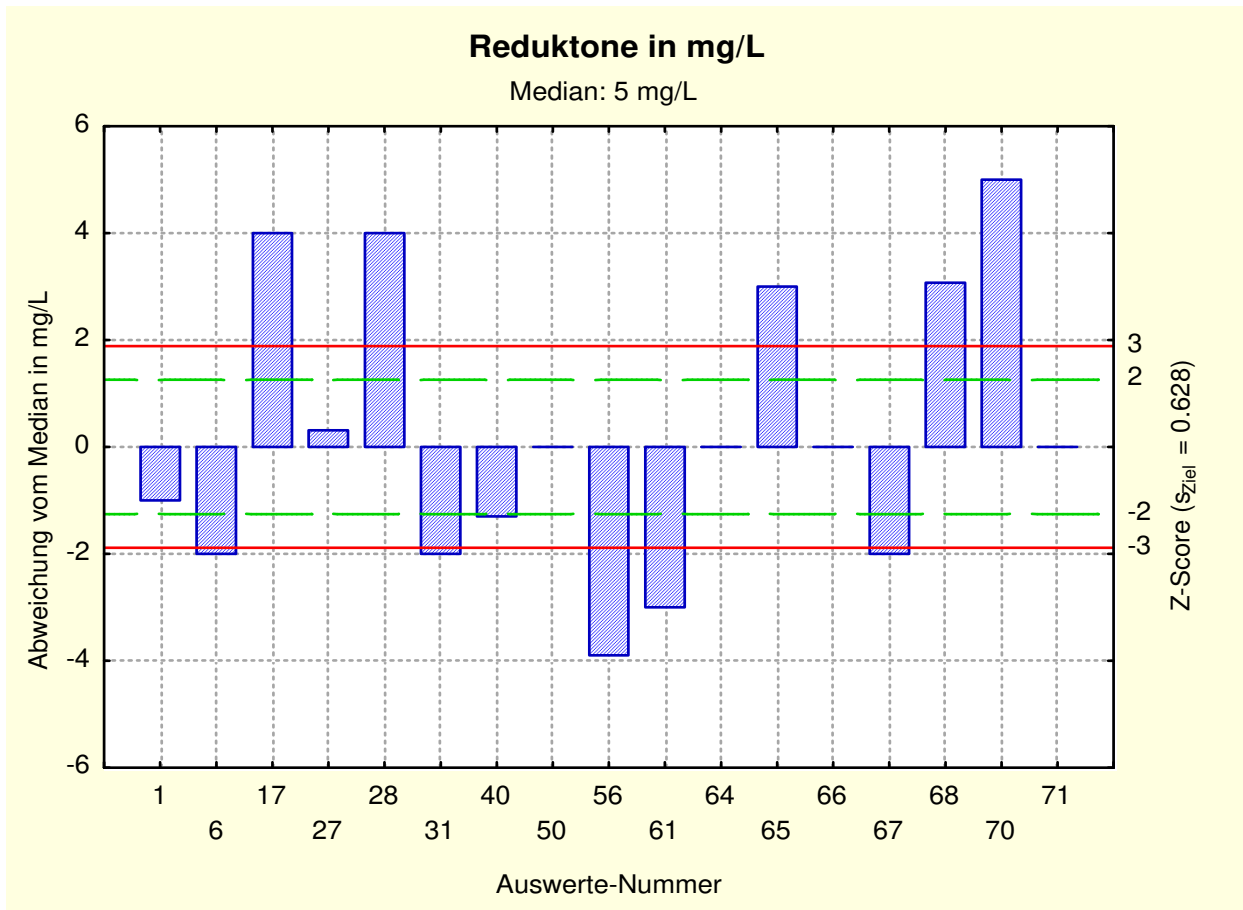
(*) Diese Werte weichen um mehr als 50 % vom Median der Werte ab und bleiben unberücksichtigt.

5.15.2 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Reduktone [mg/L]	alle Daten
Gültige Werte	13
Minimalwert	2,0
Mittelwert	4,62
Median	5,00
Maximalwert	8,1
Standardabweichung (s_L)	1,834
Standardfehler des Mittelwertes	0,509
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s_H)	0,628
Zielstandardabweichung, experimentell (s_{exp})	
Horrat-Wert (s_L/s_H)	2,92
Quotient (s_L/s_{exp})	
Quotient (u_M/s_H)	0,81
Quotient ($u_M/s_{exp\ herk.}$)	

5.15.3 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
Acetaldehyd/potent.	SO ₂ -Bindung mit Acetaldehyd; Platinelektrode	1	3,00	
Propionaldehyd/Stärke	SO ₂ -Bindung mit Propionaldehyd; Stärke als Indikator	1	9,00	
Glyoxal/Stärke	SO ₂ -Bindung mit Glyoxal; Stärke als Indikator	8	5,71	2,63
Glyoxal/potentiometr.	SO ₂ -Bindung mit Glyoxal; Platinelektrode	5	5,62	2,68
Glyoxal/MTT	SO ₂ -Bindung mit Glyoxal; automat. phot. mit MTT	1	1,10	
photometr.	Photometrie mit MTT (Angabe zur SO ₂ -Bindung fehlt)	1	2,00	
	alle Verfahren	17	5,23	2,98



5.16 Freie Schweflige Säure [mg/L]

5.16.1 Laborergebnisse mit Destillations-, photometrischen Verfahren und FTIR

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse aus Destillations- und photometrischen Verfahren

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
03	LwK 6.2	29,5	5,50	2,31	
05	LwK 6.2	30,1	6,08	2,55	
06	LwK 6.2	19,0	-5,00	-2,10	
07	LwK 6.2	22,4	-1,60	-0,67	
08	LwK 6.2	25,3	1,30	0,55	
10	LwK 6.2	23,0	-1,00	-0,42	
11	LwK 6.2	22,7	-1,30	-0,55	
12	LwK 6.3	20,0	-4,00	-1,68	
14	LwK 6.3	28,7	4,70	1,97	
29	LwK 6.2	26,5	2,50	1,05	
42	LwK 6.3	25,0	1,00	0,42	
45	LwK 6.3	23,0	-1,00	-0,42	
46	LwK 6.4	18,0	-6,00	-2,52	
53	LwK 6.3	24,0	0,00	0,00	
55	LwK 6.4	21,0	-3,00	-1,26	
56	LwK 6.4	22,3	-1,70	-0,71	
61	LwK 6.3	26,0	2,00	0,84	
91	LwK 6.2	25,3	1,30	0,55	
103	LwK 6.2	24,4	0,40	0,17	
203	LwK 6.5	30,5	6,53	2,74	
206	LwK 6.5	20,0	-4,00	-1,68	
207	LwK 6.5	25,0	0,99	0,42	
208	LwK 6.5	21,7	-2,31	-0,97	
210	LwK 6.5	25,5	1,50	0,63	
212	LwK 6.5	20,0	-4,00	-1,68	
214	LwK 6.5	45,0	21,00	8,82	(*)
220	LwK 6.5	22,0	-2,00	-0,84	
226	LwK 6.5	28,0	4,00	1,68	
238	LwK 6.5	24,0	0,00	0,00	
245	LwK 6.5	26,0	2,00	0,84	
251	LwK 6.5	31,0	7,00	2,94	
258	LwK 6.5	37,0	13,00	5,46	(*)
262	LwK 6.5	26,0	2,00	0,84	
264	LwK 6.5	35,0	11,00	4,62	
280	LwK 6.5	23,0	-1,00	-0,42	
284	LwK 6.5	28,0	4,00	1,68	
338	LwK 6.5	24,0	0,00	0,00	
349	LwK 6.5	30,0	6,00	2,52	
363	LwK 6.5	38,0	14,00	5,88	(*)

(*) Diese Werte weichen um mehr als 50 % vom Median der Werte aus Destillation und Photometrie ab.

5.16.2 Laborergebnisse: jodometrisch, mitgeteilt 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.)	27,0	0,45	0,17	
17	LwK 6.1 (incl. Red.)	25,0	-1,55	-0,60	
19	LwK 6.1 (incl. Red.)	27,0	0,45	0,17	
20	LwK 6.1 (incl. Red.)	26,1	-0,45	-0,17	
22	LwK 6.1 (incl. Red.)	26,0	-0,55	-0,21	
23	LwK 6.1 (incl. Red.)	31,0	4,45	1,72	
24	LwK 6.1 (incl. Red.)	32,0	5,45	2,10	
25	LwK 6.1 (incl. Red.)	25,0	-1,55	-0,60	
26	LwK 6.1 (incl. Red.)	27,0	0,45	0,17	
27	LwK 6.1 (incl. Red.)	26,0	-0,51	-0,20	
31	LwK 6.1 (incl. Red.)	29,0	2,45	0,94	
41	LwK 6.1 (incl. Red.)	24,0	-2,55	-0,98	
50	LwK 6.1 (incl. Red.)	30,0	3,45	1,33	
54	LwK 6.1 (incl. Red.)	25,0	-1,55	-0,60	

Fortsetzung: Laborergebnisse: jodometrisch, mitgeteilt einschließlich Reduktone

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
58	LwK 6.1 (incl.Red.)	32,0	5,45	2,10	
60	LwK 6.1 (incl.Red.)	28,0	1,45	0,56	
63	LwK 6.1 (incl.Red.)	34,2	7,65	2,95	
64	LwK 6.1 (incl.Red.)	26,0	-0,55	-0,21	
65	LwK 6.1 (incl.Red.)	33,0	6,45	2,49	
72	LwK 6.1 (incl.Red.)	25,3	-1,25	-0,48	
75	LwK 6.1 (incl.Red.)	30,0	3,45	1,33	
77	Redox incl.	22,0	-4,55	-1,75	
78	LwK 6.1 (incl.Red.)	25,0	-1,55	-0,60	
81	LwK 6.1 (incl.Red.)	34,0	7,45	2,87	
84	LwK 6.1 (incl.Red.)	26,0	-0,55	-0,21	
92	LwK 6.1 (incl.Red.)	24,0	-2,55	-0,98	
95	LwK 6.1 (incl.Red.)	26,0	-0,55	-0,21	
105	LwK 6.1 (incl.Red.)	30,0	3,45	1,33	

5.16.3 Laborergebnisse: jodometrisch ausschließlich Reduktone

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmung ausschließlich Reduktone.

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score S _H incl. Red.	Hinweis
01	LwK 6.1 (excl.Red.)	23,0	-3,00	-1,18	-1,16	
16	LwK 6.1 (excl.Red.)	27,0	1,00	0,39	0,39	
17	LwK 6.1 (excl.Red.)	16,0	-10,00	-3,93	-3,86	
27	LwK 6.1 (excl.Red.)	20,7	-5,27	-2,07	-2,03	
28	LwK 6.1 (excl.Red.)	27,0	1,00	0,39	0,39	
31	LwK 6.1 (excl.Red.)	26,0	0,00	0,00	0,00	
37	LwK 6.1 (excl.Red.)	26,0	0,00	0,00	0,00	
39	LwK 6.1 (excl.Red.)	28,0	2,00	0,79	0,77	
40	LwK 6.1 (excl.Red.)	27,0	1,00	0,39	0,39	
43	LwK 6.1 (excl.Red.)	26,0	0,00	0,00	0,00	
50	LwK 6.1 (excl.Red.)	25,0	-1,00	-0,39	-0,39	
64	LwK 6.1 (excl.Red.)	21,0	-5,00	-1,96	-1,93	
65	LwK 6.1 (excl.Red.)	25,0	-1,00	-0,39	-0,39	
66	LwK 6.1 (excl.Red.)	29,0	3,00	1,18	1,16	
67	LwK 6.1 (excl.Red.)	30,0	4,00	1,57	1,54	
68	LwK 6.1 (excl.Red.)	21,9	-4,12	-1,62	-1,59	
70	LwK 6.1 (excl.Red.)	22,0	-4,00	-1,57	-1,54	
71	LwK 6.1 (excl.Red.)	30,0	4,00	1,57	1,54	
98	LwK 6.1 (excl.Red.)	29,0	3,00	1,18	1,16	

Methodenkod in **blauer Schrift**: Wert vom Teilnehmer unter Abzug der Reduktone mitgeteilt

Methodenkod schwarze Schrift: Wert vom Auswerter nachberechnet

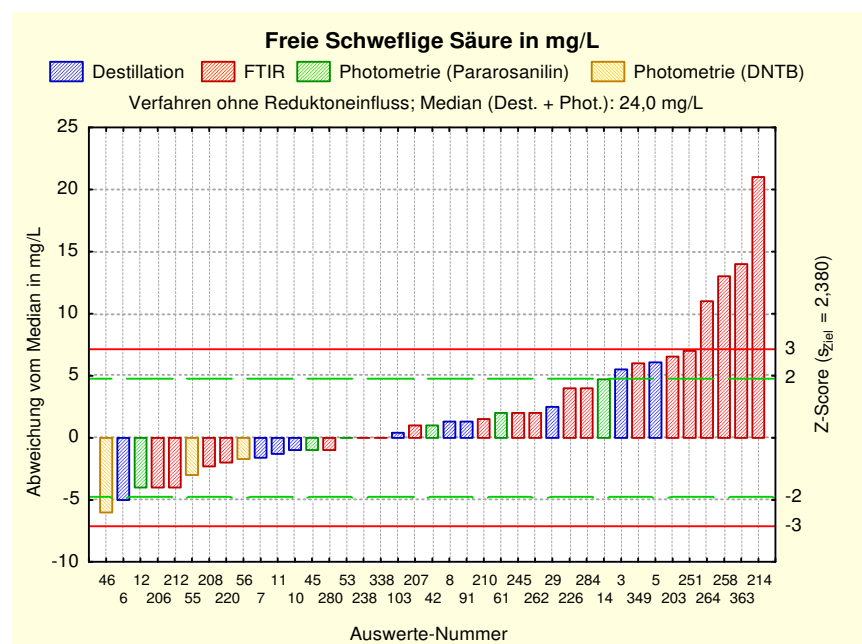
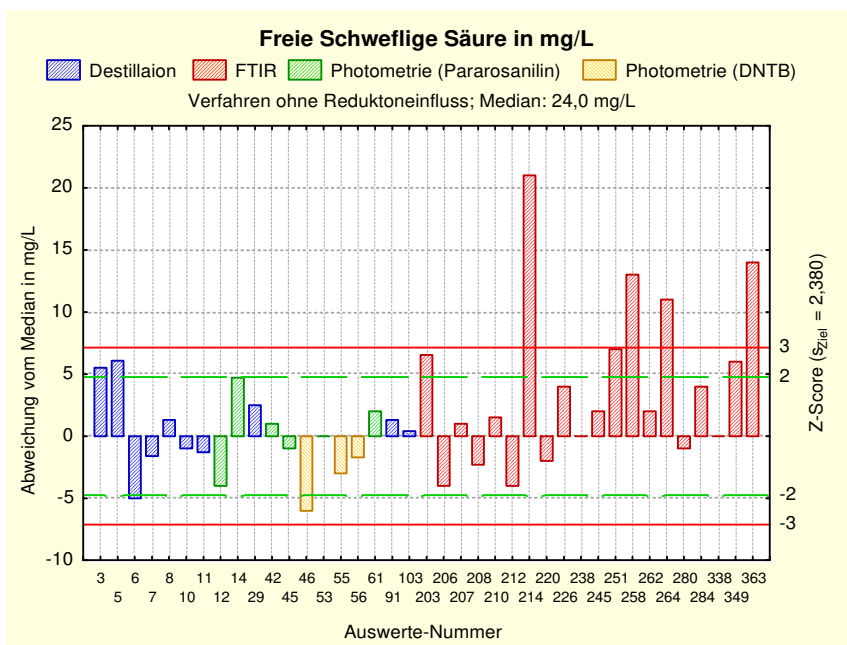
S_H incl. Red.: Zielstandardabweichung berechnet nach Horwitz aus Median der Werte inklusive Reduktone

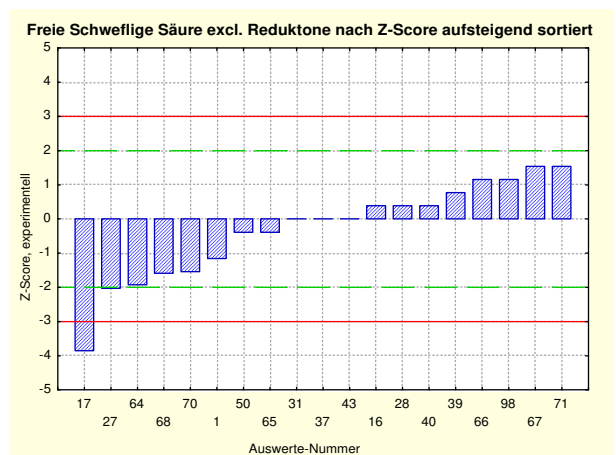
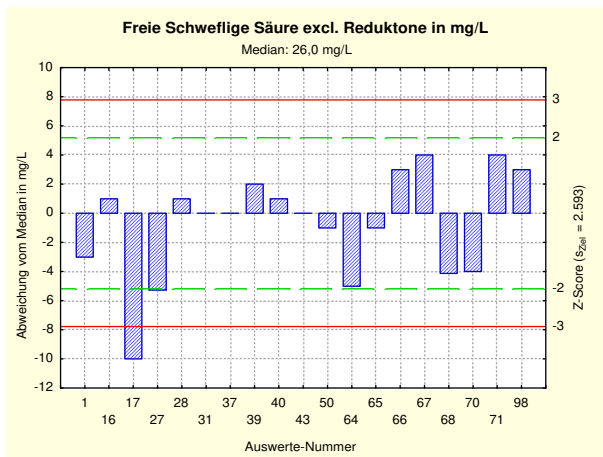
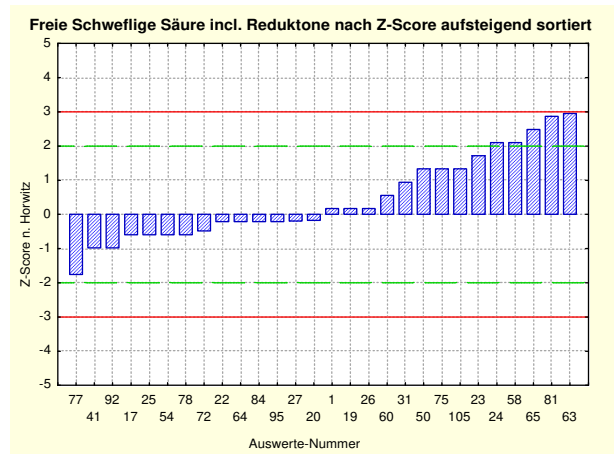
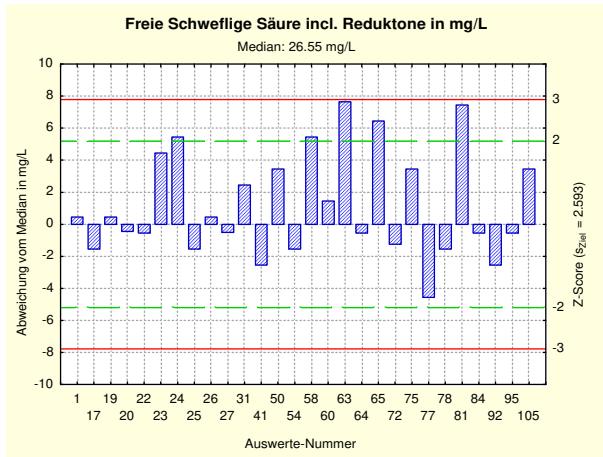
5.16.4 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Freie Schweflige Säure [mg/L]	Destillation	Destillation, Photometrie	Jodometrisch Reduktone	
	alle Daten	alle Daten	inclusive alle Daten	exclusive alle Daten
Gültige Werte	10	19	28	19
Minimalwert	19,0	18,0	22,0	16,0
Mittelwert	24,82	24,01	27,70	25,24
Median	24,85	24,00	26,55	26,00
Maximalwert	30,1	30,1	34,2	30,0
Standardabweichung (s _L)	3,343	3,327	3,270	3,673
Standardfehler des Mittelwertes	1,057	0,763	0,618	0,843
Zielstandardabweichung				
- nach Horwitz (S _H)	2,451	2,380	2,593	2,548
- experimentell (S _H incl. Red.)				2,593
Horrat-Wert (s _L /S _H)	1,36	1,40	1,26	1,44
Quotient (s _L /S _H incl. Red.)				1,42
Quotient (u _M /S _H)	0,43	0,32	0,24	0,33
Quotient (u _M /S _{exp} herk.)				0,32

5.16.5 Angaben zu den Analyseverfahren

Code	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 6.1(incl.Red.)	Direkte jodometrische Titration OIV-MA-AS323-04B ohne Abzug der Reduktone	27	27,74	3,20
Redox incl.	elektrometrische Bestimmung mit pH-Meter im mV-Modus und der Redoxelektrode ORP inklusive Reduktone	1	22,00	
	jodometrische Verfahren ohne Abzug der Reduktone	28	27,53	3,31
LwK 6.1(excl.Red.)	Direkte jodometrische Titration OIV-MA-AS323-04B			
	- mit Abzug der Reduktone	12	27,13	2,57
- Basis erweitert	- Basis erweitert durch Nachberechnung von Werten	19	25,45	3,63
LwK 6.2	Methode n. Paul bzw. OIV-MA-AS323-04A	10	24,81	3,62
LwK 6.3	Pararosanilinnmethode	6	24,50	3,07
LwK 6.4	DNTB-Verfahren	3	20,47	2,43
	Destillations- und photometrische Verfahren	19	23,99	3,50
LwK 6.5	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der Gasphase	20	27,53	6,32
	Destillations-, photometrische und FTIR-Verfahren	39	25,38	4,48





5.17 Gesamte Schweflige Säure [mg/L]

5.17.1 Laborergebnisse

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse aus Destillationsverfahren; verbindliche Bewertung

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 7.4.2	114,0	10,00	1,21	1,87	
02	LwK 7.3	102,8	-1,20	-0,15	-0,22	
03	LwK 7.3	102,2	-1,80	-0,22	-0,34	
05	LwK 7.3	114,2	10,24	1,24	1,91	
06	LwK 7.3	101,0	-3,00	-0,36	-0,56	
07	LwK 7.3	105,6	1,60	0,19	0,30	
08	LwK 7.3	108,4	4,40	0,53	0,82	
10	LwK 7.3	104,0	0,00	0,00	0,00	
11	LwK 7.3	98,9	-5,10	-0,62	-0,95	
12	LwK 7.4.2	98,0	-6,00	-0,73	-1,12	
14	LwK 7.4.2	104,0	0,00	0,00	0,00	
16	LwK 7.5.1(excl. Red.)	108,0	4,00	0,48	0,75	
17	LwK 7.5.1(incl. Red.)	98,0	-6,00	-0,73	-1,12	
19	LwK 7.5.1(incl. Red.)	98,0	-6,00	-0,73	-1,12	
20	LwK 7.5.1(incl. Red.)	101,0	-3,00	-0,36	-0,56	
22	LwK 7.4.2	102,0	-2,00	-0,24	-0,37	
23	LwK 7.5.1(incl. Red.)	114,0	10,00	1,21	1,87	
24	LwK 7.4.2m	104,0	0,00	0,00	0,00	
25	LwK 7.5.1(incl. Red.)	101,0	-3,00	-0,36	-0,56	
26	LwK 7.5.2(incl. Red.)	106,0	2,00	0,24	0,37	
27	LwK 7.5.1(incl. Red.)	107,3	3,29	0,40	0,61	
28	LwK 7.5.1(excl. Red.)	98,0	-6,00	-0,73	-1,12	
29	LwK 7.3	117,2	13,21	1,60	2,47	
31	LwK 7.4.1	106,0	2,00	0,24	0,37	
37	LwK 7.5.1(excl. Red.)	111,0	7,00	0,85	1,31	
39	LwK 7.7	116,0	12,00	1,45	2,24	
40	LwK 7.5.1(excl. Red.)	107,0	3,00	0,36	0,56	
41	LwK 7.4.1	101,5	-2,50	-0,30	-0,47	
42	LwK 7.7	103,0	-1,00	-0,12	-0,19	
43	LwK 7.4.2	105,0	1,00	0,12	0,19	
45	LwK 7.4.2	107,0	3,00	0,36	0,56	
46	LwK 7.7	110,0	6,00	0,73	1,12	
50	LwK 7.7	96,0	-8,00	-0,97	-1,49	
52	LwK 7.4.1	102,0	-2,00	-0,24	-0,37	
53	LwK 7.7	105,0	1,00	0,12	0,19	
54	LwK 7.8	115,0	11,00	1,33	2,05	
55	LwK 7.7	111,0	7,00	0,85	1,31	
56	LwK 7.7	106,6	2,60	0,31	0,49	
58	LwK 7.4.2	109,0	5,00	0,60	0,93	
60	LwK 7.5.2(incl. Red.)	112,0	8,00	0,97	1,49	
61	LwK 7.6	100,0	-4,00	-0,48	-0,75	
63	LwK 7.4.2	104,0	0,00	0,00	0,00	
64	LwK 7.5.3(incl. Red.)	96,0	-8,00	-0,97	-1,49	
65	LwK 7.5.1(incl. Red.)	111,0	7,00	0,85	1,31	
66	LwK 7.4.2	104,0	0,00	0,00	0,00	
67	LwK 7.5.1(excl. Red.)	107,0	3,00	0,36	0,56	
68	LwK 7.5.1(excl. Red.)	104,6	0,59	0,07	0,11	
70	LwK 7.5.3(excl. Red.)	95,0	-9,00	-1,09	-1,68	
71	LwK 7.4.2	100,0	-4,00	-0,48	-0,75	
72	LwK 7.1	93,1	-10,90	-1,32	-2,03	
75	LwK 7.5.1(incl. Red.)	105,0	1,00	0,12	0,19	
77	LwK 7.5.1(incl. Red.)	94,0	-10,00	-1,21	-1,87	
78	LwK 7.5.3(incl. Red.)	95,0	-9,00	-1,09	-1,68	
81	LwK 7.4.1	105,0	1,00	0,12	0,19	
84	LwK 7.5.3(incl. Red.)	130,0	26,00	3,14	4,85	
88	LwK 7.4.2	100,0	-4,00	-0,48	-0,75	
91	LwK 7.3	104,2	0,20	0,02	0,04	
92	LwK 7.5.1(incl. Red.)	90,0	-14,00	-1,69	-2,61	
93	LwK 7.4.2	97,0	-7,00	-0,85	-1,31	
95	LwK 7.5.1(incl. Red.)	94,0	-10,00	-1,21	-1,87	
96	LwK 7.5.1(incl. Red.)	105,0	1,00	0,12	0,19	

Fortsetzung: Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
98	LwK 7.5.1(excl. Red.)	111,0	7,00	0,85	1,31	
99	LwK 7.4.2	92,0	-12,00	-1,45	-2,24	
103	LwK 7.3	105,0	1,00	0,12	0,19	
105	LwK 7.4.2	108,0	4,00	0,48	0,75	
203	LwK 7.8	99,2	-4,84	-0,59	-0,90	
206	LwK 7.8	101,0	-3,00	-0,36	-0,56	
207	LwK 7.8	100,4	-3,58	-0,43	-0,67	
208	LwK 7.8	104,1	0,07	0,01	0,01	
209	FTIR(direkt)	100,0	-4,00	-0,48	-0,75	
210	LwK 7.8	114,0	10,00	1,21	1,87	
212	LwK 7.8	107,0	3,00	0,36	0,56	
214	LwK 7.8	93,0	-11,00	-1,33	-2,05	
220	LwK 7.8	92,0	-12,00	-1,45	-2,24	
226	LwK 7.8	114,0	10,00	1,21	1,87	
238	LwK 7.8	96,0	-8,00	-0,97	-1,49	
245	LwK 7.8	108,0	4,00	0,48	0,75	
251	LwK 7.8	92,0	-12,00	-1,45	-2,24	
258	LwK 7.8	104,0	0,00	0,00	0,00	
262	LwK 7.8	91,0	-13,00	-1,57	-2,43	
264	LwK 7.8	114,0	10,00	1,21	1,87	
280	LwK 7.8	105,0	1,00	0,12	0,19	
284	LwK 7.8	135,0	31,00	3,75	5,79	
338	LwK 7.8	96,0	-8,00	-0,97	-1,49	
349	LwK 7.8	106,0	2,00	0,24	0,37	
363	LwK 7.8	109,0	5,00	0,60	0,93	

Für Ergebnisse von FTIR-Verfahren sind die Z-Score_{Horwitz} gültig. Die Z-Score_{exper.} in grauer Schrift sind nur zur Information wiedergegeben.

5.17.2 Laborergebnisse: jodometrische Verfahren einschließlich Reduktone

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmung einschließlich Reduktone; informativ

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
14	LwK 7.5.1(incl. Red.)	126,0	13,40	1,51	2,50	
17	LwK 7.5.1(incl. Red.)	98,0	-3,00	-0,37	-0,56	
19	LwK 7.5.1(incl. Red.)	98,0	-3,00	-0,37	-0,56	
20	LwK 7.5.1(incl. Red.)	101,0	0,00	0,00	0,00	
23	LwK 7.5.1(incl. Red.)	114,0	13,00	1,61	2,43	
25	LwK 7.5.1(incl. Red.)	101,0	0,00	0,00	0,00	
26	LwK 7.5.2(incl. Red.)	106,0	5,00	0,62	0,93	
27	LwK 7.5.1(incl. Red.)	107,3	6,29	0,78	1,17	
60	LwK 7.5.2(incl. Red.)	112,0	11,00	1,36	2,05	
64	LwK 7.5.3(incl. Red.)	96,0	-5,00	-0,62	-0,93	
65	LwK 7.5.1(incl. Red.)	111,0	10,00	1,24	1,87	
75	LwK 7.5.1(incl. Red.)	105,0	4,00	0,50	0,75	
77	LwK 7.5.1(incl. Red.)	94,0	-7,00	-0,87	-1,31	
78	LwK 7.5.3(incl. Red.)	95,0	-6,00	-0,74	-1,12	
84	LwK 7.5.3(incl. Red.)	130,0	29,00	3,59	5,41	(**)
92	LwK 7.5.1(incl. Red.)	90,0	-11,00	-1,36	-2,05	
95	LwK 7.5.1(incl. Red.)	94,0	-7,00	-0,87	-1,31	
96	LwK 7.5.1(incl. Red.)	105,0	4,00	0,50	0,75	

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

5.17.3 Laborergebnisse: jodometrische Verfahren ausschließlich Reduktone

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmung ausschließlich Reduktone; informativ

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
16	LwK 7.5.1(excl. Red.)	108,0	4,20	0,51	0,78	
17	LwK 7.5.1(excl. Red.)	89,0	-14,80	-1,79	-2,76	
27	LwK 7.5.1(excl. Red.)	102,0	-1,81	-0,22	-0,34	
28	LwK 7.5.1(excl. Red.)	98,0	-5,80	-0,70	-1,08	
37	LwK 7.5.1(excl. Red.)	111,0	7,20	0,87	1,34	
40	LwK 7.5.1(excl. Red.)	107,0	3,20	0,39	0,60	
64	LwK 7.5.3(excl. Red.)	91,0	-12,80	-1,55	-2,39	
65	LwK 7.5.1(excl. Red.)	103,0	-0,80	-0,10	-0,15	
67	LwK 7.5.1(excl. Red.)	107,0	3,20	0,39	0,60	
68	LwK 7.5.1(excl. Red.)	104,6	0,80	0,10	0,15	
70	LwK 7.5.3(excl. Red.)	95,0	-8,80	-1,07	-1,64	
98	LwK 7.5.1(excl. Red.)	111,0	7,20	0,87	1,34	

Methodenkodex in blauer Schrift: Wert vom Teilnehmer unter Abzug der Reduktone mitgeteilt
Methodenkodex schwarze Schrift: Wert vom Auswerter nachberechnet

5.17.4 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Gesamte Schweflige Säure [mg/L]	Destillations- verfahren		Jodometrisch; Reduktone	
	alle Daten	alle Daten	ber. Daten	exclusive alle Daten
Gültige Werte	31	17	16	12
Minimalwert	92,0	90,0	90,0	89,0
Mittelwert	103,84	103,37	101,71	102,21
Median	104,00	101,00	101,00	103,80
Maximalwert	117,2	130,0	114,0	111,0
Standardabweichung (s _L)	5,451	9,779	7,195	7,448
Standardfehler des Mittelwertes (u _M)	0,979	2,372	1,799	2,150
Zielstandardabweichung				
n. Horwitz (s _H)	8,271	8,068	8,068	8,257
experimentell (s _{exp herk.})	5,357	5,357	5,357	5,357
Horrat-Wert (s _L /s _H)	0,66	1,21	0,89	0,90
Quotient (s _L /s _{exp herk.})	1,02	1,83	1,34	1,39
Quotient (u _M /s _H)	0,12	0,29	0,22	0,26
Quotient (u _M /s _{exp herk.})	0,18	0,44	0,34	0,40

5.17.5 Angaben zu den Analyseverfahren

Code	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 7.1	Methode nach AVV V2	1	93,10	
LwK 7.3	Methode n. Paul bzw. OIV-MA-AS323-04A	11	105,28	4,99
LwK 7.4.1	Destillationsmethode n. Dr. Jakob	4	103,63	2,51
LwK 7.4.2	Destillationsmethode n. Dr. Rebelein	14	103,17	5,40
LwK 7.4.2m	Destillationsmethode n. Dr. Rebelein, modifiziert	1	104,00	
	Destillationsverfahren	31	103,68	4,43
LwK 7.5.1(incl. Red.)	jodometr. n. einf. Hydrolyse ohne Reduktonabzug	12	101,50	8,14
LwK 7.5.2(incl. Red.)	jodometr. n. dopp. Hydrolyse ohne Reduktonabzug	2	109,00	4,81
LwK 7.5.3(incl. Red.)	Hydrolyse n. Dr. Rebelein ohne Abzug der Reduktone	3	104,33	17,35
	jodometrische Verfahren ohne Reduktonabzug	17	102,53	8,79
wie mitgeteilt				
LwK 7.5.1 (excl. Red.)	jodometr. n. einf. Hydrolyse mit Reduktonabzug	7	107,12	3,93
LwK 7.5.2(excl. Red.)	jodometr. n. doppelter Hydrolyse mit Reduktonabzug	1	95,00	
	jodometrische Verfahren mit Reduktonabzug	8	105,43	6,14
Basis erweitert				
LwK 7.5.1 (excl. Red.)	jodometrisch n. einf. Hydrolyse mit Reduktonabzug	10	104,85	5,57
LwK 7.5.2 (excl. Red.)	jodometrisch n. dopp. Hydrolyse mit Reduktonabzug	2	93,00	3,21
LwK 7.5.3(excl. Red.)	Hydrolyse nach Dr. Rebelein mit Abzug der Reduktone	12	102,32	8,22
	jodometrische Verfahren mit Reduktonabzug	1	100,00	
LwK 7.7	DNTB-Verfahren	7	106,69	6,70
LwK 7.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der Gasphase	21	103,75	9,57
FTIR(direkt)	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der flüss. Phase	1	100,00	

